

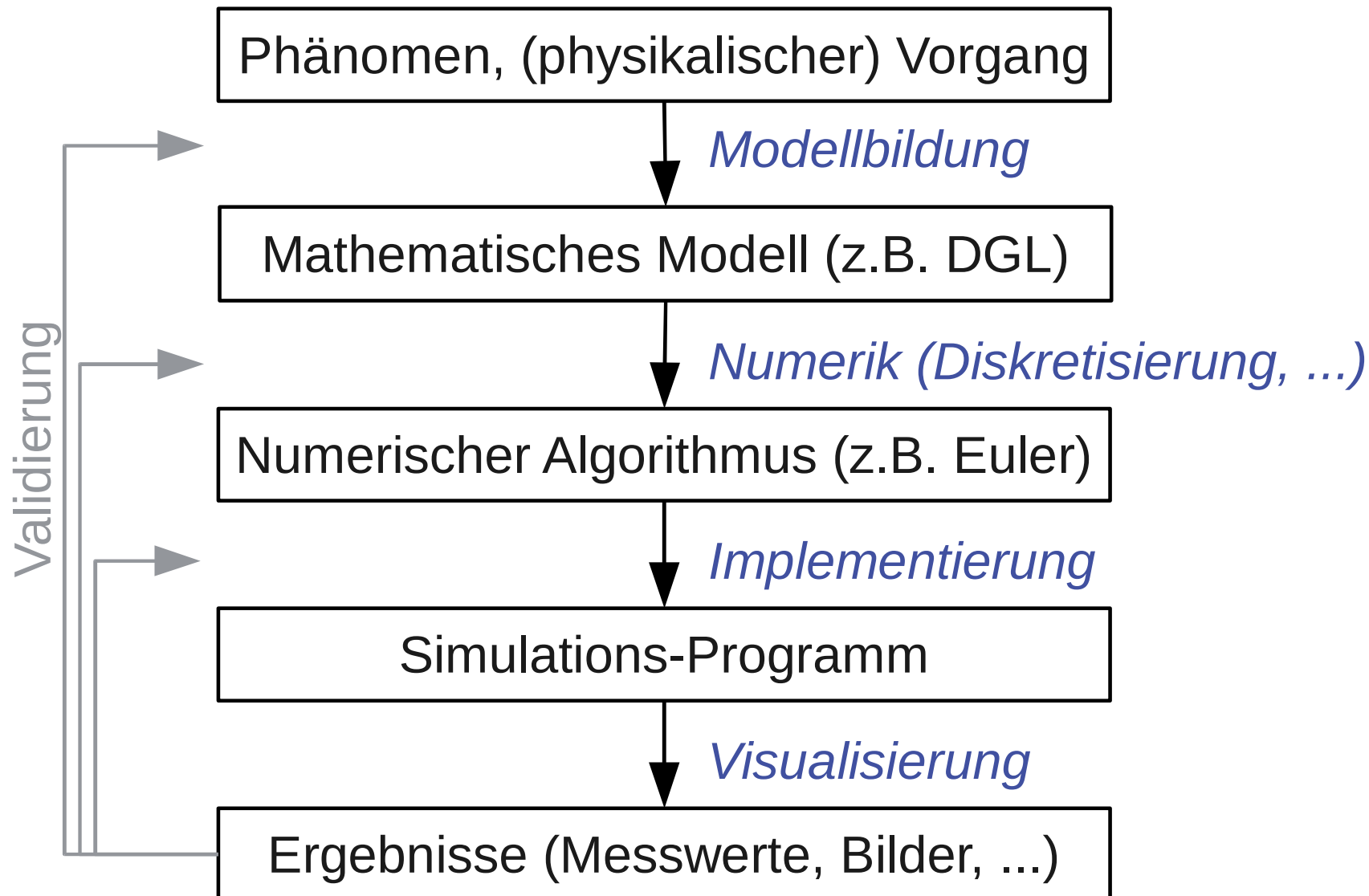
Teil X

Simulation von Partikelsystemen

Wo stehen wir?

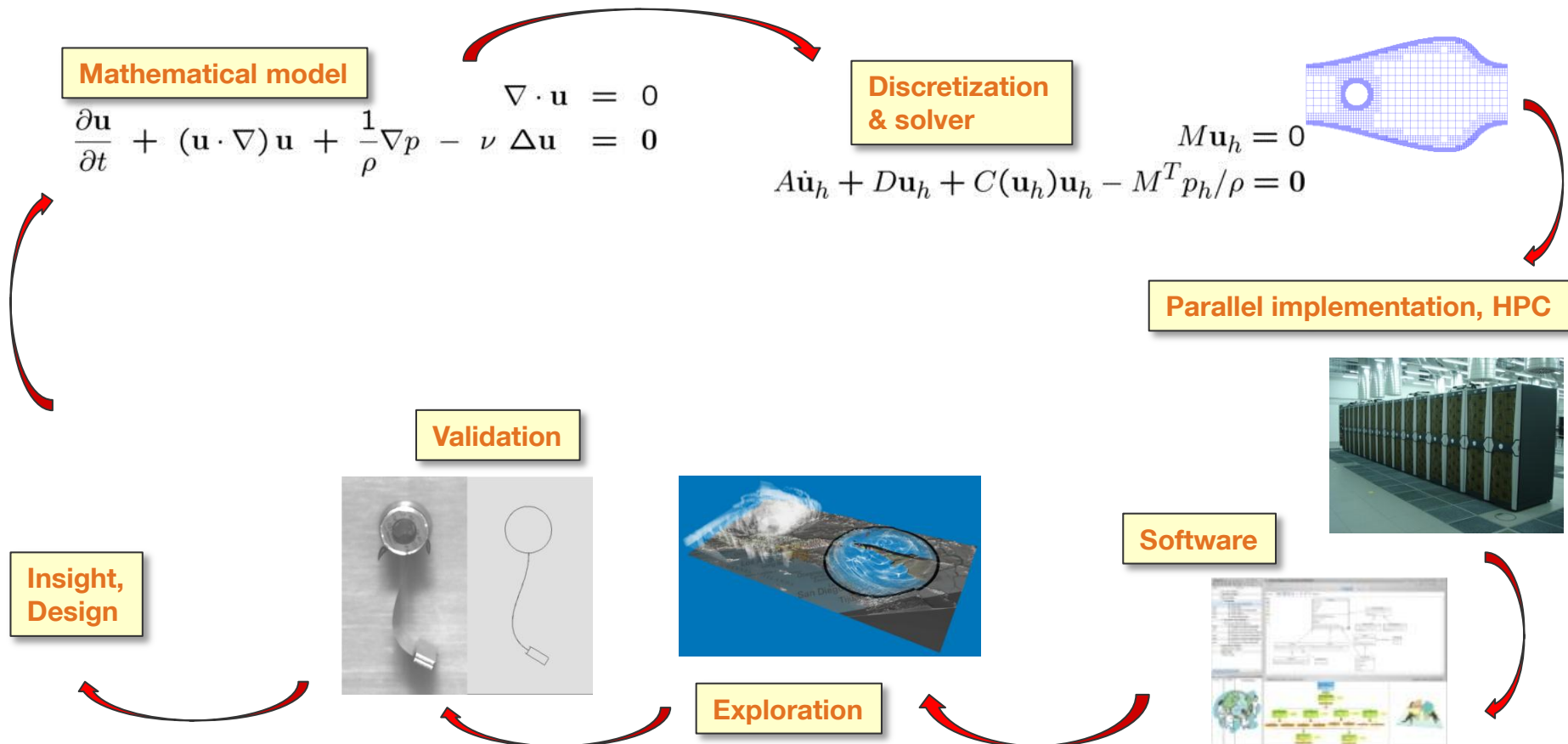
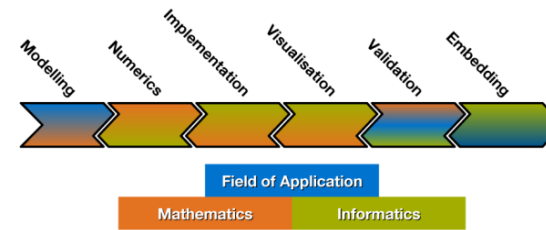
- Teil I: Erste Schritte
- Teil II: Datentypen
- Teil III: Kontrollstrukturen
- Teil IV: Funktionen und Module
- Teil V: IO und Datentypen
- Teil VI: Objektorientierte Programmierung
- Teil VII: Reguläre Ausdrücke
- Teil VIII: Exceptions
- Teil IX: Grafik
- Teil X: Partikelsysteme**
- Teil XI: Datenstrukturen
- Teil XII: Wissenschaftliches Rechnen
- Teil XIII: Wärmeleitung
- Teil XIV: Lösung von Linearen Gleichungssystemen
- Teil XV: Mehrgitterverfahren

