

Jamming von isotropen und winkelabhängigen Teilchen in 3 Dimensionen

Bachelorarbeit aus der Physik

vorgelegt von

Ferdinand Freiherr von Lindenfels

27.06.2025

Lehrstuhl für Theoretische Physik
Theoretische Physik der weichen Kondensierten Materie
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. Michael Schmiedeberg

Abstract

In der Vorliegenden Arbeit wurden Systeme von Teilchen mit und ohne Winkelabhängigkeit der Bindung in 3 Dimensionen mit harmonisch Abstoßenden Potential sowie dem Lennard-Jones-Potential simuliert. Die Minimierung erfolgte mittels Nonlinear Conjugate Gradient Verfahren. Eine 3D Visualisierung erfolgte mittels Blender. Es wurden Energien und Anzahl der Überlappungen pro Teilchen gemessen und Phasengrenzen, sowie Teilweise Bildung von Strukturen identifiziert.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung und Zielsetzung	3
2	Material und Methoden	5
2.1	Potentiale und Potentialberechnung	5
2.1.1	Allgemein	5
2.1.2	Harmonisch abstoßendes Potential	6
2.1.3	Lennard-Jones-Potential	7
2.1.4	Drehwinkelabhängigkeit eines Potentials	8
2.2	Conjugate Gradient Verfahren	9
2.3	Software und Datentypen	16
2.3.1	Minimierung	16
2.3.2	Visualisierung	16
3	Ergebnisse	18
3.1	Harmonisch Abstoßendes Potential - isotrop	18
3.2	Lennard-Jones-Potential	24
3.2.1	isotrop	24
3.2.2	tetraedrisch, oktaedrisch, kubisch	28
4	Fazit und Ausblick	33

1 Einführung und Zielsetzung

In der vorliegenden Arbeit geht es darum, Simulationen von Systemen von Teilchen mit paarweiser Wechselwirkung durchzuführen. Die Wechselwirkung wird durch Potentiale dargestellt. Die Minimierung dieser Potentiale simuliert einen Abkühlvorgang des Systems von einem zufällig initialisierten Zustand, dem eine hohe, von Null verschiedene Temperatur zugeordnet wird, hin zu einem Zustand, der das Potential lokal minimiert, welchem dann die Temperatur Null zugeordnet wird. Impulse werden dabei nicht berücksichtigt, weder zur Energiebestimmung noch zur Beschreibung des momentanen Zustands, unter anderem deshalb weil am Temperaturnullpunkt keine Kinetische Energie mehr vorhanden sein soll. Ziel dieser Vorgehensweise ist die Möglichkeit, Größen zur Beschreibung von Phasenübergängen des Systems am Temperaturnullpunkt mit Änderung der Packungsdichte, also des durch Teilchen ausgefüllten Raums innerhalb des Systems zu entwickeln. Mit zunehmender Packungsdichte blockieren sich die Teilchen gegenseitig an der freien Bewegung, sodass für jedes Teilchen weniger Punkte im Ortsraum zur Verfügung stehen. Das wird Jamming genannt (engl. jam: sperren/versperren). Das geht mit einem verringerten Phasenraumvolumen einher, sodass am Übergang vom unversperrten zum versperrten Zustand eine größere Entropieänderung und die Sprunghafte Änderung Physikalischer Eigenschaften stattfindet. Es entsteht ein Phasenübergang. Parameter anhand derer solche Phasenübergänge beschrieben werden können sind zum Beispiel auch geometrische Größen. Solche Geometrischen Größen sollen unter anderem in dieser Arbeit entwickelt werden. Solch Größen könnten zum Beispiel die durchschnittliche Anzahl der Überlappungen zu Nachbarpartikeln pro Partikel sein, oder aber die durchschnittliche Anzahl der Partikeln pro Partikel, die sich innerhalb eines bestimmten Radius pro Partikel befinden. Dies ist die Quantitative Beschreibung des Systems. Als Qualitatives Moment soll auch unter anderem überprüft werden, ob die Teilchen für bestimmte Potentiale und Packungsdichten bestimmte Strukturen ausbilden.

Die Packungsdichte Φ ist wie schon angedeutet definiert als der Anteil des Gesamtvolumens der durch Teilchen ausgefüllt ist. Für Kugelteilchen bedeutet das

$$\Phi = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{4}{3}\pi r_i^3}{V_{ges}}. \quad (1)$$

Für Konstellationen in denen es nur eine Partikelsorte gibt (sog. monodisperse Systeme) bedeutet das

$$\Phi = \frac{N \frac{4}{3}\pi r_i^3}{V_{ges}}. \quad (2)$$

Für Polydisperse Systeme (Systeme mit mehr als einer Teilchensorte) ist

$$\Phi = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{Teilchesorten}}} N_i \frac{4}{3} \pi r_i^3}{V_{ges}}. \quad (3)$$

Um eine Modulation des betrachteten Systems nach der Packungsdichte vorzunehmen kann die Teilchenzahl verändert werden. Um eine kontinuierliche Modulation des betrachteten Systems nach der Packungsdichte vorzunehmen ist es allerdings sinnvoller die Teilchenzahl konstant zu halten und das betrachtete Volumen zu verändern.

Um die oben genannten Qualitativen und Quantitativen Eigenschaften zu erhalten ist es zunächst das Ziel einen möglichst effizienten Algorithmus zu finden um aus einem Zufällig initialisierten Systemzustand Potential zu einem Lokalen Minimum zu minimieren. Die Tatsache das dieses Minimum lokal sein soll hat den Sinn, dass dies auch Physikalisch ist, da sich ein Physikalisches System auch nicht, außer bei nennenswerten Impulsen über Potentialhürden zu einem noch kleineren Potentialminimum hin bewegen würde.

Die Simulation findet in 3 Dimensionen statt, ausserdem kommen drehwinkelabhängige, also vom Drehwinkel der einzelnen Teilchen abhängige Potentiale zur Anwendung. Dies Simuliert Teilchen mit einem bevorzugten Bindungswinkel. Unter anderem wird untersucht welchen Einfluss die Drehwinkelabhängigkeit auf die Bildung von Strukturen hat. Es wurde sich im Rahmen dieser Arbeit auf Monodisperse Systeme beschränkt, obwohl der Algorithmus und die Programmstruktur auch auf Polydisperse Systeme ausgelegt sind.

Zur Minimierung des Potentials wird sich der Nichtlinearen Konjugierten Gradientenmethode (Nonlinear Conjugate Gradient Method) nach Hestens und Stiefel [?] bedient. Näheres dazu findet sich im entsprechenden Teil im Teil Material und Methoden.

2 Material und Methoden

2.1 Potentiale und Potentialberechnung

2.1.1 Allgemein

Alle Teilchen befinden sich innerhalb eines vorgegebenen Volumenelementes (Kasten) der Kantenlängen X, Y und Z in x -, y - bzw. z -Richtung. Das Volumen V_{ges} dieses Volumenelementes berechnet sich aus

$$V_{ges} = X \cdot Y \cdot Z \quad (4)$$

wobei im Rahmen dieser Arbeit immer

$$X = Y = Z \quad (5)$$

angenommen wird. Dieses Volumenelement ist nicht etwa ein abgeschlossenes, sondern es wird als Ausgangspunkt für sog. Periodische Randbedingungen verwendet. Da die Gesamtsimulation an sich auf sehr ausgedehnte Systeme abzielt, im Rahmen einer numerischen Auswertung aber nur endlich viele Teilchen verwendet werden können, ist die Betrachtung Periodischer Randbedingungen vorteilhaft. Es wird dabei davon ausgegangen, daß ein und das selbe Teilchen in unendlichen Kopien in einem unendlichen Gitter identischer, aneinander angrenzender Volumenelemente existiert. Bewegt sich ein Teilchen über die Grenzen des Volumens hinaus, so kommt es im selben Volumenelement (um eine Kantenlänge zurückverschoben) auf der gegenüberliegenden Seite wieder heraus. Bewegt sich also später im Rahmen der Optimierung ein Teilchen über die Grenzen des Volumens hinaus, so wird es anschließend um eine gesamte Kantenlänge (X, Y oder Z) zurückverschoben, sodaß es wieder innerhalb des Volumens liegt. Der Abstandsvektor

$$\Delta \vec{x}_{ij} := \vec{x}_j - \vec{x}_i + k \cdot X \cdot \hat{e}_x + l \cdot Y \cdot \hat{e}_y + m \cdot Z \cdot \hat{e}_z \quad (6)$$

ist also derjenige Vektor, der über alle Grenzen hinaus (auch diagonal, Hauptvolumen + 26 Nachbarvolumen = 27 Volumenelemente zu untersuchen) den Abstand

$$r_{ij} = |\Delta \vec{x}_{ij}| \quad (7)$$

minimiert. Effektiv bedeutet das, daß jeder einzelne Eintrag von $\Delta \vec{x}_{ij}$ betragsmäßig minimal über alle (k, l, m) ist.

jedes Teilchen besitzt einen Radius r_i (i ist der Teilchenindex). Würden sich zwei Teilchen eben gerade genau berühren so hätten sie den als Mittelpunkts abstand r_{ij} den Abstand

$$\sigma_{ij} := r_i + r_j \quad (8)$$

Dieser Abstand σ_{ij} wird unter anderem für die Berechnung der Potentiale gebraucht.

2.1.2 Harmonisch abstoßendes Potential

Als ein Potential wird das im Rahmen dieser Arbeit das harmonisch abstoßende Potential

$$U = U_{harm} = \sum_i \sum_j \begin{cases} \frac{\epsilon}{2} \cdot (\sigma_{ij} - r_{ij})^2 & \text{falls } r_{ij} < \sigma_{ij} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (9)$$

wie es auch bei [5] angegeben ist verwendet. Es dient unter anderem als Referenz zur Entwicklung des Algorithmus, da dieses Potential einigermaßen gut beschrieben und erforscht ist. Der Vorfaktor ϵ ist einfach nur ein Skalierungsfaktor, der im Rahmen dieser Arbeit willkürlich gleich 1 gesetzt wurde.

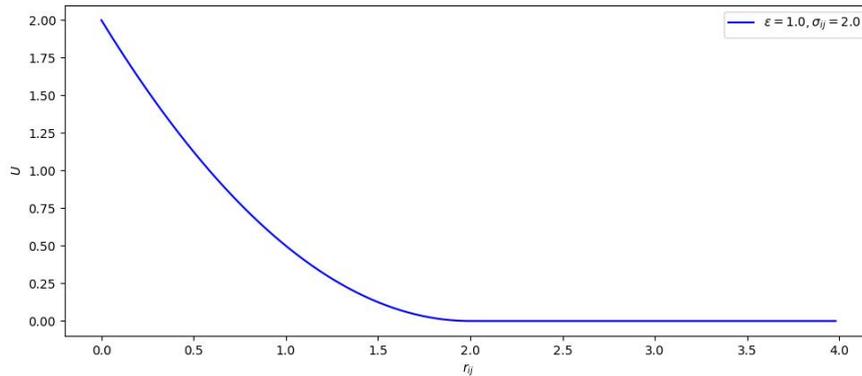


Abbildung 1: Form des harmonisch Abstoßenden Potentials mit $\epsilon = 1.0$ und $\sigma_{ij} = 2.0$

Dieses Potential (siehe Abb. 1) ist ein rein abstoßendes Potential, das auf die Reichweite des Teilchenradius begrenzt ist, ähnlich elastischer Kugeln, die erst beginnen sich abzustößen, wenn sie sich berühren. Im entspannten Zustand bei niedrigen Packungsdichten schieben sich die Teilchen solange voneinander weg, bis sie sich nicht mehr berühren, und ziehen sich dann weder an noch stoßen sie sich ab.

