

# Computerphysik WS 2017/2018

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

## Hausarbeit (50 Punkte)

4. April 2018

Abgabe bis **25.04.2018** 23:55 Uhr per email an [petra.imhof@fu-berlin.de](mailto:petra.imhof@fu-berlin.de)

*Hinweis: Zur Lösung von linearen Gleichungssystemen können Sie `np.linalg.solve` verwenden.*

*Für Zufallszahlen verwenden Sie `numpy.random`.*

*Erlaubt sind außerdem die üblichen "simplen" numpy Funktionen `numpy.log()`, `numpy.exp()`, `numpy.sin()`, `numpy.cos()`, `math.sqrt()`, `math.factorial()`, `numpy.arange()`, `numpy.dot()`, ... und natürlich `matplotlib.pyplot`*

*Analytische Ableitungen sind nur in Aufgabe 2 erlaubt.*

### Aufgabe 1: Bewegung im Torsionspotential (40 Punkte)

Für kettenartige Moleküle (Alkane, Polymere) ist eine vereinfachte Beschreibung der Konformationsdynamik durch Torsionswinkel verbreitet. Hierbei wird die Drehung von ganzen Gruppen des Moleküls um eine Achse, häufig definiert durch die Bindung zweier Atome, betrachtet. Durch weitere Wechselwirkungen können manche Torsionswinkel höhere oder niedrigere potentielle Energien haben als andere. Nachstehende Tabelle gibt das aus einem Experiment ermittelte Energieprofil einer solchen Torsionsbewegung an.

Winkel $\theta$ /Grad	Energie/kJ
-175.00	-0.00
-165.00	0.30
-155.00	0.94
-145.00	1.58
-135.00	2.41
-125.00	3.40
-115.00	3.63
-105.00	2.95
-95.00	2.12
-85.00	1.56
-75.00	1.24
-65.00	1.22
-55.00	1.45
-45.00	2.06
-35.00	3.11
-25.00	4.07
-15.00	4.74
-5.00	5.69
5.00	5.73
15.00	4.86
25.00	3.72
35.00	2.90
45.00	2.17
55.00	1.60
65.00	1.22
75.00	1.28
85.00	1.73
95.00	2.25
105.00	2.76
115.00	3.11
125.00	3.17
135.00	2.42
145.00	1.57
155.00	0.95
165.00	0.29
175.00	0.00

(a) (10 Punkte) Charakterisierung des Torsionspotentials.

- (1 Punkt) Plotten Sie die Messdaten in ein Energieprofil, d.h. Energie als Funktion des Torsionswinkels.
- (3) Fitten Sie an die Messdaten eine Energiefunktion der Form  $E = \sum_k^n V_k(1 + \cos(k * \theta))$  für  $n = 1, 2, 3, 4$ . Welcher Fit beschreibt die Messdaten am besten?
- (6 Punkte) Bestimmen Sie numerisch, d.h. ohne Verwendung analytischer Ableitungen, Minima, Maxima und Wendepunkte der erhaltenen besten Ausgleichsfunktion.

(b) (12 Punkte) Betrachten sie nun die Bewegung eines Teilchens der Masse  $m = 1kg$  durch das eindimensionale Torsionspotential. Beachten Sie hierbei, dass das Potential periodisch ist also  $E(\theta=-180)=E(\theta=180)$ . Die Bewegungsgleichung ist  $m \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} = -\frac{\partial E}{\partial \theta}$  Sie können zur Umrechnung

von Winkeln in Strecken einen Radius von 1m annehmen (Das ist für Moleküle genauso utopisch wie eine Masse von 1kg, lässt sich aber einfacher rechnen).

- (2 Punkte) Implementieren Sie einen Eulerintegrator zur Lösung der Bewegungsgleichung.
- (6 Punkte) Integrieren Sie die Bewegungsgleichung für 100000 Schritte mit folgenden Einstellungen: Startposition:  $\theta_0 = 20\text{Grad}$ ; Startgeschwindigkeit  $v_0 = 10 \text{ rad/s}$  und einem Zeitschritt von  $dt = 0.001\text{s}$ . Plotten Sie die Zeitreihen von Winkel, Geschwindigkeit, potentieller und kinetischer Energie, sowie der Gesamtenergie. Was beobachten Sie Wie lange dauert eine Periode, d.h. wieviel Zeit vergeht bis wieder der gleiche Winkelwert erreicht ist?
- (4 Punkte) Implementieren sie nun eine Bewegung durch das Torsionspotential mittels Metropolis Monte-Carlo. Dazu gehen Sie folgendermaßen vor: In jedem Schritt wählen Sie zufällig, ob eine Vorwärts- oder Rückwärtsbewegung ausgeführt werden soll, wobei beide mit gleicher Wahrscheinlichkeit eintreten sollen. Ermitteln Sie für eine entsprechende Bewegung der Schrittlänge  $d\theta=0.1 \text{ rad}$  den neuen Winkel und die dazugehörige potentielle Energie  $E_{neu}$ . Ist diese Energie niedriger als die vorherige  $E_{alt}$ , akzeptieren Sie den neuen Winkel. Ist Sie höher, akzeptieren Sie den neuen Winkel mit der Wahrscheinlichkeit  $\exp(-\beta(E_{neu} - E_{alt}))$ . Setzen Sie  $\beta=0.6$ . Verwenden Sie die gleiche Startposition wie für die Integration der Bewegungsgleichung und berechnen Sie wieder 100000 Schritte.

