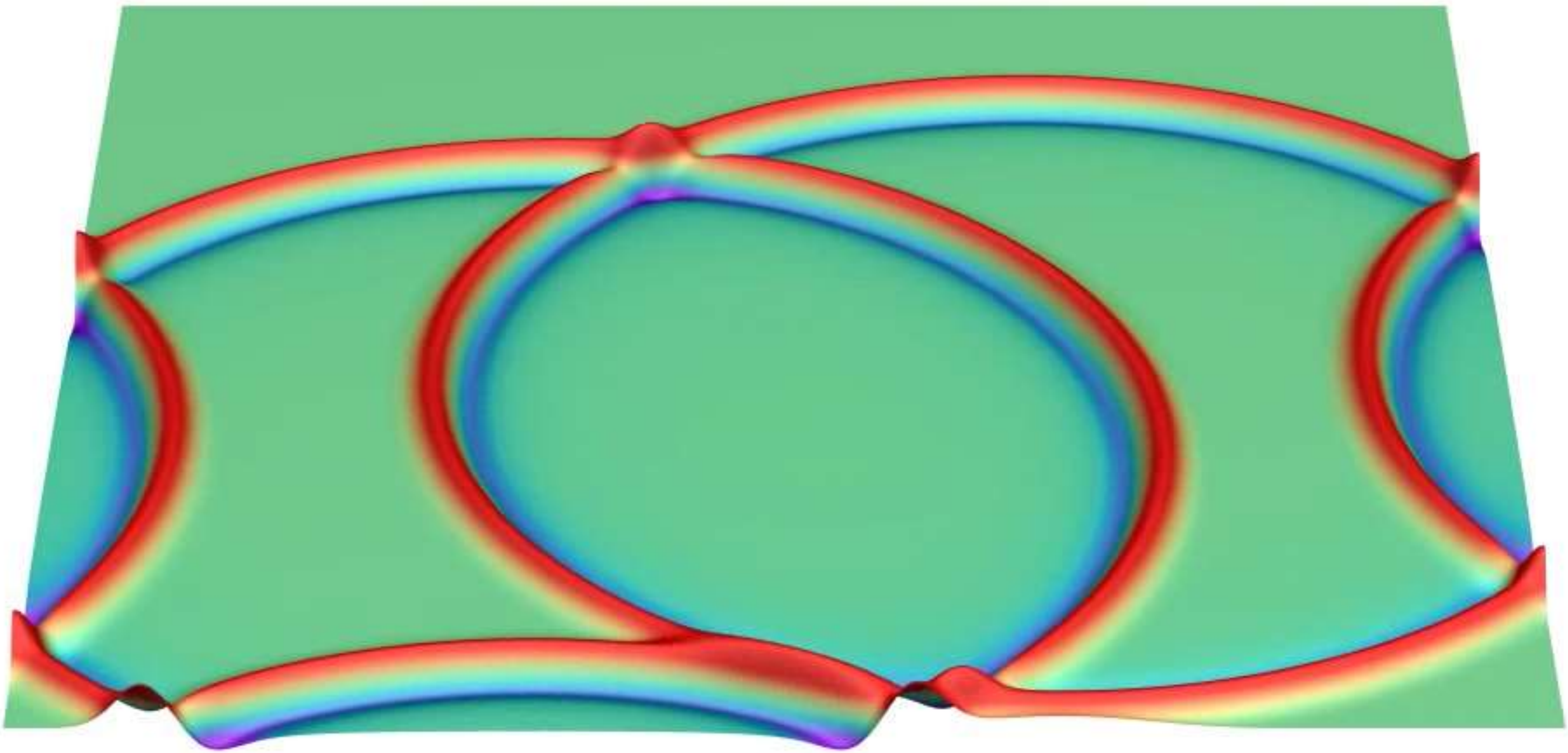
Zelluläre Automaten in der Physik



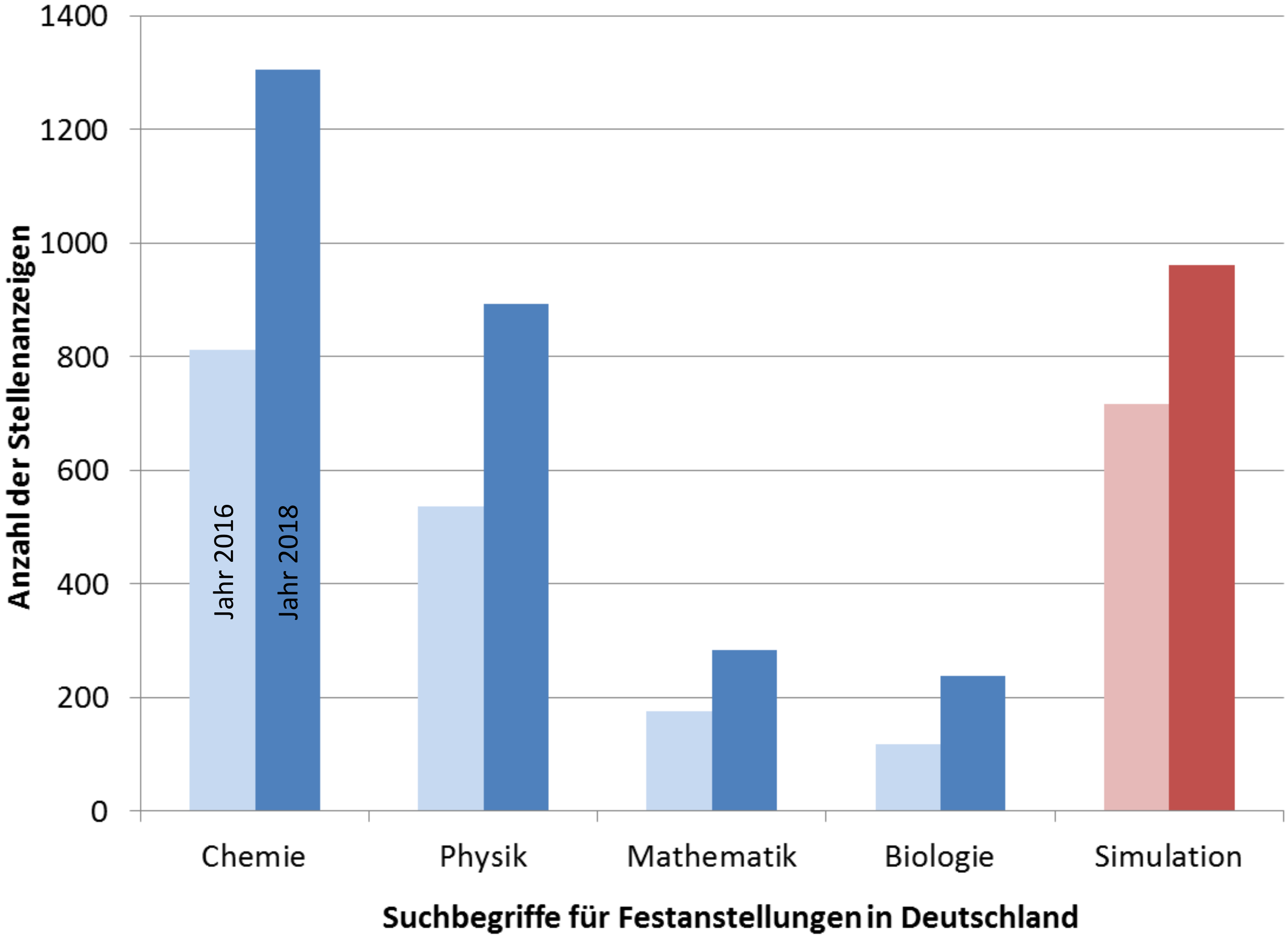
Prof. Dr. Oliver Natt

Technische Hochschule Nürnberg
Fakultät für Angewandte Mathematik, Physik und Allgemeinwissenschaften

Gliederung

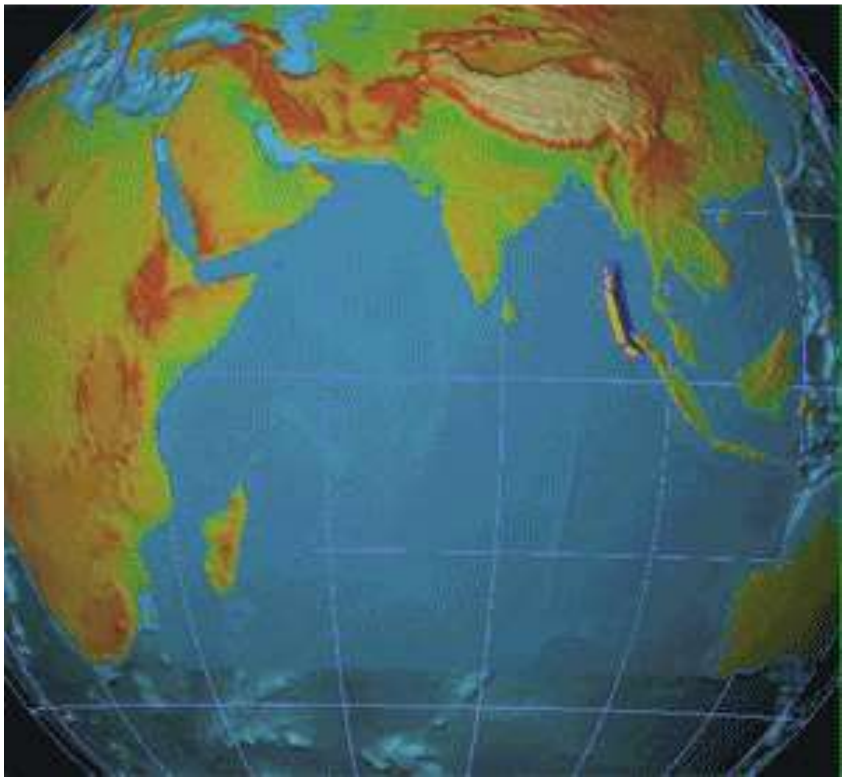
TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

Simulationen sind in Industrie und Forschung sehr wichtig.