Simulationspipeline



Simulationpipeline - reloaded

The Simulation Pipeline Basis of Computational Engineering



Simulation des Sonnensystems

- Phänomen: Planeten und Sterne ziehen sich an
- Modell: Gravitationspotential/kraft für jedes Paar:

$$F_i = \sum_{j \neq i} F_{ij}$$

- Newton:

$$\ddot{r}_i = \frac{F_i}{m_i} = \frac{\sum_{j \neq i} F_{ij}}{m_i} = - \frac{\sum_{j \neq i} \frac{\partial U(r_i, r_j)}{\partial |r_{ij}|}}{m_i}$$

- Numerik: Diskretisierung der DGL (ODE 2.Ordnung)
⇒ Trafo auf System 1. Ordnung

Simulation des Sonnensystems II

Simulationsprogramm

- Datenstrukturen für die Objekte
- Berechnung der Kraft
- Lösung der Bewegungsgleichung
- Kopplung zur Visualisierung
- Visualisierung mit Tkinter

Simulation des Sonnensystems II

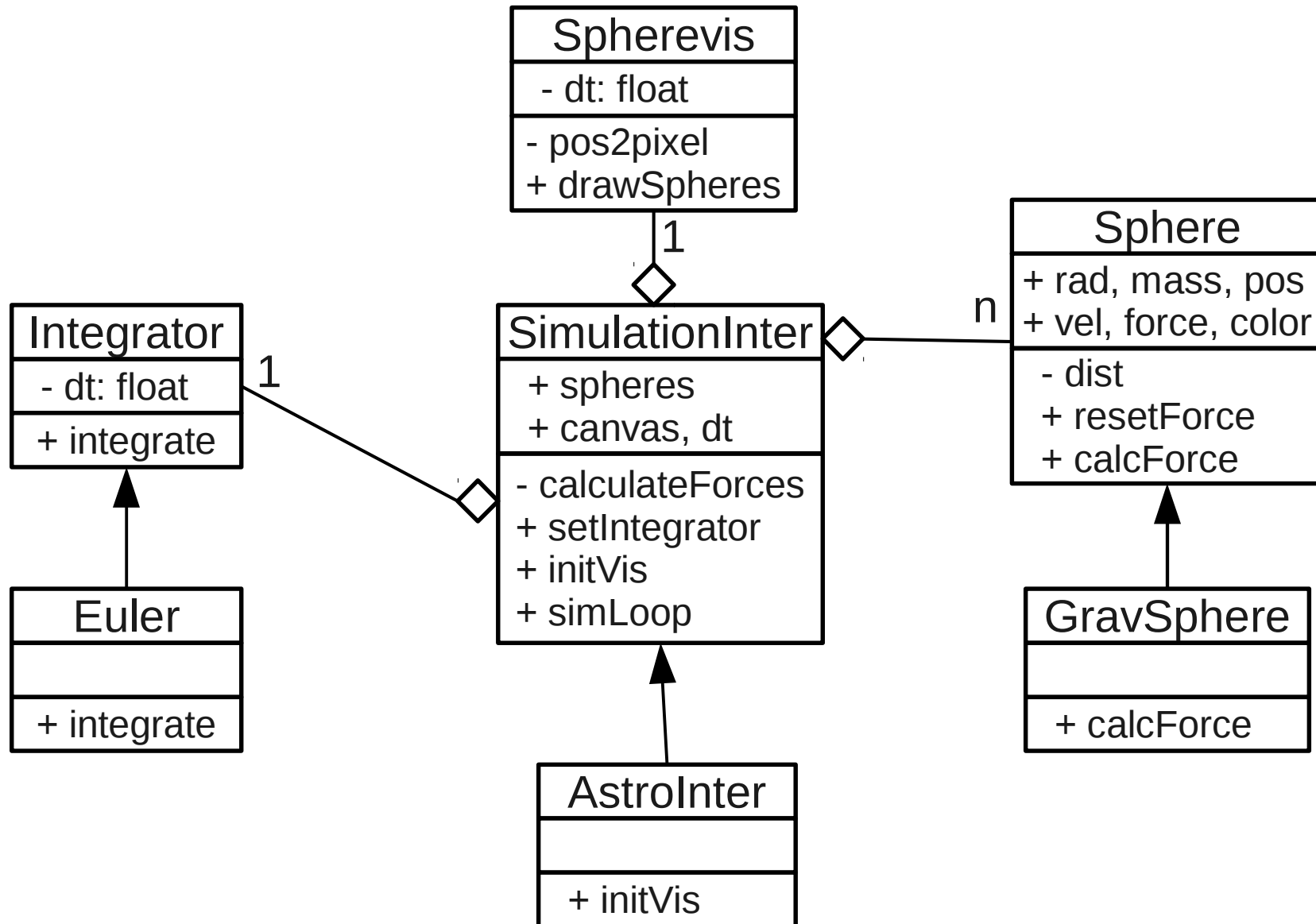
Simulationsprogramm

- Datenstrukturen für die Objekte
- Berechnung der Kraft
- Lösung der Bewegungsgleichung
- Kopplung zur Visualisierung
- Visualisierung mit Tkinter

Anmerkungen

- Eine Vorlesung für ein komplettes Programm ist wenig!
- Programm funktional, aber weder effizient noch an allen Stellen sehr sauber
- kaum Kommentare in Code-Stücken \Rightarrow mündlich in der Vorlesung.
Normal: Kommentare in den Code!

UML-Diagramm des Astro-Simulationsprogramms



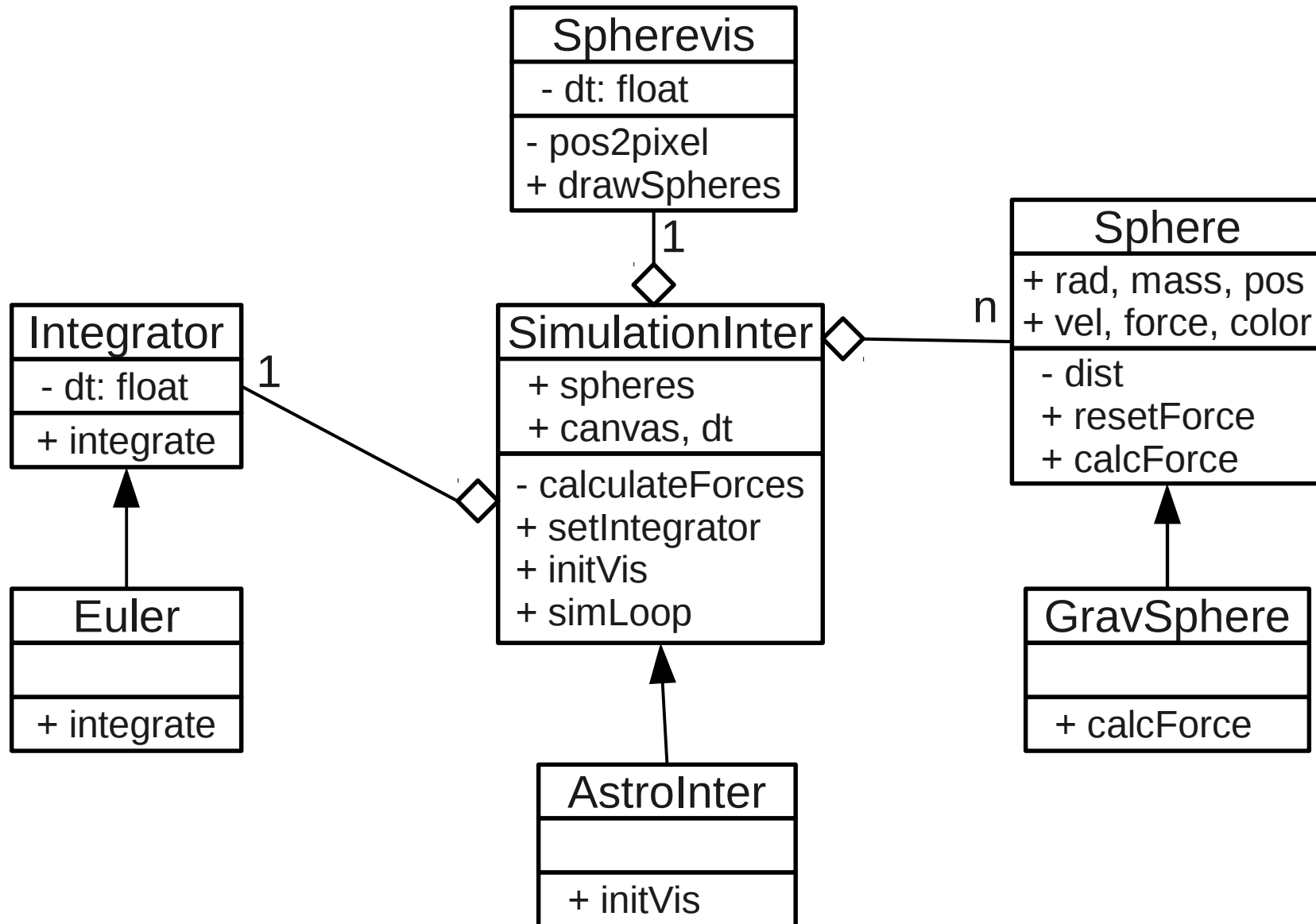
Integrator

- Basisklasse `Integrator` als Schnittstellendefinition
- Unterklasse `Euler`: Einfacher Zeitintegrator
- Für jedes Objekt: Lösung der Bewegungsgleichung in 2D

```
class Integrator(object):
    def __init__(self, dt):
        self.dt = dt
    def integrate(self, sphereList):
        pass

class Euler(Integrator):
    def integrate(self, sphereList):
        for s in sphereList:
            for d in range(2):
                s.pos[d] = s.pos[d] + self.dt*s.vel[d]
                s.vel[d] = s.vel[d] + self.dt*s.force[d]/s.mass
```

