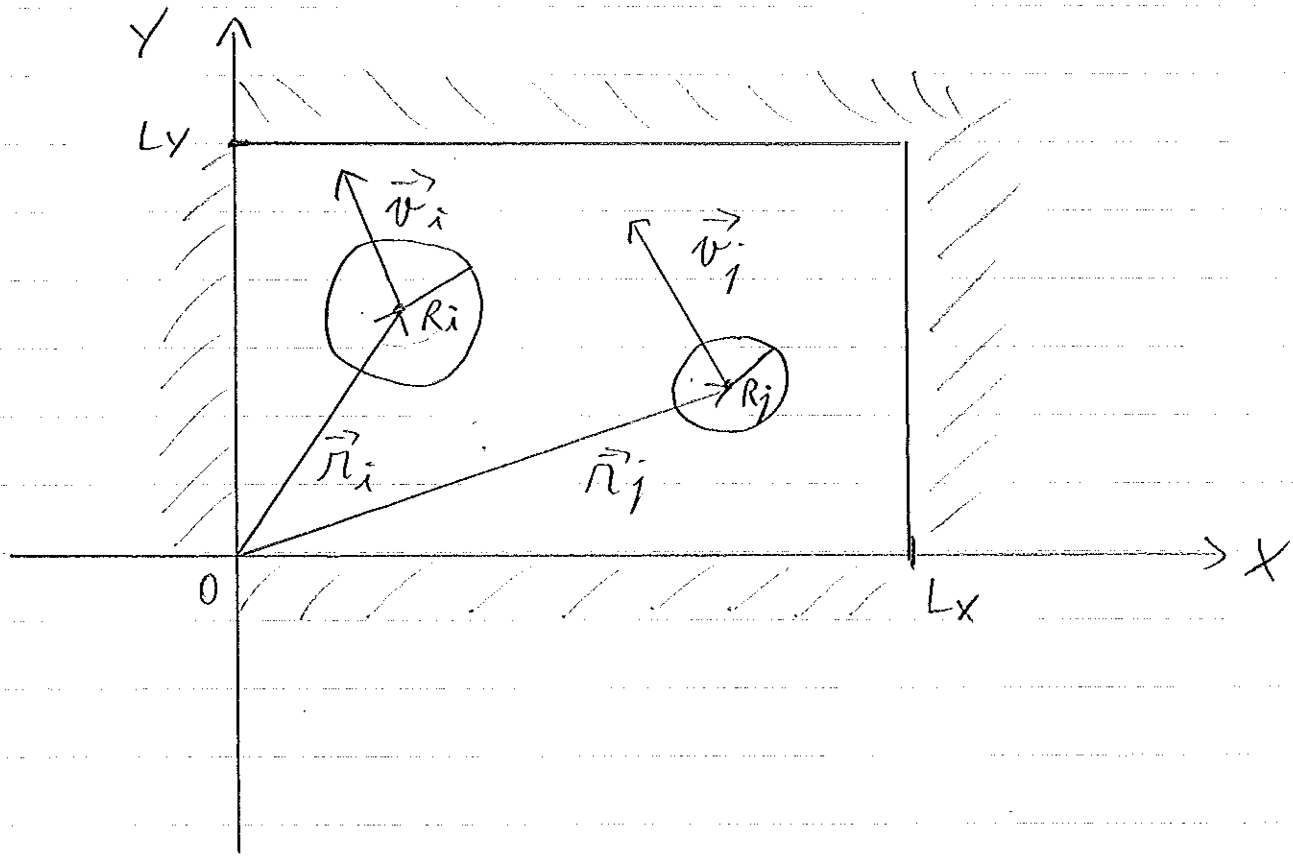
Harte Scheiben im zweidimensionalen Kasten



Kasten mit harten Wänden

$$V^{(a)}(\vec{r}_i) = \begin{cases} 0 & \text{falls } R_i < X < L_X - R_i \text{ und } R_i < Y < L_Y - R_i \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Scheiben mit hartem Kern

$$V_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| > R_i + R_j \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Physikalische Prozesse

1) Stoss einer Scheibe mit einer Wand
2) Zusammenstoss von 2 Scheiben
3) Freie Bewegung zwischen Stössen

Nur elastische Stösse ⇒ Impuls- und Energieerhaltung

Fazit: Die Dynamik ist exakt berechenbar
aber die Berechnung ist arbeitsaufwendig

⇒ Computer arbeiten lassen!