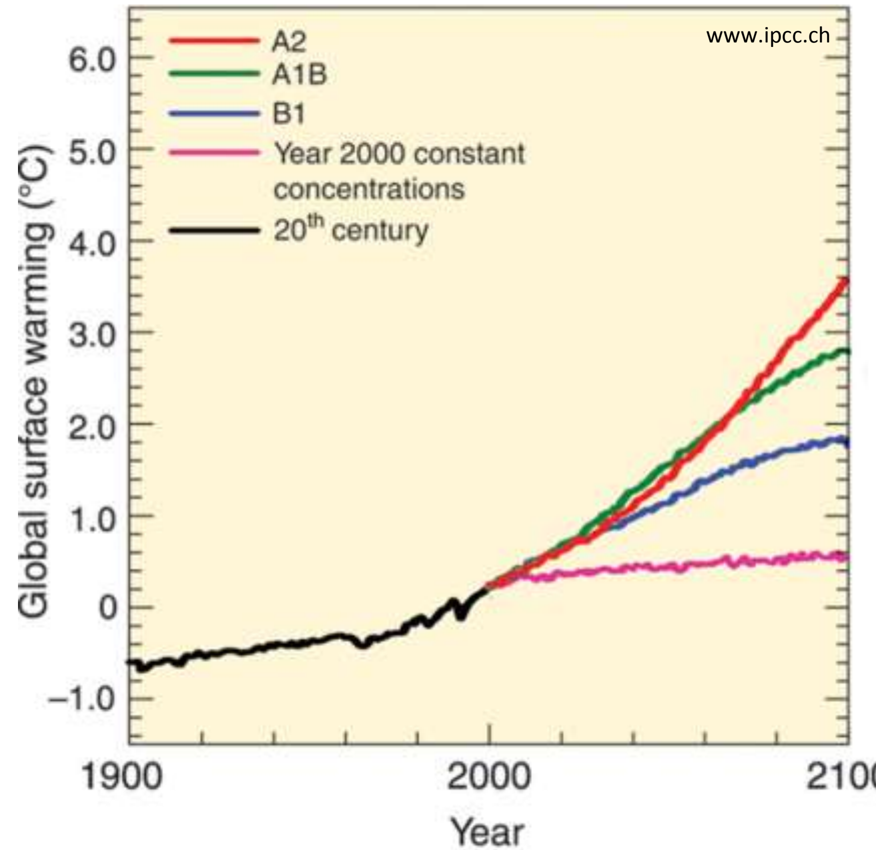


* Suche bei Stepstone am 27.07.2016 und 24.07.2018. Eingeschränkt auf die Berufsfelder „Ingenieure und technische Berufe“ und „Naturwissenschaften und Forschung“

Simulationen sind gesellschaftlich relevant.



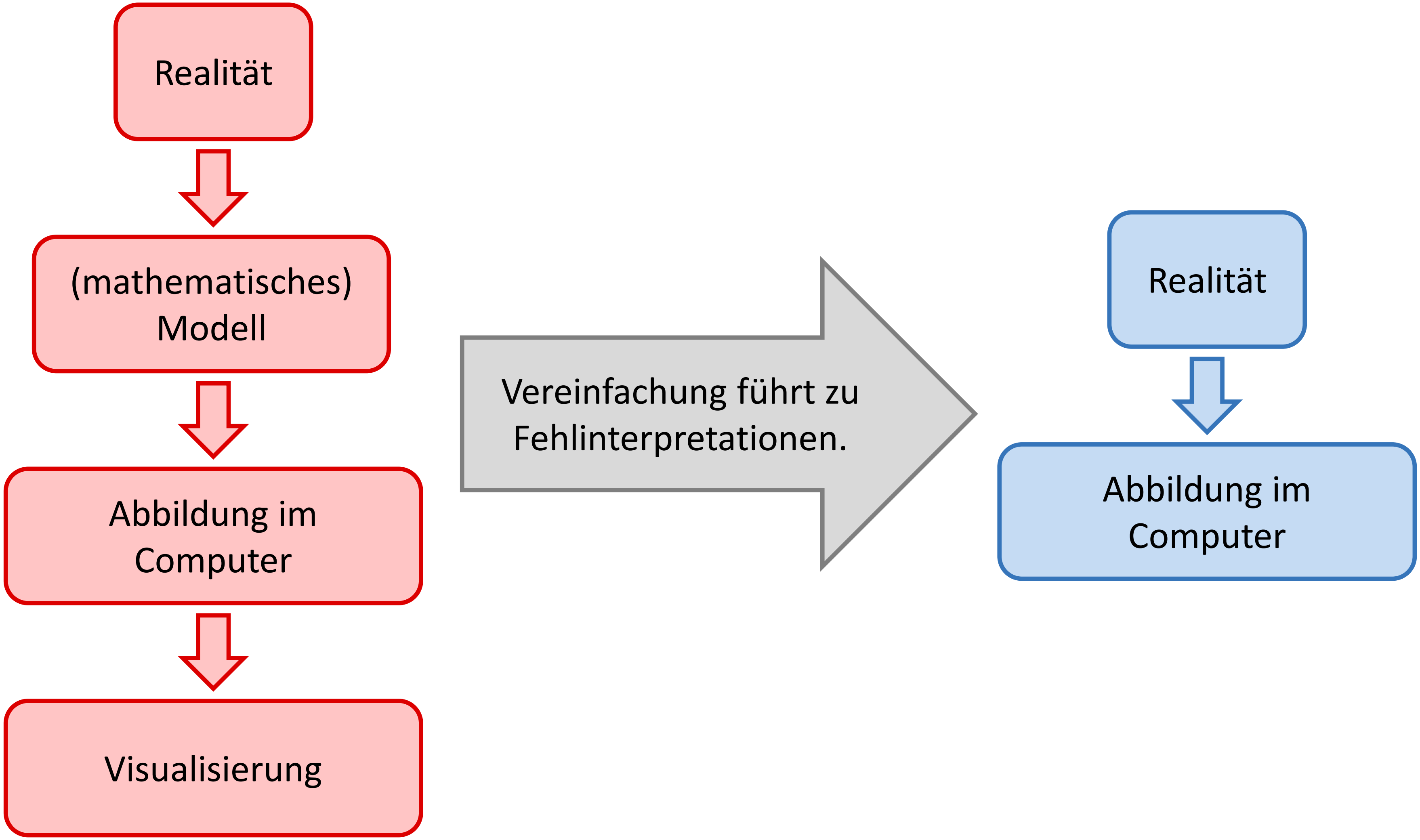
commons.wikimedia.org/wiki/File:2004_Indonesia_Tsunami.gif



Menschen fehlinterpretieren Simulationen häufig.

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

Sicht des Simulationsexperten | **Sicht des Betrachters**



Gliederung

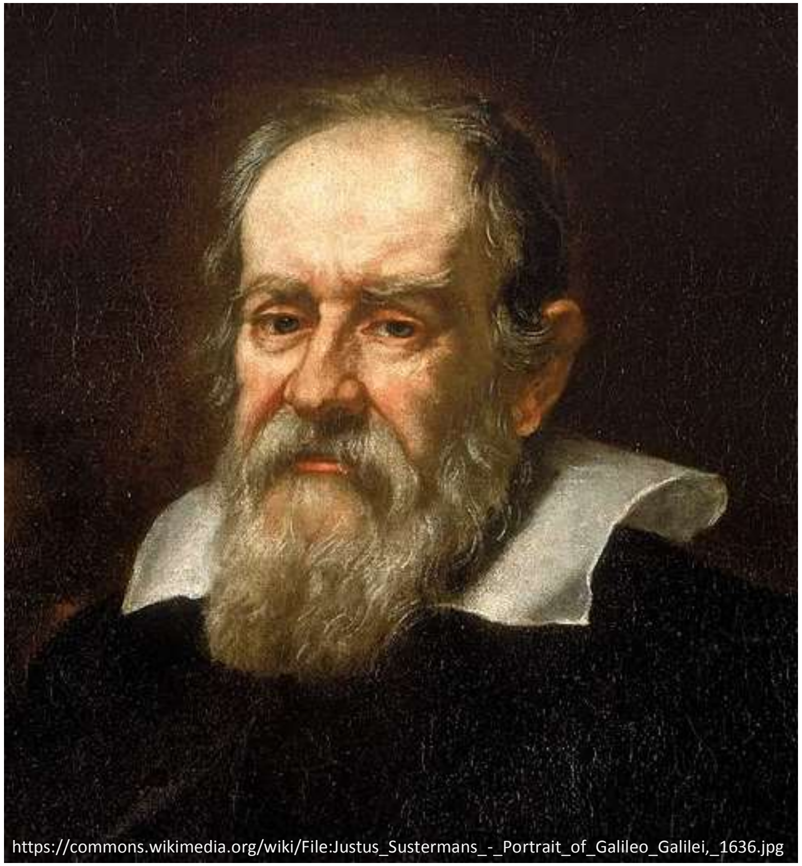
TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

Was ist Physik?

https://de.wikipedia.org

Die Physik ist eine Naturwissenschaft, die grundlegende Phänomene der Natur untersucht. Um deren Eigenschaften und Verhalten anhand von quantitativen Modellen und Gesetzmäßigkeiten zu erklären, befasst sie sich insbesondere mit Materie und Energie und deren Wechselwirkungen in Raum und Zeit.