2.1.3 Lennard-Jones-Potential

Nachdem der Algorithmus am harmonisch abstoßenden Potential entwickelt und erprobt worden ist wird dieser auf das Lennard-Jones-Potential

$$U = U_{LJ} = \sum_i \sum_j \epsilon \cdot \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (10)$$

nach John Edward Lennard-Jones [7] angewendet. Das Lennard-Jones-Potential kommt auch bei [6] zur Anwendung.

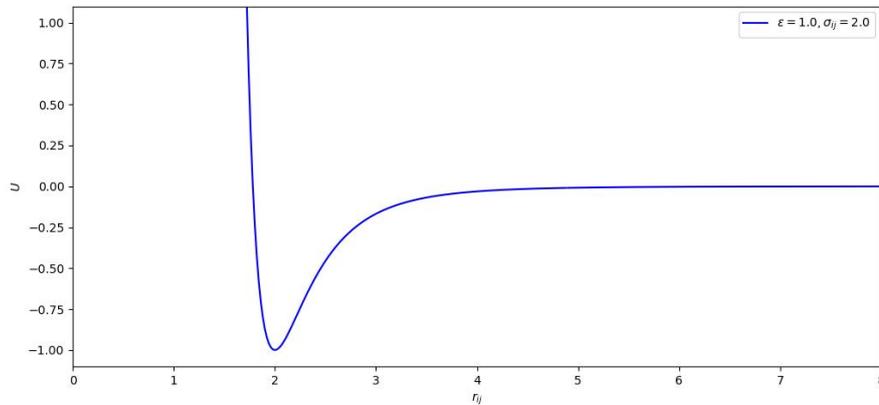


Abbildung 2: Form des Lennard-Jones-Potentials mit $\epsilon = 1.0$ und $\sigma_{ij} = 2.0$

Abb. 2 zeigt das Lennard-Jones-Potential. Es hat sein Minimum bei $r_{ij} = \sigma_{ij}$. Der Vorfaktor ϵ ist wieder ein Skalierungsfaktor. Für hohe Abstände r_{ij} ist das Lennard-Jones-Potential zwar analytisch gesehen ungleich Null, hat also theoretisch eine unbegrenzte Reichweite, sodaß sich die Teilchen theoretisch immer anziehen und für hohe Simulationsdauern aneinander Anlagern (bis zum Minimum bei $r_{ij} = \sigma_{ij}$), praktisch und in numerischer Hinsicht ist dieses Potential aber quasi gleich Null so dass für an sich beinahe alle Datentypen die Anziehung verschwindet oder Simulationsdauern notwendig werden die nicht zu tragen sind. Deshalb wird hier auch eine Modulation dieses Potentials erprobt für das gilt:

$$U = U_{LJ \text{ mod}}(r_{ij}) = \begin{cases} U_{LJ}(r_{ij}) & \text{falls } (r_{ij} < r_{th}) \\ U_{LJ}|_{r_{ij}=r_{th}} + \frac{\partial U_{LJ}}{\partial r_{ij}}|_{r_{ij}=r_{th}} \cdot (r_{ij} - r_{th}) & \text{sonst} \end{cases} \quad (11)$$

Der Wert r_{th} wurde willkürlich gleich $\sqrt{6}$ gewählt. Abb. 3 zeigt den Verlauf dieses Potentials.

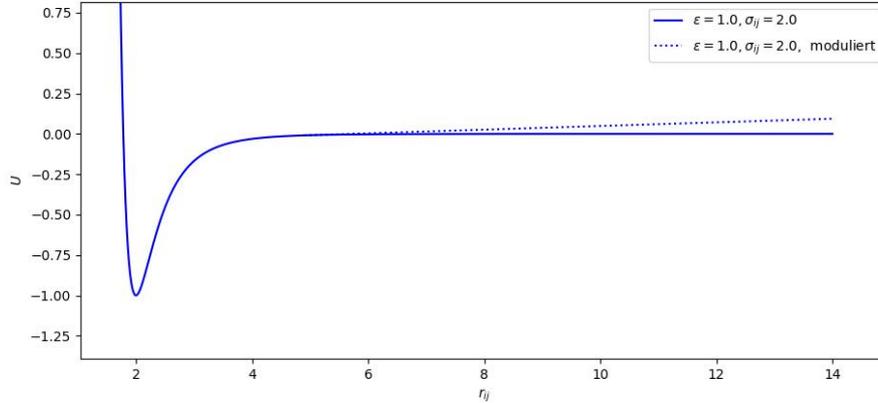


Abbildung 3: Vergleich des Lennard-Jones-Potentials mit $\epsilon = 1.0$ und $\sigma_{ij} = 2.0$ mit der modulierten Form

Es werden Varianten getestet und verglichen in denen zunächst dieses reichweitenmodulierte Potential verwendet wird, und anschließend nach erfolgter Minimierung je nach dem eine weitere Miniumierung mit dem eigentlichen Potential (Variante mit Entspannung") durchgeführt wird oder nicht (Variante ohne Entspannung"). Dies würde zunächst zu einer Stärkeren zusammenziehung der Teilchen führen mit anschließender Entspannung.

2.1.4 Drehwinkelabhängigkeit eines Potentials

Ist die Bindung einer Teilchensorte drehwinkelabhängig so werden dem Teilchen eine Anzahl an Basisvektoren $\{\vec{b}_{i0}\}_k$ zugeordnet, welche in die Richtung der bevorzugten Bindungsrichtungen zeigen. Diese können zum Beispiel in die Ecken von Platonischen Körpern o.ä. zeigen. Um die momentane Richtung dieser Basisvektoren $(\vec{b}_i)_k$ zu erhalten werden die ursprünglichen Basisvektoren $(\vec{b}_{i0})_k$ noch um die momentanen Drehwinkel des Teilchens mittels Drehmatrix R gedreht:

$$\vec{b}_i(\theta_i, \varphi_i, \alpha_i) = R(\theta_i, \varphi_i, \alpha_i) \vec{b}_{i0} \quad (12)$$

Jedes Teilchen besitzt also 3 Ortskoordinaten und 3 Winkelkoordinaten. Der Winkel den ein Basisvektor eines Teilchens mit dem Teilchenindex i mit dem Verbindungsvektor $\Delta\vec{x}_{ij}$ zum Teilchen mit dem Teilchenindex j einschließt, ist der Winkel θ_{ij} . Von allen Basisvektoren des Teilchens i wird derjenige Basisvektor ausgewählt, welcher den geringsten Winkel mit dem Verbindungsvektor $\Delta\vec{x}_{ij}$ einschließt. Gleichfalls hat das Teilchen j ein Winkel

θ_{ji} der nicht gleich dem Winkel θ_{ij} ist. Den cosinus Dieser Winkel erhält man durch das Skalarprodukt der jeweiligen Einheitsvektoren.

$$\cos(\theta_{ij}) = \vec{b}_i \cdot \frac{\Delta \vec{x}_{ij}}{r_{ij}} \quad , \quad \cos(\theta_{ji}) = \vec{b}_j \cdot \frac{\Delta \vec{x}_{ji}}{r_{ij}} \quad (13)$$

wobei $\Delta \vec{x}_{ji} = -\Delta \vec{x}_{ij}$ aber $r_{ji} = r_{ij}$ ist. Die Winkel θ_{ij} und θ_{ji} ergeben sich dann aus dem arcuscossinus der jeweiligen Skalarprodukte.

Um nun ein Winkelabhängiges Lennard-Jones-Potential zu erreichen wird der Radialteil - das oben genannte Lennard-Jones-Potential mit Winkelanteilen multipliziert:

$$U_{LJ}(r_{ij}, \theta_{ij}, \theta_{ji}) = U_{LJ}(r_{ij}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\theta_{ij}^2}{\sigma_{pw}^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\theta_{ji}^2}{\sigma_{pw}^2}\right) \quad (14)$$

wie es auch bei [6] zur Anwendung kommt.

Im Falle drehwinkelabhängiger Potentiale hängt das Potential also von $6N$ Koordinaten ab, daher ist der Gradient ein $6N$ -Dimensionaler Vektor und die Hesse-Matrix eine $6N \times 6N$ -Matrix. Im Falle drehwinkelunabhängiger Potentiale hängt das Potential nur von $3N$ Koordinaten ab, der Gradient ist ein $3N$ -Dimensionaler Vektor und die Hesse-Matrix eine $3N \times 3N$ -Matrix.

2.2 Conjugate Gradient Verfahren

Die Forderung, daß ein Ortsvektor in Richtung des negativen Gradienten des Potentials verschoben werden soll um so das Potential zu minimieren ist gleichbedeutend mit der Differentialgleichung

$$\vec{v} := \frac{d\vec{x}}{dt} = -\vec{\nabla}U \quad (15)$$

Es entsteht ein Strömungsfeld das gleich dem Gradientenfeld von U ist. Die Maxima von U sind Quellen des Strömungsfeldes, Sattelpunkte von U sind Staupunkte des Strömungsfeldes, und Minima sind Senken des Strömungsfeldes. Würde man unendlich kleine, unendlich viele Schritte machen können, so könnte man diese Gradientenlinie einfach nachgehen. Man kann aber numerisch nicht unendlich kleine, unendlich viele Schritte gehen. Deshalb muss eine endliche Schrittweite gewählt werden, sodass

$$\vec{x}_{next} = \vec{x}_{last} + \vec{v} \cdot \Delta t \quad (16)$$

mit

$$\vec{v} = -\vec{\nabla}U|_{\vec{x}_{last}} = \text{konst} \quad (17)$$

aus Gl. 15. Daraus ergeben sich aber Abweichungen von der Gradientenlinie. Während eines Schrittes mit unverändertem Richtungsvektor \vec{v} ist

$$\frac{dU}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}U \quad (18)$$

und

$$U = \min \Leftrightarrow \frac{dU}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}U = 0 . \quad (19)$$

Wird also die Schrittweite so gewählt, daß in Richtung der Suche U maximal minimiert wird, so steht der Gradient und damit die Suchrichtung des Nächsten Schrittes, falls dafür wieder der negative Gradient gewählt wird, senkrecht auf der momentanen Suchrichtung. Wird immer wieder der negative Gradient als Richtung (sog. Steepest Descent-Methode) und die Schrittweite immer bis zum Minimum auf der Richtung gewählt, erhält man meistens eine Zickzackartige Kurve, wie in Abb. 4 zu sehen, die auch nie ganz das Minimum erreicht.

