

# Computerphysik WS 2016/2017

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

## Hausarbeit

15. Januar 2017

Abgabe (als jupyter notebook sowie pdf/html-Datei) bis zum 05.02.2017, 23:59 Uhr

per email an [petra.imhof@fu-berlin.de](mailto:petra.imhof@fu-berlin.de), Betreff: Computerphysik-Hausarbeit. Benennen sie die Dateien Vorname\_Nachname\_matrikelnummer.ipynb bzw. .pdf .

*Hinweis: Ableitungen oder Integrale für analytisch angegebene Funktionen können analytisch berechnet und als Ableitungs- bzw. Integralfunktion direkt implementiert werden. Für alle anderen Ableitungen und Integrationen verwenden Sie geeignete eigene Implementierungen numerischer Differentiation und Integration. Für Interpolationen und Fits (lineare, sowie nichtlinear) verwenden Sie ebenfalls Ihre eigenen Implementierungen.*

*Erlaubt sind folgende numpy-Module anstelle der eigenen Implementierungen (außer wenn eine solche ausdrücklich in der Aufgabe gefordert ist) : `numpy.dot`, `numpy.linalg.solve`, `numpy.linalg.eig`, `numpy.fft.fft`, `numpy.random`*

*Achten Sie bei allen Plots auf eine sinnvolle Darstellung und eine korrekte Beschriftung.*

## Aufgabe 1: Partikelbewegung im Potential (18 Punkte)

Gegeben sind folgende zwei-dimensionale Potentiale  $V(x, y)$

$$V_1(x, y) = x^4 - 50x^2 + y^4 - 50y^2 \quad (1)$$

$$V_2(x, y) = x^4 + y^4 - 21x^2 - 13y^2 - 22y - 14x + 2x^2 \cdot y + 2xy^2 + 170 \quad (2)$$

- a) (1 Punkt) Implementieren Sie ein Newton-Verfahren zur Minimierung.
- b) (1 Punkt) Nutzen Sie das Newton-Verfahren, um ausgehend von folgenden Punkten die nächstliegenden stationären Punkte (Punkte, an denen die Kraft bzw. der Gradient des Potentials verschwindet) zu bestimmen:  $P_0 = (-5.1, -2.3)$ ;  $P_1 = (0.1, 1.1)$ ;  $P_2 = (2.0, 4.0)$ ;  $P_3 = (0.2, -4.0)$ ;  $P_4 = (3.0, 5.6)$ ;  $P_5 = (-3.0, 4.2)$ .
- c) (1 Punkt) Handelt es sich bei den gefundenen stationären Punkten tatsächlich um ein Minimum oder um ein Maximum oder einen Sattelpunkt (Minimum in eine Richtung, Maximum in alle anderen Richtungen) auf der Potentialfläche?
- d) (6 Punkte) Implementieren Sie einen Euler-Integrator, um die Bewegungsgleichung

$$m \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = - \frac{\partial V}{\partial q} \quad (3)$$

eines Teilchens der Masse  $m$  in einem Potential  $V = V(x, y)$  zu bestimmen.  $q$  bezeichnet die Position des Teilchens  $q(x, y)$  auf einer x-y Fläche, die mit  $x \in [-6, 6]$  und  $y \in [-6, 6]$  (Meter) begrenzt sei.

Implementieren Sie die Begrenzung als

- Periodische Randbedingungen: Wenn das Teilchen die Fläche z.B. nach zu kleinen  $x$ -Werten verlässt wird es um die  $x$ -Breite zu positiven  $x$ -Werten verschoben. Beispiel: aus  $x = -7.2$  wird  $x = 4.8$ . Entsprechend wird für zu große  $x$ -Werte und  $y$ -Werte verfahren. (*Hinweis: Vorsicht, wenn das Teilchen um mehr als eine Flächenbreite "herausläuft".*)
- Reflektierende Randbedingungen: Wenn das Teilchen die Fläche z.B. nach zu kleinen  $x$ -Werten verlässt wird es soweit zu positiven  $x$ -Werten verschoben, wie es aus der Fläche herausgelaufen ist. Beispiel: aus  $x = -7.2$  wird  $x = -4.8$ . Außerdem wird die Richtung der Geschwindigkeit entsprechend umgekehrt. Die Reflektion an den  $y$ -Rändern geschieht entsprechend.