Skizze eines Programms

1. Initialisierung : $\vec{r}_i(t=0), \vec{v}_i(t=0)$
2. Relaxation (Simulation eines Zeitintervalls τ)

   → Zeitschritte

   ggf. Bahnen und Observablen speichern
3. Ensemble-Messungen (Simulation eines Zeitintervalls T)

   → Zeitschritte

   ggf. Mittelungen berechnen
4. Visualisierung

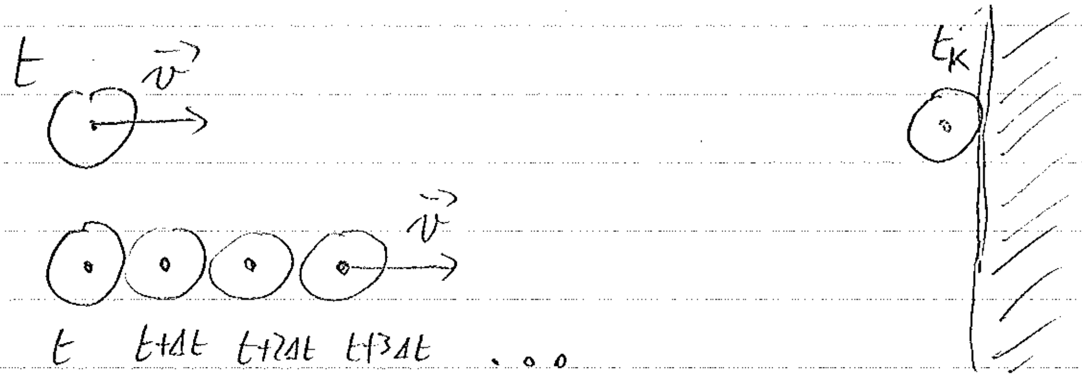
Zeitschritt: 0. Konfiguration $\{\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t)\}$ vorgegeben

1. Bestimmung der Zeit $t_K > t$ der nächsten Kollision

2. Berechnung der nächsten Konfiguration $\{\vec{r}_i(t'), \vec{v}_i(t')\}$

$$t' = \text{Minimum}\,(t_K, t + \Delta t)$$

Δt = maximale Zeitschrittlänge für "kontinuierliche Bewegung" (Visualisierung)



$$\Rightarrow \quad \Delta t \approx \text{Minimum} \left\{ \frac{2R_i}{|\vec{v}_i|} \;;\; i = 1, \ldots, N \right\}$$

Kollision gegen die Wand

Teilchen mit Position $\vec{r}_i(t) = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$ und Geschwindigkeit $\vec{v}_i(t) = \begin{pmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \end{pmatrix}$ zur Zeit t.

Zeit t_i der nächsten Kollision mit einer Wand?

