



Übungsblatt 6 Abgabe bis 04.06.2018 vor der Übung

Vorname, Name:

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



- a) einen Produktionslauf im NVT-Ensemble bei Raumtemperatur 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) Analog zur inneren Energie U (Vorlesung Seite 15) wird auch der Erwartungswert $\langle A \rangle$ eines physikalischen Systems über den Phasenraum definiert:

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

Welchen Wert hat die Phasenraumdichte in diesem numerischen Beispiel? (10 Punkte)

3. Verwenden Sie für diese Frage die Daten auf Seite 5 der Vorlesung. Die Punkte M und L bekommen keinen van der Waals Radius zugeordnet.

- a) Um welchen Faktor (ungefähr) steigt der Rechenaufwand für den Elektrostatikterm in typischen Kraftfeldern, wenn man das TIP5P WassermodeLL anstelle von TIP3P verwendet? (10 Punkte)

- b) Unterscheidet sich der Aufwand für den van der Waals-Term zwischen TIP3P und TIP4P? Bitte kurze Begründung angeben. (10 Punkte)