



Numerische Simulationsverfahren im Ingenieurwesen

Übungsblatt 8

Auswertung und Anfangskonfiguration

In der Datei md2-rahmencode.m ist der Rahmencode für die Erweiterung der Molekulardynamik-Simulation vorbereitet. Im Kopf des Programmes sind die (normierten) Parameter definiert. Der Geschwindigkeit-Verlet-Algorithmus ist nun vollständig enthalten.

Erweitern Sie den Code derart, dass alle ta Zeitschritte eine Auswertung der Simulation vorgenommen wird. Berechnen Sie zu diesen Zeitpunkten die Temperatur des simulierten Gases. Beachten Sie, dass infolge der Normierung der Zusammenhang zwischen mittlerer normierter kinetischer Energie $\langle \bar{E}_{kin} \rangle$ und normierter Temperatur \bar{T}

$$\langle \bar{E}_{kin} \rangle = \frac{3}{2} \bar{T}$$

lautet.

Stellen Sie die Positionen der Moleküle zum Auswerte-Zeitpunkt dar und geben Sie den Verlauf der mittleren Temperatur über der Zeit graphisch aus.

Zeit zur Bearbeitung: 60 Minuten