Falls $v_{ix} > 0$: $\quad x_i + v_{ix} \cdot (t_{ix} - t) = L_x - R_i$

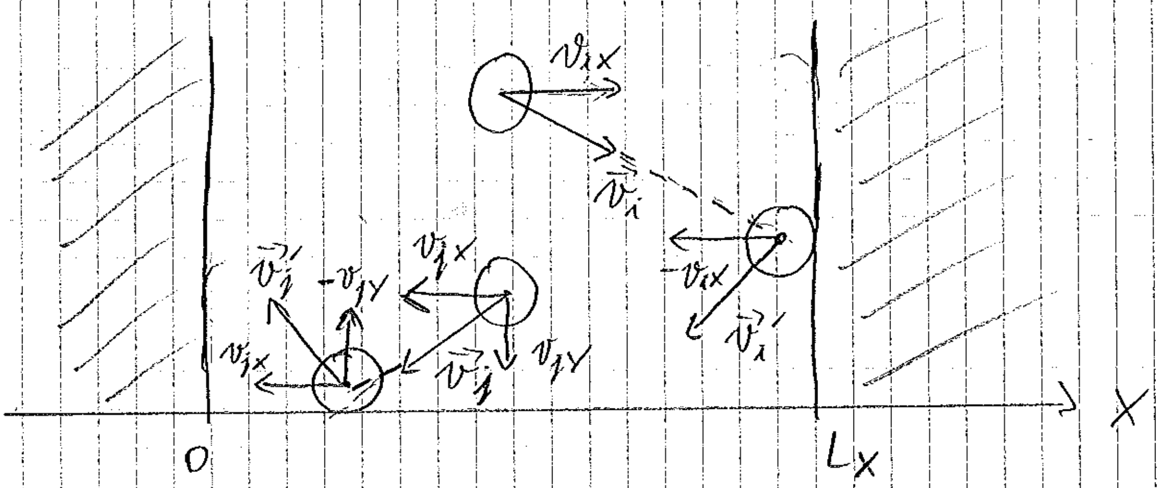
$$\Rightarrow \quad t_{ix} = t + \frac{L_x - R_i - x_i}{v_{ix}}$$

Falls $v_{ix} < 0$: $\quad x_i + v_{ix}(t_{ix} - t) = R_i$

$$\Rightarrow \quad t_{ix} = t + \frac{R_i - x_i}{v_{ix}}$$

Ähnliche Berechnung für t_{iy}

Schliesslich $t_i = \text{Minimum}(t_{ix}, t_{iy})$



Position direkt nach der Kollision

$$x_i' = x_i + v_{ix}(t'-t)$$

$$y_i' = y_i + v_{iy} \cdot (t'-t)$$

Geschwindigkeit direkt nach der Kollision

gegen eine vertikale Wand $(t_{ix} < t_{iy})$

$$v_{ix}' = -v_{ix}$$

$$v_{iy}' = v_{iy}$$

gegen eine horizontale Wand $(t_{iy} < t_{ix})$

$$v_{ix}' = v_{ix}$$

$$v_{iy}' = -v_{iy}$$

Impulsänderung der Wand : $\Delta p_x = 2 m_i v_{ix}$

bzw.

$$\Delta p_y = 2 m_i v_{iy}$$

Zusammenstoss von 2 Scheiben

Teilchen i mit Position $\vec{r}_i = \vec{r}_i(t)$ und Geschwindigkeit $\vec{v}_i = \vec{v}_i(t)$ zur Zeit t

Teilchen j mit Position $\vec{r}_j = \vec{r}_j(t)$ und Geschwindigkeit $\vec{v}_j = \vec{v}_j(t)$ zur Zeit t

Freie Bewegung bis zur Zeit $\tilde{t}$

$$\vec{r}_i(\tilde{t}) = \vec{r}_i + \vec{v}_i\,(\tilde{t} - t)$$

$$\vec{r}_j(\tilde{t}) = \vec{r}_j + \vec{v}_j\,(\tilde{t} - t)$$

Zusammenstoss zur Zeit $\tilde{t}$ $\Rightarrow$ $|\vec{r}_i(\tilde{t}) - \vec{r}_j(\tilde{t})| = R_i + R_j$

$$\Rightarrow \left(\vec{r}_i - \vec{r}_j + (\vec{v}_i - \vec{v}_j)\,(\tilde{t} - t)\right)^2 = \left(R_i + R_j\right)^2$$

