



**Übungsblatt 6** Abgabe bis 19.06.17 vor der Übung

**Vorname, Name:**

1. Skizzieren Sie den Verlauf der Energie (Summe aus kinetischer und potenzieller Energie) mit der Zeit, wenn Sie



a) einen Produktionslauf im NVT-Ensemble durchführen

b) im NVE-Ensemble zunächst von 0K aufheizen, und dann weiter bei Raumtemperatur simulieren

(je 10 Punkte)

2. Aus einer Simulation haben wir für die Eigenschaft A folgende Ergebnisse zu den jeweiligen Schritten *i* erhalten:

Schritt	A	Schritt	A
1	0.129	11	0.665
2	0.928	12	0.289
3	0.208	13	0.206
4	0.434	14	0.085
5	0.569	15	0.394
6	0.414	16	0.611
7	0.631	17	0.807
8	0.719	18	0.929
9	0.837	19	0.134
10	0.034	20	0.345

Berechnen sie den Erwartungswert (=Durchschnitt) von A gemäß der Formel

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i$$

wobei N die Anzahl der Schritte und  $A_i$  der Wert von A im Schritt  $i$  ist.

(je 10 Punkte)

- a) für die Schritte von 1 bis 10
- b) für die Schritte von 11 bis 20
- c) für die Schritte von 1 bis 20

Aus einem Experiment haben wir den Erwartungswert von A zu 0.500 erhalten.

- d) Welcher der beiden Simulationsabschnitte (1-10 bzw. 11-20) war in dieser Hinsicht der „bessere“ ? Bitte kurz begründen. (10 Punkte)

- e) Brachten die Schritte von 11 bis 20 diesbezüglich eine Verbesserung für den berechneten Erwartungswert, oder hätte man die Simulation nach 10 Schritten abbrechen können ? (10 Punkte)

- f) In der Vorlesung wurde folgende Definition des Erwartungswertes eines physikalischen Systems angegeben:

$$\langle A \rangle = \int \int A(p, q) \pi(p, q) dp dq \quad \text{wobei } \pi \text{ die Phasenraumdichte ist.}$$

Welchen Wert hat die Phasenraumdichte in diesem numerischen Beispiel ?

Tipp: Vergleichen Sie dazu die Berechnung von  $\langle A \rangle$  in Fragenteil a) bis c) (10 Punkte)

6. Welchen rechentechnischen Nachteil bringt die Verwendung des TIP5P Wassermodelles gegenüber TIP3P ? Tipp: Denken Sie an die Anzahl zu berechnender Interaktionen (10 Punkte)

7. Warum muß man die Geschwindigkeit des Massenschwerpunktes in MD-Simulationen immer wieder zurücksetzen ? (10 Punkte)