



## Übungen zur Computerphysik, WS 2007/08

### 6. Übung

(Besprechung am 05.12.2007)

#### **Aufgabe 18** „*markov disks*“

Implementieren Sie den Algorithmus „markov disks“ für 4 disks:  
Benutzen Sie wieder die Box aus Aufgabe 16 ohne periodische RB. Starten Sie von einer „legalen“ Anfangskonfiguration. Erzeugen Sie mit den Bedeckungsdichten aus Aufg. 16 wieder Histogramme für die auf die x-Achse projizierte Dichte und vergleichen Sie diese mit denen aus Aufg.17 .

#### **Aufgabe 19** „*direct disks-any*“

Implementieren Sie den Algorithmus „direct disks-any“ um die rejection rate des Algorithmus „markov disks“ zu bestimmen. Ändern Sie den Algorithmus so ab, dass Sie die Verwendung der Histogramme vermeiden. Sortieren Sie die N Ausgaben von  $\eta_{max}$  so, dass  $\eta_{max,1} \leq \dots \leq \eta_{max,N}$ . Bestimmen Sie die rejection rate des Algorithmus „direct disks“ direkt aus dem sortierten Vektor  $\{\eta_{max,1}, \dots, \eta_{max,N}\}$

#### **Aufgabe 20** „*gamma distribution*“

Erzeugen Sie die Gamma - Verteilung  $\Gamma_N(x)$  mit dem naive - Algorithmus der Teil des „direct-piston-particles“ Algorithmus ist und mit dem Algorithmus „gamma cut“. Erzeugen Sie aus langen Durchläufen beider Programme Histogramme, um zu überprüfen, dass die berechneten Daten auch wirklich die Gamma Verteilung  $\Gamma_N(x)$  und  $\Gamma_N^{cut}(x, x_{cut})$  ergeben. Histogramme haben einen freien Parameter, die Anzahl von Zwischenstellen bzw Balken. Erzeugen Sie für den gleichen Datensatz ein Histogramm mit wenig und eins mit vielen Stützstellen und überlegen Sie sich Vor - und Nachteile der jeweiligen Wahl. Danach folgt eine Datenanalyse ohne Histogramme:

Erzeugen Sie die Daten  $\{x_1, \dots, x_N\}$ , sortieren diese dann in aufsteigender Ordnung  $\{\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_k, \dots, \tilde{x}_N\}$  ( vgl Aufg. 18 ). Zeigen Sie, dass der Plot  $k/N$  gegen  $\tilde{x}_k$  direkt mit dem Integral der betrachteten Verteilungsfunktion verglichen werden kann.

Hinweis: Schlagen Sie Informationen zu dem Kolmogorov-Smirnov Test nach.

#### **Aufgabe 21** „*naive - piston - particles*“

Implementieren Sie den Algorithmus „naive - piston - particles“ und „naive - piston - particles (patch)“ und vergleichen Sie diese Markov Chain Programme mit dem Programm zu „direct-piston-particles“. Sollten die Programme gleiche Ergebnisse liefern, oder sind Unterschiede zu erwarten? Festigen Sie Ihre Überlegungen mit „hoch-präzisen“ Berechnungen des mittleren Box-Volumens  $\langle L \rangle$  und Histogrammen von  $\pi(L)$  aller 3 Programme. Verallgemeinern Sie den direct-sampling Algorithmus auf den Fall 2 dimensionaler hard-disks mit periodischen RB ( vgl Alg. „direct - p - disks“ ) Plotten Sie die Zustandsgleichung ( mittleres Volumen gegen Druck ) um Abweichungen vom idealen Gasgesetz ablesen zu können.