Modellbildung in der Physik



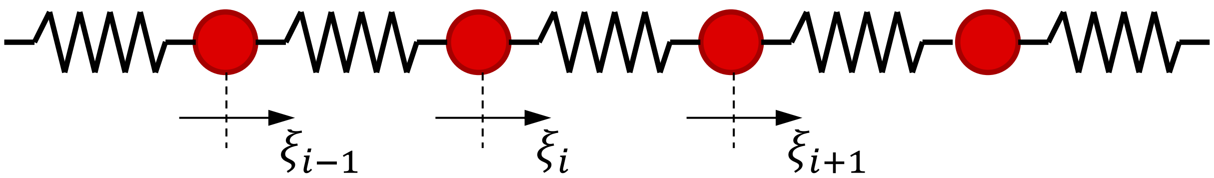
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Justus_Sustermans_-_Portrait_of_Galileo_Galilei,_1636.jpg

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isaac_Newton,_English_School,_1715-20.jpg

Primat der Physik: Modelliert wird mit Differentialgleichungen.

Beispiel einer Modellbildung: Wellenausbreitung

- Mechanische Modellvorstellung: Masse-Feder-Kette



Anschaulich begreifbar durch Experimente

- Mathematische Beschreibung liefert ein System gekoppelter Differentialgleichungen.

$$m\ddot{\xi}_i = D(\xi_{i+1} - 2\xi_i + \xi_{i-1})$$

- Grenzübergang $\Delta x \to 0$ liefert eine partielle Differentialgleichung:

$$\frac{\partial^2 \xi(x,t)}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \xi(x,t)}{\partial x^2} = 0$$

- Lösung der Differentialgleichung analytisch oder durch
- Simulation mittels Diskretisierung in Raum- und/oder Zeit.

Mathematisch abstrakt und anspruchsvoll

Beispiel einer Modellbildung: Wellenausbreitung

- Mechanische Modellvorstellung: Masse-Feder-Kette

Anschaulich begreifbar durch Experimente

- Frage: Kann man das anschauliche mechanische Modell nicht direkter im Computer abbilden, um es zu simulieren?
- Antwort: Ja, das geht zum Beispiel mit zellulären Automaten.

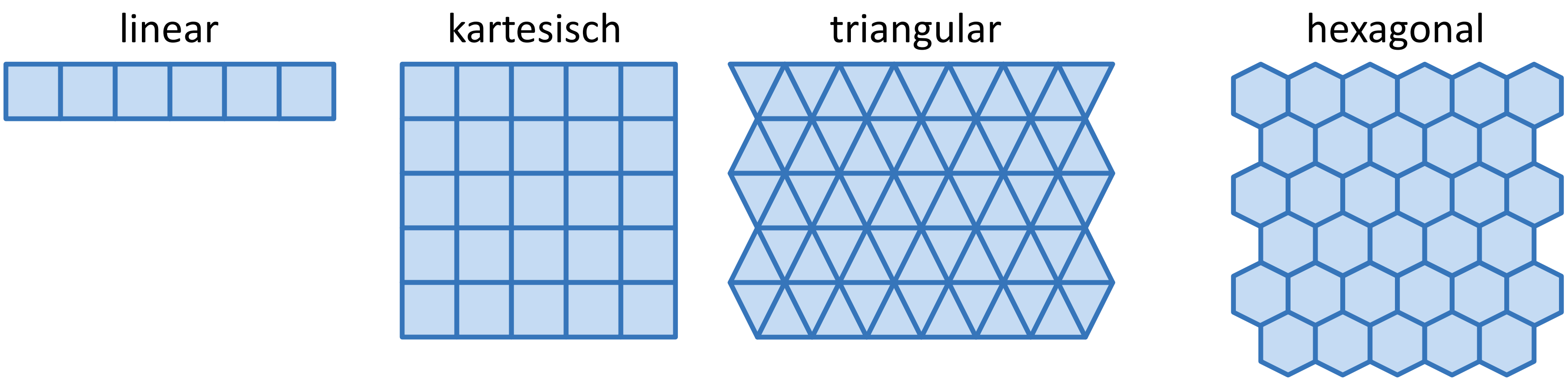
Gliederung

Was ist ein zellulärer Automat?

Ein zellulärer Automat besteht aus …

1. einem ***Zellraum***,

   - Der Zellraum besteht aus einer endlichen Anzahl von Zellen.
   - Die Zellen sind 1-dimensional, 2-dimensional oder 3-dimensional angeordnet.



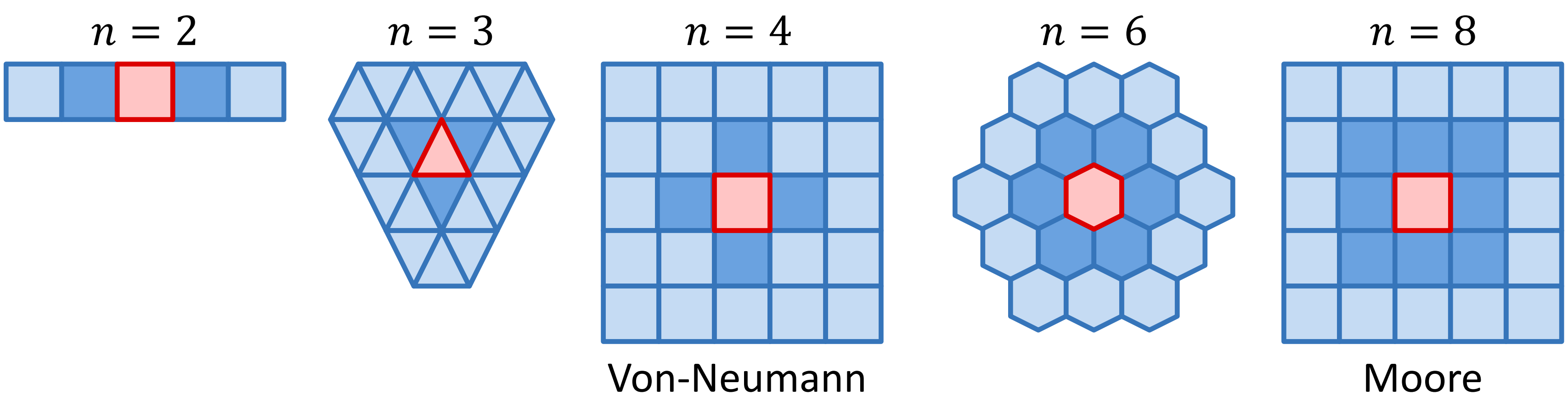
   - Zelluläre Automaten mit linearer oder kartesischer Zellanordnung lassen sich besonders einfach implementieren.

Was ist ein zellulärer Automat?

Ein zellulärer Automat besteht aus …

2. einer ***Nachbarschaftsbeziehung***,

   - Jeder Zelle wird eine bestimmte Anzahl von Nachbarn zugeordnet.



   - Am Rand des Gitters setzt man die Nachbarschaftsbeziehung meistens periodisch fort.

Was ist ein zellulärer Automat?

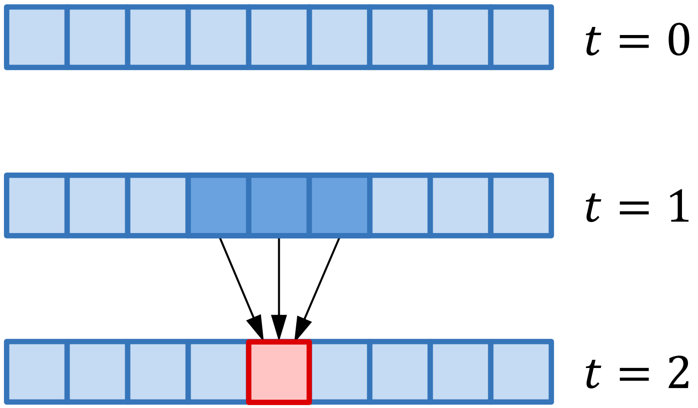
Ein zellulärer Automat besteht aus …

3. einer ***Zustandsmenge***,
   - Jeder Zelle kann eine endliche Anzahl von Zuständen annehmen.
   - Meist wird der Zustand durch eine Menge von Zahlen abgebildet.
   - Die Menge der Zustände ist häufig klein.

Was ist ein zellulärer Automat?

Ein zellulärer Automat besteht aus …

4. einer ***Zeitentwicklungsregel***,
   - Von einem Zeitschritt zum nächsten ändert sich der Zustand einer Zelle.
   - Der neue Zustand hängt nur vom alten Zustand der Zelle und vom alten Zustand der Nachbarn ab.
   - Die Zeitentwicklungsregel kann auch eine stochastische Komponente enthalten.



Was ist ein zellulärer Automat?

Ein zellulärer Automat besteht aus …

5. einer ***Anfangszustand,***

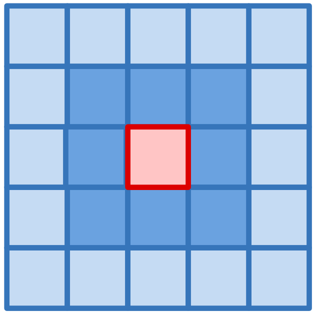
   - Zum Zeitpunkt $t = 0$ muss der Zellraum mit Elementen aus der Zustandsmenge initialisiert werden.

