1. Implementierung (einfach / langsam)

A.) Gespeicherte Daten:

Aktuelle Konfiguration $\{(\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t)\} \in \mathbb{R}^{4N}$

B) Zeitschritt

- Berechnung aller Kollisionszeiten zwischen Scheibenpaaren t_{ij} $\Rightarrow \sim \frac{N(N-1)}{2}$ Operationen
- Berechnung aller Wandkollisionszeiten t_i $\Rightarrow \sim N$ Operationen
- Berechnung der neuen Konfiguration $\{\vec{r}_i(t'), \vec{v}_i(t')\}$ $\Rightarrow \sim N$ Operationen

C) Rechenaufwand

Minimaler Speicherbedarf $\sim N$

Rechenzeit für 1 Zeitschritt $\sim N^2$

Allerdings findet höchstens eine Kollision pro Zeitschritt statt. Wenigstens $\frac{N}{2}$ Zeitschritte müssen durchgeführt werden bevor alle Scheiben wenigstens einmal wechselwirkt haben. Wenn wir ein festes Zeitintervall T simulieren, nimmt die Anzahl der Kollisionen mit der Teilchenzahl zu (wenigstens linear, möglicherweise schneller).

$\Rightarrow$ Rechenaufwand für eine Simulation

- Rechenzeit $\sim N^3$
- Speicherbedarf $\sim N^2$ (für Visualisierung)

(Aber nur $\sim N$ muss gleichzeitig im Hauptspeicher sein. Der Rest kann auf Festplatten ausgelagert werden)

2. Implementierung (komplexer aber schneller)

A) Gespeicherte Daten:

Aktuelle Konfiguration $\{(\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t)\} \in \mathbb{R}^{4N}$

Alle zukünftigen Kollisionszeiten t_{ij} and t_i
und die nächste Kollisionszeit für jede Scheibe $t_i^{(1)}$
$\Rightarrow \sim N^2$ Zeiten

B) Initialisierung

Berechnung aller Zeiten $t_{ij}, t_i, t_i^{(1)}$

$\Rightarrow$ einmalig $\sim N^2$ Operationen

C) Zeitschritt

- Bestimmung von $t' = \mathrm{Min}\left(\{t_i^{(1)}\} \text{ and } t+\Delta t\right)$

  $\Rightarrow \sim N$ Operationen

- Berechnung der neuen Konfiguration

  $\{(\vec{r}_i(t'), \vec{v}_i(t')\} \Rightarrow \sim N$ Operationen

- Aktualisierung der Kollisionszeiten $t_{ij}, t_i, t_i^{(1)}$

  - Für einen Zusammenstoss zwischen Scheiben k und l müssen nur die Zeiten t_{ik} und t_{il} $\forall i$ und t_l, t_k neu berechnet werden. Anschliesslich müssen die Zeiten $t_i^{(1)}$ aktualisiert werden

  - $\Rightarrow \sim N$ Operationen

  - Für einen Stoss der Scheibe k gegen eine Wand, müssen nur t_{ik}, $i = 1, .., N$ und t_k neu berechnet werden. Dann müssen auch die Zeiten $t_i^{(1)}$ aktualisiert werden

    $\Rightarrow \sim N$ Operationen

D) Rechenaufwand

Minimaler Speicherbedarf $\sim N^2$

Rechenzeit für 1 Zeitschritt $\sim N$

für eine Simulation : Zeit $\sim N^2$

Speicher $\sim N^2$

Initialisierung Die Wahl hängt von der Anwendung ab

Positionen : - geordnet (Gitter, geometrische Form)

- zufällig, üblicherweise gleichmässig verteilt im Kasten oder ein Teil davon

Geschwindigkeiten :

- Alle Scheiben bis auf 1 im Ruhezustand (Anwendungen: Tests, Zeitumkehrinvarianz, Dämpfung, ...)
- Eine grosse schwere Scheibe im Ruhezustand, viele kleine leichte Scheiben im thermischen Gleichgewicht (Anwendung: Brownsche Bewegung)
- Zufällige Verteilung ausserhalb des Gleichgewichts

z.B. identische Norm $|\vec{v}_i(t=0)| = v$
aber isotrop verteilte Richtungen $\vec{v}_i / v$

