Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 10

Ausgabe: 24.06.2016 Abgabe: 01.07.2016

Aufgabe 1. Random-Walk in der NMR (15 P.)

Dynamische Prozesse können mithilfe der nuclear magnetic resonance (NMR) untersucht werden. Zur theoretischen Beschreibung werden häufig Random-Walk-Simulationen eingesetzt. Im folgenden werden diese Simulationen näher beschrieben. Aufgrund der Komplexität des Themas kann jedoch nicht weiter auf die Details der NMR eingegangen werden.

In einem Pulver ist die Orientierung von Molekülen zufällig. Diese wird für gewöhnlich relativ zu dem für die NMR notwendigen Magnetfeld gemessen. Aufgrund von Wechselwirkungen ergibt sich eine Störung mit der Kreisfrequenz $\omega(\theta)$ mit der die Magnetisierung rotiert. Diese wird im folgenden als durch ein Legendre-Polynom zweiter Ordnung beschrieben angenommen.

$$\omega(\theta) = \frac{\delta}{2}\left(3\cos^2(\theta) - 1\right) \tag{1}$$

Die Wechselwirkungsstärke δ soll als 1 angenommen werden.

a) Für das Pulvermittel werden zufällig Winkel (θ, ϕ) für die Orientierung der Moleküle relativ zum Magnetfeld benötigt. Dabei sollen die Störungen in dieser Aufgabe der Einfachheit halber nicht von dem Winkel ϕ abhängen.

   Die Orientierungen sollen auf einer Kugeloberfläche gleichverteilt sein. Dies führt auf eine Winkelverteilung für $\theta \in [0, \pi]$ von

   $$p(\theta) = \frac{1}{2}\sin\theta \quad . \tag{2}$$

   Begründen Sie zunächst, warum diese Verteilung gewählt werden muss. Schreiben Sie weiterhin eine Funktion, welche entsprechend dieser Funktion verteilte Zufallszahlen generiert und testen diese.

   Abgabe: Begründung für die Verteilung, den Quelltext und ein Histogramm mit mindestens 10^4 Zufällig gezogenen θ.

b) Untersuchen Sie als nächstes die Verteilung von $\omega(\theta)$ indem Sie die zufällig gezogenen θ_i in $\omega(\theta)$ einsetzen und das Ergebnis in ein Histogram eintragen. Berechnen Sie weiterhin den Mittelwert

   $$\langle\omega\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\omega(\theta_i) \tag{3}$$

   Abgabe: Ein Histogram mit der numerisch bestimmten Verteilung von $\omega(\theta)$, den numerisch bestimmten Mittelwert $\langle\omega\rangle$ und den Quelltext.

c) Die N Moleküle können während der Messung ihre Orientierung ändern. Dies kann mit Hilfe eines Random-Walks simuliert werden. Für jedes Molekül i wird zunächst eine Anfangsorientierung $\theta_{i,0}$ gezogen. Die Orientierung bleibt jeweils für eine Zeitdauer $t_{\text{life},i,j}$ konstant und ändert sich dann instantan von $\theta_{i,j}$ auf $\theta_{i,j+1}$. Mit dem Index j werden die einzelnen Molekülorientierungen des i. Moleküls durchnummeriert. Im Zeitintervall $\left[\sum_{k=0}^{j-1} t_{\text{life},i,k}, \sum_{k=0}^{j} t_{\text{life},i,k}\right]$ weist das i. Molekül also die Orientierung $\theta_{i,j}$ auf. Die nachfolgende Molekülorientierung $\theta_{i,j+1}$ kann anhand der vorhergehenden Orientierung $\theta_{i,j}$ mit der Gleichung

$$\theta_{i,j+1} = \arccos\left[\cos(\alpha)\cos(\theta_{i,j}) - \sin(\alpha)\sin(\theta_{i,j})\cos(\psi_{i,j})\right] \quad , \tag{4}$$

berechnet werden, wobei $\psi_{i,j} \in [0, 2\pi]$ eine für jeden Schritt und jedes Molekül gleichverteilt gezogene Zufallszahl ist. Dies entspricht einer Drehung des Moleküls im Magnetfeld um den Winkel α um eine durch den Winkel ψ angegebene Drehachse, wobei diese hier zufällig gewählt werden soll.

