

## Serie 13

Diese Ferien-Serie behandelt Aufgaben zum Kapitel 6 der Vorlesung welches nicht als Prüfungsstoff gilt. Nichtsdestotrotz kann es von Interesse sein ;-).

### 1. Mehrkörpersimulation

Lösen Sie mithilfe ihres RKF45-Lösers das folgende Problem:

Wir betrachten im Weltraum  $p$  Körper, die in einer Ebene liegen, und Koordinaten  $r_1, \dots, r_p$ , mit  $r_p \in \mathbb{R}^2$ , und Masse  $m_1, \dots, m_p$  haben. Laut Newton's Gravitationsgesetz wirkt Körper  $k$  auf den Körper  $j$  mit der Kraft

$$Gm_jm_k \frac{r_k - r_j}{|r_k - r_j|^3}.$$

Die Kraft auf Körper  $r_j$  zeigt in die Richtung von  $r_k$  mit Stärke proportional zu  $|r_k - r_j|^{-2}$ . Wir wählen jetzt die Zeitskala so, dass die universale Gravitationskonstant gleich 1 ist. Die Bewegung der Körper, die über Gravitation aufeinander einwirken, ist gegeben durch

$$\ddot{r}_j = A_j(r_1, \dots, r_p) = \sum_{k \neq j} m_k \frac{r_k - r_j}{|r_k - r_j|^3}.$$

Mithilfe von Anfangswerten  $r_j(0)$  und  $\dot{r}_j(0)$ , kann man das Problem auf ein Anfangswertproblem für Systeme erster Ordnung zurückführen:

$$x_{4(j-1)+1} = r_{x,j} \quad (\text{die } x\text{-Komponente von } r_j)$$

$$x_{4(j-1)+2} = r_{y,j} \quad (\text{die } y\text{-Komponente von } r_j)$$

$$x_{4(j-1)+3} = \dot{r}_{x,j} \quad (\text{die } x\text{-Komponente von } \dot{r}_j)$$

$$x_{4(j-1)+4} = \dot{r}_{y,j} \quad (\text{die } y\text{-Komponente von } \dot{r}_j)$$

Auf diesem Wege erhalten wir  $x_1 = r_{x,1}$  und  $x_8 = \dot{r}_{y,2}$ . Das ODE System für  $x(t)$  ist dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_{4(j-1)+1} \\ x_{4(j-1)+2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_{4(j-1)+3} \\ x_{4(j-1)+4} \end{pmatrix} \\ \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_{4(j-1)+3} \\ x_{4(j-1)+4} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A_{x,j}(r_1, \dots, r_p) \\ A_{y,j}(r_1, \dots, r_p) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

**Bitte wenden!**

Dieses Problem ist in der Datei `body_problem.m` für 2 Körper und eine Wahl von Anfangsdaten vorimplementiert. Schreiben Sie eine Funktion `twobodyrhs.m` und rufen Sie das Template `body_problem.m` auf, um die Simulation zu sehen. Wie verhalten sich die adaptiven Schrittweiten?

## 2. Molekular-Dynamik mit dem Verlet-Algorithmus

In dieser Aufgabe betrachten wir eine Anwendung von sog. Strukturerehaltenden Verfahren auf Molekular-Dynamik (MD) Simulationen. Als Verfahren soll der berühmte *Verlet-Algorithmus* verwendet werden, welcher oft in praktischen MD-Simulationen verwendet wird wegen seinen "guten" Eigenschaften<sup>1</sup>.

