

Serie 4

Abgabedatum: Di./Mi. 20.3/21.3 in den Übungsgruppen oder im HG J68

Koordinatoren: Luc Grosheintz, HG J 46, luc.grosheintz@sam.ethz.ch

Webpage: <http://metaphor.ethz.ch/x/2017/fs/401-1662-10L/>

1. Konvergenzraten und Adaptive Quadratur

a) Verwenden Sie folgende Quadraturregeln

- zusammengesetzte Trapezregel
- zusammengesetzte Simpsonregel

um das Integral

$$I = \int_0^1 f_i(x) dx$$

von $f_i(x)$ auf N Teilintervallen oder mit n Funktionsauswertungen zu berechnen. (Die genauen Werte von N und n stehen im Template.) Die beiden Funktionen sind gegeben durch

$$f_1(x) := \frac{1}{1 + 5x^2} \quad f_2(x) := \sqrt{x}.$$

Berechnen Sie den Fehler und plotten Sie die Konvergenzraten. Welche Methode verwendet man sinnvollerweise?

Hinweis: Verwenden Sie das Template `quadrature.py`

2. Homogen geladenes Quadrat in kartesischen Koordinaten

Betrachten Sie ein quadratisches Gebiet in der x - y -Ebene welches eine konstante elektrische Ladungsdichte ρ_0 aufweist

$$\rho(x, y) = \begin{cases} \rho_0, & (x, y) \in [-1, 1]^2 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Das elektrostatische Potential φ an einem Punkt (x_p, y_p) ausserhalb des geladenen Quadrats ist dann durch Integration über die geladene Region gegeben

$$\varphi(x_p, y_p) = \frac{\rho_0}{4\pi\epsilon_0} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{\sqrt{(x-x_p)^2 + (y-y_p)^2}} dx dy.$$

Der Einfachheit halber setzen Sie $\frac{\rho_0}{4\pi\epsilon_0} = 1$.

Implementieren Sie die Trapez- und die Simpson-Regel in zwei Dimensionen und berechnen Sie dann $\varphi(x_p, y_p)$ für $x_p = y_p = 2, 10, 20$. Schauen Sie sich den Fehler genau an. Was ist erstaunlich daran? Wie erklären sie sich dieses Verhalten?

Hinweis: Verwenden Sie das Template `potential.py`

Siehe nächstes Blatt!

3. Monte-Carlo-Quadratur in mehreren Dimensionen

Wir betrachten das Integral

$$I = \int_{\underline{x} \in [0,1]^d} |x_1 + \dots + x_d|^2 d\underline{x},$$

- a) Implementieren Sie eine Python-Funktion `mcquad(f, d, N)`, die das obige Integral mit der Monte-Carlo-Methode mit $N = 10^k$ Zufallsvektoren numerisch berechnet.

Hinweis: Verwenden Sie das Template `mc.py`

- b) Verwenden Sie diese Funktion mit $k = 6$ und $d = 10$ für $M = 100$ verschiedene Experimente z_i . Bestimmen Sie Mittelwert und

$$\tilde{\sigma}_M = \sqrt{\frac{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M z_i^2 - \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M z_i\right)^2}{M-1}}.$$

Welche Aussage lässt sich daraus über die Genauigkeit der Approximation ableiten?

- c) Bestimmen und printen Sie das Vertrauensintervall für $d = 2, \dots, 10$ und $k = 6$ und $M = 100$. Plotten Sie ein Histogramm der einzelnen Experimente z_i .
- d) Für $d = 1, \dots, 10$, plotten Sie den Mittelwert von $M = 100$ Experimente gegen die Anzahl Zufallsvektoren $N = 10^k$ mit $k = 1, \dots, 7$. Welche Konvergenzordnung (Fehler gegen Anzahl Funktionsauswertungen) hat die MC-Methode? Wann ist MC asymptotisch besser als die Simpsonregel?

Bitte wenden!

4. Kernaufgabe: Kompressionsfaktor eines realen Gases

Modellierung der Physik

Der Kompressionsfaktor eines Gases ist definiert als

$$Z := \frac{pV}{nRT}$$

wobei p der Druck (Nm^{-2}), V das Volumen (m^3), T die Temperatur (K) und n die Stoffmenge (mol) ist. Die universelle Gaskonstante R hat den Wert $8.314462 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$. Für ein ideales Gas gilt $Z = 1$. Bei einem realen Gas entwickelt man Z in eine Reihe

$$Z = 1 + B_2 \left(\frac{n}{V} \right) + B_3 \left(\frac{n}{V} \right)^2 + \dots$$

wobei jeder Term mit Faktor B_i die Interaktion zwischen i Gasteilchen darstellt was als Ursache für die Abweichung vom idealen Verhalten interpretiert werden kann. Weil Kollisionen zwischen vielen Teilchen gleichzeitig selten sind, genügt es Zwei- und allenfalls noch Dreiteilcheninteraktionen zu berücksichtigen. Es gilt für den Koeffizient

$$B_2 = \int_0^\infty f(r) dr = \int_0^\infty \left(1 - \exp\left(-\frac{U(r)}{k_B T}\right) \right) r^2 dr$$

wobei das Potential $U(r)$ die Interaktion zwischen zwei Atomen modelliert. Wir verwenden hier das Lennard-Jones Potential

$$U(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right).$$

Aufgabenstellung

Berechnen Sie den Koeffizienten B_2 aus seiner Definition. Es soll die Monte-Carlo Technik zur Integration verwendet werden. Wir betrachten das Gas CO_2 mit $\varepsilon = 140 \text{ cm}^{-1}$ und $\sigma = 0.3943 \text{ nm}$. Die Boltzmann-Konstante ist $0.693 \text{ cm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

- Plotten Sie das Potential $U(r)$ gegen r auf dem Intervall $[0.2, 2] \text{ nm}$.
- Plotten Sie den Integranden $f(r)$ auf dem selben Intervall und für 20 verschiedene Temperaturen in Bereich $[150, 550] \text{ K}$.
- Das Integral geht über das gesamte Intervall $[0, \infty[$. Für die Monte-Carlo Methode benötigt man aber einen endlichen Integrationsbereich. Untersuchen Sie deshalb analytisch das Verhalten von $f(r)$ für $r \rightarrow 0$ sowie $r \rightarrow \infty$.
- Berechnen Sie den Wert von B_2 mit $N = 500000$ Samplepunkten in $[0.01, 10] \text{ nm}$ für eine Temperatur von 300 K und printen Sie das Vertaruensintervall mit $M=200$ Simulationen aus.