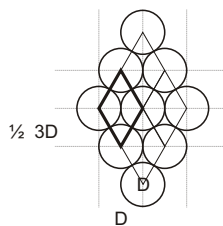


Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II

Übungsblatt 2 - Diskretisierung

1) Hard-Sphere Modell 3D

Bei einem Feststoff ist die Dichte der Moleküle sehr hoch. Im zweidimensionalen ist die Anordnung, mit der die höchste Dichte erreicht wird, durch folgendes Bild gegeben:



Im dreidimensionalen gibt es verschiedene Möglichkeiten, Kugeln in einer Gitterstruktur anzuordnen. Überlegen Sie sich zwei solcher Anordnungen und berechnen Sie die relative Dichte (Verhältnis aus dem von Kugeln belegten Gebiet zum Gesamtgebiet).

2) Mehrzentrige Moleküle

Bei einzentrigem Molekülen (beispielsweise einzelne Atome bei Edelgasen) entspricht die Kraft auf Molekül i der Summe aller Kräfte zwischen Molekül i und allen anderen Molekülen: $\vec{F}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}$

Mit Hilfe dieser Kraft lässt sich die Beschleunigung des Moleküls i wie folgt berechnen:

$$\ddot{\vec{x}}_i = \frac{\vec{F}_i}{m_i} = \frac{\sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}}{m_i}$$

Wenn ein Molekül aus mehreren Zentren besteht, wirkt zwischen jedem Zentrum des Moleküls und jedem Zentrum der Nachbarmoleküle eine Kraft. Da wir annehmen, dass die Moleküle selbst starr sind, die Zentren relativ zueinander ihre Position also nicht verändern, bewirken die Kräfte auf die einzelnen Zentren insgesamt eine Rotation des Moleküls. Überlegen Sie sich, wie diese Rotation zustande kommt und versuchen Sie, eine Formel für die Drehbeschleunigung eines Moleküls aufzustellen.

3) Diskretisierung

Die Bewegung der Moleküle wird durch folgende gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung beschrieben: $F_i = m_i \ddot{r}_i$.

In der Vorlesung wurden verschiedene Methoden zur Diskretisierung dieser Differentialgleichung beschrieben. Auf diesem Übungsblatt beschäftigen wir uns näher mit diesen Methoden.

- a) Leiten Sie mit Hilfe der Taylor-Entwicklung die Euler-Methode her.
- b) Leiten Sie mit Hilfe der Taylor-Entwicklung die Störmer-Verlet-Methode her (nur die Gleichung für die Position).
- c) Was sind die Nachteile der Störmer-Verlet-Methode?
- d) Die Velocity-Störmer-Verlet-Methode ist in exakter Arithmetik mit der Störmer-Verlet-Methode identisch. Zeigen Sie dies, indem Sie die Velocity-Störmer-Verlet-Methode aus der Störmer-Verlet-Methode herleiten. Dazu können Sie die Störmer-Verlet-Methode um eine Abschätzung der Geschwindigkeit mit folgender Formel erweitern:

$$v(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$

- d) Eine Eigenschaft von Diskretisierungsverfahren ist die Zeitumkehrbarkeit. Untersuchen Sie, ob die Velocity-Störmer-Verlet-Methode umkehrbar ist.