UML-Diagram (WH)



Klasse zur Visualisierung: Spherevis

Konstruktor `__init__`

- Parameter für den Konstruktor: `canvas`, `posLL` und `posRR`
- `canvas` enthält die Zeichenfläche
- `posLL` und `posUR` enthalten Koordinaten der Ecken des Simulationsgebiets
- Konstruktor speichert übergebenes `canvas`, dessen Größe und die Koordinaten

```
class Spherevis(object):  
    def __init__(self, canvas, posLL, posUR):  
        self.canvas = canvas  
        self.width = canvas.winfo_reqwidth()  
        self.height = canvas.winfo_reqheight()  
        self.posLL = posLL  
        self.posUR = posUR
```

Methode `pos2Pixel()`

- Zu zeichnende Objekte: Angabe in Koordinaten des Simulationsgebiets
- \Rightarrow Umrechnung von Koordinaten in Pixel
- \Rightarrow Transformation des Intervalls des Simulationsgebiets auf das Intervall zwischen Null und Anzahl an Pixeln
- Parameter für `pos2Pixel`: Simulationskoordinaten
- Rückgabewert für `pos2Pixel`: Pixelkoordinaten

```
def pos2Pixel(self, posx, posy):  
    pix_x = self.width*((posx - self.posLL[0])/  
                        (self.posUR[0]-self.posLL[0]))  
    pix_y = self.height*((posy - self.posLL[1])/  
                        (self.posUR[1]-self.posLL[1]))  
    return pix_x, pix_y
```

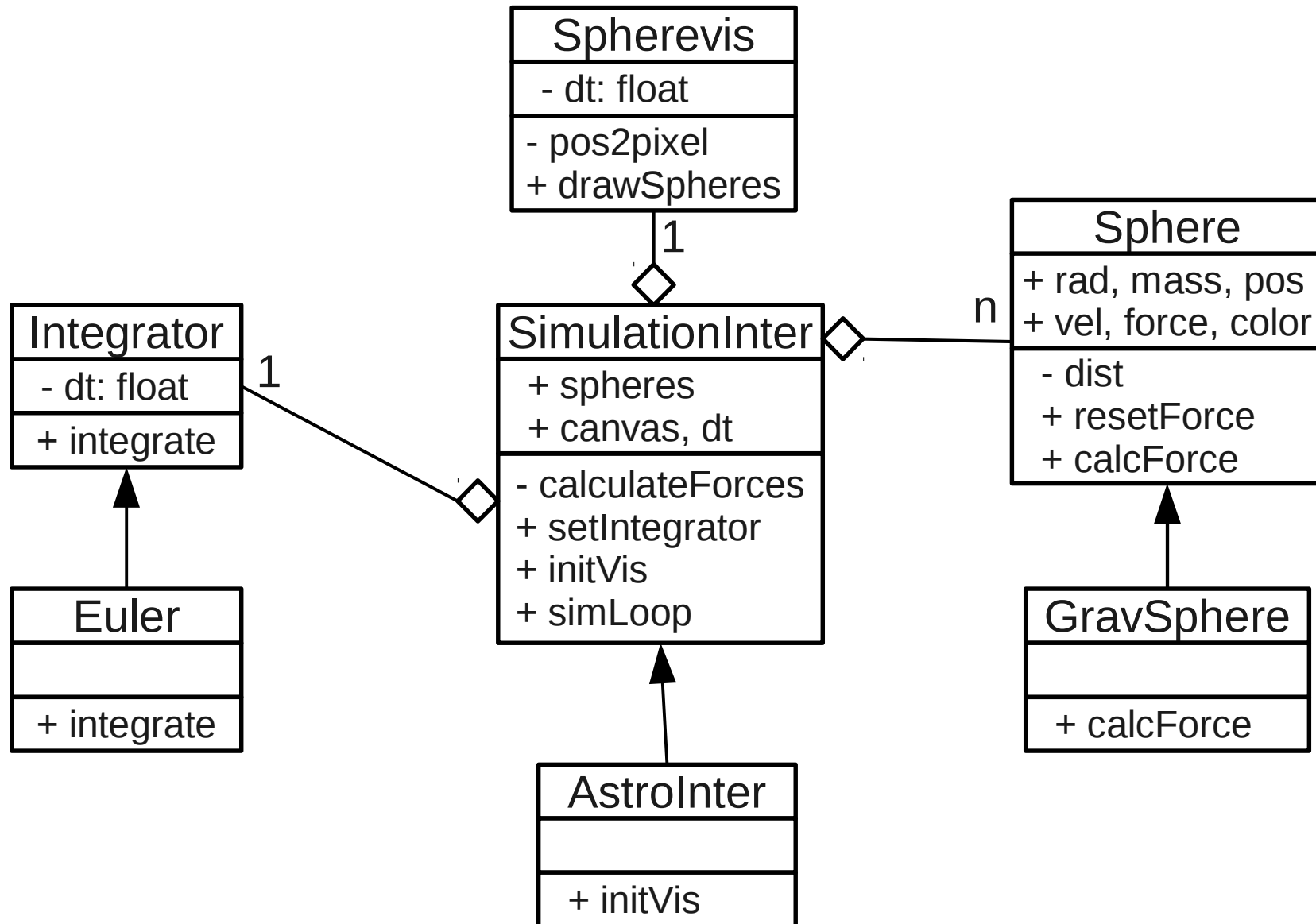
Methode `drawSpheres()`

- `drawSpheres()` erhält als Parameter eine Liste von Kugeln (Klasse `Sphere`)
- `drawSpheres()` löscht die Zeichenfläche (`canvas`) und malt alle Kugeln mit deren Radius und Farbe
- Für jede Kugel: Ermitteln von „Bounding Box“ in Pixeln, Zeichnen von Kreis mit `create_oval()`, Aktualisierung der Zeichenfläche

```
def drawSpheres(self, spheres):
    self.canvas.delete("all")
    for s in spheres:
        pixelLL = self.pos2Pixel(s.pos[0]-s.rad,
                                s.pos[1]-s.rad)
        pixelUR = self.pos2Pixel(s.pos[0]+s.rad,
                                s.pos[1]+s.rad)
        self.canvas.create_oval(pixelLL[0], pixelLL[1],
                                pixelUR[0], pixelUR[1],
                                fill=s.color)

    self.canvas.update()
```

UML-Diagram (WH)



Klassen für Kugeln: `Sphere` und `GravSphere`

Konstruktor `__init__`

- Parameter: `Position[3]`, `Geschwindigkeit[3]`, `Radius`, `Masse` und `Farbe`
- Alle Parameter werden gespeichert

Methode `resetForce()`

- Setzt die Kraft (`force()`) auf Null

Methode `dist()`

- Parameter: zweite Kugel
- Gibt den Abstand (Vektor) zwischen den Kugeln zurück

Methode `calcForce()`

- Parameter: zweite Kugel
- Berechnet die Kraft, die die zweite Kugel auf `self` ausübt und addiert sie auf `self.force`
- In der Basisklasse `Sphere` nur als „Interface“
- Konkrete Implementierung in Subklassen