   - Die Initialisierung kann zufällig oder nach einer bestimmten Regel erfolgen.

Gliederung

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

Beispiele: Conway‘s Game of Life (1970)



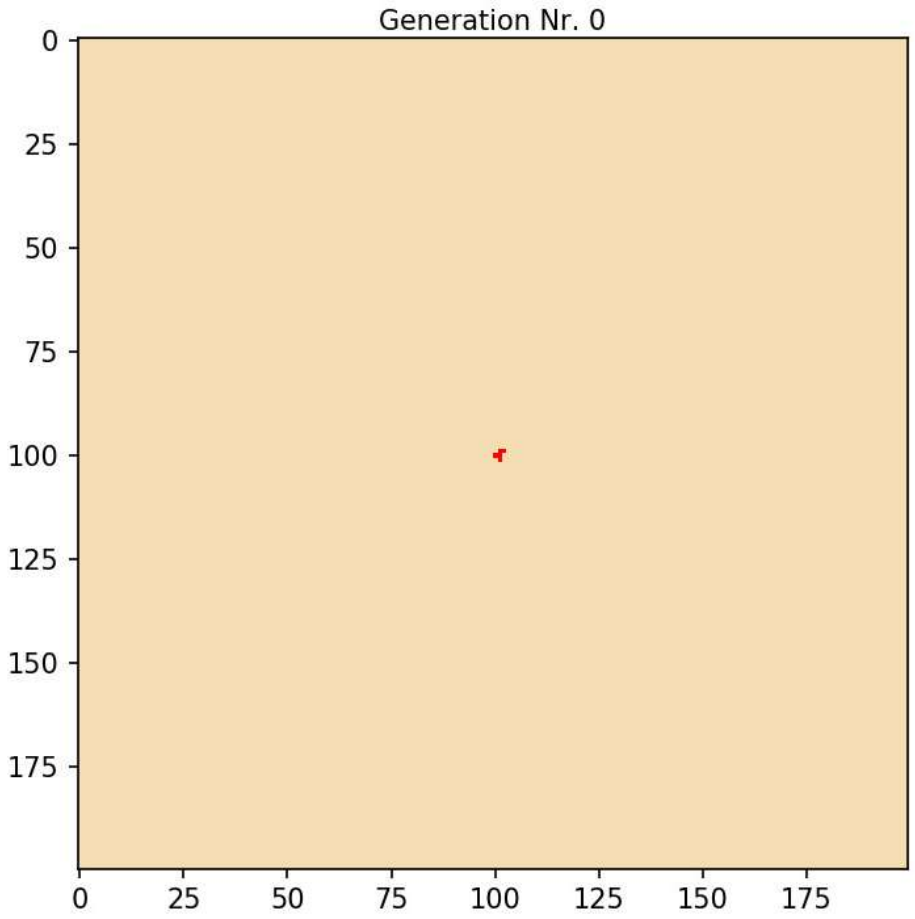
1. Kartesischer Zellraum
2. Moore-Nachbarschaft
3. Zustandsmenge:

   0 = tote Zelle

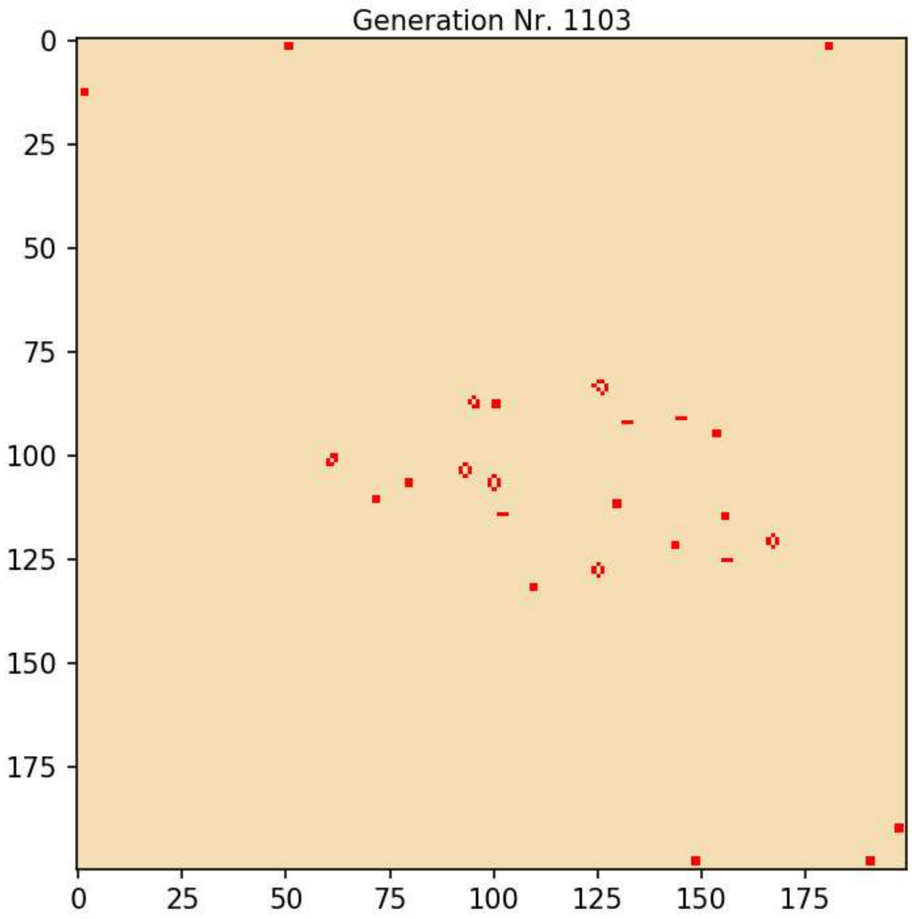
   1 = lebende Zelle
4. Zeitentwicklungsregel:
   - Eine Zelle mit mehr als drei lebenden Nachbarn stirbt (Überbevölkerung).
   - Eine Zelle mit exakt drei lebenden Nachbarn wird lebendig.
   - Eine Zelle mit exakt zwei lebenden Nachbarn behält ihren Zustand bei.
   - Eine Zelle mit weniger als zwei lebenden Nachbarn stirbt (Vereinsamung).
5. Anfangszustand:
   - Je nach Anfangszustand ergeben sich aus der einfachen Regel erstaunlich komplexe Verhaltensweisen.

Game of Life: Einfache Regeln – komplexes Verhalten

Anfangszustand

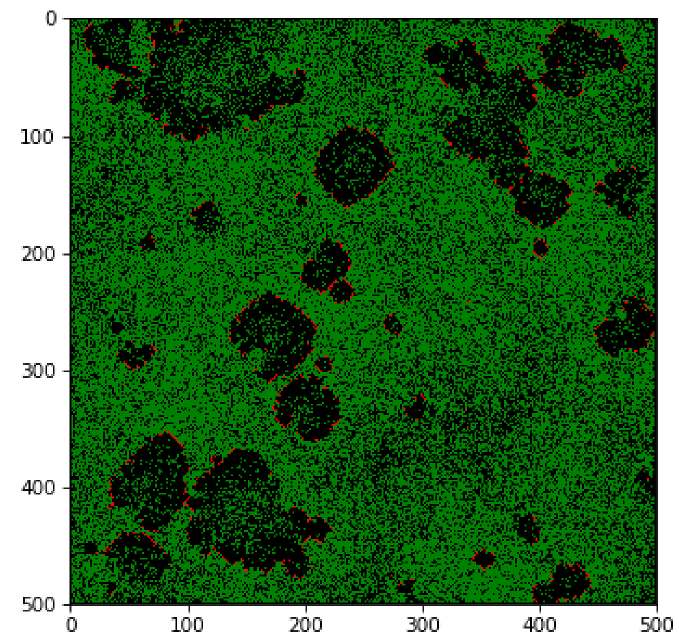


Periodisches Verhalten
nach 1103 Zeitschritten



Weitere Beispiele Zellulärer Automaten

- Wator-Modell (1984)
  - Beschreibt eine Populationsdynamik aus einer Räuber- und einer Beutespezies.
- Waldbrandmodelle (Drossel et al.: 1992)
  - Beschreiben das Ausbreitungsverhalten von Waldbränden mit stochastischen zellulären Automaten.



- Nagel-Schreckenberg-Modell (1993)
  - Beschreibt die Bewegung von Autos auf einer Straße.
  - Es erklärt das Auftreten von spontanen Stauwellen, die entgegengesetzt zur Fahrtrichtung der Autos wandern
- Evakuierungsmodelle (Burstedde et al.: 2001):
  - Beschreiben das Ausströmen von Menschen aus einem Raum mit einer oder mehreren Türen.
  - C. Burstedde, K. Klauck, A. Schadschneider, und J. Zittartz. Simulation of pedestrian dynamics using a two-dimensional cellular automaton. Physica A: 295, 507 (2001).