Die Zeit zwischen zwei Sprüngen $t_{\text{life},i,j}$ ist gemäß der Verteilung

$$p\left(t_{\text{life},i,j}\right) = \frac{1}{\tau}\exp\left(-\frac{t_{\text{life},i,j}}{\tau}\right) \quad . \tag{5}$$

zufällig verteilt.

Es soll nun der Erwartungswert der makroskopischen Magnetisierung

$$M\left(t_p\right) = \left\langle \cos\left[\phi\left(0, t_p\right) - \phi\left(t_p, 2t_p\right)\right]\right\rangle = \sum_{i}^{N} \cos\left[\phi_i\left(0, t_p\right) - \phi_i\left(t_p, 2t_p\right)\right] \tag{6}$$

in Abhängigkeit der Zeit t_p berechnet werden. Dabei ist $\phi\left(t_1, t_2\right)$ die im Zeitintervall $t_2 - t_1$ gelaufene Phase der Magnetisierung

$$\phi_i\left(t_1, t_2\right) = \int_{t_1}^{t_2} \omega\left(\theta_i\left(t\right)\right) \mathrm{d}t \,. \tag{7}$$

Das Integral über die Frequenzen wird praktisch zu einer Summe, weil die Frequenzen zwischen den Sprüngen konstant sind und die Sprünge als instantan angenommen werden. Es soll die Frquenz aus Gleichung (1) verwendet werden.

Abgabe: Berechnete Erwartungswerte $M\left(t_p\right)$ mit $t_p \in [0.1, 100]$, $\tau = 0.75$ und $\alpha = 10°$ für mindestens $N \geq 10^4$ Random-Walks.

Tipp: Wählen und plotten Sie die t_p logarithmisch im Intervall. Verwenden Sie etwa 30-40 Werte, um nicht zu hohe Rechenzeiten zu erhalten.

Tipp: Für sehr kleine Zeiten t_p finden keine Sprünge statt, entsprechend ist zu erwarten, dass für kleine t_p die beiden Phasen gleich sind und daher der Erwarungswert der Magnetisierung 1 ist. Für zunehmendes t_p finden Sprünge statt und werden die Korrelation zerstören, die Magnetisierung wird abnehmen und für sehr große t_p gegen 0 gehen.