Implementierung der Klasse Sphere

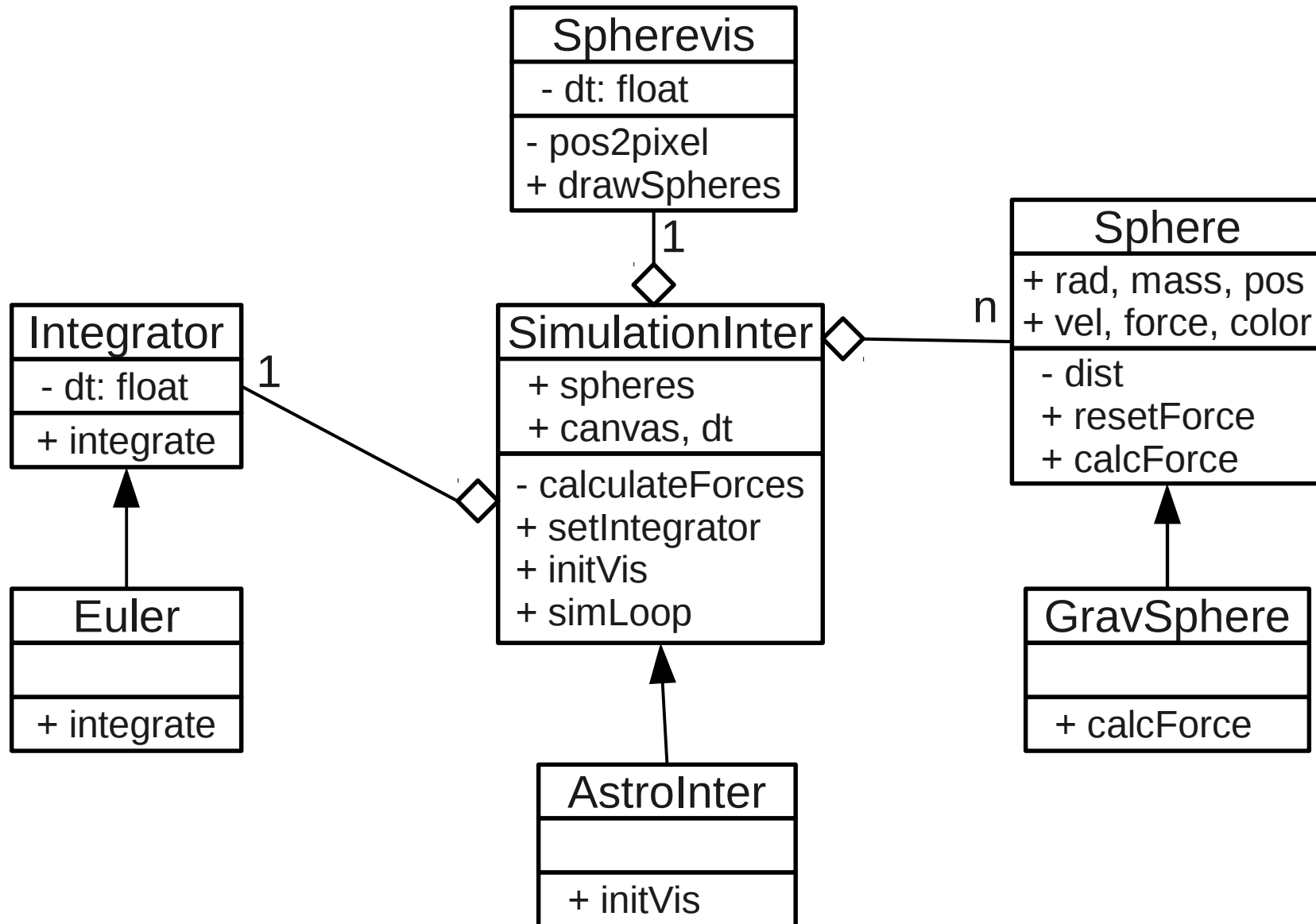
```
from math import sqrt
class Sphere(object):
    def __init__(self, pos, vel, rad, mass, color="red"):
        self.rad = rad
        self.mass = mass
        self.pos = list(pos)
        self.vel = list(vel)
        self.force = [0,0]
        self.color = color
    def resetForce(self):
        for d in range(2):
            self.force[d] = 0
    def dist(self, sphere2):
        dist = [0,0]
        for d in range(2):
            dist[d] = sphere2.pos[d] - self.pos[d]
        return dist
    def calcForce(self, sphere2):
        pass
```


Subklasse GravSphere

- Gravitationskraft 1D: $F(d) = G \cdot \frac{m_1 m_2}{d^2}$
- G : Gravitationskonstante ($6.67428 \cdot 10^{-11}$)
- Gravitationskraft: $\vec{F}(\vec{r}) = G \cdot \frac{m_1 m_2}{d^3} \cdot \vec{r}$
- Dabei: \vec{r} : Vektor zwischen beiden Kugeln, d : Abstand
- GravSphere übernimmt Konstruktor, `resetForce()` und `dist()` von der Basisklasse
- `calcForce()` wird überschrieben

```
class GravSphere(Sphere):
    gravConst = 6.67428e-11
    def calcForce(self, sphere2):
        dist = self.dist(sphere2)
        for d in range(2):
            self.force[d] += (dist[d] * self.gravConst *
                             (self.mass * sphere2.mass)
                             /sqrt(dist[0]**2 + dist[1]**2)**3)
```

UML-Diagram (WH)



Schnittstellenklasse zum Steuern der Simulation

- Eine Klasse, die die bisherigen Teile zusammenführt (`SimulationInter`)
- Dinge, die getan werden müssen:
 - Initialisierung (Erstellung von Kugeln)
 - Erstellung des Integrators
 - Berechnung der Kräfte zwischen den Partikeln
 - Aufruf des Integrators
 - Erstellung der Zeichenfläche
 - Methode, mit der in einer Schleife Zeichnen, Kraftberechnung und der Integrator wiederholt aufgerufen werden
- Die Klasse implementiert noch keine konkrete Simulation
- Dazu wird eine Subklasse von `SimulationInter` erstellt: `AstroInter`

Nötige Module

```
from spheres import GravSphere
from spherevis import Spherevis
from Tkinter import Tk, Canvas
from math import sqrt, pi
from random import random
```

Konstruktor `__init__(self, dt)`

- Legt Liste für Kugeln (`spheres []`)
- Speichert Zeitschrittweite `dt`
- Erzeugt ein Canvas zur Visualisierung

Methode `setIntegrator()`

- Speichert den übergebenen Integrator ab

Methode `calculateForces()`

- Setzt zunächst die Kraft auf alle Kugeln auf Null
- Läuft dann über alle Kugelpaare und berechnet die Kraft

Methode `initVis()`

- Initialisiert die Visualisierung
- Wird durch Subklasse implementiert, da nur da die Simulationskoordinaten bekannt sind

Methode `simLoop()`

- Führt die Simulation endlos durch
- In jeden Schritt: Visualisierung, Kraftberechnung und Integration

Implementierung der Klasse `SimulationInter`

```
class SimulationInter(object):
    def __init__(self, dt):
        self.spheres = []
        self.dt = dt
        root = Tk()
        self.canvas = Canvas(root, width=800, height=800)
        self.canvas.pack()

    def setIntegrator(self, integrator):
        self.integrator = integrator

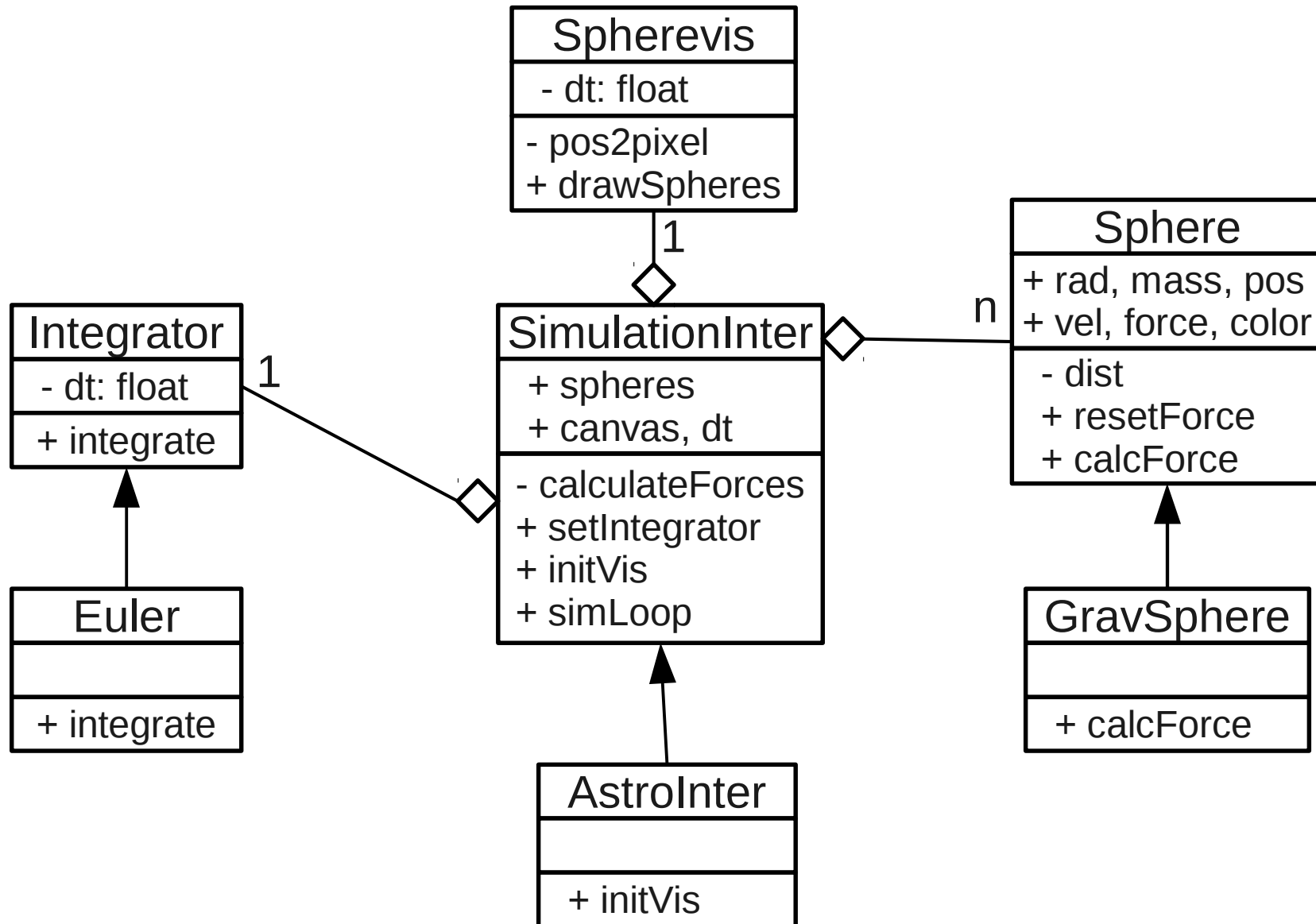
    def calculateForces(self):
        for sphere1 in self.spheres:
            sphere1.resetForce()
        for sphere1 in self.spheres:
            for sphere2 in self.spheres:
                if sphere1 != sphere2:
                    sphere1.calcForce(sphere2)
```