Gliederung

Populäre Zelluläre Automaten in der Physik

- Zelluläre Automaten für das Ising-Modell (Vichiniac: 1984)

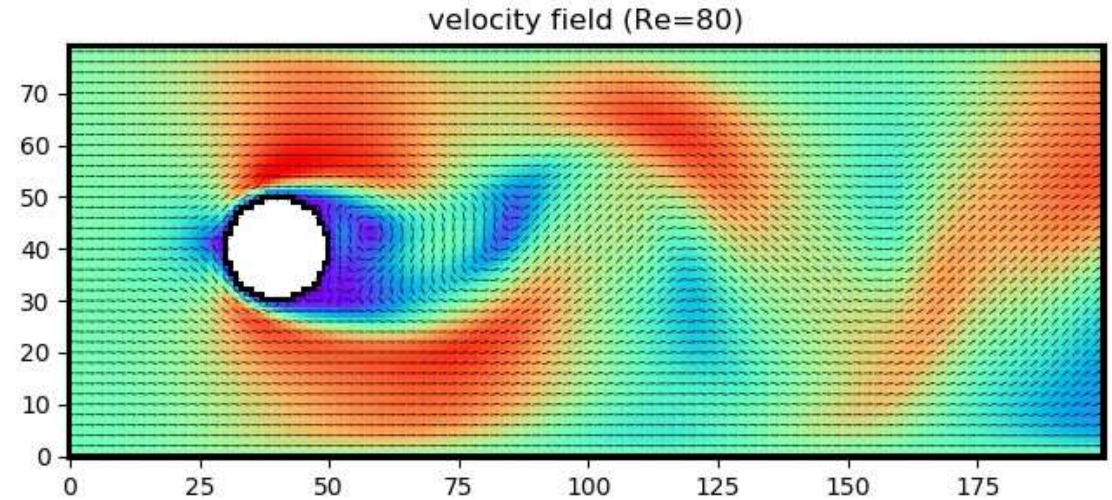
- Reaktions-Diffusions Modelle (Gray, Scott: 1985)

https://de.m.wikipedia.org/wiki/Datei:Liesegang_Sandstein_ReiKi.jpg

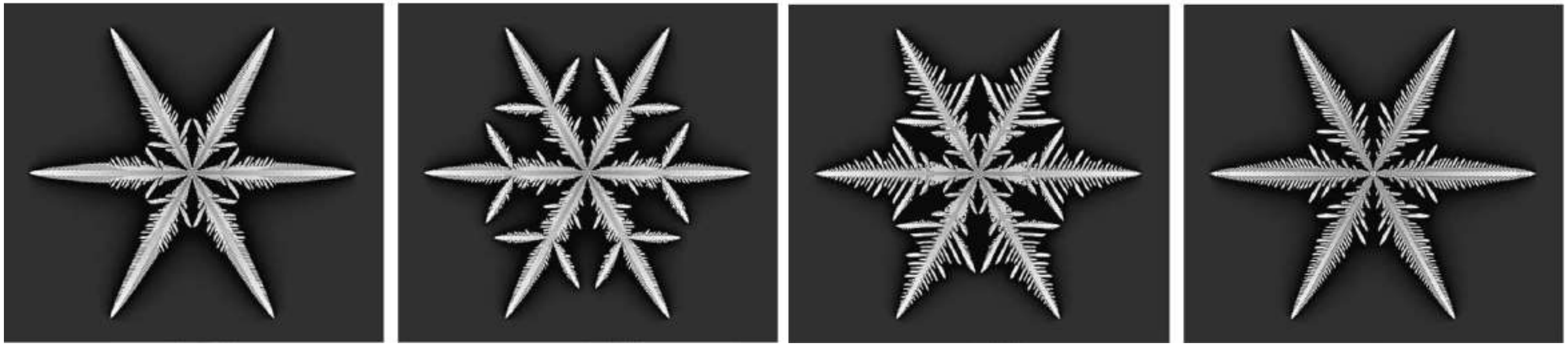
http://blogs.taz.de/hausmeisterblog/files/2017/01/Gepard_im_Zoo_Rostock_Zoo_RostockKloock.jpg

Populäre Zelluläre Automaten in der Physik

- Gitter-Gas-Modell FHP (Frisch, Hasslacher, Pomeau: 1986)
  Gitter-Boltzmann-Modelle (~1998)



- Wachstum von Schneeflocken (Reiter: 2005)

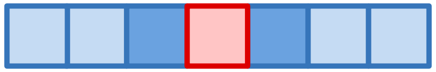


Reiter, CA. A local cellular model for snow crystal growth. Chaos, Solitons and Fractals, 23:1111-1119, 2005.

Zellulärer Automat für 1-dim Wellenausbreitung

- Mechanische Modellvorstellung: Masse-Feder-Kette

1. Linearer Zellraum
2. Standard-Nachbarschaft



3. Zustandsmenge besteht aus zwei Gleitkomma-Zahlen:

   z = Momentane Auslenkung einer Masse

   v = Momentane Geschwindigkeit einer Masse

4. Zeitentwicklungsregel:
   - Addiere zur Geschwindigkeit v den Wert $\alpha \cdot (z_{\mathrm{Nachbar}} - z)$ für jede Nachbarzelle. Dabei ist α eine Konstante.
   - Erhöhe die Auslenkung um den Wert v.

Zellulärer Automat für 1-dim Wellenausbreitung

- Fragen, die Schüler anhand eines solchen Simulationsmodells bearbeiten können:
  - Wie wirkt sich der Parameter α auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit aus?
  - Hat die Amplitude oder Frequenz der Anregung Auswirkungen auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit?
  - Was passiert, wenn man irgendwie nicht-sinusförmig anregt?
  - Was passiert, wenn sich zwei Wellen treffen?
  - Was passiert am Ende des Zellraums, wenn man dort die Auslenkung auf Null festklemmt?
  - Wie kann man ein offenes Ende modellieren?
  - Wie kann ich eine gedämpfte Welle damit modellieren?
- Das Modell kann sehr einfach auf 2-dimensionale Wellenausbreitung erweitert werden: `wellen-2d.py`
- Man kann nahezu alle Phänomene der Wellenausbreitung, die in der Schule üblicherweise behandelt werden, anhand dieses einfachen Modells verstehen.

Warum schimmeln Wohnungen meistens in den Ecken?

Wärmestromdichte ist proportional zum negativen Temperaturgradienten:

$$\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T$$

Energieerhaltung:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}$$

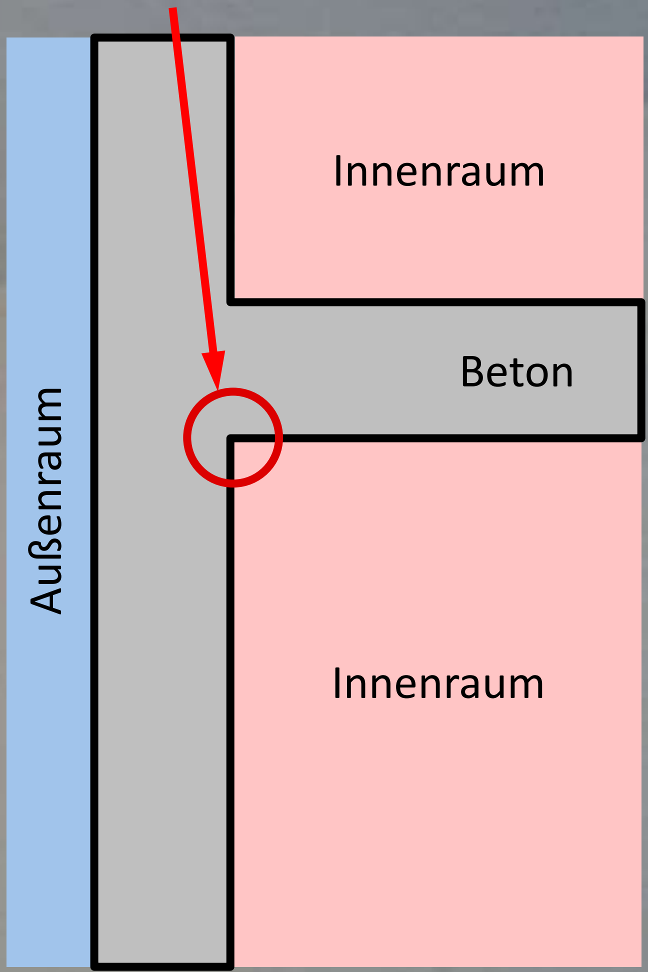
Daraus ergibt sich die Wärmeleitungs-gleichung:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \Delta T$$

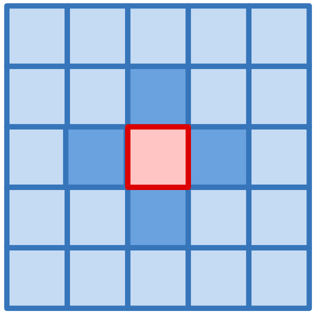
mit der Temperaturleitfähigkeit

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho c}$$

Warum wird es dort besonders kalt?