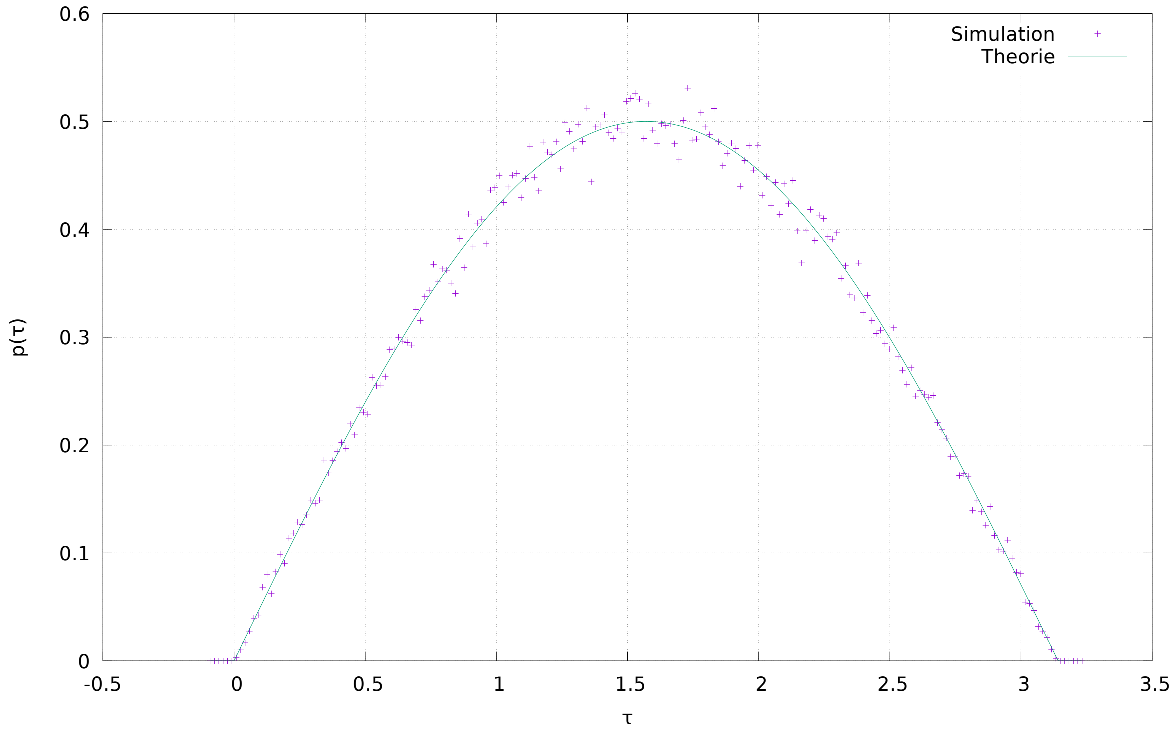

Abbildung 1: Die Verteilung von θ einer Gleichverteilung auf der Kugeloberfläche.

Lösung 1.

a) Die Werte sollen gleichverteilt auf der Kugeloberfläche gezogen werden. Wird der Umfang eines Kreises mit dem Winkel θ mit festem Radius $r = 1$ betrachtet so hängt der Umfang vom Winkel θ ab, er ist genau $U = 2\pi r \sin\theta$. Entsprechend liegen im Raum isotrop verteilte Richtungen häufiger am Äquator als an den Polen. Dies muss auch bei einer Integration berücksichtigt werden, bei Kugelkoordinaten wird dies mit Hilfe der Jacobi-Determinante $r^2 \sin\theta$ erreicht. Die Verteilung ist in Abbildung 1 dargestellt.

b) Die Verteilung $p(\omega)$ kann analytisch hergeleitet werden und ist

$$p(\omega) = \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{2\omega + 1}} \tag{8}$$

wobei ω aus dem Intervall $\omega = [-1/2, 1]$ kommt. Diese Funktion sollte nicht hergeleitet werden, ist aber sicherlich nützlich um die Ergebnisse zu kontrollieren. Die Funktion weist für $\omega = -1/2$ eine Divergenz auf. Dies kann mit dem numerischen Verfahren nicht sehr schön dargestellt werden. Die Verteilung ist in Abbildung 2 dargestellt.

Mit Hilfe des analytischen Ergebnisses für die Verteilungsfunktion lässt sich auch der Erwartungswert $\langle\omega\rangle$ berechnen:

$$\langle\omega\rangle = \int\limits_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} p(\omega)\,\omega \,\mathrm{d}\omega = \int\limits_{-\frac{1}{2}}^{1} \frac{\omega}{\sqrt{3}\sqrt{2\omega + 1}} \,\mathrm{d}\omega = 0 \tag{9}$$