Implementierung der Klasse `SimulationInter` (cont.)

```
def initVis(self):
    print "Subclasses have to implement initVis"
    exit(1)

def simLoop(self):
    while True:
        self.vis.drawSpheres(self.spheres)
        for i in range(10):
            self.calculateForces()
            self.integrator.integrate(self.spheres)
```

UML-Diagram (WH)



Subklasse `AstroInter`

Konstruktor `__init__`

- Konstruktor der Vaterklasse aufrufen (Zeitschrittweite 1/10 Tag)
- Planeten erzeugen

Methode `initVis()`

- Größe des sichtbaren Raumausschnitts festlegen
- Instanz der Klasse `Spherevis` erzeugen

```
class AstroInter(SimulationInter):
    def __init__(self):
        SimulationInter.__init__(self, 8640.)
        c=3.
        self.spheres.append(GravSphere(( 0.00000, 0.),
            (0., 0.), c*20.e9, 1.9891e30, "yellow")) # Sonne
        ...
    def initVis(self):
        self.vis = Spherevis(self.canvas, (-2.e12, -2.e12),
            ( 2.e12, 2.e12))
```

Restliche Planeten

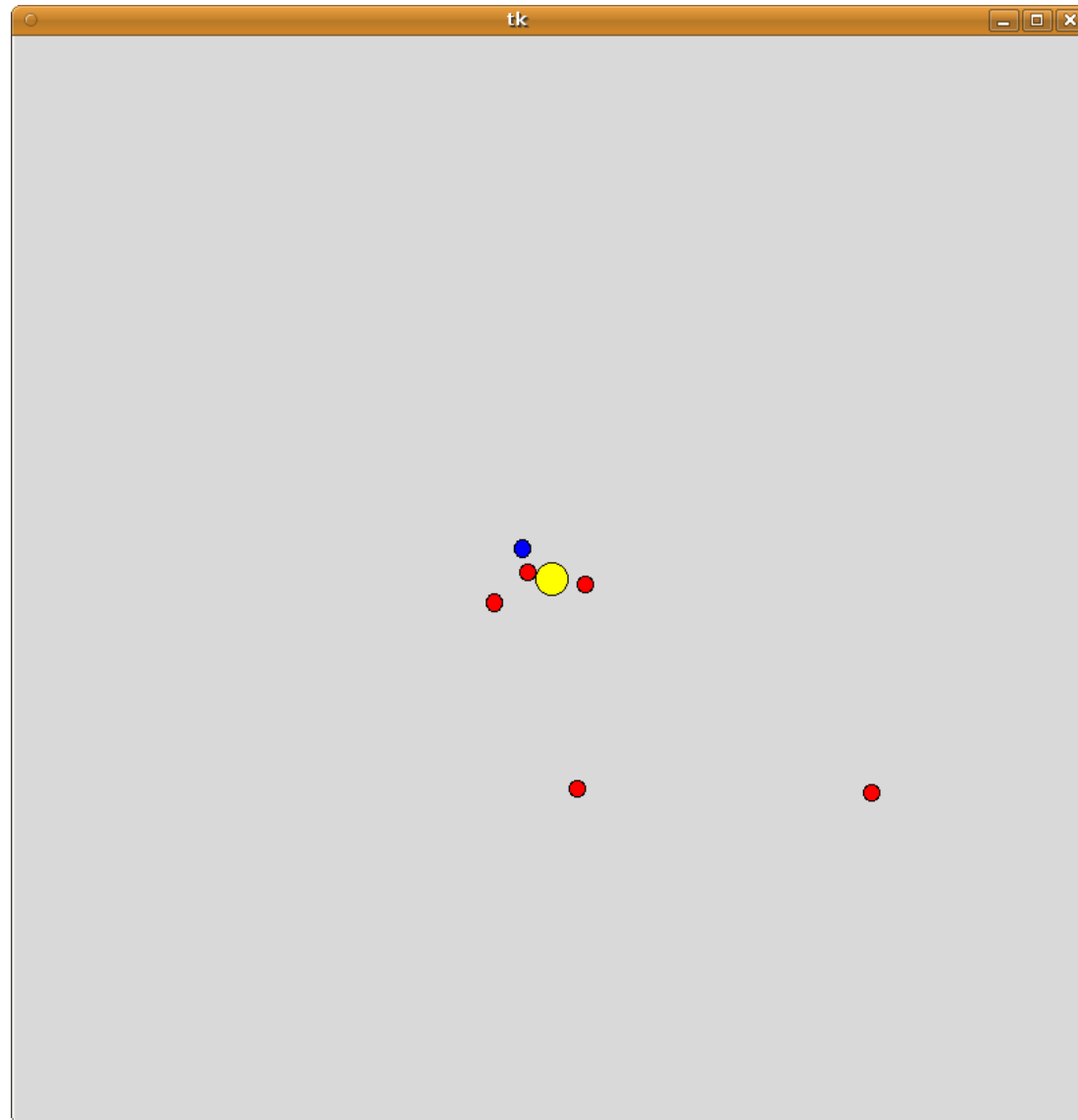
```
self.spheres.append(GravSphere(( 57.9e9, 0.),
    (0.,47872.), c*10.e9, 3.302e23)) # Merkur
self.spheres.append(GravSphere(( 108.2e9, 0.),
    (0.,35021.), c*10.e9, 4.8685e24)) # Venus
self.spheres.append(GravSphere(( 149.6e9, 0.),
    (0.,29786.), c*10.e9, 5.9736e24, "blue")) # Erde
self.spheres.append(GravSphere(( 227.9e9, 0.),
    (0.,24131.), c*10.e9, 6.4185e23)) # Mars
self.spheres.append(GravSphere(( 778.3e9, 0.),
    (0.,13070.), c*10.e9, 1.899e27)) # Jupiter
self.spheres.append(GravSphere((1.429e12, 0.),
    (0., 9672.), c*10.e9, 5.6846e26)) # Saturn
self.spheres.append(GravSphere((2.875e12, 0.),
    (0., 6835.), c*10.e9, 8.6832e25)) # Uranus
self.spheres.append(GravSphere((4.504e12, 0.),
    (0., 5478.), c*10.e9, 1.0243e26)) # Neptun
```

Starten der Simulation

- Alle nötigen Klassen wurden implementiert
- Nun müssen nur noch die konkreten Instanzen erzeugt werden

```
>>> # nötige Module einbinden
>>> from integrator import Euler
>>> from simulationinterface import AstroInter
>>>
>>> # Interface für Astro-Simulation erstellen
>>> simInter = AstroInter()
>>> # Integrator mit Zeitschrittweite für Astro-Sim.
>>> simInter.setIntegrator(Euler(simInter.dt))
>>> # Init Vis. (Abbildung Sim-Koord. auf Canvas)
>>> simInter.initVis()
>>> # Simulation starten
>>> simInter.simLoop()
```

