

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Computersimulation – eine Schlüsseltechnologie</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Von der Schrödingergleichung zur Moleküldynamik</b>	<b>17</b>
2.1	Die Schrödingergleichung	18
2.2	Eine Herleitung der klassischen Moleküldynamik	21
2.2.1	TDSCF-Ansatz und Ehrenfest-Moleküldynamik	21
2.2.2	Entwicklung in adiabatischer Basis	25
2.2.3	Beschränkung auf den Grundzustand	26
2.2.4	Approximation der Potentialenergie-Hyperfläche	27
2.3	Ein Ausblick auf ab initio Moleküldynamik-Verfahren	31
<b>3</b>	<b>Das Linked-Cell-Verfahren für kurzreichweitige Potentiale</b>	<b>39</b>
3.1	Die Zeitdiskretisierung – das Störmer-Verlet-Verfahren	42
3.2	Implementierung des Basisalgorithmus	49
3.3	Der Abschneideradius	56
3.4	Das Linked-Cell-Verfahren	59
3.5	Implementierung der Linked-Cell-Methode	61
3.6	Erste Anwendungsbeispiele und Erweiterungen	69
3.6.1	Zusammenstoß zweier Körper I	69
3.6.2	Zusammenstoß zweier Körper II	72
3.6.3	Dichteunterschied	76
3.6.4	Rayleigh-Taylor-Instabilität	77
3.6.5	Rayleigh-Bénard-Strömung	83
3.6.6	Oberflächenwellen in granularen Materialien	87
3.7	Thermostate, Ensembles und Anwendungen	91
3.7.1	Thermostate und Equilibrierung	92
3.7.2	Statistische Mechanik und thermodynamische Größen	98
3.7.3	Phasenübergang von Argon im NVT-Ensemble	102
3.7.4	Das Parrinello-Rahman-Verfahren	110
3.7.5	Phasenübergang von Argon im NPT-Ensemble	114
<b>4</b>	<b>Parallelisierung</b>	<b>119</b>
4.1	Parallelrechner und Parallelisierungsstrategien	119
4.2	Gebietszerlegung für die Linked-Cell-Methode	128
4.3	Implementierung	134

4.4	Leistungsmessung und Benchmark .....	145
4.5	Anwendungsbeispiele.....	152
4.5.1	Zusammenstoß zweier Körper .....	152
4.5.2	Rayleigh-Taylor-Instabilität .....	154
<b>5</b>	<b>Erweiterung auf kompliziertere Potentiale und Moleküle ..</b>	<b>157</b>
5.1	Mehrkörperpotentiale .....	157
5.1.1	Rißbildung in Metallen – Finnis-Sinclair-Potential ....	158
5.1.2	Phasenumwandlung in Metallen – EAM-Potential ....	166
5.1.3	Fullerene und Nanoröhren – Brenner-Potential .....	173
5.2	Potentiale mit festen Nachbarschaftsstrukturen.....	187
5.2.1	Einführungsbeispiel: Membranen und Minimalflächen .	188
5.2.2	Lineare molekulare Systeme .....	193
5.2.3	Ausblick auf kompliziertere Moleküle .....	210
<b>6</b>	<b>Zeitintegrationsverfahren .....</b>	<b>219</b>
6.1	Fehler der Zeitintegration.....	220
6.2	Symplektische Verfahren .....	229
6.3	Multiple Zeitschrittverfahren - das Impuls-Verfahren .....	234
6.4	Zwangsbedingungen – der Rattle-Algorithmus .....	238
<b>7</b>	<b>Gitterbasierte Methoden für langreichweitige Potentiale ..</b>	<b>247</b>
7.1	Lösung der Potentialgleichung.....	251
7.1.1	Randbedingungen .....	251
7.1.2	Die Potentialgleichung und ihre Zerlegung .....	252
7.1.3	Zerlegung der potentiellen Energie und der Kräfte ....	256
7.2	Kurz- und langreichweitige Energie- und Kraftanteile .....	258
7.2.1	Der kurzreichweitige Anteil – Linked-Cell-Methode ...	258
7.2.2	Der langreichweitige Anteil – schnelle Poissonlöser ...	260
7.2.3	Einige Varianten .....	267
7.3	Die Smooth-Particle-Mesh-Ewald-Methode (SPME) .....	269
7.3.1	Der kurzreichweitige Anteil .....	269
7.3.2	Der langreichweitige Anteil .....	272
7.3.3	Implementierung der SPME-Methode .....	282
7.4	Anwendungsbeispiele und Erweiterungen .....	291
7.4.1	Rayleigh-Taylor-Instabilität mit Coulomb-Potential ...	291
7.4.2	Phasenübergang in ionischen Mikrokristallen.....	294
7.4.3	Wasser als molekulares System .....	297
7.5	Parallelisierung.....	304
7.5.1	Parallelisierung der SPME-Methode .....	305
7.5.2	Implementierung .....	309
7.5.3	Leistungsmessung und Benchmark .....	313
7.6	Anwendungsbeispiel: Die Struktur des Universums .....	317

<b>8</b>	<b>Baumverfahren für langreichweitige Potentiale</b>	323
8.1	Reihenentwicklung des Potentials	324
8.2	Baum-Strukturen für die Zerlegung des Fernfelds	329
8.3	Partikel-Cluster-Wechselwirkungen und das Barnes-Hut-Verfahren	335
8.3.1	Verfahren	335
8.3.2	Implementierung	338
8.3.3	Anwendungen aus der Astrophysik	349
8.4	Parallele Baumtechniken	352
8.4.1	Eine Implementierung mit Schlüsseln	353
8.4.2	Dynamische Lastverteilung	368
8.4.3	Datenverteilung mit raumfüllenden Kurven	371
8.4.4	Anwendungen	377
8.5	Verfahren höherer Ordnung	381
8.5.1	Implementierung	382
8.5.2	Parallelisierung	388
8.6	Cluster-Cluster-Wechselwirkung und das schnelle Multipolverfahren	388
8.6.1	Verfahren	389
8.6.2	Implementierung	393
8.6.3	Fehlerabschätzung	397
8.6.4	Parallelisierung	398
8.7	Vergleich und Ausblick	399
<b>9</b>	<b>Anwendungen aus Biochemie und Biophysik</b>	401
9.1	Trypsininhibitor des Rinderpankreas	402
9.2	Membranen	404
9.3	Peptide und Proteine	408
9.4	Protein-Ligand-Komplex und Bindung	419
<b>10</b>	<b>Ausblick</b>	423
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	427
A.1	Newtonsche, Lagrangesche und Hamiltonsche Gleichungen	427
A.2	Hinweise zur Programmierung und Visualisierung	428
A.3	Parallelisierung mit MPI	431
A.4	Maxwell-Boltzmann-Verteilung	436
A.5	Simulationsparameter	439
	<b>Literaturverzeichnis</b>	441
	<b>Index</b>	477

Numerische Simulation in der Moleküldynamik

Numerik, Algorithmen, Parallelisierung, Anwendungen

Griebel, M.; Knapek, S.; Zumbusch, G.; Caglar, A.

2004, XII, 480 S. 135 Abb., 44 Abb. in Farbe., Softcover

ISBN: 978-3-540-41856-6