Mathematische Modellierung
SS19, Übungsblatt 11

Ausarbeitung bis 1. Juli 2020

1. Seien n Teilchen in einem Behählter gegeben, wobei ein Teilchen nur eine der möglichen Energien $E_k > E_{k-1} > \cdots E_2 > E_1 \geq 0$ annehmen kann. Die Anzahl der Teilchen mit Energie E_i ist m_i, und die gesamte Energie ist E, d.h. es gibt die Einschränkungen,

$$\mathbf{1}^\top \boldsymbol{m} = n, \quad \boldsymbol{m}^\top \boldsymbol{E} = E$$

wobei $\mathbf{1} = \{1, \ldots, 1\}$, $\boldsymbol{m} = \{m_1, \ldots, m_k\}$ und $\boldsymbol{E} = \{E_1, \ldots, E_k\}$. Sei $\hat{E} = E/n$ die durchschnittliche Energie mit

$$E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^\top \boldsymbol{E}/k.$$

Innerhalb dieser Einschränkungen seien alle energetischen Zuteilungen von Teilchen 1 bis n gleich wahrscheinlich. Sei $\boldsymbol{X} = \{X_i\}_{i=1}^k$ ein Zufallsvektor, wobei $X_i = 1$ gilt wenn ein zufälliges Teilchen Energie E_i hat und sonst gilt $X_i = 0$. Angenommen sind $\{\boldsymbol{X}_j\}_{j=1}^n$ alle gleich verteilt wie $\boldsymbol{X}$, und für $\hat{E}$ fixiert und E, n ausreichend groß sind sie unabhängig. Der Zufallsvektor $\boldsymbol{Y}^{(n)} = \boldsymbol{X}_1 + \cdots \boldsymbol{X}_n$ ist verteilt wie

$$P(\boldsymbol{Y}^{(n)} = \boldsymbol{m}) = \begin{cases} \dfrac{1}{N} \begin{pmatrix} n! \\ \boldsymbol{m}! \end{pmatrix} & \begin{matrix} \mathbf{1}^\top \boldsymbol{m} = n \\ \boldsymbol{m}^\top \boldsymbol{E} = E, \end{matrix} \\ 0, & \text{sonst}, \end{cases} \qquad N = \sum_{\mathbf{1}^\top \boldsymbol{m} = n, \boldsymbol{m}^\top \boldsymbol{E} = E} \begin{pmatrix} n! \\ \boldsymbol{m}! \end{pmatrix}.$$

(a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die folgende Tabelle mit $\boldsymbol{E} = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k$, $\Delta E = \frac{n}{k-1}$ und $E = n$ zu erstellen,

Makrozustände	$\boldsymbol{E} = \{E_j\}_{j=1}^k$	# Mikrozustände
$\{M = i\}_{i=1}^N$:	$\{\boldsymbol{m}_i\}_{i=1}^N = \{m_{i,j}\}_{i=1,j=1}^{N\ \ k}$	$\{K_i\}_{i=1}^N$, $K_i = \binom{n!}{\boldsymbol{m}_i!}$
Erwartungen:	$\bar{\boldsymbol{m}} = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{m}_i K_i / N$	N

wie z.B. für $n, k = 5$,

Makrozustände	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	# Mikrozustände
$M = 1$:	1	4	0	0	0	5
2:	4	0	0	0	1	5
3:	3	0	2	0	0	10
4:	3	1	0	1	0	20
$M = 5$:	2	2	1	0	0	30
Erwartungen:	2.50	1.43	0.71	0.29	0.07	Gesamt: 70

(b) Mit diesem Code stellen Sie die Erwarungsverteilung, die wahrscheinlichste Verteilung und die Boltzmann Verteilung grafisch dar, um ihre Ähnlichkeit für großes n zu zeigen.

(c) Verwenden Sie den Code, um die Unabhängigkeitsbedingungen $P(X_{i,j} = \alpha \ \&\ X_{i',j'} = \omega) = P(X_{i,j} = \alpha) \cdot P(X_{i',j'} = \omega)$, $\alpha, \omega \in \{0, 1\}$, zu kontrollieren.

Gelöst vom Herrn Morina.

2. Brownsche Bewegung wird simuliert. Ein gegebenes Teilchen kann sich in einem dünnen Rohr innerhalb eines Zeitintervalls der Länge Δt nach links oder nach rechts bewegen oder stehenbleiben. Für einen solchen Schritt sei δ eine Zufallsvariable mit

$$P(\delta = -1) = \alpha, \quad P(\delta = 0) = 1 - 2\alpha, \quad P(\delta = +1) = \alpha,$$

wobei $\alpha \in (0, \frac{1}{2}]$. Seien $\{X_1(t; \Delta t), X_2(t; \Delta t), \dots\}$ unabhängige und gleich verteilte Zufallsvariablen, wobei $X_i(t; \Delta t)$ die Position eines $i$ten Brownschen Teilchens zur Zeit t darstellt. Seien $\{\delta_{i,k}\}$ unabhängig und gleich verteilt wie δ. Beim $k$ten Schritt des $i$ten Teilchens gilt

$$X_i(k \cdot \Delta t; \Delta t) = X_i((k-1) \cdot \Delta t; \Delta t) + \sqrt{D\Delta t/\alpha} \cdot \delta_{i,k}, \quad i, k \in \mathbb{N}, \quad X_i(0; \Delta t) = 0.$$

   (a) Schätzen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Position eines dieser Teilchen ab.