$$\Rightarrow (\vec{v}_i - \vec{v}_j)^2\,(\tilde{t} - t)^2 + 2\,(\vec{r}_i - \vec{r}_j)(\vec{v}_i - \vec{v}_j)\,\tilde{t} - t - (R_i + R_j)^2 = 0$$

$$+ (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2$$

Quadratische Gleichung für $\tilde{t} - t$

$$\tilde{t}_{\pm} - t = \frac{-(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\,(\vec{v}_i - \vec{v}_j) \pm \sqrt{\Delta}}{(\vec{v}_i^{\,2} - \vec{v}_j)^2}$$

$$\text{mit } \Delta = \left[(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\cdot(\vec{v}_i - \vec{v}_j)\right]^2 - (\vec{v}_i - \vec{v}_j)^2\left[(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 - (R_i + R_j)^2\right]$$

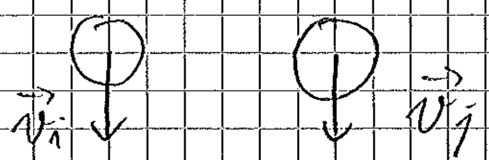
Die nächste Kollisionszeit ist

$$t_{ij} = \begin{cases} \tilde{t}_- & \text{falls } \Delta > 0 \text{ und } \tilde{t}_- - t > 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

Vollständige Interpretation :

- $\Delta < 0$ $\Rightarrow$ Zusammenstoss nicht möglich

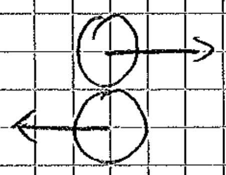
z. B.



- $\Delta = 0$ $\Rightarrow$ $\tilde{t}_+ = \tilde{t}_-$

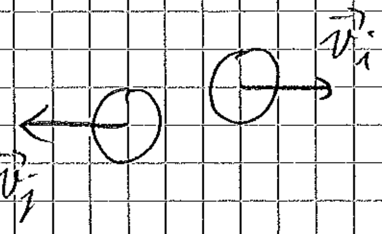
Beide Scheiben berühren sich genau in einem Punkt $\Rightarrow$ keine Wirkung

z. B.



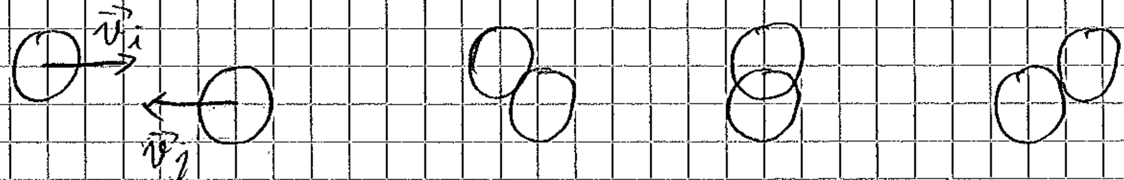
- $\Delta > 0$ und $\tilde{t}_\pm < t$ $\Rightarrow$ Zusammenstoss in der Vergangenheit

z. B.



- $\Delta > 0$ und $\tilde{t}_\pm > t$ $\Rightarrow$ Zusammenstoss in der Zukunft

z. B. :



Zeit t Zeit $\tilde{t}_-$ $\tilde{t}_- <$ Zeit $< \tilde{t}_+$ Zeit $\tilde{t}_+$

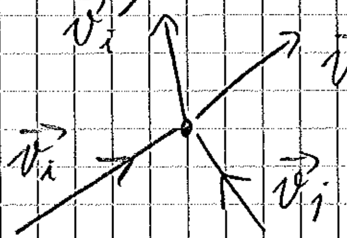
- $\Delta > 0$ und $\tilde{t}_+ > t > \tilde{t}_-$ $\Rightarrow$ Beide Scheiben überlappen sich

Diese Situation sollte nie auftreten !

