

Lösung 13

1. Mehrkörpersimulation

Wir beobachten, dass die Schrittweiten kleiner werden, wenn die Körper näher sind.

2. Molekular-Dynamik mit dem Verlet-Algorithmus

In Abb. 1 ist der zeitliche Verlauf der totalen Energie in der MD-Simulation gezeichnet. Es ist klar (aus elementarer Physik!), dass die totale Energie eine Erhaltungsgrösse ist. Wir beobachten, dass der `ode45` diese nicht erhält. Der Verlet-Algorithmus (bis auf kleine Fluktuation) jedoch schon! Es lässt sich zeigen, dass der Verlet-Algorithmus Energie erhält. Dieses Verfahren erhält auch noch weitere Grössen (z.B. Drehimpuls, ...) und ist deshalb sehr populär in Mehr-Körper-Simulationen.

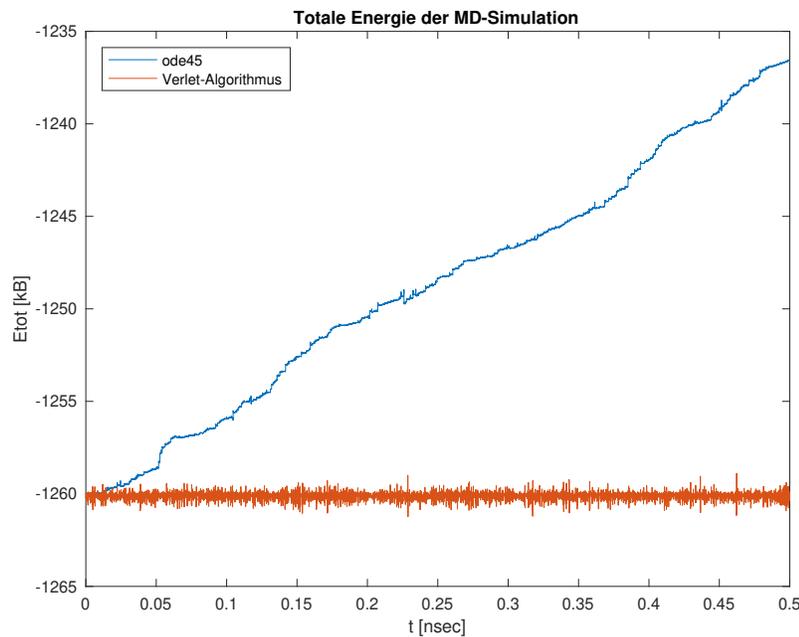


Abbildung 1 – Zeitliche Entwicklung der totalen Energie in der MD-Simulation für die beiden Löser.