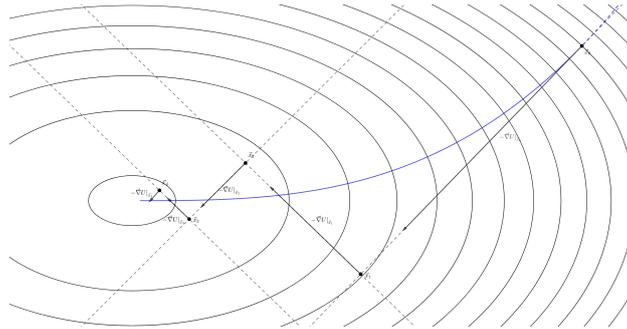


Abbildung 4: Suchverlauf nach Steepest Descent Methode in Quadratischem Potential bei positiv definiten Hesse-Matrix (schwarz). Blau: Gradientenlinie

Die Findung der richtigen Schrittweite auf einer Geraden mit vorgegebenen, festen Richtungsvektor nennt man Linesearch. Mit den genauen Methoden von Linesearches wird sich weiter unten befassen.

In den o.g. Fällen (Maxima, Sattelpunkte, Minima) ist der Gradient Null, deshalb hätte jede Simulation, die zu irgendeinem Zeitpunkt in einem solchen Punkt landet, in diesem Punkt ihr Ende. Ziel der Simulation sind jedoch ausschließlich Minima. Gradientenlinien stehen in 2 Dimensionen immer senkrecht auf den Iso-Potential-Linien, in mehreren Dimensionen immer senkrecht auf den Iso-Potential-(Hyper-)Flächen. ist eine Gerade senkrecht zum Gradienten so ist sie Tangential zu einer Iso-Potential-(Hyper-)Fläche/Linie. würde man Gl. 15 noch einmal ableiten, so erhielte man

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt}(-\vec{\nabla}U) = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})(-\vec{\nabla}U) = -\vec{v}^T \left((\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla})U \right) = -\vec{v}^T H = -H\vec{v} \quad (20)$$

wobei H die Hessematrix von U ist, also die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}\vec{v} = -H\vec{v} \quad (21)$$

Diese hat die Lösung

$$\vec{v}(t) = \exp\left(-\int H dt\right)\vec{v}_0 \quad (22)$$

Wäre H eine Konstante Matrix so wäre U eine Quadratische Funktion in \vec{x} der Form

$$U(\vec{x}) = U|_{\vec{x}_0} + \vec{\nabla}U|_{\vec{x}_0} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) + \frac{1}{2}(\vec{x} - \vec{x}_0)^T H|_{\vec{x}_0} (\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (23)$$

und Gl. 22 gleich

$$\vec{v}(t) = \exp(-Ht)\vec{v}_0 \quad (24)$$

und damit

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_0 - \exp(-Ht)H^{-1}\vec{v}_0. \quad (25)$$

wobei H^{-1} die Inverse von H ist. Wäre H aber tatsächlich global konstant, so hätte U nur dann ein Minimum, wenn H positiv definit wäre. In diesem Fall wäre U minimal wenn

$$\vec{\nabla}U(\vec{x}) = \vec{\nabla}U|_{\vec{x}=\vec{x}_0} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) + H(\vec{x} - \vec{x}_0) = 0 \quad (26)$$

wäre, mit der Lösung

$$(\vec{x} - \vec{x}_0) = -(H|_{\vec{x}_0})^{-1}\vec{\nabla}U(\vec{x}) \quad (27)$$

die Berechnung einer Inversen von ist jedoch häufig nicht tragbar. Die Lineare Konjugierte Gradientenmethode (welche hier nicht verwendet wird) ist eine Methode um iterativ Gl. 26 zu lösen. Die Iso-Potential-Linien/Flächen einer Quadratischen Funktion mit positiv definiten Hesse-Matrix sind Ellipsen bzw. Ellipsoide. Die Iso-Potential-Linien/Flächen einer Quadratischen Funktion mit im allg. nicht positiv definiten Hesse-Matrix sind Kegelschnitte. Ellipsen bzw. Ellipsoide besitzen Hauptachsen. Diese Hauptachsen sind senkrecht zu einander. Die Länge der Hauptachsen ist gegeben durch die Wurzeln der Inversen Eigenwerte von H bzw. die Wurzeln der Eigenwerte von H^{-1} , was, wenn H invertierbar ist, also alle Eigenwerte von H ungleich null sind, das gleiche ist. Die Richtungen der Hauptachsen der Ellipsen/Ellipsoide sind die Eigenvektoren von H . Ellipsen und Ellipsoide kommen aber durch Streckung und Stauchung von Kreisen und Kugeln um die

Länge der Hauptachsen zustande. Sind Zwei Vektoren vom Ursprung des Ellipsoides vor der Streckung/Stauchung senkrecht zu einander im Sinne des normalen Skalarproduktes mit der Einheitsmatrix als Metrik, so sind sie nach der Streckung/Stauchung konjugiert zu einander. Sie sind im Prinzip senkrecht zu einander im Sinne eines anderen Skalarproduktes und zwar mit H^{-1} als Metrik. Eine Tangente eines Ellipsoides steht konjugiert auf dem Radius des Tangentialpunktes. Die Lineare Konjugierte Gradientenmethode macht sich diese Tatsache zunutze indem sie Iterativ eine Basis von Konjugierten Vektoren aufbaut (welche den Gesamten \mathbb{R}^{6N} aufspannt), und so nicht in Richtung des senkrechten sondern des konjugierten nächsten Richtungsvektors und damit im Falle einer positiv definiten, konstanten Hesse-Matrix nicht im Zickzack sondern direkt in Richtung des Minimums zu einer Unter-ebene zu gehen. Die Lineare Konjugierte Gradientenmethode geht also von konstantem, positiv definitem H aus. Die Funktionen die Minimiert werden sind aber im Allgemeinen keine Quadratischen Funktionen in \vec{x} . Würde man lokal die Funktion Durch die Taylorentwicklung bis zur 2. Ordnung in \vec{x} annähern würde man zwar vorübergehend ein konstantes aber im allgemeinen, außer in der direkten Umgebung eines Minimums, nicht positiv definites H erhalten. Würde man auf diesen Fall die Lineare Konjugierte Gradientenmethode anwenden so würde man als Lösung in Richtung von Maxima und Sattelpunkten springen, siehe Abb. 5 und 6, was ja eben gerade nicht gewünscht ist. Für solche Fälle existiert die Nichtlineare Konjugierte Gradientenmethode.

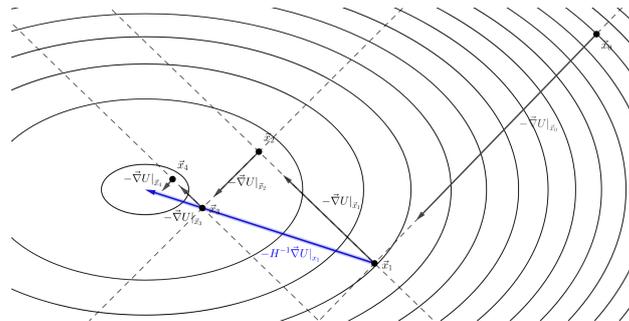


Abbildung 5: Suchverlauf nach Steepest Descent Methode (schwarz) im vergleich zur Linearen Konjugierten Gradientenmethode (blau) in Quadratischem Potetial bei positiv definiten Hesse-Matrix - die Lineare Konjugierte Gradientenmethode fuehrt immer direkt in das Minimum (erwuenscht)

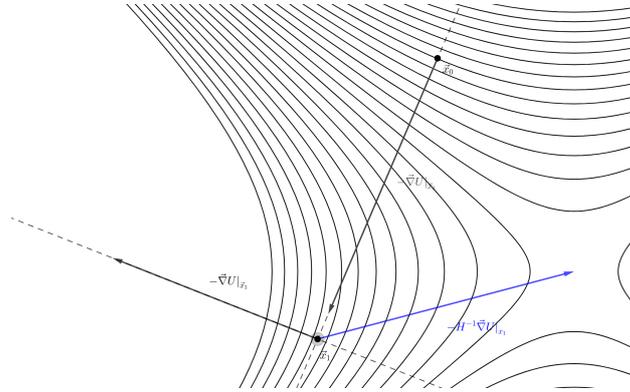


Abbildung 6: Suchverlauf nach Steepest Descent Methode (schwarz) im Vergleich zur Linearen Konjugierten Gradientenmethode (blau) in Quadratischem Potential bei gemischten Vorzeichen der Eigenwerte der Hesse-Matrix - die Lineare Konjugierte Gradientenmethode führt immer direkt in den Sattelpunkt (unerwünscht)

Die Nichtlineare Konjugierte Gradientenmethode funktioniert folgendermaßen:

Zu Beginn (am Punkt \vec{x}_0) wird als Richtungsvektor \vec{v}_0 für die Suche der negativen Gradienten

$$\vec{v}_0 = -\vec{\nabla}U|_{\vec{x}_0} \quad (28)$$

ausgewählt. Danach erfolgt ein Liniensuche entlang dieser Richtung bis zum Minimum in dieser Richtung. Danach erfolgt für jeden weiteren Schritt die Richtungsauswahl durch Addition des neuen negativen Gradienten mit dem alten Richtungsvektor über einen Vorfaktor β :

$$\vec{v}_n = -\vec{\nabla}U|_{\vec{x}_n} + \beta \vec{v}_{n-1} \quad (29)$$

und ein Liniensuche entlang dieser Richtung bis zum Minimum in dieser Richtung

Für die Berechnung des Faktors β stehen mehrere Varianten zur Verfügung:

Fletcher-Reeves [1]

$$\beta_n^{FR} = \frac{\Delta\vec{x}_n^T \Delta\vec{x}_n}{\Delta\vec{x}_{n-1}^T \Delta\vec{x}_{n-1}} \quad , \quad \Delta\vec{x}_k = -\vec{\nabla}U|_{x=x_k} \quad (30)$$

Polak-Ribière [?]

$$\beta_n^{PR} = \frac{\Delta\vec{x}_n^T (\Delta\vec{x}_n - \Delta\vec{x}_{n-1})}{\Delta\vec{x}_{n-1}^T \Delta\vec{x}_{n-1}} \quad , \quad \Delta\vec{x}_k = -\vec{\nabla}U|_{x=x_k} \quad (31)$$

Hestenes–Stiefel [3]

$$\beta_n^{HS} = \frac{\Delta \vec{x}_n^T (\Delta \vec{x}_n - \Delta \vec{x}_{n-1})}{-\vec{v}_{n-1}^T (\Delta \vec{x}_n - \Delta \vec{x}_{n-1})}, \quad \Delta \vec{x}_k = -\vec{\nabla} U|_{x=x_k} \quad (32)$$

Dai–Yuan [4]

$$\beta_n^{DY} = \frac{\Delta \vec{x}_n^T \Delta \vec{x}_n}{-\vec{v}_{n-1}^T (\Delta \vec{x}_n - \Delta \vec{x}_{n-1})}, \quad \Delta \vec{x}_k = -\vec{\nabla} U|_{x=x_k} \quad (33)$$

Spätestens nach n_{dim} ($= 6N$) Schritten, oft aber auch schon früher, muß β zurück auf Null gesetzt werden, beispielsweise wenn beta negativ wird. Zu sehen ist, daß für die Auswahl der Richtungsvektoren kein H gebraucht wird.