Verfahren: Gleichmässig verteilte Zufallszahlen $\phi_i \in [0, 2\pi)$

$$\Rightarrow \begin{cases} v_{ix}(t=0) = v \cos(\phi_i) \\ v_{iy}(t=0) = v \sin(\phi_i) \end{cases}$$

(Anwendungen: Streben ins Gleichgewicht, Relaxation)

- Zufällige Verteilung im Gleichgewicht

Maxwell - Geschwindigkeitsverteilung (2D)

$$f(\vec{v}) = \frac{m}{2\pi k_B T} e^{-m\vec{v}^2/2k_BT}$$

Verfahren: Gleichmässig verteilte Zufallszahlen
$\alpha_i, \beta_i \in [0, 1)$

$$\Rightarrow \begin{cases} v_{ix}(t=0) = \sqrt{\frac{k_BT}{m}} \sqrt{-2\ln(1-\alpha_i)} \cos(2\pi \beta_i) \\ v_{iy}(t=0) = \frac{k_BT}{m} \sqrt{-2\ln(1-\alpha_i)} \sin(2\pi \beta_i) \end{cases}$$

(Anwendung: Ensemble - Berechnungen)

Observablen und Verteilungen $(N \gg 1)$

1) Temperatur

Kinetische Energie $E_K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} m_i \vec{v}_i^{\,2}$

Das ist eine Konstante der Bewegung
(Mikrokanonisches Ensemble ← geschlossenes System)

Im thermischen Gleichgewicht gilt der Gleichverteilungssatz (2D-Fall)

$$\frac{E_K}{N} = k_B T$$

So die Energie pro Scheibe entspricht der Temperatur [in Einheiten $k_B = 1$].

(Mikrokan. Ensemble = Kanonisches Ensemble)

2) Druck

Der Druck ist die Kraft, die die Scheiben gegen eine Wand üben, geteilt durch die Wandlänge. Wegen der diskreten Kollision müssen wir über ein Zeitintervall ΔT mitteln

$$P_\alpha(t) = \frac{1}{\Delta T} \sum_{\text{Kollisionen in } [t, t+\Delta T]} \Delta p_\alpha$$

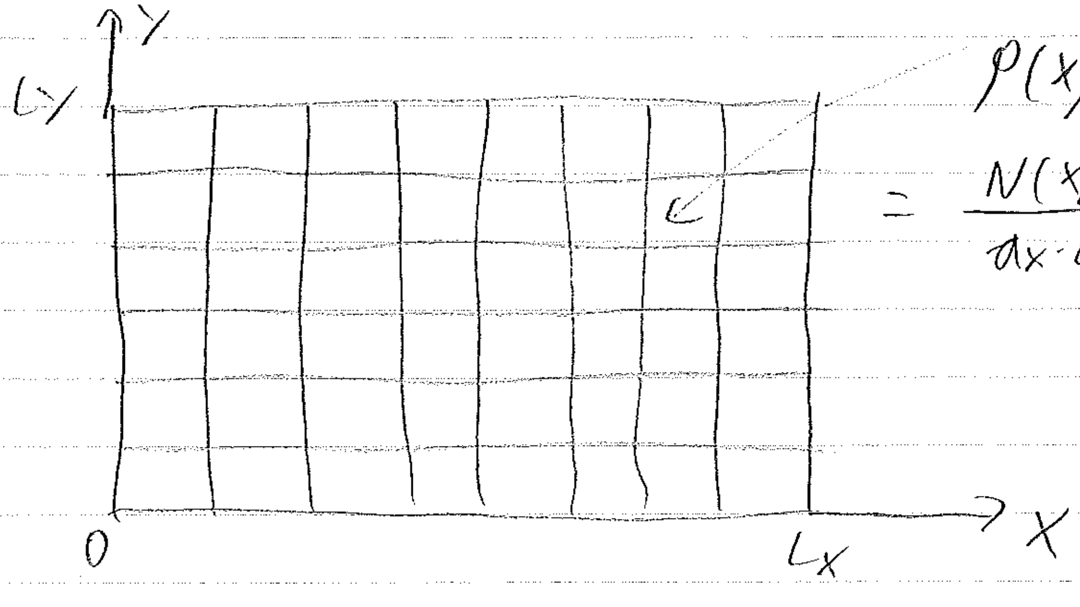
wobei $\alpha = X, Y$ und Δp_α auf Seite 6 definiert ist.