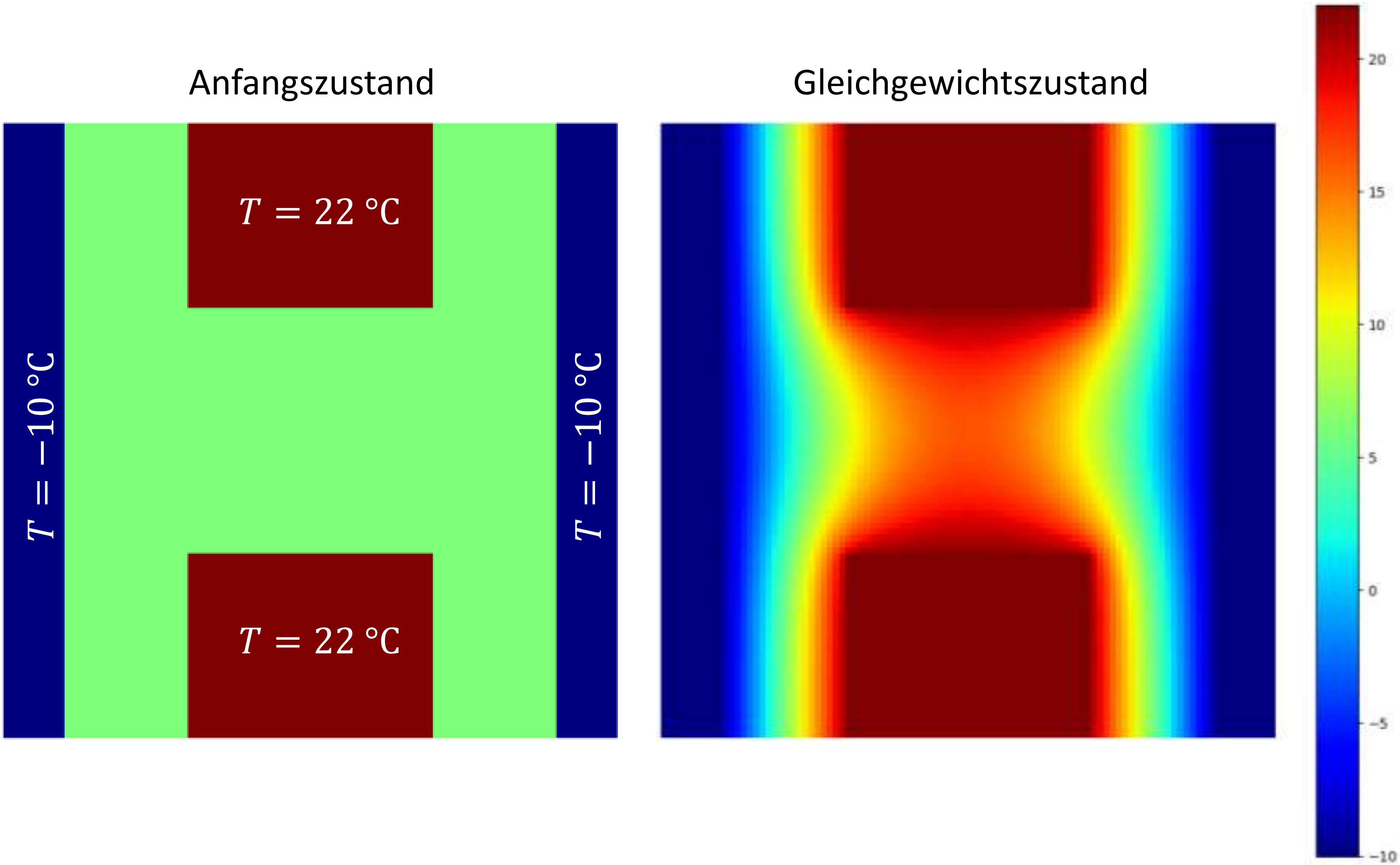


Simulation von Wärmeleitung



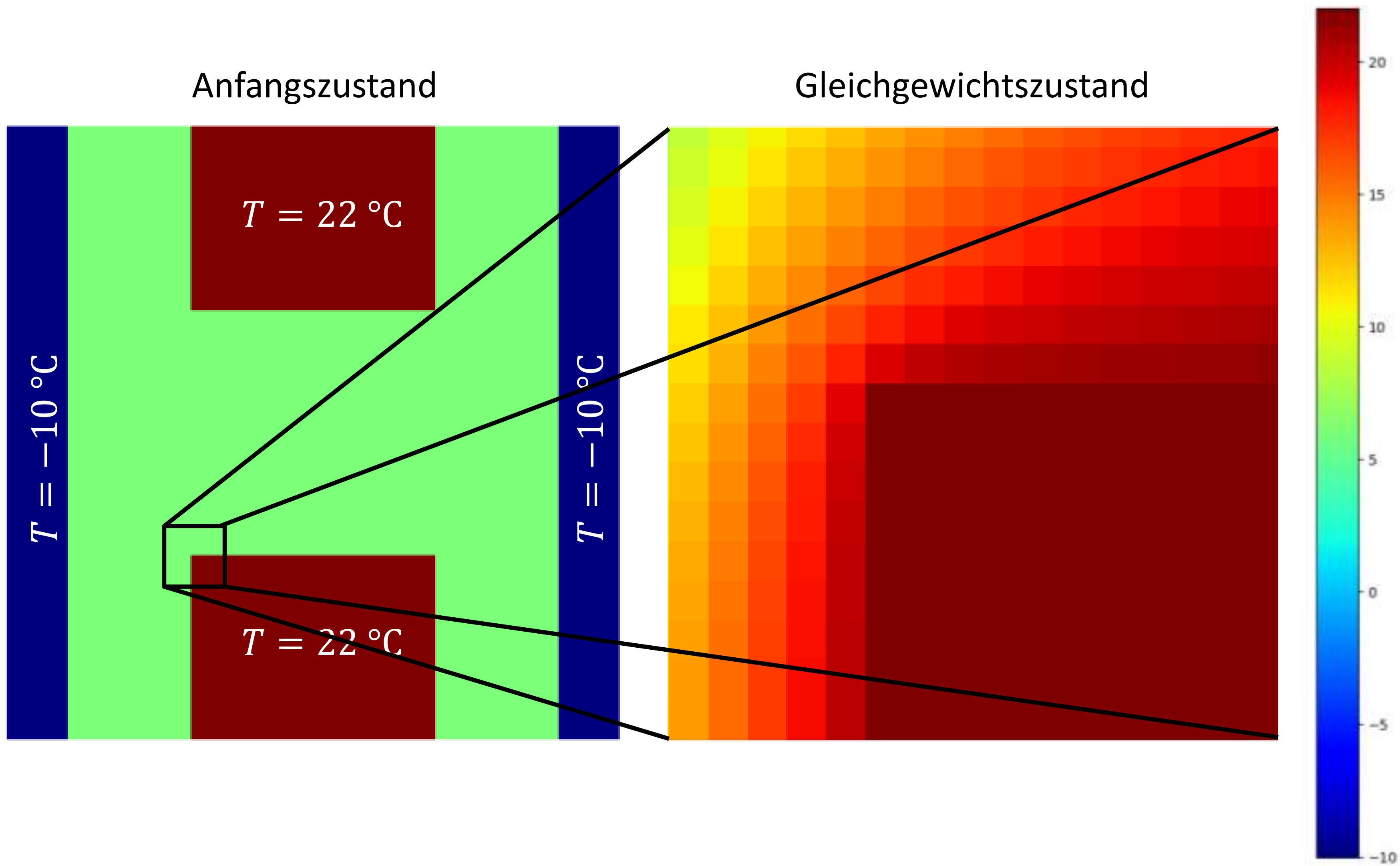
1. Kartesischer Zellraum
2. Von-Neumann-Nachbarschaft
3. Zustandsmenge: Eine Gleitkomma-Zahl
   T = die Temperatur der Zelle.
4. Zeitentwicklungsregel:
   - Wir beschreiben den Temperaturausgleich mit den Nachbarzellen durch die Regel: Addiere zur Temperatur T den Wert $\alpha \cdot (T_{\text{Nachbar}} - T)$ für jede Nachbarzelle. Dabei ist die Konstante α die Temperaturleitfähigkeit.
5. Anfangszustand:
   - Am Anfang muss eine bestimmte Temperatur vorgegeben werden (zum Beispiel überall 20 °C).
6. Randbedingungen: Setze die Temperatur an den Rändern auf einen festen Wert.

Simulation einer geometrischen Wärmebrücke



`waermeleitung.py`

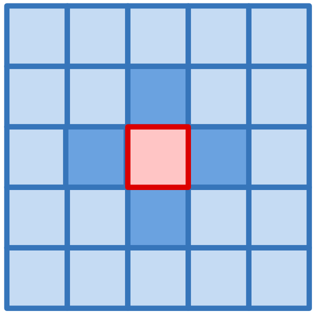
Simulation einer geometrischen Wärmebrücke



`waermeleitung.py`

Das Wärmeleitungsmodell kann auch Diffusion simulieren

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM



1. Kartesischer Zellraum
2. Von-Neumann-Nachbarschaft
3. Zustandsmenge: Eine Gleitkomma-Zahl

   c = die Konzentration einer Substanz.
4. Zeitentwicklungsregel:
   - Wir beschreiben den Konzentrationsausgleich mit den Nachbarzellen durch die Regel: Addiere zur Konzentration c den Wert $D \cdot (c_{\text{Nachbar}} - c)$ für jede Nachbarzelle. Dabei ist die Konstante D die Diffusionskonstante.
5. Anfangszustand:
   - Am Anfang muss eine bestimmte Konzentrationsverteilung vorgeben.