Positionen direkt nach einem Zusammenstoss

$$\vec{r}_{i,j}(t') = \vec{r}_{i,j}(t) + \vec{v}_{i,j}(t) \cdot (t'-t)$$

Geschwindigkeiten direkt nach einem Zusammenstoss



4 Unbekannte $\vec{v}_i', \vec{v}_j'$

Elastischer Zusammenstoss =>

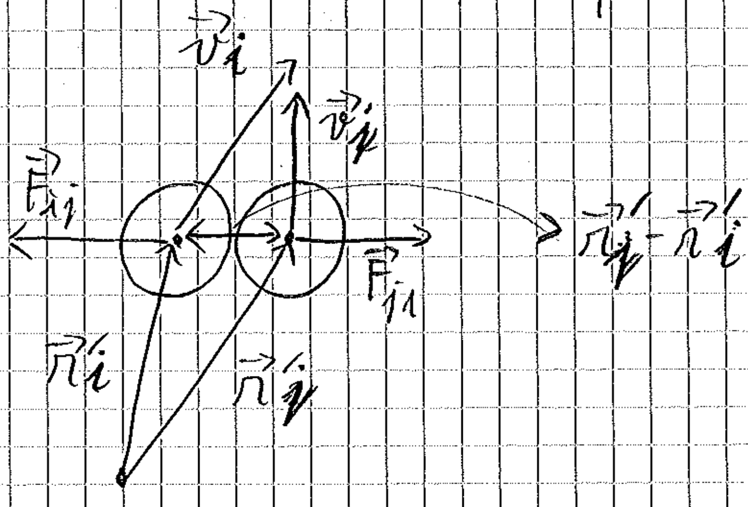
=> Energieerhaltung $\frac{m_i}{2}\vec{v}_i^{\,2} + \frac{m_j}{2}\vec{v}_j^{\,2} = \frac{m_i}{2}\vec{v}_i'^{\,2} + \frac{m_j}{2}\vec{v}_j'^{\,2}$

Impulserhaltung $m_i \vec{v}_i + m_j \vec{v}_j = m_i \vec{v}_i' + m_j \vec{v}_j'$

=> 3 Erhaltungsgrössen

zusätzliche Information : Kraft $\perp$ Oberfläche

$\Leftrightarrow$ Kraft // Verbindungslinie $\vec{r}_i' - \vec{r}_j'$



Folgerung: Nur Geschwindigkeitskomponenten parallel zu $\vec{r}_i' - \vec{r}_j'$ werden geändert

Zerlegung $\quad \vec{v}_{i,j} = \vec{v}_{i,j\parallel} + \vec{v}_{i,j\perp}$

$$\vec{v}_{i,j}' = \vec{v}_{i,j\parallel}' + \vec{v}_{i,j\perp}'$$

Lineare Algebra $\Rightarrow \quad \vec{v}_{i,j\parallel} = \frac{\vec{v}_{i,j\parallel}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)$

$$\vec{v}_{i,j\perp} = \vec{v}_{i,j} - \vec{v}_{i,j\parallel}$$

Geschwindigkeitserhaltung $\Rightarrow \quad \vec{v}_{i,j\perp}' = \vec{v}_{i,j\perp}$

Energie- und Impulserhaltung

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{m_i}{2} v_{i\parallel}^2 + \frac{m_j}{2} v_{j\parallel}^2 = \frac{m_i}{2} v_{i\parallel}'^2 + \frac{m_j}{2} v_{j\parallel}'^2 \\ m_i v_{i\parallel} + m_j v_{j\parallel} = m_i v_{i\parallel}' + m_j v_{j\parallel}' \end{cases}$$

wie ein eindimensionales Stoßproblem

Lösung: $\quad v_{i\parallel}' = \frac{m_i - m_j}{m_i + m_j} v_{i\parallel} + \frac{2 m_j}{m_i + m_j} v_{j\parallel}$

$$v_{j\parallel}' = \frac{m_j - m_i}{m_i + m_j} v_{j\parallel} + \frac{2 m_i}{m_i + m_j} v_{i\parallel}$$