Dr. Vasile Gradinaru
Marco Petrella

Serie 5

Abgabedatum: Fr 29.03 oder früher
Koordinatoren: Marco Petrella, HG J 45, `marco.petrella@sam.math.ethz.ch`
Webpage: http://metaphor.ethz.ch/x/2019/fs/401-1662-10L

1. *Beweis der Ordnung impliziten Euler Verfahrens*

Zeigen Sie, dass der Fehler im Impliziten-Euler-Verfahren sich wie $O(h)$ verhält:

$$\|y(t_n) - y_n\| \leq C \cdot h \,,$$

wobei $y(t_n)$ ist die exakte Lösung einer gewöhnlicher Differentialgleichung erster Ordnung mit Lipschitz-stetiger rechten Seite, h ist der Zeitschritt, $t_n = n \cdot h$ und y_n ist die numerische Approximation zur Zeit t_n.

Hinweis: folgen Sie den Schritten und Ideen aus der Vorlesung für das explizite Euler Verfahren und für die implizite Mittelpunktsregel.

Bitte wenden!

2. *Molekulardynamik*

Wir betrachten ein System von N Teilchen, deren paarweise Wechselwirkung durch das Lennard-Jones Potential $U(r) = U(\|\underline{x}\|)$ gegeben ist:

$$U(r) = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right) \tag{1}$$

und:

$$V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) := \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ i\neq j}}^{N} U(\|\underline{x}_i - \underline{x}_j\|) \tag{2}$$

Die Hamiltonfunktion des Systems ist dann:

$$\mathcal{H}(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N, \underline{p}_1, \dots, \underline{p}_N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\underline{p}_i^2}{2m} + V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N)\,. \tag{3}$$

Verwenden Sie die Hamiltongleichungen zur Herleitung der Bewegungsgleichungen.

a) Implementieren Sie das Velocity-Verlet Verfahren (8).

b) Implementieren Sie das Leap-Frog Verfahren (9).

Hinweis (aus dem Skript): Aus den Hamiltongleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\underline{x}}_i &= \nabla_{\underline{p}_i}\mathcal{H} \\ \dot{\underline{p}}_i &= -\nabla_{\underline{x}_i}\mathcal{H} \end{aligned} \tag{4}$$

folgt

$$\begin{aligned} \dot{\underline{x}}_i &= \underline{v}_i \\ \dot{\underline{v}}_i &= -\nabla_{x_i} V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) \end{aligned} \tag{5}$$

oder

$$m\ddot{\underline{x}}_i = \underline{F}_i \tag{6}$$

Die Ableitung in Gl. (6) approximieren wir mit finiten Differenzen 2. Ordnung.

$$\begin{aligned} m_i \frac{\underline{x}_i^{n+1} - 2\underline{x}_i^n + \underline{x}_i^{n-1}}{\delta t^2} &= \underline{F}_i^n \\ \Rightarrow \underline{x}_i^{n+1} &= 2\underline{x}_i^n - \underline{x}_i^{n-1} + \delta t^2 \underline{F}_i^n \end{aligned} \tag{7}$$

Zur numerischen Lösung benutzen wir das Velocity-Verlet (8) und das Leap-Frog Verfahren (9).

$$\begin{aligned} \underline{v}_i^{n+1} &= \underline{v}_i^n + \frac{\delta t}{2}\left(\underline{F}_i^n + \underline{F}_i^{n+1}\right) \\ \underline{x}_i^{n+1} &= \underline{x}_i^n + \delta t\, \underline{v}_i^n + \frac{\delta t^2}{2}\underline{F}_i^n \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \underline{v}_i^{n+\frac{1}{2}} &= \underline{v}_i^{n-\frac{1}{2}} + \delta t\, \underline{F}_i^n \\ \underline{x}_i^{n+1} &= \underline{x}_i^n + \delta t\, \underline{v}_i^{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{9}$$

Da beim Leap-Frog Verfahren die Geschwindigkeiten um $\frac{\delta t}{2}$ verschoben sind, müssen wir einmalig den Startwert anpassen:

$$\underline{v}_i^{-\frac{1}{2}} = \underline{v}_i^0 - \frac{\delta t}{2} \underline{F}_i^0 \tag{10}$$

Zur Berechnung der kinetischen Energie interpolieren wir die Geschwindigkeiten zu den Zeiten t_n linear:

$$\underline{v}_i^n = \frac{\underline{v}_i^{n+\frac{1}{2}} + \underline{v}_i^{n-\frac{1}{2}}}{2} \tag{11}$$

c) Integrieren Sie das System von $t = [0, \ldots, 60]$ mit $\delta t = 0.05$.

Hinweis: Die Funktion `init_pos_vel` aus `md_Template.py` erzeugt die Anfangswerte.

d) Berechnen Sie die kinetische, potentielle und totale Energie für jeden Zeitschritt und erstellen Sie einen Plot.

e) Was geschieht, wenn man einen gegebenen Anfangszustand mit einer minimalen Störung versieht?

Die Funktion `small_perturbation` aus dem Template simuliert zwei 25-Teilchen Systeme welche zu Beginn gleichmässig auf einem Gitter verteilt sind mit zufällig ausgewählten Geschwindigkeiten auf einem Kreis mit Radius 10^{-4}. Beim gestörten System wird bei einem einzigen Teilchen die Geschwindigkeit um 10^{-10} erhöht. Führe oben genannte Funktion aus und beschreibe deine Beobachtungen.

Warnung: Die Berechnungen können mehrere Minuten in Anspruch nehmen.

f) Interpretieren und erklären Sie die einzelnen Plots aus der vorangehenden Unteraufgabe.

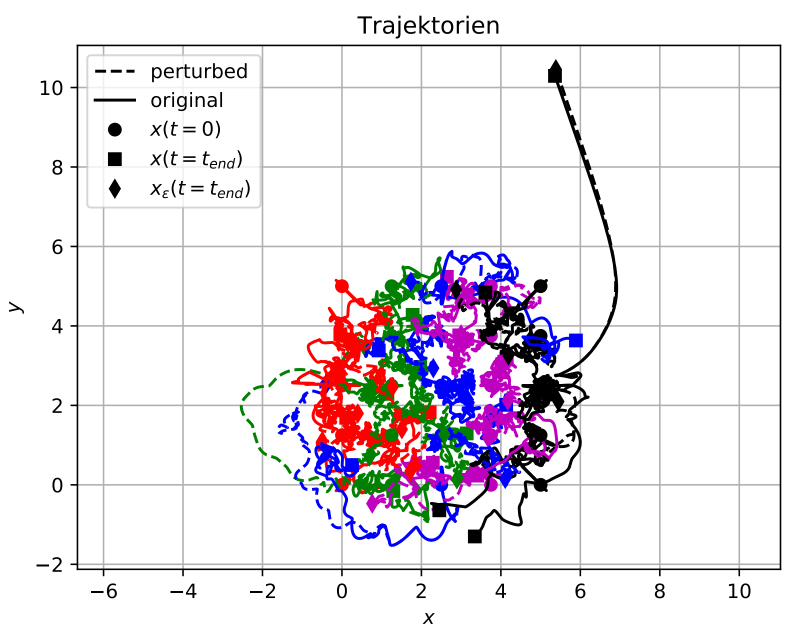

Abbildung 1 – Aufgabe 1: Trajektorien (Zufällige Perturbation!)