Aufgabenblatt zum Wahlpflichtfach: Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Aufgabe 1

Erstellen Sie eine Text-Datei “In.dat”, in die Sie die Werte $1, 2, ..., 10$ eintragen.

a) Schreiben Sie nun ein Fortran-Programm, das diese Werte in einen `Integer`-Array einliest. Teilen Sie nun alle Werte des Arrays durch 129 und geben Sie das Ergebnis als `real` Datentyp an. Schreiben Sie die Ergebnisse in eine Datei “Out.dat” (Darstellung mit Exponenten zur Basis 10, und bis auf zwei Nachkommastellen genau). Schließen Sie die Datei “Out.dat”.

b) Das Programm soll nun über die Konsole den Benutzer dazu auffordern, eine Zahl einzugeben, die dann zu den in Teil a) berechneten Werten addiert wird. Geben Sie auch diese Ergebnisse in die Datei “Out.dat” aus (diesmal als Fixpunktzahl mit 7 Nachkommastellen). Achten Sie darauf, dass ihre ersten Ergebnisse in der Datei dabei nicht überschrieben werden.

Aufgabe 2

Erstellen Sie ein Programm, das den Benutzer über die Konsole auffordert, ein Datum einzugeben.

a) Das Programm soll über die Konsole ausgeben, welche Jahreszeit an diesem Datum vorliegt.

b) Über Unterroutinen soll nun berechnet werden, wieviele Tage es ab diesem Datum bis zum nächsten Perihel-Durchgang der Erde (sonnennächster Punkt der Erdbahn: 3. Januar) und bis zum nächsten Aphel-Durchgang (sonnenfernster Punkt: 5. Juli) sind. Achten Sie dabei auf Schaltjahre (Schaltjahre sind alle Jahre, deren Jahreszahl ohne Rest durch vier teilbar ist. Ausgenommen von dieser Schaltjahresregelung die durch 100 teilbaren Jahreszahlen, sind diese allerdings wiederum durch 400 teilbar, wird der Schalttag wieder hinzugefügt). Geben Sie die jeweilige Zeitdauer in Tagen über die Konsole aus.

Aufgabe 3 Fakultät

Schreiben Sie ein Programm, dass für eine nicht-negative ganze Zahl n die Fakultät n! sowohl iterativ als auch rekursiv berechnet. Die Berechnung soll in zwei verschiedenen Funktionen durchgeführt werden, nachdem der Nutzer interaktiv eine nicht-negative ganze Zahl eingegeben hat. Das Programm soll zum Vergleich die beiden Ergebnisse ausgeben.

Aufgabe 4 Harmonischer Oszillator

In dieser Aufgabe soll ein erstes kleines Simulationsprogramm geschrieben werden. Betrachten Sie einen klassischen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator, zunächst ohne Reibung und äußere Anregung:

$$\ddot{x}\left(t\right) = -\omega_0^2 x\left(t\right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{D}{m}} \tag{1}$$

Schreiben Sie ein FORTRAN- (oder C-) Programm, das die Dynamik des Systems simuliert, und zwar mit Hilfe des Verlet-Algorithmus:

$$x\left(t+\Delta t\right) = 2x\left(t\right) - x\left(t-\Delta t\right) + a\left(t\right)\Delta t^2 \tag{2}$$

$$v\left(t\right) = \frac{x\left(t+\Delta t\right) - x\left(t-\Delta t\right)}{2\Delta t} \tag{3}$$

a) Wählen Sie zunächst $\omega_0 = 1$ und $\Delta t = 0.01$, sowie als Anfangsbedingung $x\left(t=0\right) = 5$. Simulieren Sie $N = 10000$ Zeitschritte und geben Sie folgende Größen in jeweils 2-spaltigen Dateien aus: Zeitschritt/Ort, Zeitschritt/Geschwindigkeit, Zeitschritt/Energie. Stellen Sie die Ergebnisse mit gnuplot grafisch dar.

   Hinweis: Schreiben Sie ihr Programm so, dass alle von außen einstellbaren Parameter zu Beginn der Simulation aus einer Datei eingelesen werden. Das verhindert, dass für jede Parameteränderung neu kompiliert werden muss.

b) Erstellen Sie die Phasenraumtrajektorie, indem Sie in einer 2-spaltigen Datei Ort und Geschwindigkeit zum jeweils gleichen Zeitpunkt für alle Zeitschritte ausgeben. Vergleichen Sie die Trajektorien für verschiedene Werte von ω_0, $x\left(t=0\right)$ und $v\left(t=0\right)$ mit gnuplot.

   Hinweis: Mit dem Algorithmus aus Gl.(2) ist es nicht möglich, dem System eine Anfangsgeschwindigkeit zu geben. Um das dennoch tun zu können, muss der Ort beim ersten Zeitschritt nach

   $$x\left(t=0+\Delta t\right) = x\left(t=0\right) + v\left(t=0\right)\Delta t + 0.5a\left(t=0\right)\Delta t^2$$

   berechnet werden. Danach kann der Verlet-Algorithmus nach Gl.(2) angewendet werden.

c) Erweitern Sie die Bewegungsgleichung (1) durch einen Reibungsterm $-\Gamma\dot{x}\left(t\right)$ und betrachten Sie das Verhalten des Systems im Vergleich zum reibungsfreien Fall.

d) Erweitern Sie die Bewegungsgleichung zusätzlich durch eine periodische äußere Anregung $F_0 \sin\left(\omega t\right)$ und betrachten Sie das Verhalten des Systems. Simulieren Sie die Resonanzkatastrophe!