Für $\Delta T \lesssim \tau_R$ (Relaxationszeit) fluktuiert $P_\alpha(t)$ sehr stark. Für $\Delta T \gg \tau_R$ sollte $P_\alpha(t)$ relativ stabil sein. Ausserdem sollte er gleich für alle Wände werden.

3) Dichte

Die Fläche des Kastens wird in $n_X \cdot n_Y$ Rechtecken mit Kantenlängen $a_X = L_X / n_X$ und $a_Y = L_Y / n_Y$ unterteilt. Man berechnet die Anzahl der Scheiben, die in jedem Rechteck sind (Position des Zentrums der Scheibe).

Wie der Druck fluktuiert die Dichte stark für kurze Zeiten. Wenn sie über ein Zeitintervall $\Delta T \gg \tau_R$ gemittelt wird, sollte sie relativ zeitunabhängig und gleichmässig werden



$$\rho(X,Y) = \frac{N(X,Y)}{a_X \cdot a_Y}$$

4) Geschwindigkeitsverteilung

Man berechnet die Anzahl $F(n)$ der Scheiben mit einer Geschwindigkeit

$$v_i = |\vec{v}_i|$$

im Intervall $[(n-1)\Delta v, n\Delta v]$ für $n = 1, .., n_M$.

Im thermischen Gleichgewicht ergibt die Maxwell-Verteilung (2D-Fall)

$$f(v) = \frac{m}{k_B T} \, v \, e^{-mv^2/2k_BT}$$

So $$\frac{F(n)}{N\Delta v} \approx f\left(\left(n-\tfrac{1}{2}\right)\Delta v\right) \quad \text{für } n = 1, 2, \ldots$$

oder genauer

$$\frac{F(n)}{N} \approx \int_{(n-1)\Delta v}^{n\Delta v} f(v)\,dv = e^{-\frac{m\Delta v^2}{2k_BT}(n-1)^2} - e^{-\frac{m\Delta v^2}{2k_BT}n^2}$$

Die Anzahl der Intervalle n_M sollte so gross wie möglich sein, aber $n_M << N$. Δv sollte so gewählt, dass der Anteil der Scheiben mit $|\vec{v}_i| > n_M \Delta v$ ist vernachlässigbar

$$\Rightarrow \quad e^{-\frac{m\Delta v^2}{2k_BT}n_M^2} << \frac{1}{n_M} \iff \frac{m\Delta v^2}{2k_BT} >> \frac{\ln n_M}{n_M^2}$$

5) Mittlere Stosszeit

$$\tau_S^{-1}(t) = \frac{1}{\Delta T} \cdot \left[\text{Anzahl der Zusammenstösse zwischen Scheibenpaaren in } [t, t+\Delta T] \right]$$

Wie andere Observablen sollte diese Stosszeit für kurze Zeiten ΔT stark fluktuieren aber einen relativen stabilen Wert für $\Delta T \gg \tau_R$ erreichen.

N.B. Das System kann erst relaxiert haben wenn alle Scheiben wenigstens einmal wechselwirkt haben
$\Rightarrow \quad \tau_R \sim N \tau_S$

Schlussfolgerung

- Es ist ziemlich einfach die Dynamik harter Scheiben in einem geschlossenen Kasten zu simulieren
- Dieses System reicht um mehrere Begriffe der statistischen Physik zu veranschaulichen.