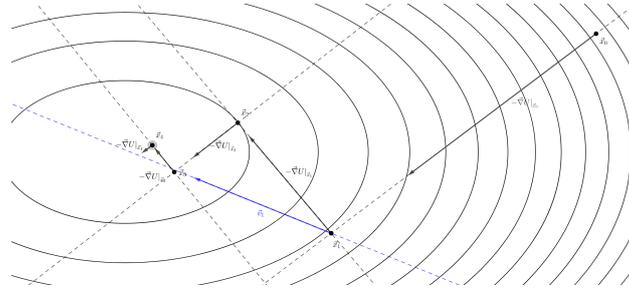


Abbildung 7: Suchverlauf nach Steepest Descent Methode (schwarz) im Vergleich zur Nichtlinearen Konjugierten Gradientenmethode (blau, hier β_{FR}) in Quadratischem Potential bei positiv definitiver Hesse-Matrix - die Lineare Konjugierte Gradientenmethode zeigt in Richtung des Minimums (erwünscht)

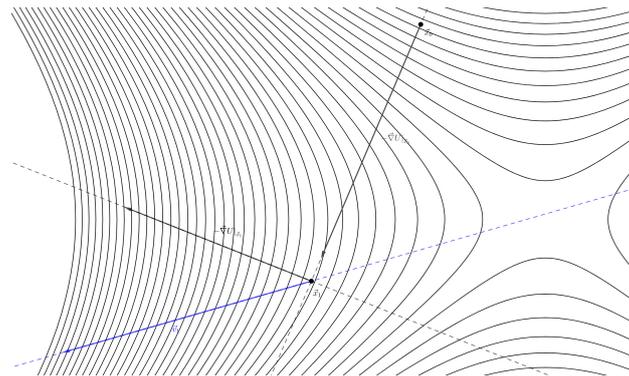


Abbildung 8: Suchverlauf nach Steepest Descent Methode (schwarz) im Vergleich zur Nichtlinearen Konjugierten Gradientenmethode (blau, hier β_{FR}) in Quadratischem Potential bei gemischten Vorzeichen der Eigenwerte der Hesse-Matrix - die Lineare Konjugierte Gradientenmethode zeigt vom Sattelpunkt weg (erwünscht)

Line Search Verfahren Für die Suche eines Minimums der Funktion auf einer Gerade mit vorgegebenem Richtungsvektor (Line Search) gilt zunächst

$$\vec{x}(t) = \vec{x}_0 + \vec{v} \cdot t \quad (34)$$

und

$$\vec{x}_n = \vec{x}_0 + \vec{v} \cdot t_n \quad (35)$$

bzw. zwischen zwei Orts- und Zeitpunkten mit dem Index $n - 1$ und n innerhalb des Linesearch

$$\vec{x}(t_{n-1} < t < t_n) = \vec{x}_{n-1} + \vec{v} \cdot (t - t_{n-1}) \quad (36)$$

und für das Potential in Quadratischer Näherung

$$U(t_{n-1} < t < t_n) \approx U|_{t_{n-1}} + \frac{dU}{dt}|_{t_{n-1}}(t - t_{n-1}) + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2}|_{t_{n-1}}(t - t_{n-1})^2 \quad (37)$$

mit

$$\frac{dU}{dt}|_{t_n} = \vec{v} \cdot (\vec{\nabla}U)|_{t_n} = \vec{v}^T \vec{\nabla}U|_{t_n} \quad (38)$$

und

$$\frac{d^2U}{dt^2}|_{t_n} = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})U|_{t_n} = \vec{v}^T (H|_{t_n}) \vec{v}. \quad (39)$$

Damit ist

$$U(t_{n-1} < t < t_n) \approx U|_{t_{n-1}} + \vec{v}^T \vec{\nabla}U|_{t_{n-1}}(t - t_{n-1}) + \frac{1}{2} \vec{v}^T (H|_{t_n}) \vec{v}(t - t_{n-1})^2. \quad (40)$$

Falls die zweite Ableitung größer Null ist, ist $U \approx \min$ falls

$$\frac{dU}{dt}|_{t_{n-1} < t < t_n} \approx \vec{v}^T \vec{\nabla}U|_{t_{n-1}} + \vec{v}^T (H|_{t_n}) \vec{v}(t - t_{n-1}) = 0 \quad (41)$$

$$\Leftrightarrow t = t_n = t_{n-1} - \frac{\frac{dU}{dt}|_{t_{n-1}}}{\frac{d^2U}{dt^2}|_{t_{n-1}}} = t_{n-1} - \frac{\vec{v}^T \vec{\nabla}U|_{t_{n-1}}}{\vec{v}^T (H|_{t_n}) \vec{v}} \quad (42)$$

Dies ist die sog. Newton-Methode. Alternativ kann $d^2/dt^2U|_{t_n}$ auch genähert werden als

$$\frac{d^2U}{dt^2}|_{t_n} \approx \frac{\frac{dU}{dt}|_{t_n} - \frac{dU}{dt}|_{t_{n-1}}}{t_n - t_{n-1}} \quad (43)$$

Dafür ist also die Berechnung von H nicht nötig, jedoch muß sich $(t_n - t_{n-1})$ bereits in einer passenden Größenordnung befinden. Deshalb wird zu Beginn eines Line Searches immer zunächst die explizite Variante mit Berechnung von H verwendet. Ansonsten wird die zweite Variante verwendet außer, wenn

sich mit ihr kein Fortschritt mehr erzielen lässt. Ist $\vec{v}^T H \vec{v}$ nicht größer null, besitzt die Funktion auf der Linie in der näheren Umgebung ein Maximum. Von diesem soll sich wegbewegt werden. Allgemein soll die Bewegung immer in richtung der negativen Zeitableitung geschehen. Das Vorzeichen von $(t_n - t_{n-1})$ soll also bestimmt werden von $-dU/dt|_{t_{n-1}}$, also wird die Regel für t_n verändert zu

$$t_n = t_{n-1} - \frac{\frac{dU}{dt}|_{t_{n-1}}}{\left| \frac{d^2U}{dt^2}|_{t_{n-1}} \right|}. \quad (44)$$

in der von der zweiten zeitableitung im Nenner der Betrag genommen wird,

2.3 Software und Datentypen

2.3.1 Minimierung

Die Software zur Minimierung des Potentials wurde in *C++ 13.3* geschrieben. Als Datentyp für *float*-Variablen wurde *long double* verwendet. Als Abbruchkriterium für einen Line-Search sowie den Gesamtalgorithmus wurde verwendet, daß dann abgebrochen wird, wenn der Betrag des Zugewinns für U pro Schritt einen Wert von 10^{-16} unterschreitet. Zur expliziten Ableitung für die Gradienten und H wurde als Computeralgebrasystem *Python 3* mit der Bibliothek *sympy* verwendet, um das entsprechende C++ Bibliotheksmodul zu erstellen. Für die Quantitative Auswertung wurde *Python 3* verwendet, die Diagramme wurden mit der Bibliothek *Matplotlib* erstellt.

2.3.2 Visualisierung

Für die 3D-Visualisierung wurde *Blender 4.4.3* verwendet.

Die Outputdateien eines Hauptprogramms, beinhaltend die optimierten Orts- und Drehwinkelkoordinaten sowie Informationen zu deren Winkelabhängigkeit und einiger Metadaten zu Packungsdichte und Minimierungsergebnis, werden über ein Skript in Blender eingelesen. Für die Darstellung der Teilchen wird zunächst ein Polyeder entsprechend der Basisvektoren der Winkelabhängigkeit des Teilchens erstellt und durch Oberflächenunterteilung eine Kugel mit dem Teilchenradius erzeugt. Der Radius an jedem Punkt wird dann gemäß der Berechnung für den Winkelanteil des Potentials skaliert. Der Radius der Teilchen entspricht also der Stärke des Potentials in dieser Richtung. Die verwendeten Geometrien werden in Abb. 9 gezeigt.

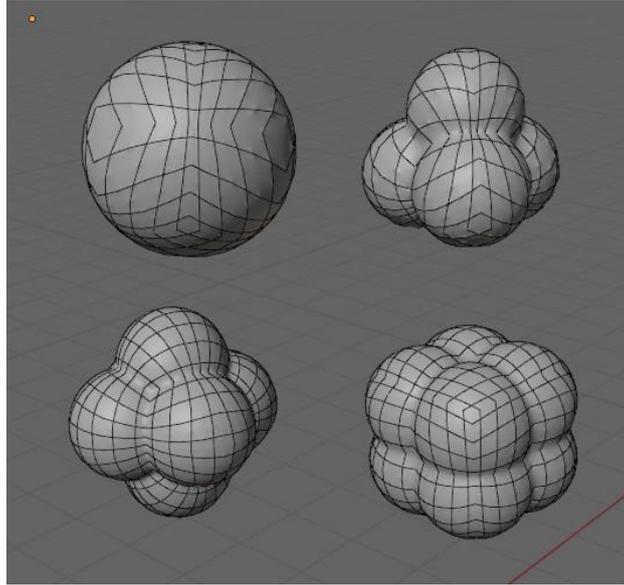


Abbildung 9: 3D-Darstellung der Teilchen: isotrop (l.o.), mit tetraedrischer (r.o.), oktaedrischer (l.u.) und kubischer (r.u.) Winkelabhängigkeit. Massstabs- und winkeltreue Abbildung des Winkelanteils des Potentials als Radius bei $\sigma_{pw} = 1.0$

Diese werden dann gemäß ihrer Drehwinkelkoordinaten gedreht und gemäß ihrer Ortskoordinaten platziert.

3 Ergebnisse

3.1 Harmonisch Abstoßendes Potential - isotrop

Zunächst wird sich mit den Ergebnissen für das harmonisch Abstoßende Potential befasst, die ja eine Art Benchmark für den Algorithmus darstellen. In Abb 10 ist die Energie pro Teilchen nach erfolgter Minimierung für unterschiedliche Packungsdichten aufgetragen für Teilchenanzahlen $N = 100$ und $N = 300$. Zunächst lässt sich feststellen, dass Lage und Form in diesem Bereich von Teilchenanzahlen nicht von der Teilchenanzahl abhängen. (Merke: Für eine höhere Teilchenanzahl wurde entsprechend das Volumen vergrößert um die Entsprechende Packungsdichte zu erhalten). Die Energie ist bis zu einer Kritischen Packungsdichte von circa 0.625 gleich Null. Danach steigt sie zunächst ählich einer Quadratischen Funktion an. In höheren Bereichen Außerhalb der Graphik steigt sie Linear an.