Als System betrachten wir einen (kleinen) gefrorenen Argon-Kristall bestehend aus  $N = 7$  Argon Atomen. Sechs der Atome sind auf einem regelmässigen Hexagon um ein zentrales Atom verteilt. Um die Wechselwirkung zwischen den Atomen zu beschreiben benutzen wir ein Lennard-Jones Potential (welches oft ein elementarer Bestandteil einer verfeinerten Behandlung in praktischen MD-Simulationen ist). Das Potential der Wechselwirkung eines Atoms  $\alpha$  mit einem Atom  $\beta$  ist dann gegeben durch

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\beta) = 4\varepsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right).$$

Hier sind  $\varepsilon$  und  $\sigma$  Konstanten,  $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta$  der Vektor von der Position von Atom  $\beta$  zum Atom  $\alpha$  und  $r_{\alpha\beta} = |\mathbf{r}_{\alpha\beta}|$ . Das totale Potential des Systems ist dann gegeben durch die Summe

$$U_{\text{tot}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N U_{\alpha\beta}$$

und die Bewegungsgleichungen des Systems lauten dann

$$m\ddot{\mathbf{r}}_\alpha = -\frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{r}_\alpha}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\alpha = 1, \dots, N)$$

wobei  $m$  die Masse eines Atoms ist.

Gegeben die Anfangs-Positionen und -Geschwindigkeiten der Atome haben wir also ein Anfangswert-Problem (AWP). Die Idee von MD-Simulationen ist nun dieses AWP zu lösen um dadurch Informationen über (z.B.) thermodynamische Grössen des Systems zu gewinnen. Hier wollen wir nicht weiter in die Kunst von MD-Simulationen eingehen, sondern einfach dieses "Spielzeug" Problem mit dem berühmten Verlet-

<sup>1</sup>Für mehr Informationen zu MD-Simulationen und dem Verlet-Algorithmus verweisen wir z.B. auf M. P. Allen, D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford University Press, 1989.

Algorithmus lösen. Dieses Verfahren hat Konsistenz-Ordnung  $p = 2$  und sehr gute Erhaltungseigenschaften von gewissen Kerngrößen.

Der Verlet-Algorithmus berechnet die Position und Geschwindigkeit des  $\alpha$ -sten Atom zum nächsten Zeitschritt  $(\mathbf{r}_\alpha^{j+1}, \mathbf{v}_\alpha^{j+1})$  aus den derzeitigen  $(\mathbf{r}_\alpha^j, \mathbf{v}_\alpha^j)$  mit folgender Rekursion

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_\alpha^{j+1/2} &= \mathbf{v}_\alpha^j + \frac{1}{m_\alpha} \mathbf{F}_\alpha^j \frac{\Delta t}{2} \\ \mathbf{r}_\alpha^{j+1} &= \mathbf{r}_\alpha^j + \mathbf{v}_\alpha^{j+1/2} \Delta t \\ \mathbf{v}_\alpha^{j+1} &= \mathbf{v}_\alpha^{j+1/2} + \frac{1}{m_\alpha} \mathbf{F}_\alpha^{j+1} \frac{\Delta t}{2}.\end{aligned}$$

Hier bezeichnet  $\mathbf{F}_\alpha^j$  die totale Kraft zur Zeit  $t^j$  auf das  $\alpha$ -ste Atom. Diese hängt von den Positionen aller Atome ab und ist hier gegeben durch

$$\mathbf{F}_\alpha^j = -\frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{r}_\alpha}(\mathbf{r}_1^j, \dots, \mathbf{r}_N^j) = \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \mathbf{f}_{\alpha\beta}^j$$

wobei

$$\mathbf{f}_{\alpha\beta}^j = \frac{48\varepsilon}{\sigma^2} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}^j} \right)^{14} + \frac{1}{2} \left( \frac{\sigma}{r_{\alpha\beta}^j} \right)^8 \right] \mathbf{r}_{\alpha\beta}^j$$

die Kraft des Atom  $\beta$  auf Atom  $\alpha$  zur Zeit  $t^j$  ist.

Lassen Sie das Matlab-Programm `argon.m` laufen. Dieses simuliert die Bewegung der 7 Argon Atome für 0.5 Nanosekunden, einmal mit dem Matlab Löser `ode45` und einmal dem obigen Verlet-Algorithmus, und plottet die zeitliche Entwicklung der totalen Energie

$$E_{\text{tot}} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{m}{2} v_\alpha^2 + U_{\text{tot}}.$$

Was beobachten Sie?

**Abgabe:** Keine.