Screenshot der Astro-Simulation



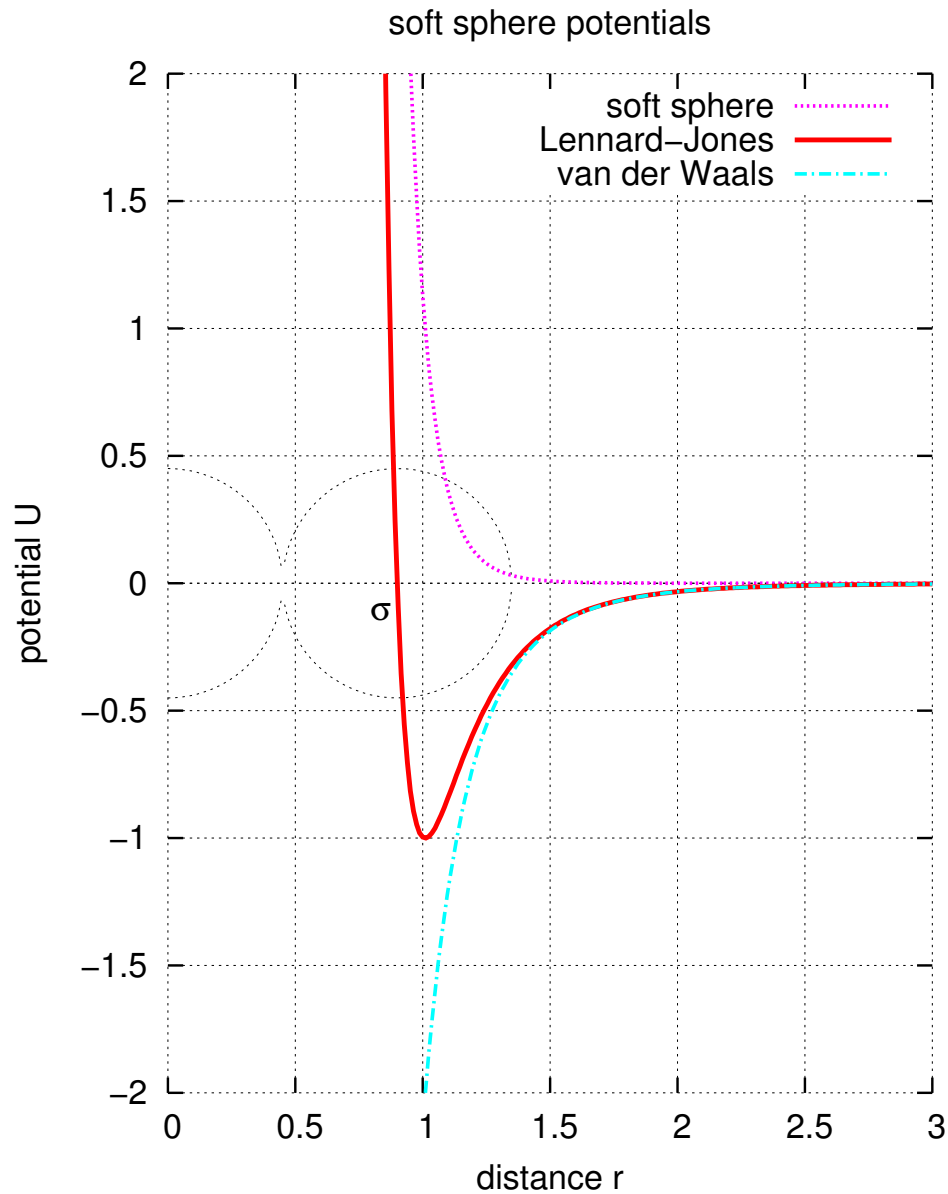
Mögliche Erweiterung?

Welche anderen physikalischen Phänomene lassen sich ähnlich beschreiben?

Simulation von Molekülen

- Phänomen: Moleküle stoßen sich ab bzw. ziehen sich an (klassische Molekulardynamik)
- Basis:
 - Newtonsche Bewegungsgleichungen:
$$F_i = m_i \cdot a_i = m_i \cdot \ddot{r}_i$$
 - Moleküle als Partikel betrachtet:
$$F_i = \sum_j F_{ij}$$
 - Interaktion zwischen Molekülen: potentielle Energie:
$$F_{ij} = -\nabla U(r_{ij})$$
- Modell: Lennard-Jones-Potential (Kombination aus Pauli-Repulsion und van-der-Waals-Anziehung)

Lennard-Jones-Potential



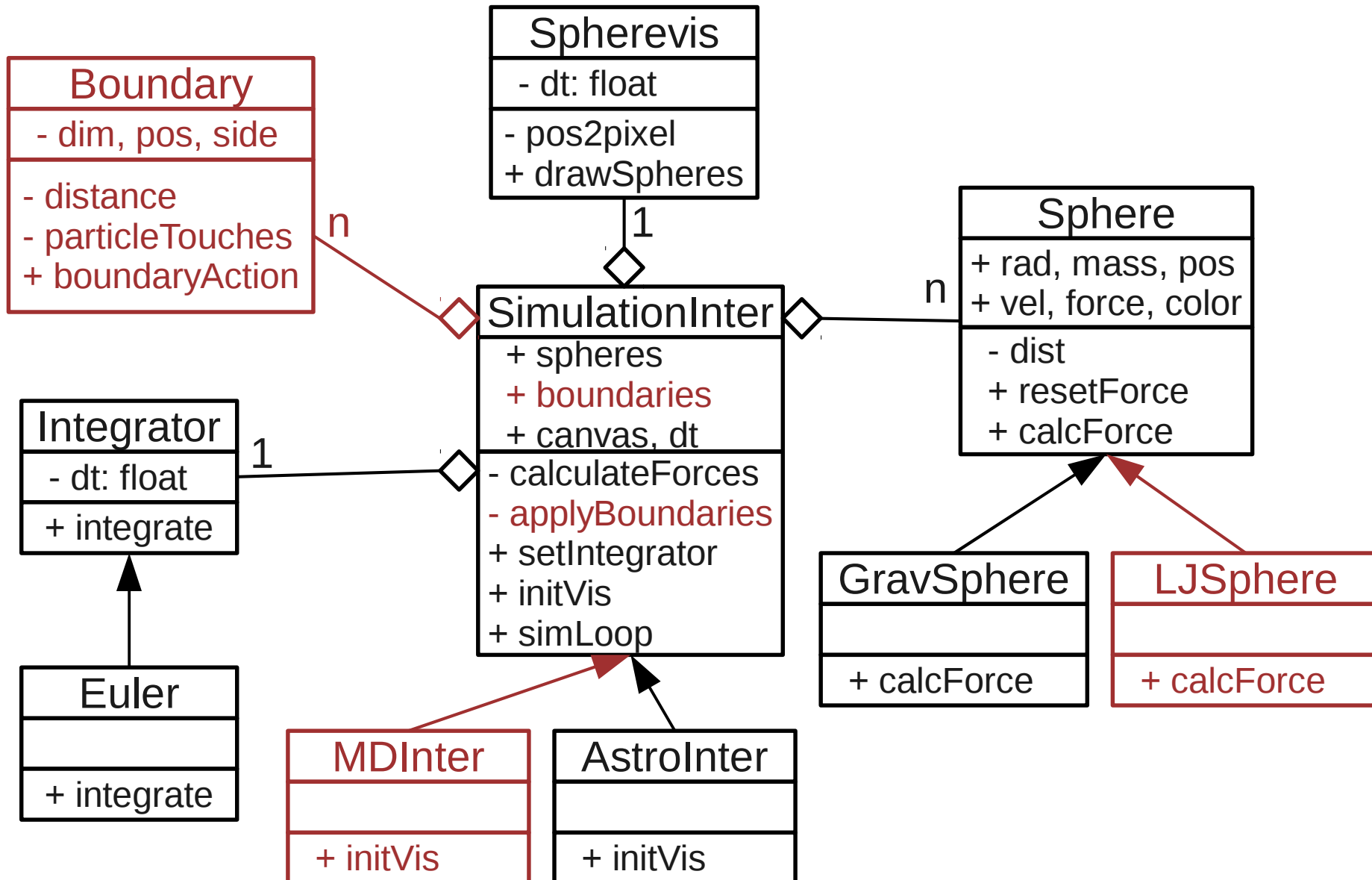
$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

Simulation von Molekülen III

Anmerkungen

- Numerik: analog zur Astro-Simulation
- Simulationsprogramm
 - Im wesentlichen wie bei der Astro-Simulation
 - Wir erweitern das bisherige Programm so, dass damit sowohl Planeten als auch Moleküle simuliert werden können
 - Zusätzlich muss das Gebiet begrenzt werden
- Visualisierung wieder mit Tkinter
- Kosten eines Zeitschritts: $O(N * N)$, daher nur wenige Moleküle möglich
- Aufgrund der kurzreichweitigen Kraft (LJ-Potential fällt schnell ab) sollten nur Nachbarn von Molekülen zur Kraftberechnung verwendet werden ($O(N)$)