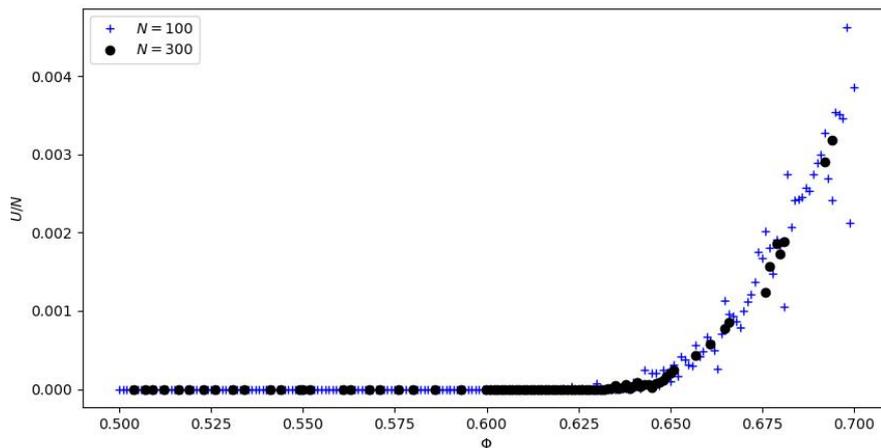


Abbildung 10: Energie pro Teilchen für harmonisch abstoßend isotropes Potential für Teilchenanzahl $N = 100$ (blau +) und $N = 300$ (schwarz o)

In Abb. 11 wird die Anzahl der Überlappungen pro Teilchen zu Nachbarpartikeln, das ist zweimal die Anzahl der paarweisen Abstände r_{ij} , die kleiner als σ_{ij} sind, für Teilchenanzahlen $N = 100$ und $N = 300$, aufgetragen. Sie ist im unteren Bereich gleich Null, das heißt in diesem Bereich konnten sich die Teilchen vollständig auseinanderschieben. In einem Bereich um eine Kritische Packungsdichte von circa 0.625 steigt die Anzahl sprunghaft von Null auf über 6. Danach steigt sie langsam weiter bis auf circa 12 (außerhalb der Graphik). Dieses ist unabhängig von der Teilchenzahl. Zum Vergleich haben die Kubisch Flächenzentrierte und die Hexagonal Dichteste

Kugelpackung eine Packungsdichte von circa 0.740 und jede Kugel besitzt 12 Nächste Nachbarn. Bedeutet, dass es schon weit vor der Packungsdichte der Kubisch Flächenzentrierten bzw. der Hexagonal Dichtesten Kugelpackung nicht mehr möglich ist die Teilchen auseinanderzuschieben. Dies kann unterschiedliche gründe haben, wie Fehlstellen, Korngrenzen etc..

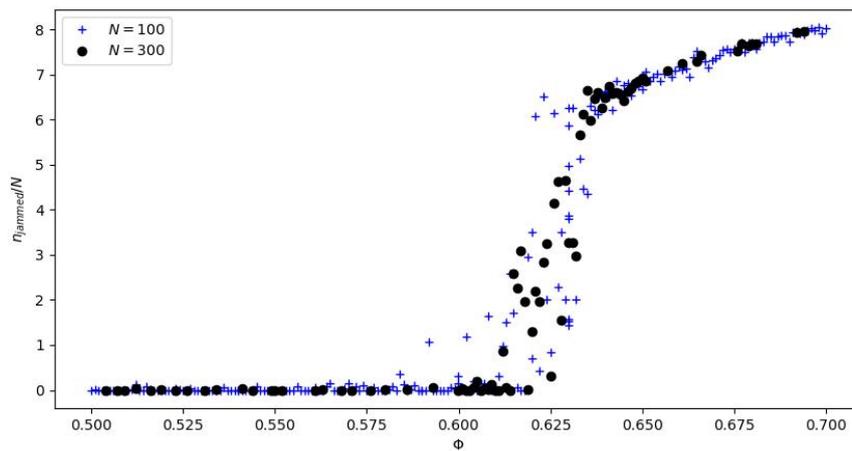


Abbildung 11: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für harmonisch abstoßend isotropes Potential für Teilchenanzahl $N = 100$ (blau +) und $N = 300$ (schwarz o)

Abbildungen 12 bis 19 zeigen die 3D-Darstellungen der Ergebnisse für Packungsdichte 0.625 für $N = 100$ und $N = 300$ aus verschiedenen Blickwinkeln, um einen Eindruck zu erhalten wie sich die Kugeln angeordnet haben.

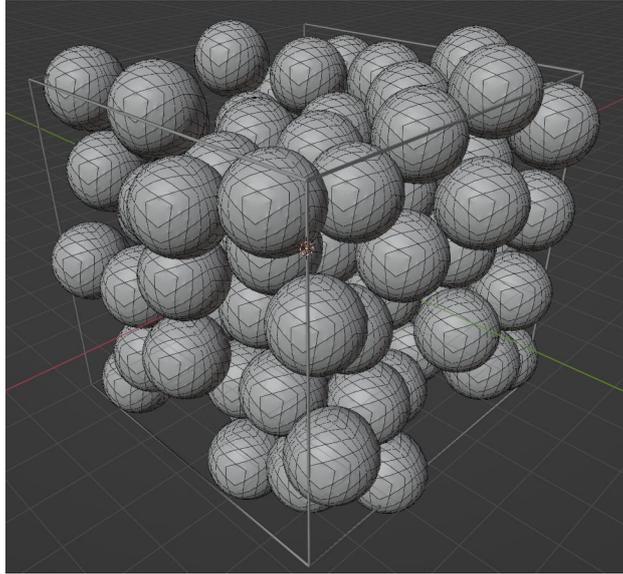


Abbildung 12: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel Diagonal aus Richtung $+x, +y, +z$

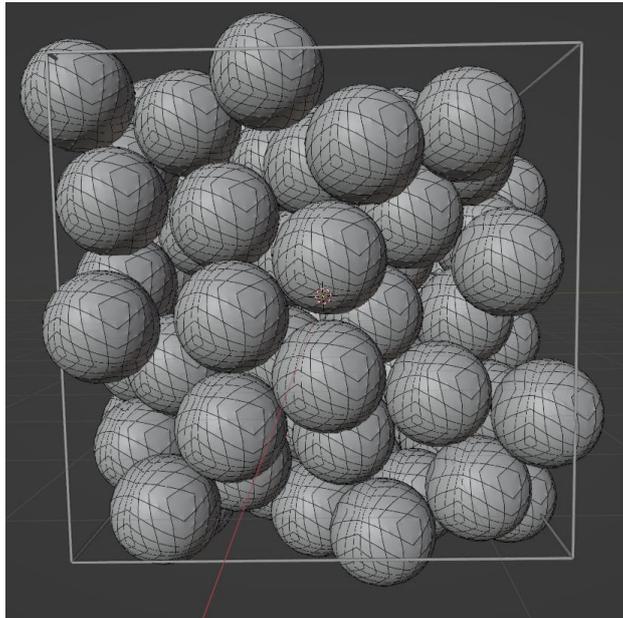


Abbildung 13: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von der Seite aus Richtung $+x$



Abbildung 14: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von der Seite aus Richtung $+y$



Abbildung 15: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von oben

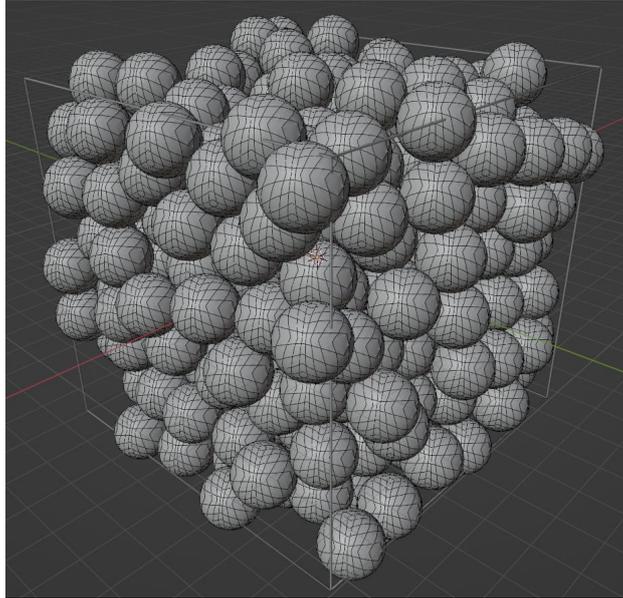


Abbildung 16: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 300$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel Diagonal aus Richtung $+x, +y, +z$

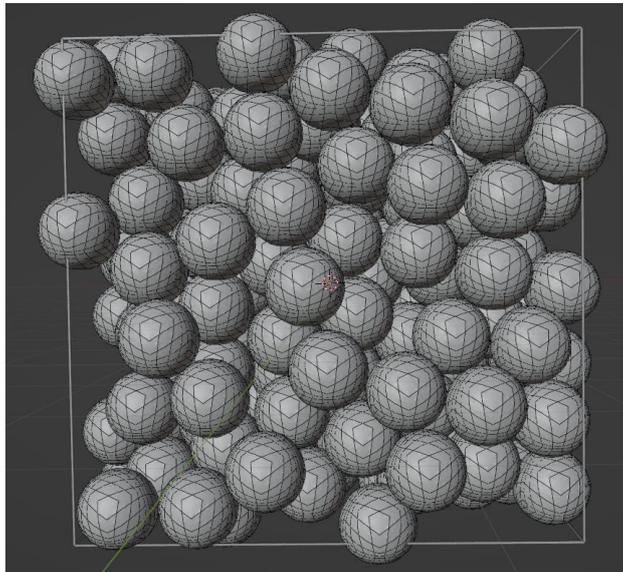


Abbildung 17: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 300$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von der Seite aus Richtung $+x$

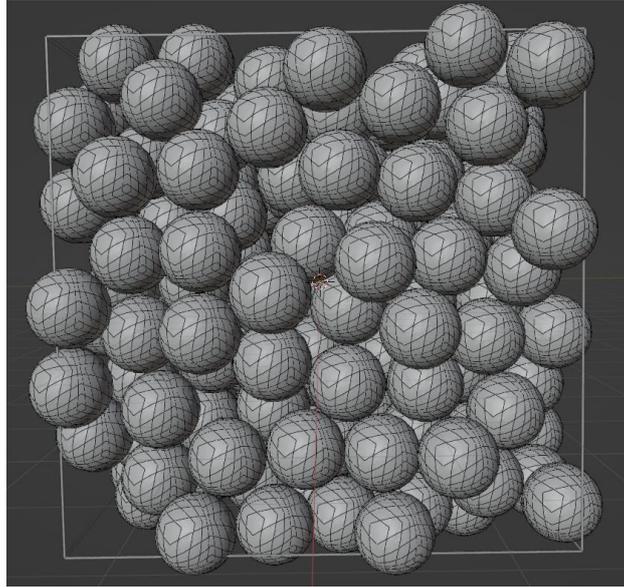


Abbildung 18: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 300$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von der Seite aus Richtung $+y$