Das Teilchen habe die Masse  $m = 1\text{kg}$  und hat bei der Startposition  $q_0 = (0.0, 1.0)$  die Startgeschwindigkeit  $v_0 = (0.2; 0.5)\text{m/s}$ . Berechnen Sie in jedem Zeitschritt die Gesamtenergie  $E_{tot} = V + T$  wobei  $T = \frac{1}{2}mv^2$  die kinetische Energie des Teilchens mit Geschwindigkeit  $v$  ist.

- e) (2 Punkte) Der Euler-Integrator wird als kein guter Integrator angesehen, weil er 1.) eine hohe Energiedrift aufweist und 2.) nicht zeit-reversibel ist. Testen Sie die Energiedrift, indem Sie mittels Ihres Euler-Integrators eine Trajektorie (Positionen des Teilchens als Funktion der Zeit) berechnen. Berücksichtigen Sie dazu

- Kein Potential:  $V(x, y) = 0$
- Das Potential  $V_1$

jeweils für periodische und reflektierende Randbedingungen. Verwenden Sie die Zeitschritte  $dt = 0.01\text{s}$ ;  $dt = 0.001\text{s}$ ;  $dt = 0.0001\text{s}$ . Plotten Sie die Gesamtenergie als Funktion der Zeit. Wie groß ist der Unterschied der Gesamtenergie nach 20s ?

- f) (**2 Punkte**) Testen Sie nun die Zeitumkehrbarkeit. Nehmen Sie die letzte Position ihrer “Vorwärts”-trajektorien und starten Sie von dort aus eine “Rückwärts”-trajektorie mit ebensovielen Schritten und gleicher Schrittweite wie vorwärts. Enden Sie wieder am ursprünglichen Startpunkt  $q_0$ ? Plotten Sie die Positionen der Vorwärts- und Rückwärts-trajektorien mit unterschiedlichen Farben in ein x-y Diagramm.
- g) (**3 Punkte**) Berechnen Sie nun eine “Vorwärts”-trajektorie, ausgehend von  $q_0$  und  $v_0$  für 20s mit Schrittweite 0.01. Plotten Sie die x- und y-Positionen jeweils als Funktion der Zeit. Kommt es zu periodischen Wiederholungen von x-oder y-Positionen ? Wenn ja, mit welcher Frequenz?
- h) (**2 Punkt**) Betrachten Sie nun das Potential  $V_2$  und reflektierende Randbedingungen. Finden Sie ausgehend von Startposition  $q_0 = (0.0, 1.0)$  und Anfangsgeschwindigkeit  $v_0 = (0.2, 0.5)$  durch Variation der Anfangsgeschwindigkeit eine Euler-integrierte Trajektorie, die dem Punkt  $q_f = (-2.0, 5.0)$  mindestens auf 0.01m nahe kommt.

## Aufgabe 2: Isothermale Titrationskalorimetrie (20 Punkte)

Bei der isothermalen Titrationskalorimetrie werden zwei separate, identische Zellen durch Wärmezufuhr bei konstanter Temperatur gehalten. In der einen Zelle, der Referenzzelle, befindet sich ausschließlich Wasser, während sich in der anderen Zelle, der Probenzelle, Wasser und das zu beprobende Makromolekül befindet. Über eine Spritze wird nun der Probenzelle Ligand (ein kleines Molekül) zugeführt, welcher mit dem zu beprobenden Makromolekül reagiert. Je nach Reaktion entsteht dabei Wärme oder wird dem System Wärme entzogen. Hierdurch verändert sich die benötigte, externe Wärmezufuhr um die Probenzelle bei konstanter Temperatur zu halten.