Erweiterung auf MD-Simulation: UML



Subklasse `LJSphere` der Klasse `Sphere`

- Methode `calcForce()` wird überschrieben, der Rest von der Basisklasse übernommen
- Lennard-Jones-Potential: $U(r_{ij}) = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)$
- Zur Vereinfachung: $\epsilon = \sigma = 1$
- Kraft 1D: $F(r_{ij}) = 24\left(2 \cdot \left(\frac{1}{r}\right)^{13} - \left(\frac{1}{r}\right)^7\right)$
- Kraft nD: $\vec{F}(\vec{r}_{ij}) = 24\left(2 \cdot \left(\frac{1}{d}\right)^{14} - \left(\frac{1}{d}\right)^8\right) \cdot \vec{r}_{ij}$

```
class LJSphere(Sphere):
    def calcForce(self, sphere2):
        dist = self.dist(sphere2)
        absdist = sqrt(dist[0]**2 + dist[1]**2)
        for d in range(2):
            self.force[d] += 24*(2*absdist**-14
                                - absdist**-8) * dist[d]
```

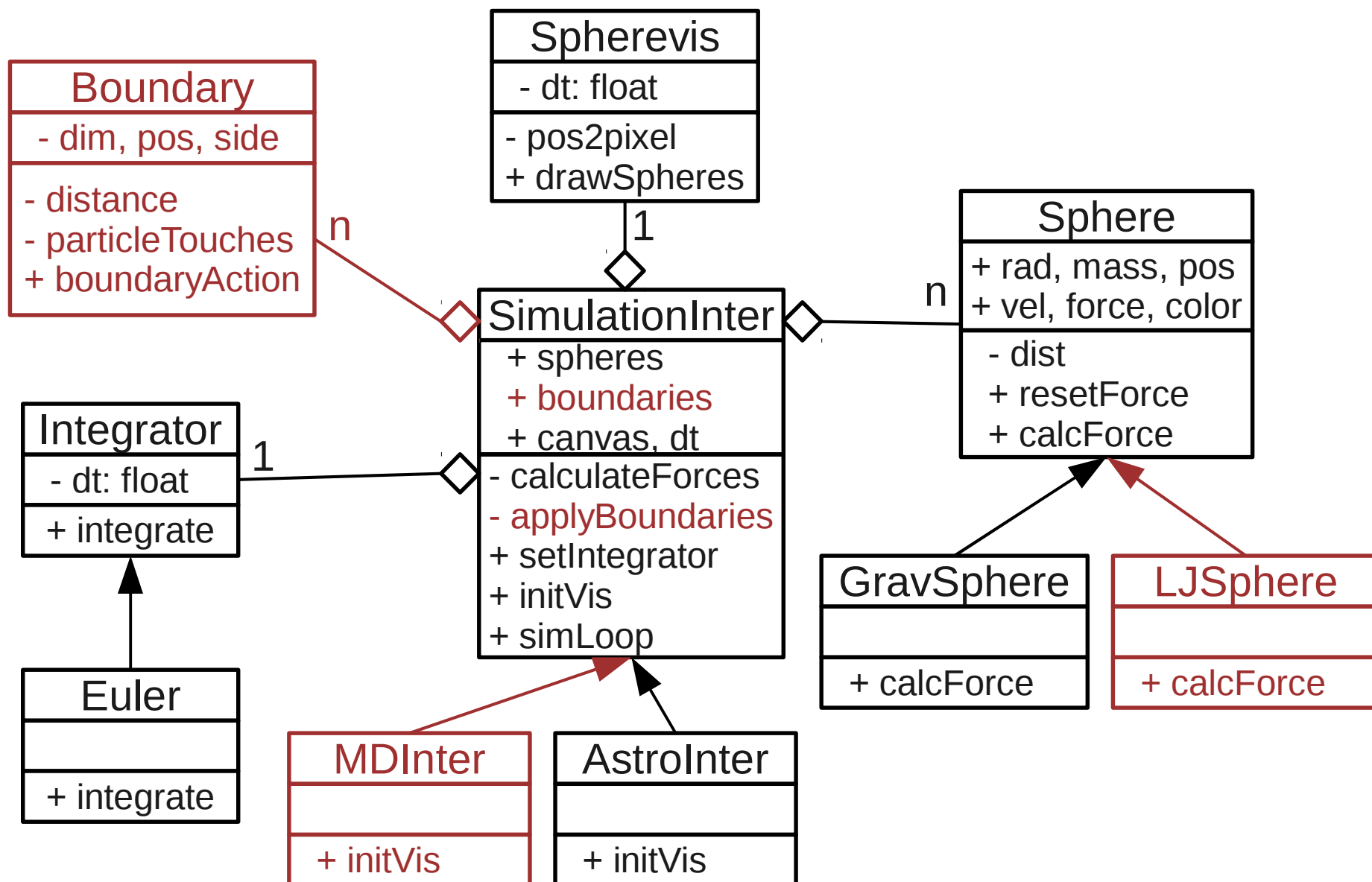
Randbedingungen

- Bisher: Simulationsgebiet prinzipiell unendlich groß
- Die Moleküle würden in alle Richtungen davonfliegen
- Deswegen: Begrenzung des Gebiets
- Verhalten am Rand des Gebiets muss definiert werden:
 - Aus- bzw. einströmende Ränder
 - Periodische Ränder (was links rausfliegt kommt rechts wieder rein)
 - Reflektierende Ränder (Einfach, deswegen nehmen wir diese)
 - Heizende/Kühlende Ränder
 - ...

Reflektierende Ränder

- Sobald ein Partikel den Rand berührt, prallt es ab
- Geschwindigkeit senkrecht zur Wand wird invertiert
- Die Strecke, die schon überlappt, wird neuer Abstand zur Wand

Erweiterung auf MD-Simulation: UML (WH)



Klasse `Boundary`

Konstruktor `__init__`

- Parameter `dim`: gibt die Raumrichtung an (0: x, 1: y)
- Parameter `pos`: gibt die Position der Ebene an
- Parameter `side`: -1 für linke/untere Seite, +1 für rechts/oben

Methode `distance()`

- Parameter `p`: Partikel
- Berechnet den Abstand des Partikels zum Rand

Methode `particleTouches()`

- Parameter `p`: Partikel
- Gibt `True` zurück, wenn das Partikel den Rand berührt (Abstand kleiner als Radius)

Methode `boundaryAction()`

- Parameter `p`: Partikel
- Führt bei Berührung die Auswirkung des Aufpralls aus

Implementierung der Klasse Boundary

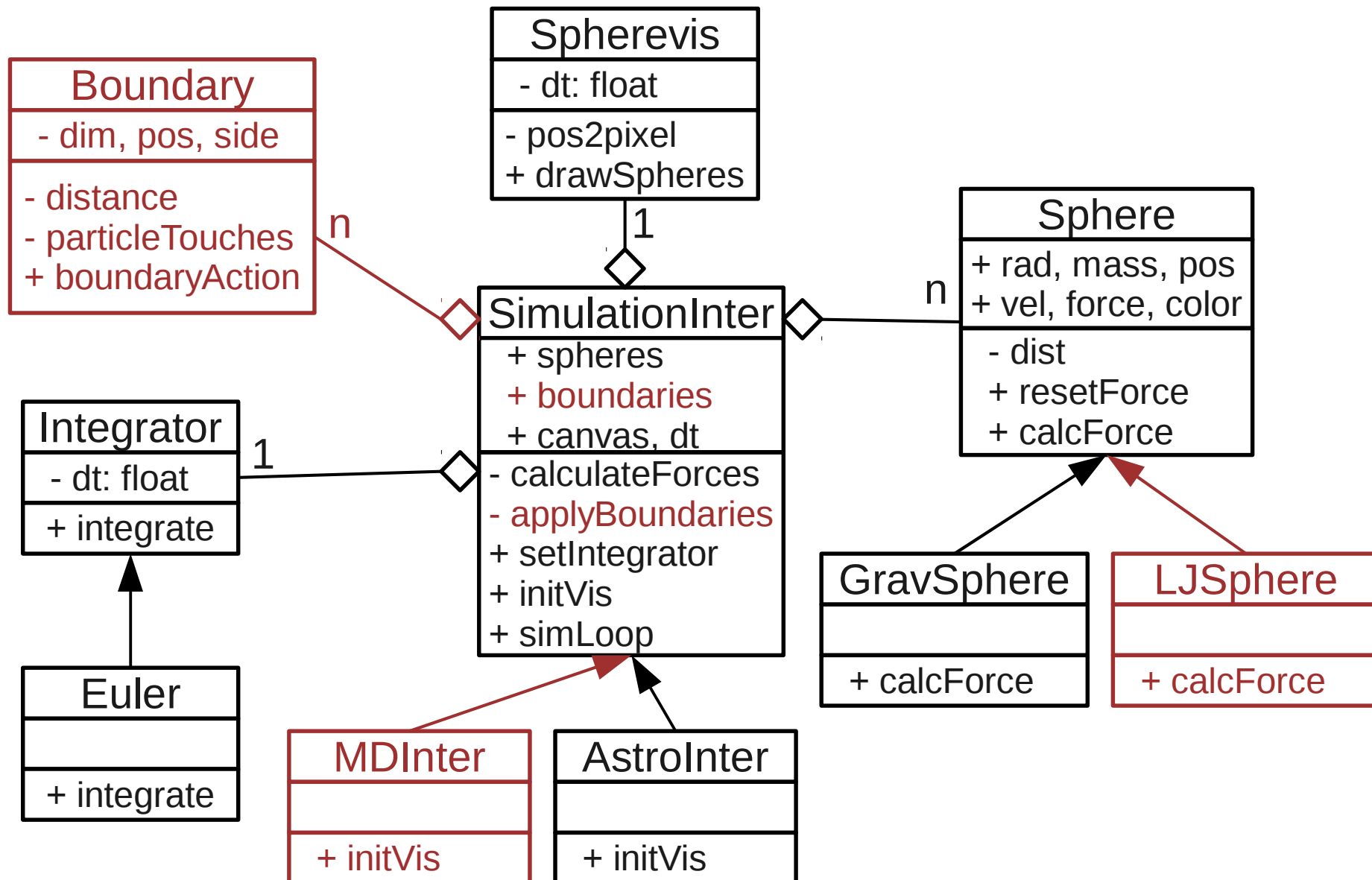
```
class Boundary(object):
    def __init__(self, dim, pos, side):
        self.dim = dim # 0 oder 1
        self.pos = pos # beliebiger float-Wert
        self.side = side # -1 oder 1

    def distance(self, p):
        return p.pos[self.dim] - self.pos

    def particleTouches(self, p):
        return abs(self.distance(p)) <= p.rad

    def boundaryAction(self, p):
        if self.particleTouches(p):
            p.pos[self.dim] -= 2*(self.distance(p)
                                +p.rad*self.side)
            p.vel[self.dim] *= -1
```

