Modellierung und Simulation I **Übungsblatt 3**

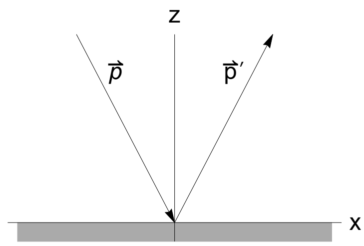
Jun.-Prof. Dr. Christian Mendl Abgabe: 21. November 2017

Aufgabe 7 (Thermische Zustandsgleichung eines idealen Gases)
Wir berechnen den Druck eines idealen Gases ausgehend von der mikroskopischen Beschreibung. In einem Kubus mit Seitenlänge L befinden sich N Punktteilchen mit Masse m im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur T.

(a) Der auf die Behälterwände ausgeübte Druck ist die durchschnittliche Kraft pro Fläche. Die Kraft wiederum berechnet sich aus der Impulsänderung pro Zeit. Verwenden Sie die Impulsänderung in z-Richtung beim Stoß eines Teilchens mit der Wand (siehe Abbildung) und die Zeitspanne für den Flug zur entgegengesetzten Wand und zurück, um die Formel

$$F_{1,z}(\vec{p}) = \frac{p_z^2}{mL}$$

für die Kraft eines Teilchens mit Impuls $\vec{p}$ auf diese Wand herzuleiten. [2 Punkte]



(b) Im thermischen Gleichgewicht hängt die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchen nur vom Impuls ab, und ist gegeben durch die Maxwell-Boltzmann Verteilung

$$f_{\mathsf{MB}}(\vec{p}) = \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\beta \frac{|\vec{p}|^2}{2m}},$$

wobei $\beta = 1/(k_{\mathsf{B}}T)$ die "inverse Temperatur", k_{B} die Boltzmann-Konstante und $|\vec{p}|$ die euklidische Norm des Vektors $\vec{p}$ bezeichnet. Berechnen Sie hiermit die durchschnittliche Kraft, also

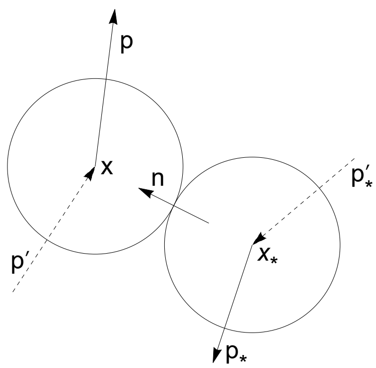
$$\langle F_{1,z} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} F_{1,z}(\vec{p})\, f_{\mathsf{MB}}(\vec{p})\, \mathrm{d}^3 p. \qquad \text{[2 Punkte]}$$

(c) Leiten Sie nun die Formel

$$P = \frac{N}{V\beta}$$

für den Druck P her, wobei $V = L^3$ das Volumen bezeichnet. [2 Punkte]

Aufgabe 8 (Boltzmann-Gleichung für idealisierte harte Kugeln)
Zwei identische Billardkugeln mit Durchmesser $d > 0$ stoßen aufeinander. Wir bezeichnen die Impulse vor der Kollision mit p', p'_*, und nach der Kollision mit p, p_* (siehe Abbildung; der Übersichtlichkeit halber lassen wir Vektorpfeile weg und setzen $m = 1$). Die Kugelmittelpunkte zum Zeitpunkt der Kollision seien x und x_*, und $n = \frac{x - x_*}{|x - x_*|}$ der Richtungsvektor zwischen den Mittelpunkten.



(a) Begründen Sie in Worten, warum die Impulsänderungen $p - p'$ bzw. $p_* - p'_*$ in Richtung n zeigen müssen. [1 Punkt]

(b) Beim idealisierten elastischen Stoß gelten Impuls- und Energieerhaltung:

$$p + p_* = p' + p'_*,$$
$$|p|^2 + |p_*|^2 = |p'|^2 + |p'_*|^2.$$

Verwenden Sie diese Erhaltungssätze, um folgende Beziehungen zwischen den Impulsen vor und nach der Kollision herzuleiten:

$$\begin{aligned} p' &= p \;\; - (n \cdot (p - p_*))\, n \\ p'_* &= p_* - (n \cdot (p_* - p))\, n, \end{aligned} \tag{1}$$

wobei $a \cdot b$ das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren a und b bezeichnet. [2 Punkte]
Hinweis: Setzen Sie $p - p' = c\, n$ mit einem noch zu bestimmenden Faktor c in die Erhaltungsgleichungen ein.