(c) (18 Punkte) Analyse der Dynamik

- (2 Punkte) Teilen Sie die Torsionswinkel in so viele Bereiche auf, wie Sie lokale Minima gefunden haben. Ein Bereich wird dabei durch die an ein Minimum angrenzenden lokalen Maxima begrenzt. Ordnen Sie alle Positionen der Trajektorie aus der numerischen Integration der Bewegungsgleichung, sowie der Monte-Carlo-Simulation einem dieser Bereiche zu.
- (4 Punkte) Stellen Sie für die Monte-Carlo Simulation eine Übergangsmatrix auf, indem Sie die Übergänge zwischen Bereichen zählen. Die Matrix hat soviele Reihen/Spalten wie Sie Bereiche zugeordnet haben. "Übergänge", die im gleichen Bereich bleiben werden auf der Diagonalen erfasst. Ein Übergang von Bereich 1 nach Bereich 2 erhöht das Matrixelements der 1. Reihe und 2. Spalte um eins. Zählen Sie direkte Übergänge, d.h. für jeden Simulationsschritt, sowie Übergänge nach  $\tau$  Simulationsschritten mit  $\tau=10, 20 \dots 1000$ . Machen Sie anschliessend die Matrizen Zeilen-stochastisch (Zeilensumme=1), indem Sie jeden Eintrag durch die Zeilensumme teilen.
- (6 Punkte) Bestimmen Sie für jede der Übergangsmatrizen die Eigenwerte. Plotten Sie  $-\tau/\ln(\lambda_n)$  gegen  $\tau$  für jeden der Eigenwerte  $\lambda_{n \neq 1}$ . Was beobachten Sie?
- (3 Punkte) Berechnen Sie für die Übergangsmatrix zu  $\tau=1000$  die rechten und linken Eigenvektoren (*Hinweis: Die linken Eigenvektoren einer Matrix  $\mathbf{A}$  bekommt man als die rechten Eigenvektoren der Matrix  $\mathbf{A}^T$* ).
- (3 Punkte) Wenden Sie die Übergangsmatrix zu  $\tau=1000$  auf den Vektor  $(1/3, 1/3, 1/3)$  1000 mal von rechts an. Vergleichen Sie den erhaltenen Vektor mit dem linken Eigenvektor zum ersten Eigenwert sowie mit dem Verhältnis der Häufigkeiten Winkel in den verschiedenen Bereichen zu finden. Was fällt Ihnen auf?

(*Hinweis: Sollten Sie keine eigenen Trajektorien mittels Simulation erzeugen können, bearbeiten Sie die übrigen Aufgaben mit der Trajektorie in der Datei `torsion.dat`*).

## Aufgabe 2: Zerfallsprozesse und Lebensdauern (10 Punkte)

Ein bestimmtes dynamisches System wird durch zwei Zeitskalen beschrieben. Eine dieser Zeitskalen entspricht der Entstehungsrate eines bestimmten Zustands, die andere der Zerfallsrate. Diese Raten lassen sich abschätzend aus einer Autokorrelationszeitfunktion (acf) bestimmen, welche die Anwesenheit/Abwesenheit eines Zustands betrachtet.

Solch eine Autokorrelationszeitfunktion kann man definieren als:

$$acf(t) = \frac{\sum_{t_0} S(t_0)S(t_0 + t)}{\sum_{t_0} S(t_0)S(t_0)} \quad (1)$$

wobei  $S(t_0 + t)$  die Existenz des Zustands zur Zeit  $t_0 + t$ , also z.B.  $t$  Schritte später als  $t_0$ , anzeigt. Setzen Sie den Wert  $S(t_0)$ ,  $S(t_0 + t)$  etc. gleich eins, wenn der betrachtete Zustand zum Zeitpunkt  $t$  vorliegt und sonst gleich null. Die Summe über  $t_0$  kennzeichnet hier alle möglichen Startzeitpunkte, der Nenner dient der Normierung. In dem Datensatz `states.txt` sind verschiedene Zustände gelistet. Die Autokorrelation lässt sich durch eine Summe von zwei Exponentialfunktionen

$$C(t) \propto A_1 \exp(-t/\tau_1) + A_2 \exp(-t/\tau_2) \quad (2)$$

annähern. Hierbei sind  $1/\tau_1$  und  $1/\tau_2$  die Zerfall und Entstehungsrate.

(a) (10 Punkte)

- (4 Punkte) Berechnen Sie aus dem Datensatz die Autokorrelationszeitfunktionen für die Zustände 1 und 2 für  $t=0, \dots, 100$  und plotten Sie diese.
- (6 Punkte) Implementieren Sie einen nicht-linearen (chi-square / Levenberg-Marquardt/Gauss-Newton) Fit.
- Nutzen Sie Ihre Fitfunktion und bestimmen Sie die Parameter  $A_1$ ,  $A_2$  sowie die Raten  $1/\tau_1$  und  $1/\tau_2$  der Funktion  $C(t)$ . Welcher der beiden Zustände zerfällt schneller? *Hinweis: Die beiden Raten sowie die beiden Vorfaktoren haben unterschiedliche Vorzeichen.*