- a) (**2 Punkte**) In `itc.txt` finden Sie typische Messwerte eines ITC Experiments. In der ersten Spalte sind dabei die Messzeiten in Sekunden und in der zweiten die jeweiligen Differenzen der Wärmeströme  $\dot{Q} - \dot{Q}_{ref}$  (mit  $\dot{Q}$  dem Wärmestrom in die Probenzelle und  $\dot{Q}_{ref}$  dem Wärmestrom in die Referenzzelle) in ncal/s angegeben. Plotten Sie die Messwerte. Ist die Reaktion exo- oder endotherm, d.h. wird bei der Reaktion Wärme freigesetzt oder aufgenommen?
- b) (**3 Punkte**) Berechnen Sie für alle 20 Peaks jeweils die Wärmemenge  $\Delta Q_T$  in  $\mu\text{cal}$ . Ligand wird dabei zu den Messzeiten: 0 s, 101 s, 202 s, ... zugegeben. Damit befindet sich zB der erste Peak zwischen 0 s und 100 s.
- c) (**3 Punkte**) Nehmen Sie an, dass die totale Konzentration des Makromoleküls  $MT$  vor der ersten Injektion  $10 \mu\text{mol/L}$  beträgt, während die Liganden Konzentration in der Spritze  $LS$   $100 \mu\text{mol/L}$  beträgt. Pro Injektion werden dem Anfangsvolumen der Probenzelle ( $V_0 = 0,2 \text{ mL}$ )  $2 \mu\text{L}$  aus der Spritze zugeführt.

Erstellen Sie einen Plot, der Ihre berechneten  $\Delta Q_T$  in kJ bezogen auf die Stoffmenge des Liganden einer einzigen Injektion  $\Delta n_{\text{Injektion}}$  als Funktion von  $X_r = LT/MT$  darstellt, wobei  $LT$  die totale Konzentration des Liganden in der Probenzelle ist.

*Hinweis:* Totale Konzentration bedeutet zB, dass freies und gebundenes Makromolekül berücksichtigt wird. Die totale Stoffmenge an Makromolekül bleibt dementsprechend konstant über das Experiment, die totale Konzentration dagegen verändert sich durch die injektionsbedingte Verdünnung.

- d) (**3 Punkte**)

Das von Ihnen berechnete  $\frac{\Delta Q_T}{\Delta n_{\text{Injektion}}}$  entspricht ungefähr  $\frac{dQ_T}{V_0 dLT}$ , wobei gilt:

$$\frac{dQ_T}{V_0 dLT} = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1 - \frac{1}{c} - X_r}{\sqrt{X_r^2 - 2X_r(1 - \frac{1}{c}) + (1 + \frac{1}{c})^2}} \right) \cdot \Delta H \quad (4)$$

Verwenden Sie als  $\Delta H$  die Differenz Ihrer  $\frac{\Delta Q_T}{\Delta n_{Injektion}}$  Werte für den ersten und letzten Peak gerundet auf den nächsten Integer. Plotten Sie  $\frac{dQ_T}{V_0 dLT}$  für  $c=1, 10, 100, 1000$  und  $10000$ . Vergleichen Sie die resultierenden Kurven. Wie wirkt sich das  $c$  aus? Welche Kurve repräsentiert ihre berechneten  $\frac{\Delta Q_T}{\Delta n_{Injektion}}$  Werte am besten?

e) **(3 Punkte)**

Die Assoziationskonstante  $K_a$  steht im Zusammenhang zur Steigung des Wendepunkts der Kurve  $\frac{dQ_T}{V_0 dLT}$ . Bestimmen Sie im Intervall  $X_r \in [0.5, -1.5]$  numerisch die Position und Steigung des Wendepunkts der Funktion  $\frac{dQ_T}{V_0 dLT}$  mit dem von Ihnen als optimal bestimmten Wert für  $c$ .

f) **(4 Punkte)**

In `cp.txt` finden Sie spezifische Wärmekonstanten von Wasser für verschiedene Temperaturen (Erste Spalte Temperaturen in °C, zweite Spalte spez. Wärmekonstanten in kJ/(kg·K)). Fitten Sie diese Werte mit Polynomen der 1., 2., 3., 4. und 8. Ordnung. Welcher Fit beschreibt die Messwerte am besten?

g) **(2 Punkte)** Angenommen der Heizregler der Probezelle ist defekt, so dass immer der gleiche Wärmestrom in der Zelle ankommt. Berechnen und plotten Sie den Temperaturverlauf in der Zelle, wobei die Temperatur in der Zelle (ohne Wärme der Reaktion) 35 °C betragen soll. Nehmen Sie an, dass die Temperatur vor der jeweils nächsten Liganden Injektion wieder auf den Ausgangswert zurückgegangen ist. Verwenden Sie hierfür  $\rho = 1$  kg/L und die spezifische Wärmekonstante von Wasser bei 35 °C, die sie durch ihren besten Fit erhalten.