(c) Begründen Sie kurz, warum Gl. (1) auch gilt, wenn Sie die Impulse vor und nach der Kollision vertauschen, also $(p', p'_*) \leftrightarrow (p, p_*)$. [2 Punkte]

(d) Speziell für harte Kugeln lässt sich der Kollisionsoperator

$$C[f](x,p,t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2_+} (n \cdot (p - p_*)) \left(f(x,p',t) f(x,p'_*,t) - f(x,p,t) f(x,p_*,t) \right) \mathrm{d}^2 n \, \mathrm{d}^3 p_*$$

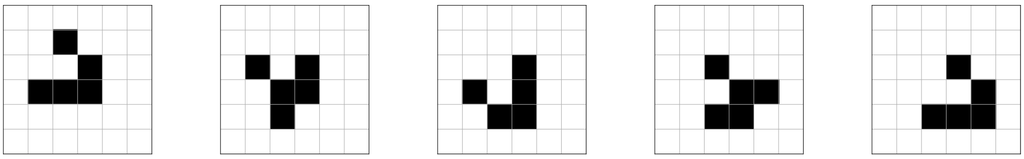
herleiten, wobei p', p'_* als Funktionen von p, p_* laut Gl. (1) aufgefasst werden und sich die Integration $\int_{S^2_+} \dots \mathrm{d}^2 n$ über die halbe Einheitskugel $S^2_+ := \{n \in S^2 \,|\, n \cdot (p - p_*) \geq 0\}$ erstreckt. Was ist der anschauliche Grund für die Bedingung $n \cdot (p - p_*) \geq 0$? [1 Punkt]

Aufgabe 9 (Zelluläre Automaten und Conway's "Game of Life")

Zelluläre Automaten sind diskrete Modelle eines räumlichen Prozesses und bestehen aus einem regulären Gitter von Zellen, die jeweils nur endlich viele Zustände annehmen können. Eines der ersten und bekanntesten Beispiele ist Conway's "Game of Life" von 1970, das man sich als abstraktes Modell für die Ausbreitung eines Organismus (z.B. Bakteriumwachstum) vorstellen kann. Jede Zelle eines zweidimensionalen Gitters befindet sich entweder im Zustand 0 oder 1, wobei 1 als "besetzt" bzw. "lebend" und 0 als "leer" bzw. "ausgestorben" interpretiert wird. Die Nachbarschaft einer Zelle besteht aus den 8 direkt angrenzenden Zellen. Die Regeln für den Übergang zum nächsten Zeitschritt (simultan für alle Zellen) lauten:

1. Überleben: jede besetzte Zelle mit zwei oder drei lebenden Nachbarn lebt weiter.
2. Aussterben: jede Zelle mit vier oder mehr bzw. einem oder keinem lebenden Nachbarn stirbt aus (Überpopulation bzw. Isolation).
3. Wachstum: Jede leere Zelle mit genau drei lebenden Nachbarn wird zu einer lebenden Zelle.

Das folgende Beispiel zeigt einen "Glider", der sich alle 4 Zeitschritte nach rechts unten bewegt:



(a) Beschreiben Sie kurz die Funktionsweise des folgenden Python-Codes zur Simulation eines Zeitschritts, wobei `P` eine NumPy-Matrix mit Einträgen vom Typ `int` ist:

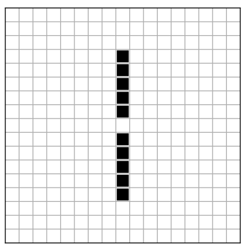
```
import numpy as np

def game_of_life_step(P):
    neighs = np.zeros(P.shape, dtype=int)
    for shift in [(-1,0), (1,0), (0,-1), (0,1), (-1,-1), (1,1), (-1,1), (1,-1)]:
        neighs += np.roll(P, shift, axis=(0,1))

    return 1 * np.logical_or(np.logical_and(P==1, neighs==2), neighs==3)
```

[2 Punkte]

(b) Bestimmen Sie die zeitliche Sequenz des rechts abgebildeten Musters, und visualisieren Sie das Muster nach 25 Zeitschritten. Was fällt Ihnen bezüglich Periodizität auf? [2 Punkte]



Hinweis: Zum Initialisieren der Populationsmatrix können Sie zunächst eine "leere" Matrix mit `P = np.zeros((17, 17), dtype=int)` erstellen und dann die besetzten Zellen auf 1 setzen, etwa `P[3, 8] = 1`, usw. Zum Visualisieren der Matrixeinträge eignet sich die Funktion `matplotlib.pyplot.spy`.

(c) Die oben beschriebenen Originalregeln werden kompakt mit B3/S23 zusammengefasst: eine leere Zelle mit genau 3 Nachbarn wird besetzt (**B**orn), und eine besetzte Zelle mit 2 oder 3 Nachbarn überlebt (**S**urvives), andernfalls stirbt die Zelle aus. Modifizieren Sie die obige Python-Funktion, so dass die "Highlife" Regel B36/S23 implementiert wird, und bestimmen Sie die entsprechende zeitliche Sequenz des Musters in (b). Ab welchem Zeitschritt weicht die Sequenz im Vergleich zu den Originalregeln ab, und welche Periodizität tritt nun auf? [2 Punkte]

(d) Freiwillige Zusatzaufgabe: Implementieren Sie den zelluläre Automaten für hexagonale Gitter.