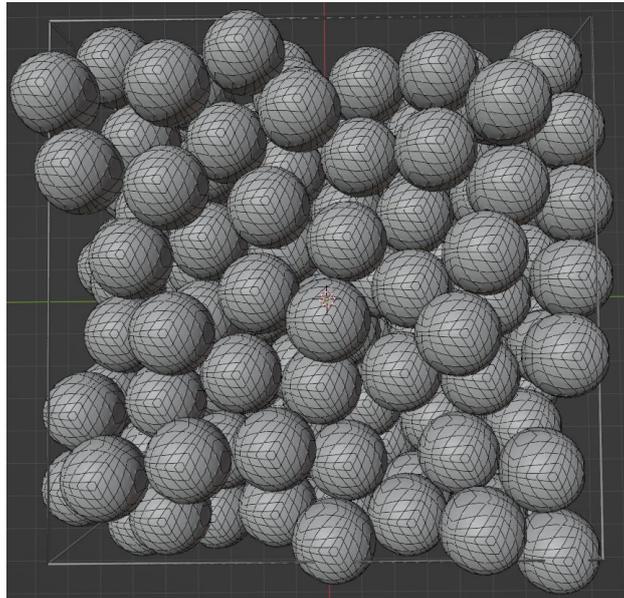


Abbildung 19: 3D-Ansicht des Systems für harmonisch Abstossendes Potential, isotrop, $N = 300$, $\Phi = 0.625$, Blickwinkel von der oben

3.2 Lennard-Jones-Potential

3.2.1 isotrop

Am Beispiel des isotropen Lennard-Jones-Potentials wird der Effekt der Entspannung der Reichweitenmodulation beschrieben. Bei N Teilchen gibt es $N(N - 1)/2$ paarweise Abstände r_{ij} , und für jeden dieser Abstände einen maximalen negativen Potentialbeitrag von -1 pro ϵ , falls $r_{ij} = 1 \cdot \sigma_{ij}$. In einer Dichtesten Kugelpackung gibt es pro Teilchen 6 paarweise Abstände mit $r_{ij} = 1 \cdot \sigma_{ij}$, und mehrere Abstände je nach Packungsart mit $r_{ij} = \sqrt{3} \cdot \sigma_{ij}$, $r_{ij} = 2 \cdot \sigma_{ij}$, $r_{ij} = \sqrt{6} \cdot \sigma_{ij}$ etc., welche auch noch einen negativen Beitrag leisten. Es wird also in größeren Cluster, das gut gepackt ist, und das sich nur berührt aber nicht überschneidet, Für das unmoduliere Lennard-Jones-Potential eine Energie im Bereich von minus 6 und darunter erwartet. Für das isotropen Lennard-Jones-Potential ohne Reichweitenmodulation (Ergebnisse nicht aufgeführt) ist dies im bereich niedriger Packungsdichten überhaupt nicht gegeben, was bedeutet, dass sich die Teilchen nicht genügend zusammengezogen haben, um genügend nächste Nachbarn zu haben. Im Reichweitenmodulierten Lennard-Jones-Potential ohne Entspannung leisten selbst entfernte Abstände noch einen positiven Energiebeitrag, was einerseits dazu führen kann daß sich die Teilchen übermäßig zusammenziehen, andererseits, daß sich Teilchen trotz Modulation quasi nicht entscheiden können in welche richtung sie gehen sollen. Abb. 25 zeigt ein Beispiel dazu, wo sich solche Schlauchartigen und getreckten Strukturen in den Bereichen niedriger Packungsdichten zeigen. Abb. 20 zeigt die Energie pro Teilchen für das isotrope Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation ohne Entspannung.

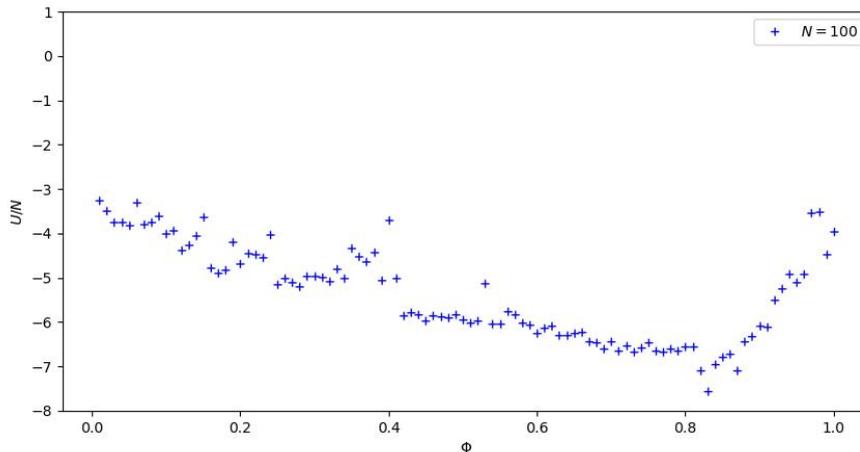


Abbildung 20: Energie pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation, ohne anschließende Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop für Teilchenanzahl $N = 100$

Hier ist Die Kurve im Bereich niedriger Packungsdichten bereits abgesenkt gegenüber der unmodulierten Variante. Abb. 21 zeigt dagegen die Variante mit anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation. Die Energie hat sich in den Bereichen niedriger Packungsdichten noch weiter abgesenkt, auch sehen wir in der 3D darstellung in diesen Bereichen keine Länglichen Strukturen (s. Abb. 26). Außerdem erhalten wir eine feiner gezeichnete Linie. Weitere Absinken der Energien hin im bereich mittlerer Packungsdichten ist der Tatsache geschuldet, dass es sich um eine begrenzte Teilchenanzahl handelt. Bei größeren Teilchenanzahlen würden sich durch größere Periodische Kastengrößen mehr Teilchen zu einem Cluster zusammenfassen, wodurch weniger Teilchen an der Oberfläche sind. Bei größeren Teilchenanzahlen würde man also über alle Packungsdichten bis zum Bereich dessen was hier das Minimum ist einen konstanten Verlauf sehen. Auch ist zu sehen, daß dieses Energieminimum oberhalb der bisherigen kritischen Packungsdichte von 0.625 und auch jenseits der Packungsdichte der Hexagonal dichtesten Kugelpackung ist.

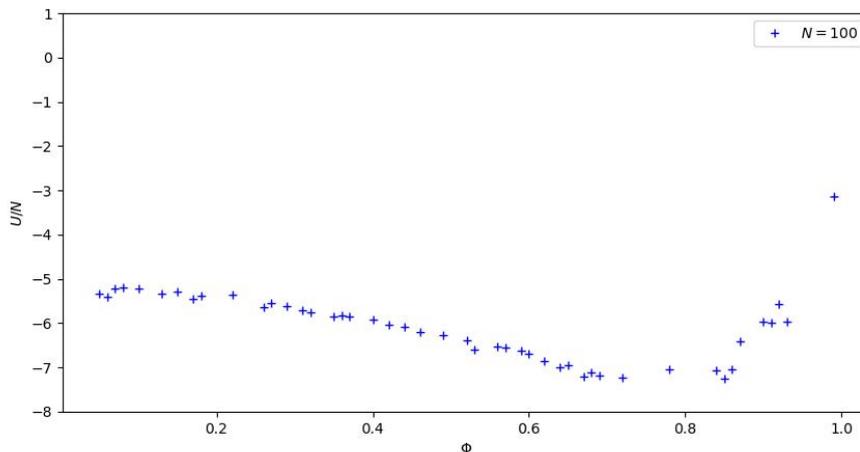


Abbildung 21: Energie pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop für Teilchenanzahl $N = 100$

Abbildungen 22 und 23 zeigen die dazugehörigen Anzahlen der Überlappungen pro Teilchen. Die Anzahl ist in beiden Fällen in den Unteren Bereichen nicht Null, da das Potential teilw. anziehend ist und daher sich erstens Ungenauigkeiten am Berührungspunkt und damit der Erfassung als Überlappung

ergeben können, und zweitens sich auch Übernächste Nachbarn etc. anziehen und damit das Cluster weiter zusammenziehen. Die Linie ist dennoch in der Variante mit Entspannung deutlicher gezeichnet. Auch ergibt sich wie beim harmonisch Abstoßenden Potential ab einer Packungsdichte von ca. 0.625 ein Sprunghafter Anstieg der Überlappungen.

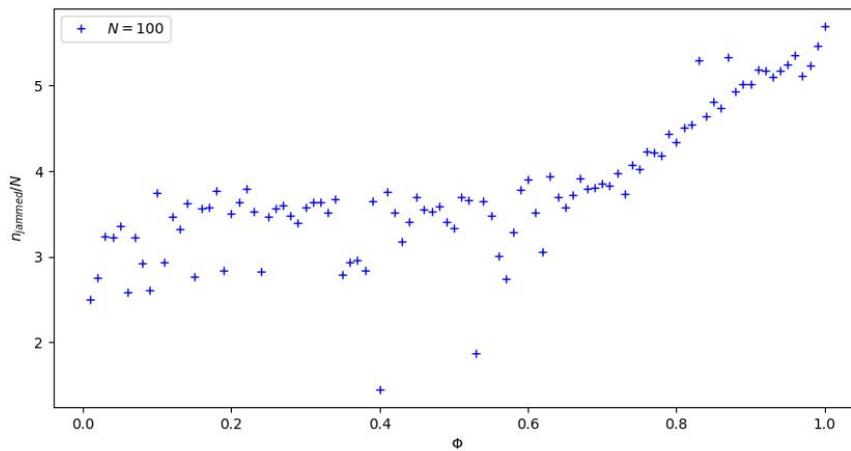


Abbildung 22: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation, ohne anschließende Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop für Teilchenanzahl $N = 100$

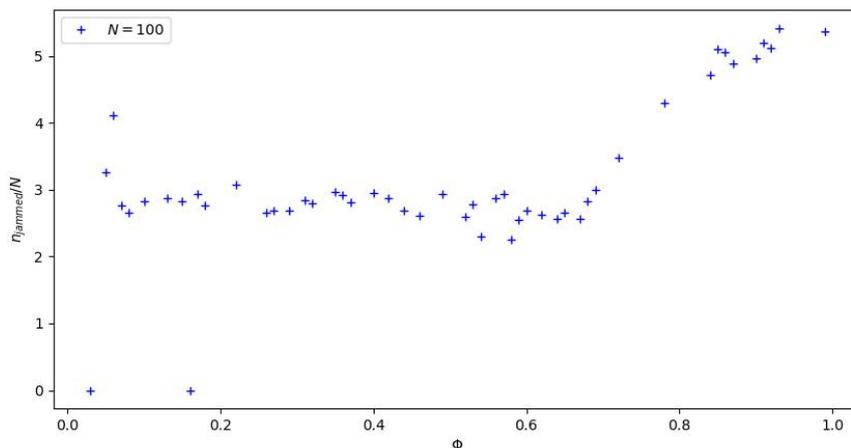


Abbildung 23: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop für Teilchenanzahl $N = 100$