### Aufgabe 3: Meteorologische Daten (12 Punkte)

Im Zeitraum 01. Januar 2012 bis 31. Dezember 2015 wurden für eine mitteleuropäische Stadt meteorologische Daten aufgenommen. Die Daten befinden sich in der Datei 'metro.csv'. Bei multivariaten Datensätzen kommt es häufig vor, dass einige wenige Messgrößen bereits einen Großteil der Information beinhalten und weitere Messgrößen nur wenig Neues beitragen. Ein Verfahren, solche Datensätze auf die "informativsten" Dimensionen zu reduzieren /zu projizieren) ist die Hauptkomponentenanalyse. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Größen, welche die größte Varianz aufweisen, auch die meiste Information beinhalten. Diese Aufgabe liefert Schritt-für-Schritt eine solche Projektion. Der Einfachheit betrachten wir hier nur vier Messgrößen als Ausgangsdaten: Temperatur [K], Druck[mb], relative Feuchtigkeit [gm/m<sup>3</sup>] und Niederschlagsmenge [cm].

a) **(1 Punkt)** Laden Sie die Messdaten und visualisieren Sie jede Messgröße in einem eigenen Histogramm, wobei die verschiedenen Jahre unterschiedlich markiert (z.B. gefärbt) sind. Plotten Sie außerdem die Messdaten als Funktion der Zeit über den gesamten Messzeitraum.

b) **(3 Punkte)** Um Redundanzen in den Daten (als lineare Abhängigkeiten der Information) zu erkennen wird die Kovarianz jeder Messgröße mit jeder anderen berechnet. Daraus wird dann die Kovarianzmatrix **C** mit den Elementen

$$C_{jk} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)(x_{ik} - \bar{x}_k) \quad (5)$$

aufgestellt. Hierbei ist  $\bar{x}_m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{im}$  der Mittelwert der Messgröße  $x_m$  (*Hinweis: Die Messgrößen fluktuieren in sehr unterschiedlichen Wertebereichen. Vor der Berechnung der Kovarianz ist daher eine Normierung, z.B. auf den jeweils höchsten Wert, ratsam.*)

- c) **(1 Punkt)** Implementieren Sie eine geeignete Matrix-Zerlegung und bestimmen Sie damit, ob die Matrix  $\mathbf{C}$  positiv definit ist.
- d) **(1 Punkt)** Berechnen Sie die Eigenvektoren der Matrix  $\mathbf{C}$  und sortieren Sie diese nach den zugehörigen Eigenwerten (größter zuerst). Die Eigenvektoren sind die sogenannten Hauptkomponenten und die zugehörigen Eigenwerte geben an, wieviel Varianz (“Information”) in dieser Hauptkomponente enthalten ist. Berechnen Sie die kumulative Summe der Eigenwerte, um zu bestimmen, welcher Prozentsatz an “Information” in den ersten beiden Hauptkomponenten enthalten ist.
- e) **(2 Punkte)** Projizieren Sie den ursprünglichen Datensatz auf die ersten beiden Hauptkomponenten durch folgende Matrixmultiplikation

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \cdot \mathbf{W} \quad (6)$$

wobei  $\mathbf{X}$  der  $d$ -dimensionale (normierte) Datensatz ist (hier  $d = 4$ ) und  $\mathbf{W}$  eine Matrix, welche die Hauptkomponenten spaltenweise enthält.

Plotten Sie jeweils die Projektionen auf die erste und zweite Hauptkomponente als Funktion der Zeit.

- f) **(4 Punkte)** Der Verlauf der Messdaten für Temperatur und relative Feuchtigkeit scheint sich jährlich zu wiederholen, allerdings doch mit einigen Abweichungen von Jahr zu Jahr. Fitten Sie für beide Messgrößen eine Funktion der Form

$$f(t) = A \sin(\omega t - B) + C \quad (7)$$

abschnittsweise für jedes Jahr an. Wenn man davon ausgeht, dass eine volle Periode ein Jahr dauert, wie lange dauert dann ein “mittleres meteorologisches Jahr”, jeweils gemessen an den Temperatur- bzw. Feuchtigkeitswerten, sowie der auf die erste Hauptkomponente projizierten Trajektorie?