`diffusion.py`

Strukturbildung: Reaktions-Diffusions-Modelle

- Zwei verschiedene Substanzen U und V diffundieren in einem Medium und reagieren miteinander.
- Jede der beiden Substanzen hat eine bestimmte Diffusionskonstante D_u bzw. D_v.
- Die Substanzen können gemäß der autokatalytischen Reaktionsgleichung

$$U + 2V \longrightarrow 3V$$
$$V \longrightarrow W$$

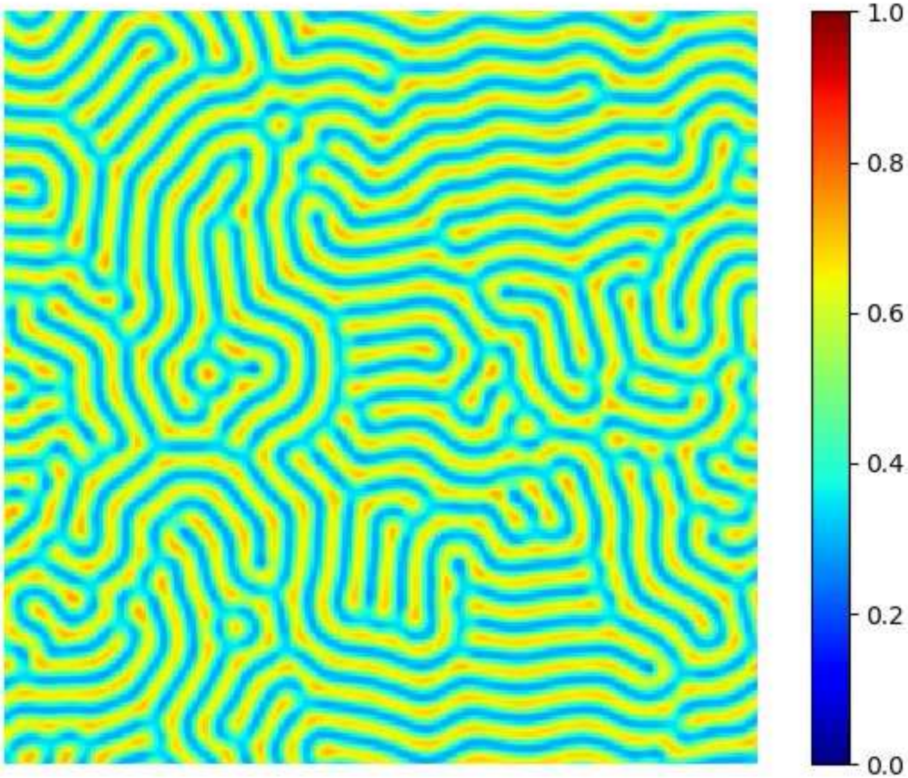
  miteinander reagieren, wobei die Substanz W inert ist.
- Die Substanz U wird von außen zugeführt und kann eine maximale Sättigungskonzentration von einer Einheit erreichen.
- Erweitere das Diffusionsmodell um einen Reaktionsschritt:
  - Addiere zur Konzentration c_u den Wert $-c_u \cdot c_v^2 + \alpha(1 - c_u)$
  - Addiere zur Konzentration c_v den Wert $c_u \cdot c_v^2 - \beta c_v$

Gray P, Scott K. Sustained Oscillations and Other Exotic Patterns of Behavior in Isothermal Reactions. J. Phys. Chem. 1985:89, 22-32.

Musterbildung bei Reaktions-Diffusions-Modellen

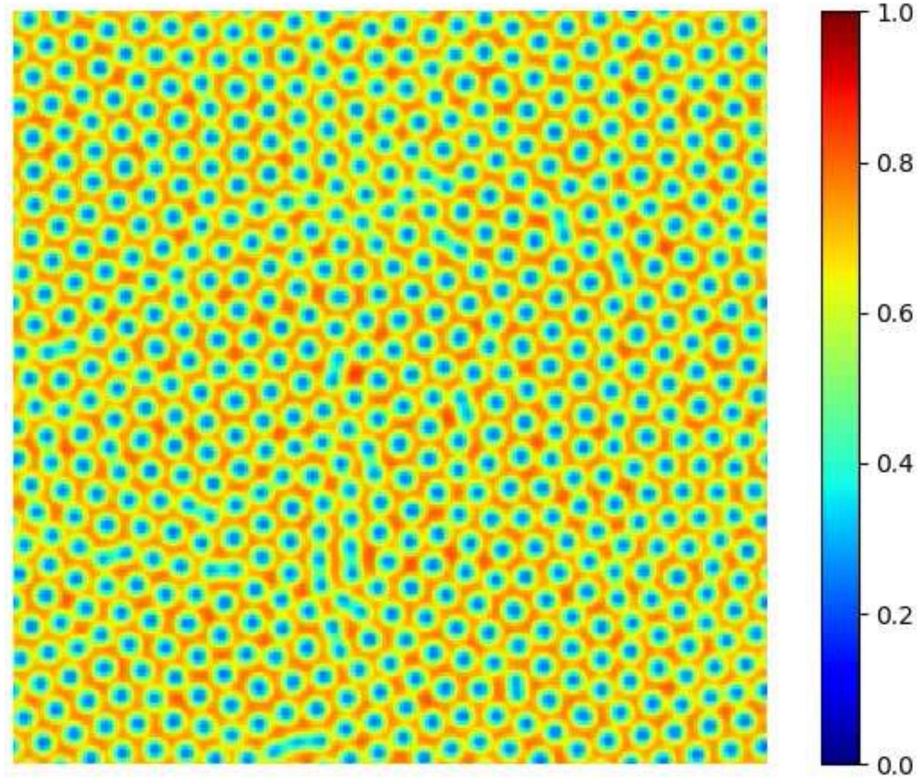
TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

Konzentration der Substanz U



$D_u = 0{,}24 \quad D_v = 0{,}10 \quad \alpha = 0{,}036 \quad \beta = 0{,}1$

Konzentration der Substanz U



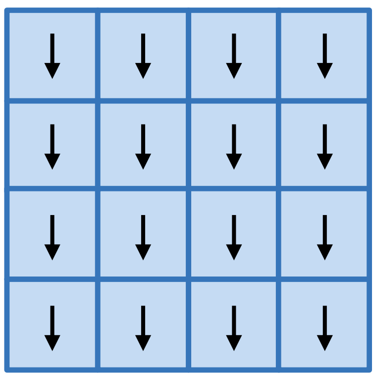
$D_u = 0{,}24 \quad D_v = 0{,}10 \quad \alpha = 0{,}040 \quad \beta = 0{,}1$

`diffusion-reaktion.py`

Das Ising-Modell: Ein Modell für Phasenübergänge

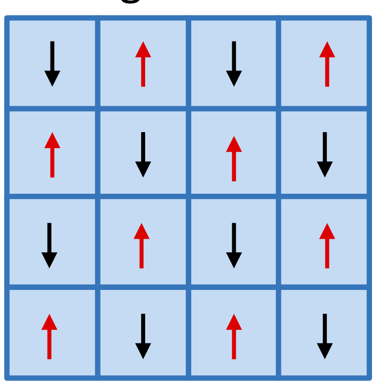
- Das Ising-Modell für magnetische Materialien betrachtet Spins auf einem Gitter.
- Die Kopplung der Spins ist beschränkt sich auf die nächsten Nachbarn.

Energie minimal



- Alle Spins parallel
- Jede Spin-Spin-Kopplung hat eine Energie von -1 Einheit.
- Gesamtenergie: $-4n/2$ Einheiten
- Mittlere Energie pro Spin: -2 Einheiten

Energie maximal

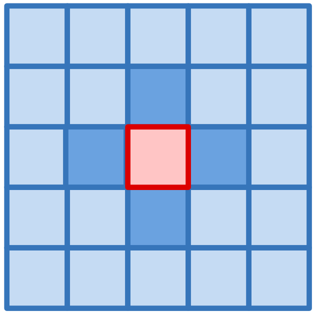


- Benachbarte Spins sind antiparallel.
- Jede Spin-Spin-Kopplung hat eine Energie von $+1$ Einheit.
- Gesamtenergie: $+4n/2$ Einheiten
- Mittlere Energie pro Spin: $+2$ Einheiten