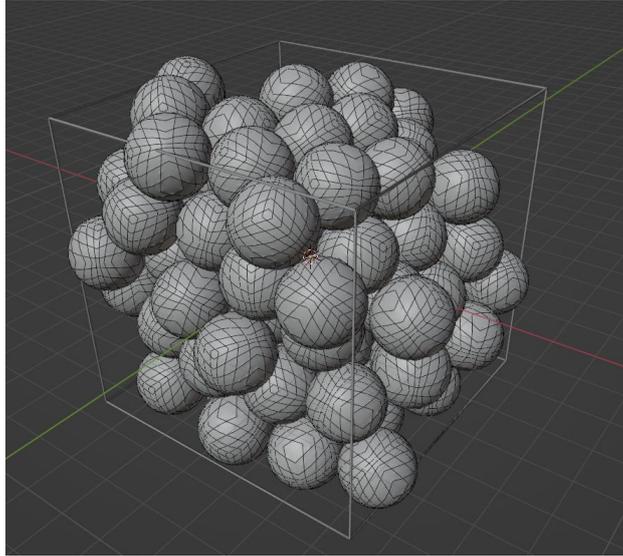


Abbildung 24: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation, ohne anschließende Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.620$

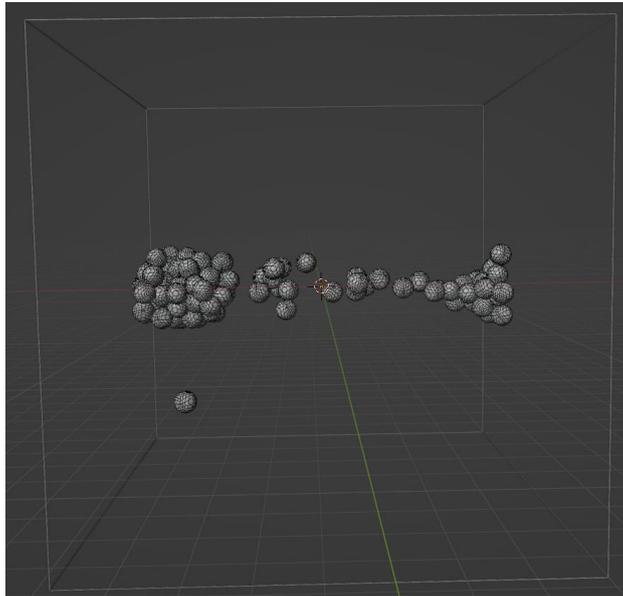


Abbildung 25: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation, ohne anschließende Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.010$ als Beispiel für eine niedrige Packungsdichte

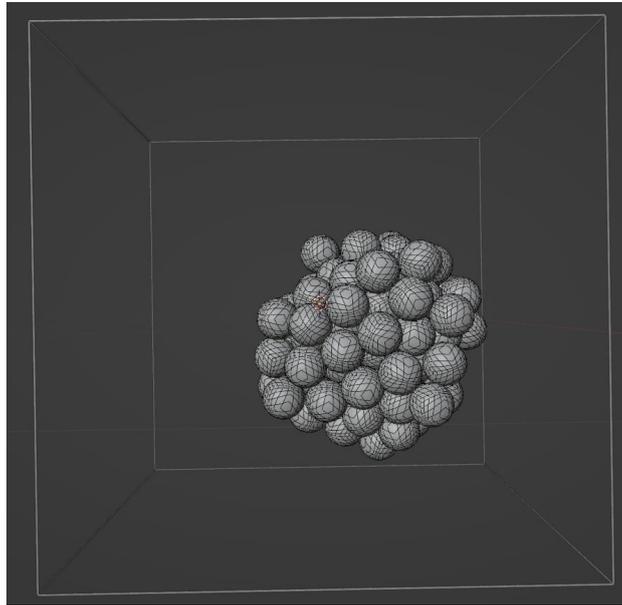


Abbildung 26: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, isotrop, $N = 100$, $\Phi = 0.050$ als Beispiel für eine niedrige Packungsdichte

3.2.2 tetraedrisch, oktaedrisch, kubisch

Für die nicht-isotropen Potentiale wurde nur noch die Variante mit Reichweitenmodulation und Entspannung durchgeführt. Bei den Energien pro Teilchen (Abbildungen 27, 28 und 29) sehen wir keine negativen Energien mehr, außerdem ergeben sich für höhere Packungsdichten teilweise sehr große Energien. Allgemein ist es auch so, daß im Bereich niedriger Packungsdichten die Teilchen sich nicht zusammenclustern. Dies ist möglicherweise eine Sache noch fehlender Anpassung des Algorithmus.

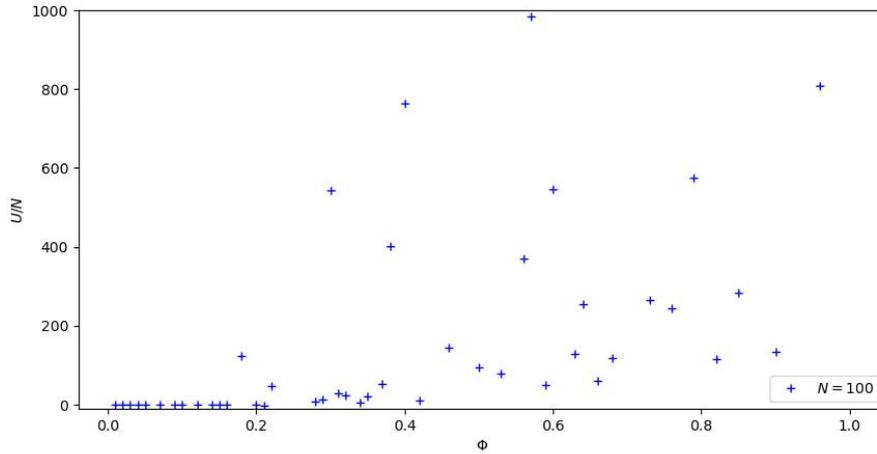


Abbildung 27: Energie pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, tetraedrisch für Teilchenanzahl $N = 100$

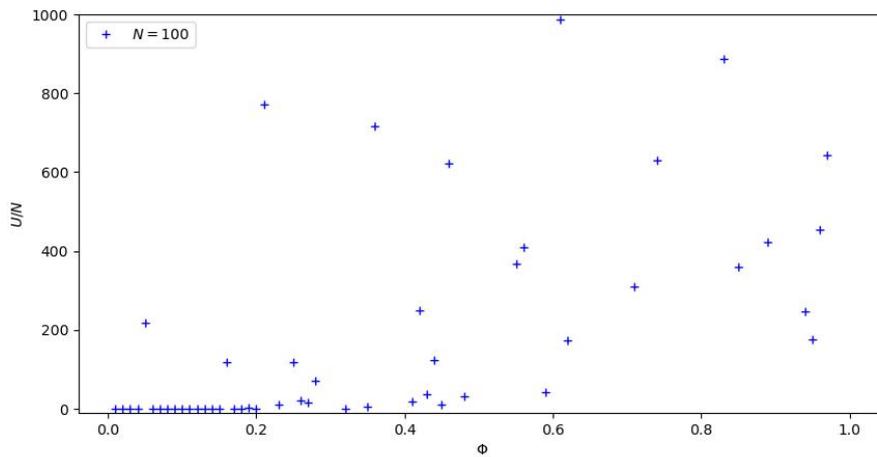


Abbildung 28: Energie pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, oktaedrisch für Teilchenanzahl $N = 100$

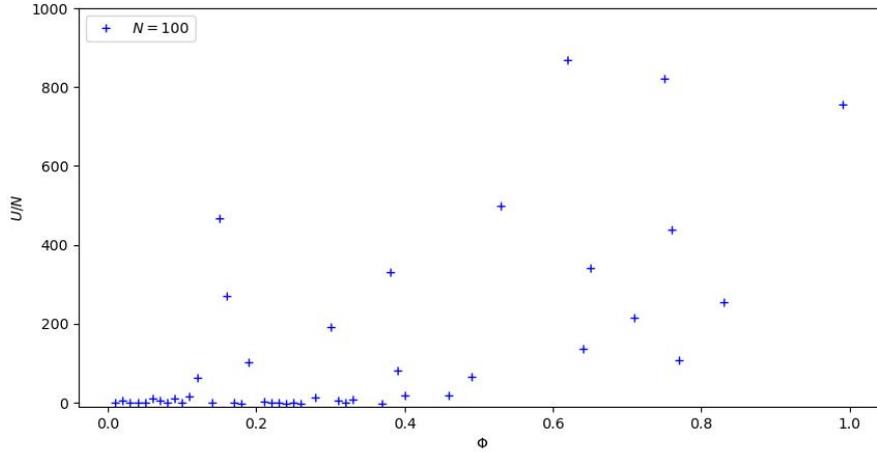


Abbildung 29: Energie pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, kubisch für Teilchenanzahl $N = 100$

Abbildungen 30, 31 und 32 zeigen die dazu gehörigen Anzahlen der Überlappungen pro Teilchen. Es ist hier nirgends mehr ein sprunghafter, nur noch ein kontinuierlicher Übergang zu sehen.