   (b) Führen Sie eine Monte-Carlo Simulation von solchen Teilchen durch, und vergleichen Sie die sich ergebende Teilchenverteilung mit der Dichte aus Teil (a).

   Gelöst vom Herrn Pichlbauer.

3. Sei $\rho(x, t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass ein Teilchen in Brownscher Bewegung sich an der Stelle x in einem dünnen Rohr zur Zeit t befindet. Angenommen für ein $D > 0$ erfüllt diese Dichte die Diffusionsgleichung mit $\Omega = (-1, +1)$ und $T > 0$,

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \rho_t(x,t) & = & D\rho_{xx}(x,t), & (x,t) \in \Omega \times (0,T) \\ \rho_x(x,t) & = & 0, & (x,t) \in \partial\Omega \times [0,T] \\ \rho(x,0) & = & \rho_0(x), & (x,t) \in \Omega \times \{0\} \end{array} \right. \qquad \int_\Omega \rho(x,t)dx = 1$$

wobei ρ_0 die anfängliche Dichte darstellt.

   (a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die Dichte $\rho(x, t)$ für $\rho_0(x) = (1 + \cos(\pi x))/2$ numerisch zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der exakten Lösung

$$\rho(x, t) = (1 + e^{-D\pi^2 t} \cos(\pi x))/2.$$

   (b) Verwenden Sie Ihren Code, um die numerische Lösung für

$$\rho_0(x) = \left\{ \begin{array}{rl} 1/(2\epsilon), & x \in [-\epsilon, +\epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{array} \right. \qquad \epsilon \in (0, 1)$$

   zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der Funktion

$$\rho^\epsilon(x, t) = \frac{1}{4\epsilon} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) \right].$$

   Bestimmen Sie, ob ρ^ϵ eine exakte Lösung ist.

   Gelöst von Frau Trampitsch.

4. Sei $\psi(x, t)$ die komplexe Wellenfunktion, wobei $|\psi|^2 = \rho(x, t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte darstellt, dass ein Teilchen mit Masse m unterwegs in einer räumlichen Dimension sich an der Stelle x zur Zeit t befindet. Angenommen erfüllt die Wellenfunktion die Schrödinger Gleichung mit $\Omega = (-1, +1)$ und $T > 0$,

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \dfrac{\hbar}{\imath} \dfrac{\partial \psi}{\partial t} & = & \dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, & (x,t) \in \Omega \times (0,T) \\ \psi(x,t) & = & 0, & (x,t) \in \partial\Omega \times [0,T] \\ \psi(x,0) & = & \psi_0(x), & (x,t) \in \Omega \times \{0\} \end{array} \right. \qquad \int_\Omega |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

wobei $|\psi_0|^2$ die anfängliche Dichte darstellt.

(a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ für Anfangswerte

$$\psi_0(x) = \omega\tilde{\psi}_0(x), \quad 1/\omega^2 = \int_\Omega |\tilde{\psi}(x)|^2 dx$$

$$\tilde{\psi}_0(x) = \exp\left(-\frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - \imath\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi\imath x}{\lambda}\right) - \exp\left(-\frac{1}{\sigma^2}\right), \quad \sigma \in \mathbb{R}_+, 1/\lambda \in \mathbb{N}$$

numerisch zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der Funktion

$$\phi(x,t) = \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2\imath t\hbar/m}} \exp\left(\frac{2\pi\imath}{\lambda}\left(x - \frac{\pi t\hbar}{\lambda m}\right) - \frac{\pi^2\sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t\hbar/(\lambda m) - \imath\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2\imath t\hbar/m}\right).$$

Bestimmen Sie, ob $\phi(x,t)$ eine exakte Lösung ist.

(b) Zeigen Sie, mit $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$ gilt

$$\rho(x,t) = |\phi(x,t)|^2 = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4\hbar^2t^2/m^2}} \exp\left(-\frac{2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4\hbar^2t^2/m^2}\right).$$

Zeigen Sie weiters, mit $\hbar/m \to 0$ und $\lambda \to 0$, während $v = 4\pi\hbar/(m\lambda)$ konstant bleibt, ergibt sich

$$\rho(x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die einer reisenden Welle mit Geschwindigkeit v entspricht.

Gelöst vom Herrn Pichlbauer.