Erweiterung auf MD-Simulation: UML (WH)



Subklasse `MDInter`

Konstruktor `__init__`

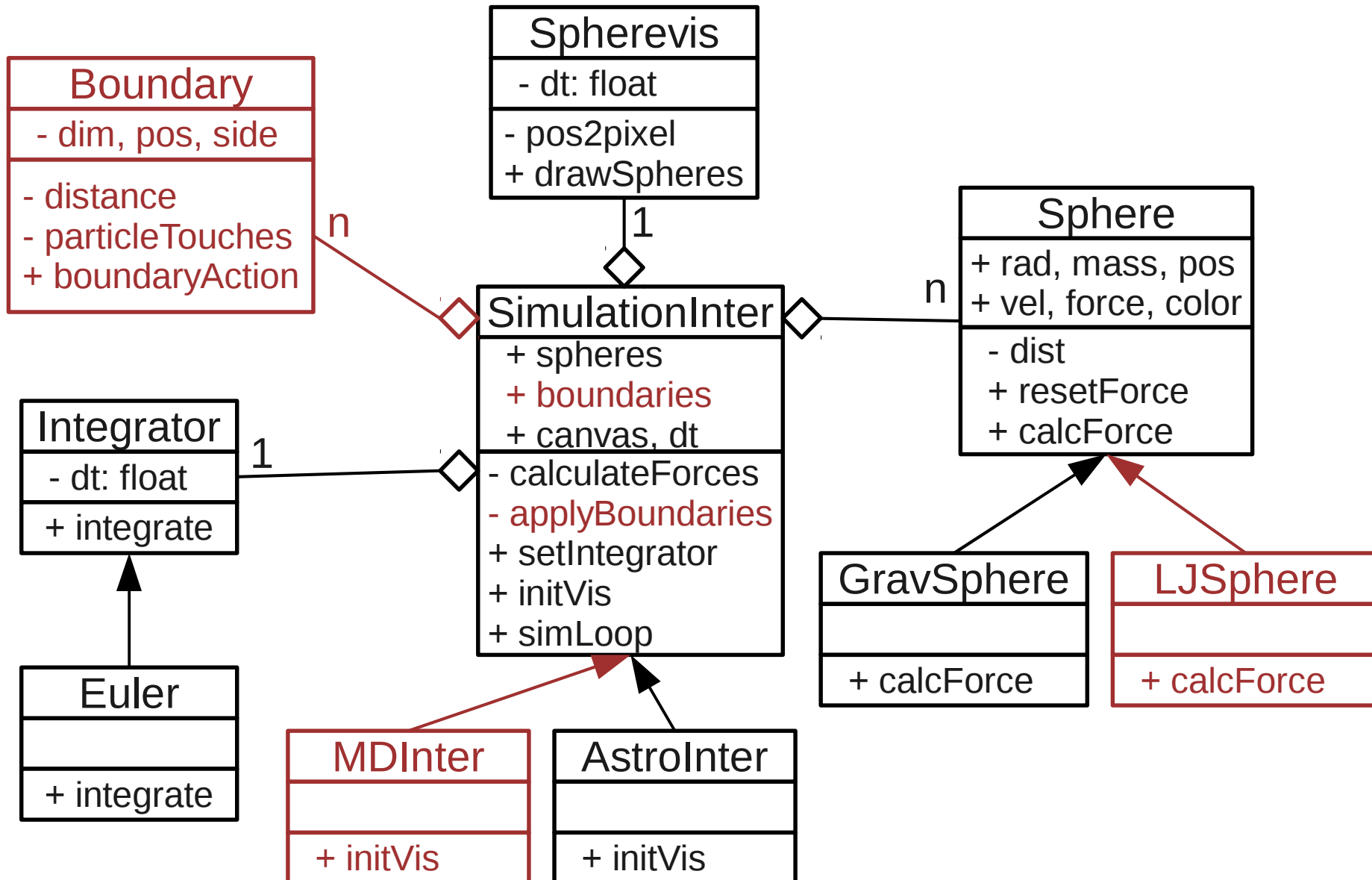
- Parameter: Anzahl Partikel und Dichte
- Konstruktor der Vaterklasse aufrufen (Zeitschrittweite 0.02)
- Moleküle erzeugen
 - Zufällige Positionen schlecht, da sich Moleküle dann evtl. überlappen (hohe Kräfte und damit numerische Probleme) \Rightarrow Positionen auf einem Gitter
 - Anzahl Partikel so runden, dass ein quadratisches Gitter erzeugt werden kann
 - Geschwindigkeiten prop. zur Temperatur. Wir versuchen nicht, genau zu sein, und wählen deswegen willkürlich gleichverteilte Geschwindigkeiten zwischen -0.25 und 0.25
- Randbedingungen erzeugen (refl. Ränder auf allen Seiten)

Methode `initVis()`

- Raum um das Molekülgitter als sichtbaren Bereich festlegen


```
class MDInter(SimulationInter):
    def __init__(self, numParticles, density):
        SimulationInter.__init__(self, 0.02)
        numPerDim = round(sqrt(numParticles))
        self.length = sqrt(pi*numPerDim**2/density)
        for ix in range(int(numPerDim)):
            for iy in range(int(numPerDim)):
                x = (ix+0.5)/numPerDim*self.length
                y = (iy+0.5)/numPerDim*self.length
                vx = (random()-0.5)/2.
                vy = (random()-0.5)/2.
                self.spheres.append(LJSphere((x, y), (vx, vy),
                                             1.0, 1.0, None))
        self.boundaries.append(Boundary(0, 0.0, -1))
        self.boundaries.append(Boundary(0, self.length, 1))
        self.boundaries.append(Boundary(1, 0.0, -1))
        self.boundaries.append(Boundary(1, self.length, 1))
    def initVis(self):
        self.vis = Spherevis(self.canvas, (0.0, 0.0),
                             (self.length, self.length))
```

Wenn wir eine Simulation auswählen wollen?



Einbinden der neuen Klassen

nötige Module

```
import argparse
from integrator import Euler
from simulationinterface import AstroInter, MDInter
```

Option-Parser

```
parser = argparse.ArgumentParser(description= \
    'Astro and MD simulation')
parser.add_argument('-n', '--numParts', \
    dest="numParts", type=int, \
    help='Number of particles', default=30)
parser.add_argument('-t', '--simType', \
    dest='simType', action='store', \
    help="'Astro' or 'MD' simulation")
parser.add_argument('--rho', dest='rho', action='store', \
    type=float, help="Density", default = 0.1)
options = parser.parse_args()
```

Simulationsinterface erstellen

```
# Simulationsinterface erstellen
if options.simType == None:
    print "Bitte Simulationstyp angeben"
    exit(1)
if options.simType == "Astro":
    simInter = AstroInter()
elif options.simType == "MD":
    n = options.numParts
    rho = options.rho
    simInter = MDInter(n, rho)
```

Screenshot der MD-Simulation

