

Serie 14

Dies ist wie in der Vorlesung angekündigt die "Ferien-Serie". Die erste Aufgabe soll Ihnen erlauben den prüfungsrelevanten Stoff über steife Probleme (Ende Kap. 5) zu verinnerlichen.

Aufgabe 2 ist nicht prüfungsrelevant (da zu Kap. 6!). Trotzdem würden wir empfehlen sich kurz die Zeit zu nehmen um sie wenigstens zu lesen ;-).

1. *Steifes nichtlineares AWP*

Wir betrachten (wiedereinmal!) die Van der Pol Differentialgleichung

$$\ddot{y}(t) = \mu(1 - y(t)^2)\dot{y}(t) - y(t)$$

mit $\mu = 1000$ für $t \in [0, 3000]$ mit den Anfangswerten

$$y(0) = 2 \quad , \quad \dot{y}(0) = 0.$$

- a) Lösen Sie obiges Anfangswertproblem numerisch mit den Matlab Lösern `ode45` und `ode23s`. Was fällt Ihnen auf?
Hinweis: Arbeiten Sie im Template `StiffVanDerPol.m`.
Beachte: Die Rechnung mit `ode45` kann durchaus ein paar Minuten dauern.
- b) Berechnen Sie den Steifigkeitsparameter S zur Anfangszeit und Anfangswerten. Ist dieses Problem lokal steif?
- c) Berechnen Sie den Steifigkeitsparameter S in jedem Zeitschritt für die numerische Lösung mit `ode23s`. Was beobachten Sie?

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

In dieser Aufgabe betrachten wir eine Anwendung von sog. Strukturhaltenden Verfahren auf Molekulardynamik (MD) Simulationen. Als Verfahren soll der berühmte *Verlet-Algorithmus* verwendet werden, welcher oft in praktischen MD-Simulationen verwendet wird wegen seinen "guten" Eigenschaften¹.

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

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 α mit einem Atom β 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 ε und σ Konstanten, $\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta$ der Vektor von der Position von Atom β zum Atom α 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 Bewegungsgleichung 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-Algorithmus lösen. Dieses Verfahren hat Konsistenz-Ordnung $p = 2$ und sehr gute Erhaltungs-Eigenschaften von gewissen Kerngrössen.

Der Verlet-Algorithmus berechnet die Position und Geschwindigkeit des α -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}_α^j die totale Kraft zur Zeit t^j auf das α -ste Atom. Diese hängt von den Positionen aller Atome ab und ist hier gegeben durch

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

Siehe nächstes Blatt!

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 β auf Atom α 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.