Das Ising-Modell: Ein Modell für Phasenübergänge

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

1. Kartesischer Zellraum



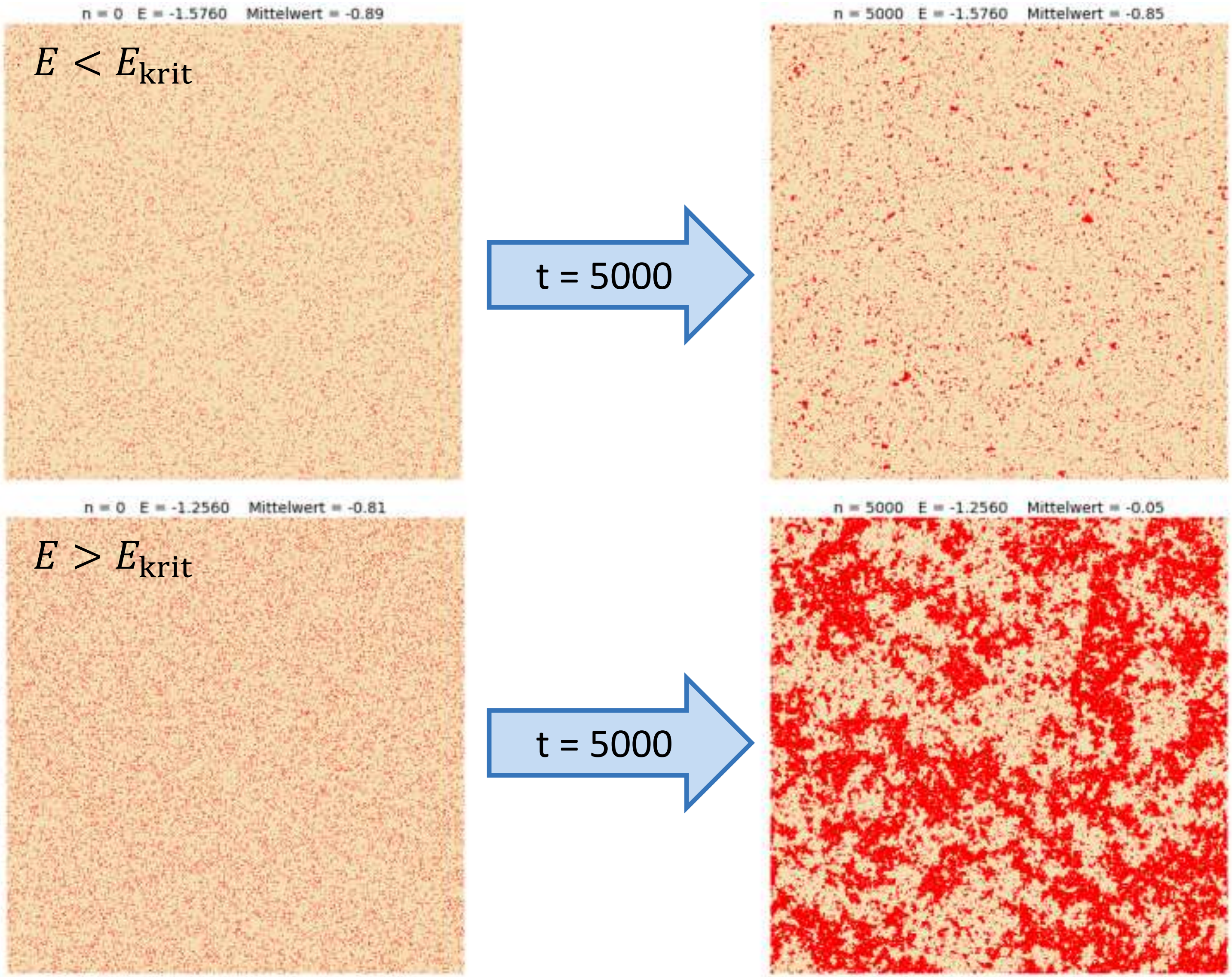
2. Von-Neumann-Nachbarschaft
3. Zustandsmenge:

   $+1$ = Spin up

   -1 = Spin down
4. Zeitentwicklungsregel:
   - Wenn die Summe der Werte in der Nachbarschaft Null ergibt, ändere die Orientierung des Spins (Energieerhaltung)
   - Wichtig: Die Regel erhält die Energie nur dann, wenn man das Feld wie ein Schachbrett in schwarze und weiße Felder unterteilt und die Regel erst auf die schwarzen Felder und dann auf die weißen Felder anwendet.
5. Anfangszustand:
   - Belege zunächst alle Felder mit -1.
   - Füge $4n$ Energieeinheiten hinzu, indem man die Spins auf n weißen Felder umdreht.

Ising-Modell: Phasenübergang bei kritischer Energie

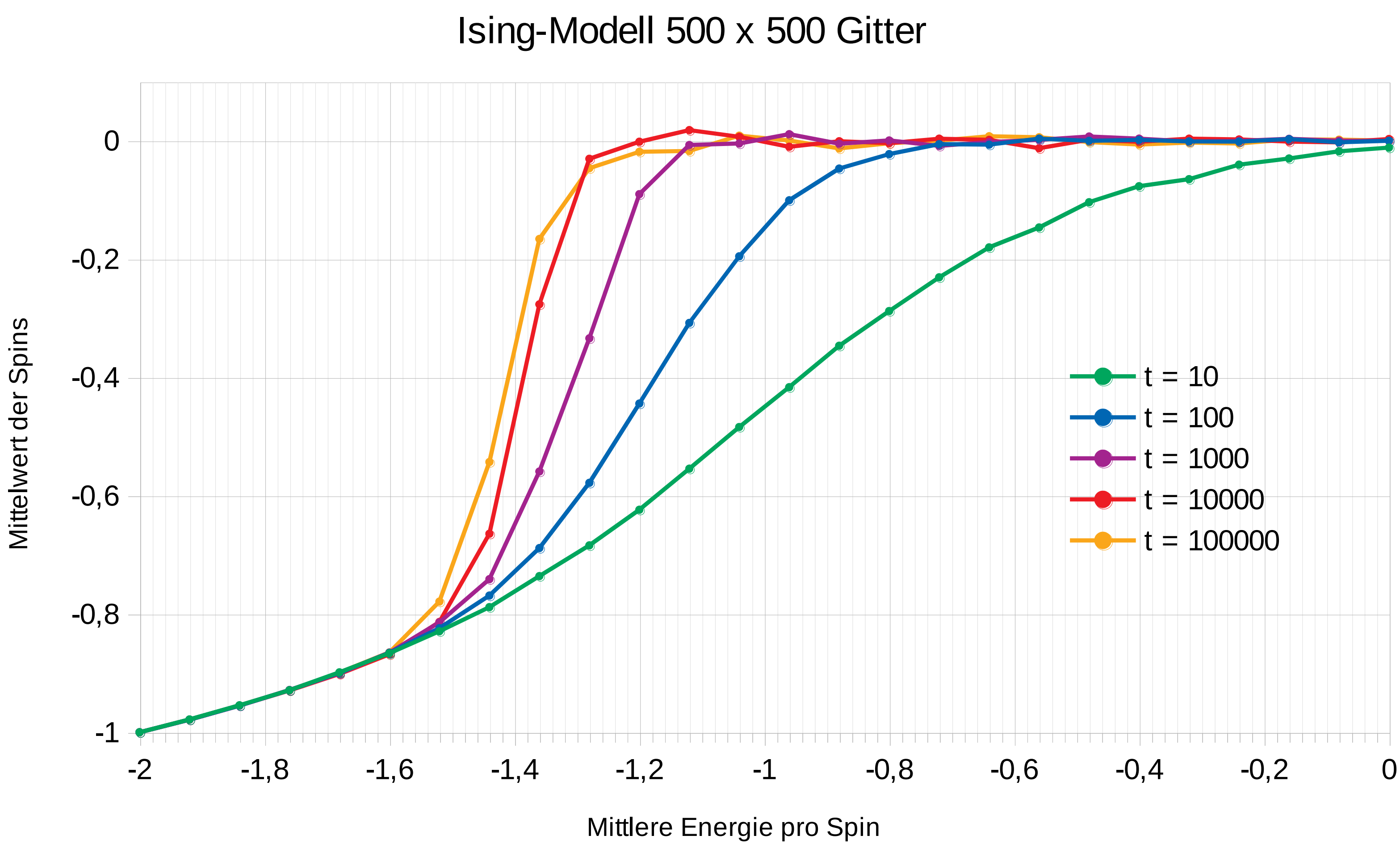
TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM



`ising.py`

Ising-Modell: Phasenübergang bei kritischer Energie

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM



Gliederung

Zelluläre Automaten sind ein schönes Modellierungstool.

- Wenn man sich auf das Wesentliche beschränkt, ist die Implementierung relativ einfach.
- Ausgehend von einer Beispielimplementierung eines zellulären Automaten kann man relativ leicht neue erzeugen.
- Man kann relativ einfach mit den Automaten herumspielen.
  - Was passiert, wenn ich die Regeln leicht modifiziere?
  - Wie wirken sich unterschiedliche Anfangsbedingungen aus?
- Die Modelle stellen (oft) keine großen Ansprüche an die Rechnerleistung und lassen sich auf einem Standard-PC in Echtzeit simulieren.
- Die Modellierung ist oft anschaulicher als über Differentialgleichungen.
- Wichtige grundlegende Prinzipien treten in den Vordergrund (Lokalität, Erhaltungsgrößen, etc.)

Meine persönlichen Empfehlungen.

TH NÜRNBERG
GEORG SIMON OHM

- Versuchen Sie den Physikunterricht mit dem Informatikunterricht zu vernetzen.
- Vernetzung mit anderen Naturwissenschaften ist ebenfalls möglich.
- Nahezu jede Programmiersprache ist für die Implementierung zellulärer Automaten geeignet.
  - Benutzen Sie nicht zu viele unterschiedliche Werkzeuge im Unterricht.
  - Orientieren Sie sich daran, was die Schüler bereits können.
- Geben Sie möglichst einfache Programmgerüste vor.
  - Idealerweise 80 Zeilen, davon 40 Zeilen Kommentare und Leerzeilen.
  - Lassen Sie Ihre Schüler darauf aufbauend die Programme erweitern und mit den Modellen spielen.
- Bunte, bewegte Bilder faszinieren!

Literaturempfehlung

- **D. Scholz: Pixelspiele – Modellieren und Simulieren mit zellulären Automaten.** Berlin, Heidelberg: Springer, 2014
  - Viele klassische Beispiele mit ausführlichen Anleitungen
  - Leider zum Teil aus meiner Sicht nur unzureichend physikalisch motiviert.
- **Chopard, Droz: Cellular Automata Modeling of Physical Systems.** Cambridge, New York: Cambridge University Press, 2009.
  - Mathematisch teilweise recht anspruchsvoll.
- **Langtangen: A Primer on Scientific Programming with Python.** Berlin: Springer, 2014.
  - Eine herausragende Einführung in das Programmieren mit Python basierend auf naturwissenschaftlichen Fragestellungen.
- **Johansson: Numerical Python.** Berkeley: Apress, 2015.
  - Richtet sich eher an professionelle Anwender im industriellen Umfeld.
  - Enthält aber viele Tipps und Kniffe zur effizienten Programmierung mit Python.

Programmbeispiele und Vortragsfolien zum Download

https://www.th-nuernberg.de/person/natt-oliver/

MNU-Tagung 2018