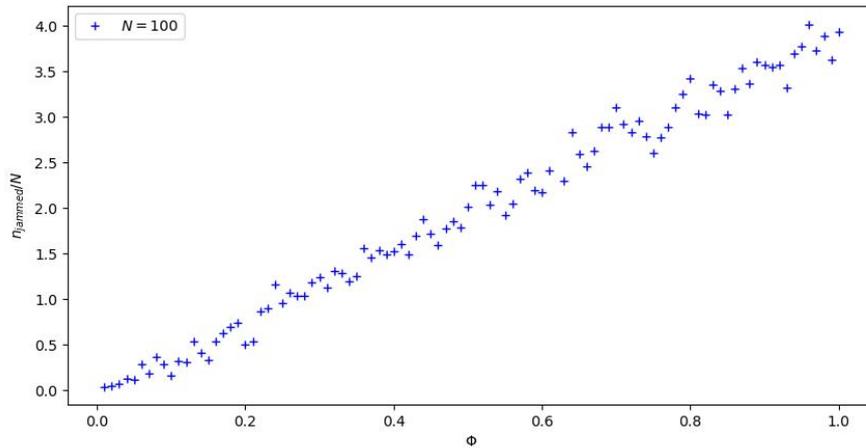


Abbildung 30: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, tetraedrisch für Teilchenanzahl $N = 100$

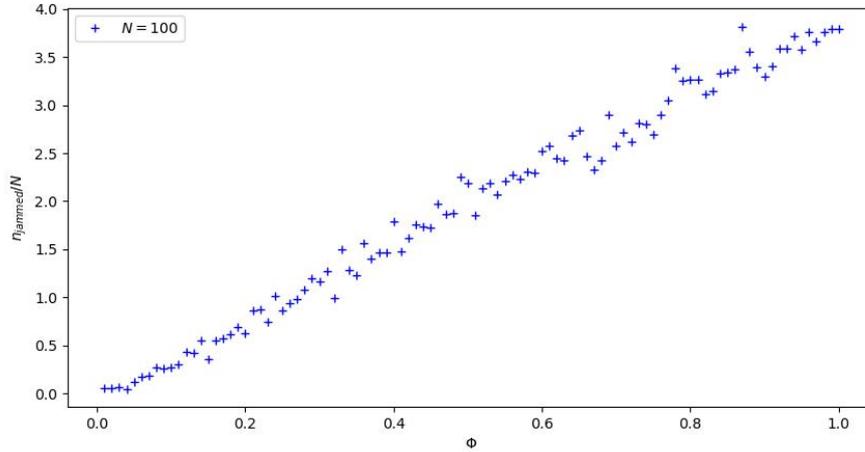


Abbildung 31: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, oktaedrisch für Teilchenanzahl $N = 100$

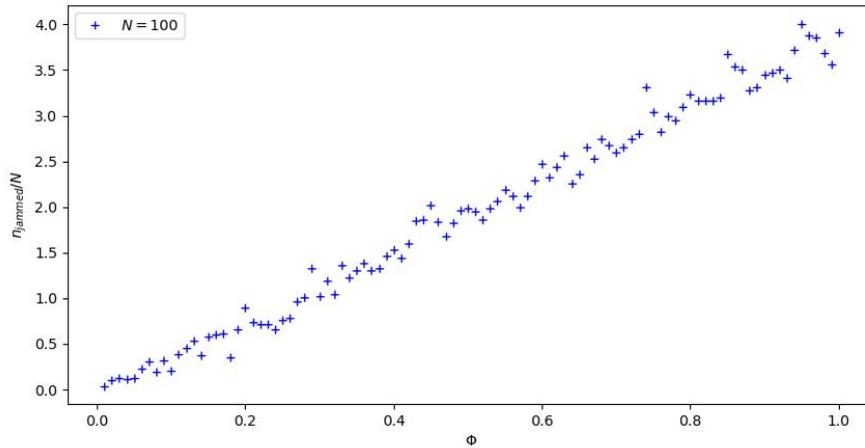


Abbildung 32: Durchschnittliche Anzahl der Überlappungen pro Teilchen für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, kubisch für Teilchenanzahl $N = 100$

In der 3D-Darstellung sehen wir in mittleren Bereichen der Packungsdichte sich zusammenhängende Strukturen vor allem bei der tetraedrischen und der oktaedrischen Variante zusammenhängende Strukturen, siehe Abbildungen 33, 34 und 35. In Abbildung 33 ist eine Solche Struktur markiert. In oberen Bereichen der Packungsdichte sind die Teilchen ähnlich wie im isotropen Fall einfach dicht zusammengepackt (nicht abgebildet).

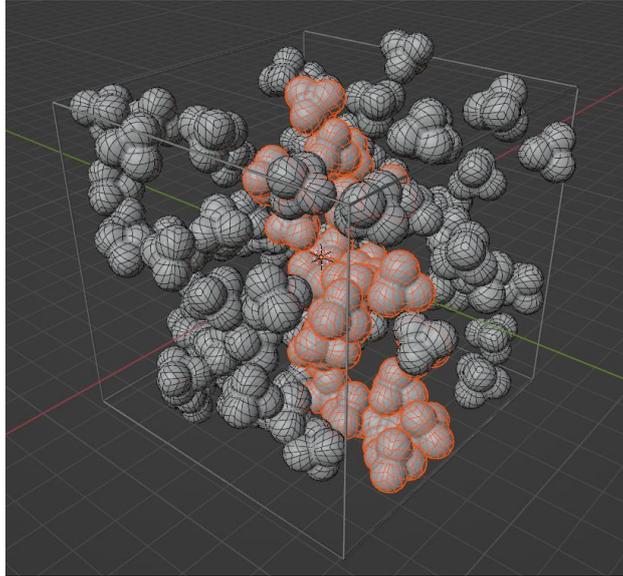


Abbildung 33: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, tetraedrisch, $N = 100$, $\Phi = 0.370$ als Beispiel für eine mittlere Packungsdichte, rot markiert: eine zusammenhängende Struktur, wenig verzweigt

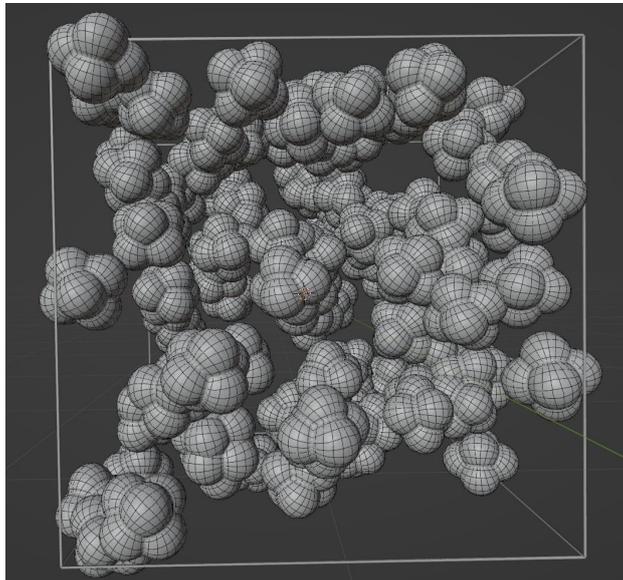


Abbildung 34: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschließender Entspannung der Reichweitenmodulation, oktaedrisch, $N = 100$, $\Phi = 0.370$ als Beispiel für eine mittlere Packungsdichte

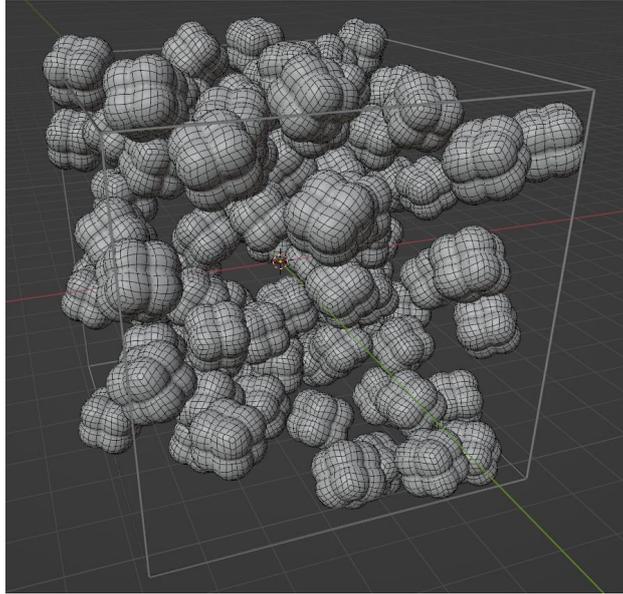


Abbildung 35: 3D-Ansicht des Systems für Lennard-Jones-Potential mit Reichweitenmodulation und anschliessender Entspannung der Reichweitenmodulation, kubisch, $N = 100$, $\Phi = 0.370$ als Beispiel für eine mittlere Packungsdichte

4 Fazit und Ausblick

Die Arbeit hat zunächst gezeigt, daß es möglich ist, isotrope und nicht-isotrope Teilchen in 3 Dimensionen zu simulieren, und dass es zumindest im Fall isotroper Teilchen deutliche Übergänge zwischen Freien Teilchen (ungejammt) und Überlappenden (gejammt) Teilchen gibt, sowohl im harmonisch abstoßenden als auch beim Lennard-Jones-Potential. Zweitens hat es sich gezeigt das es eine gute Möglichkeit der Visualisierung gibt, in dem die Systeme auch gut optisch analysiert werden können. Der Algorithmus muss allerdings für nicht-isotrope Teilchen noch besser Angepasst werden. Weiterhin könnte man noch beliebige andere Geometrien der Teilchen implementiert werden beispielsweise beliebige Kugelfunktionen oder nichtregelmäßige Polyeder. Außerdem können auch Polydisperse Systeme untersucht werden. Die Möglichkeit hierfür ist bereits in der Software implementiert. Genauso könnten noch andere Potentiale verwendet werden. An dem Skalierungsfaktor σ_{pw} für die Winkelabhängigkeit kann auch noch moduliert werden. Ebenso könnten zum Beispiel auch andere Minimierungsalgorithmen verwendet werden.

Literatur

- [1] Fletcher, R.; Reeves, C. M. (1964). Function minimization by conjugate gradients. *The Computer Journal*. 7 (2): 149–154. doi:10.1093/comjnl/7.2.149.
- [2] Polak, E.; Ribière, G. (1969). Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées. *Revue Française d’Automatique, Informatique, Recherche Opérationnelle*. 3 (1): 35–43.
- [3] Hestenes, M. R.; Stiefel, E. (1952). Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 49 (6): 409–436. doi:10.6028/jres.049.044
- [4] Dai, Y.-H.; Yuan, Y. (1999). A nonlinear conjugate gradient method with a strong global convergence property. *SIAM Journal on Optimization*. 10 (1): 177–182. doi:10.1137/S1052623497318992
- [5] O’Hern, C.S., Silbert, L.E., Liu, A.J., Nagel, S.R. (2003). Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics*, 68 1 Pt 1, 011306 . doi:10.1103/PhysRevE.68.011306
- [6] Gemeinhardt, A., Martinsons, M., Schmiedeberg, M. (2018). Growth of two-dimensional dodecagonal colloidal quasicrystals: Particles with isotropic pair interactions with two length scales vs. patchy colloids with preferred binding angles. *Eur. Phys. J. E* 41, 126 (2018). <https://doi.org/10.1140/epje/i2018-11737-1>
- [7] Jones, J. E. On the Determination of Molecular Fields. I. From the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 1924, 106, 441-462.
- [8] Richard Barrett, Michael Berry, Tony Chan, James Demmel, June Donato, Jack Dongarra, Victor Eijkhout, Roldan Pozo, Charles Romine, Henk van der Vorst (1993). *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, Philadelphia, Pennsylvania.
- [9] William L. Briggs (1987). *A Multigrid Tutorial*, SIAM, Philadelphia, Pennsylvania.
- [10] James W. Daniel (1967) Convergence of the Conjugate Gradient Method with Computationally Convenient Modifications, *Numerische Mathematik* 10, 125–131.

Erklärung

Ich erkläre hiermit dass ich die hier vorliegende Arbeit eigenhändig und nur unter Zuhilfenahme der aufgeführten Mittel angefertigt habe, sowie, daß ich die Arbeit nicht schon als Prüfungsleistung an einer anderen Stelle eingereicht habe.

Erlangen, den 27.06.2025

Ferdinand Freiherr von Lindenfels