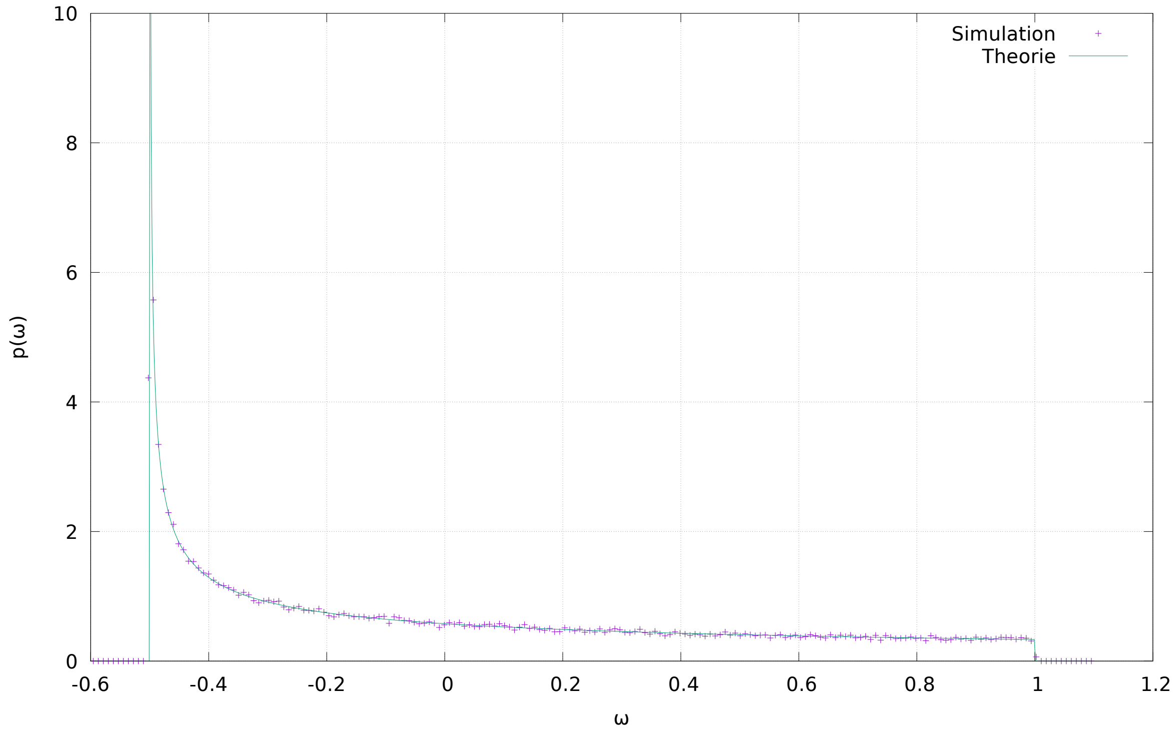

Abbildung 2: Die Verteilung der $\omega(\theta)$ für isotrop verteilte Winkel.

Die numerischen Ergebnisse sollten also Näherungsweise 0 sein.

c) Es ergibt sich die in Abbildung 3 abgebildete Magnetisierungskurve. Es ist ein Abfall der Magnetisierung mit zunehmender Evolutionszeit t_p zu erkennen. Dieser entsteht dadurch, dass einerseits mehr Sprünge stattfinden, wodurch die beiden Phasen auseinander gehen und weiterhin wird das Integrationsintervall größer wodurch kleine Unterschiede einen größeren Einfluss haben. Diese Simulation ist an die Messung einer T_2 Zeit in der NMR angelehnt, diese wird mit Hilfe von Echo Pulsfolgen gemessen. Ein Echo bedeutet, dass wie in dem Argument des cos zu sehen die Phase zunächst in die eine Richtung läuft und dann umgekehrt wird.

Hier wurde nur die Abhängigkeit von t_p untersucht, auch interessant wäre die Abhängigkeit von τ, hier ist für sehr große τ die Magnetisierung immer 1 weil keine Sprünge stattfinden. Wird τ kleiner so nimmt die Magnetisierung zunächst ab weil Sprünge stattfinden. Allerdings gibt es ein Minimum weil für sehr kleine τ so viele Sprünge stattfinden, dass ω gemittelt wird, und der Mittelwert für beliebige Orientierungen (die für sehr viele Sprünge erreicht werden können) wie in Aufgabenteil b) berechnet 0 beträgt.

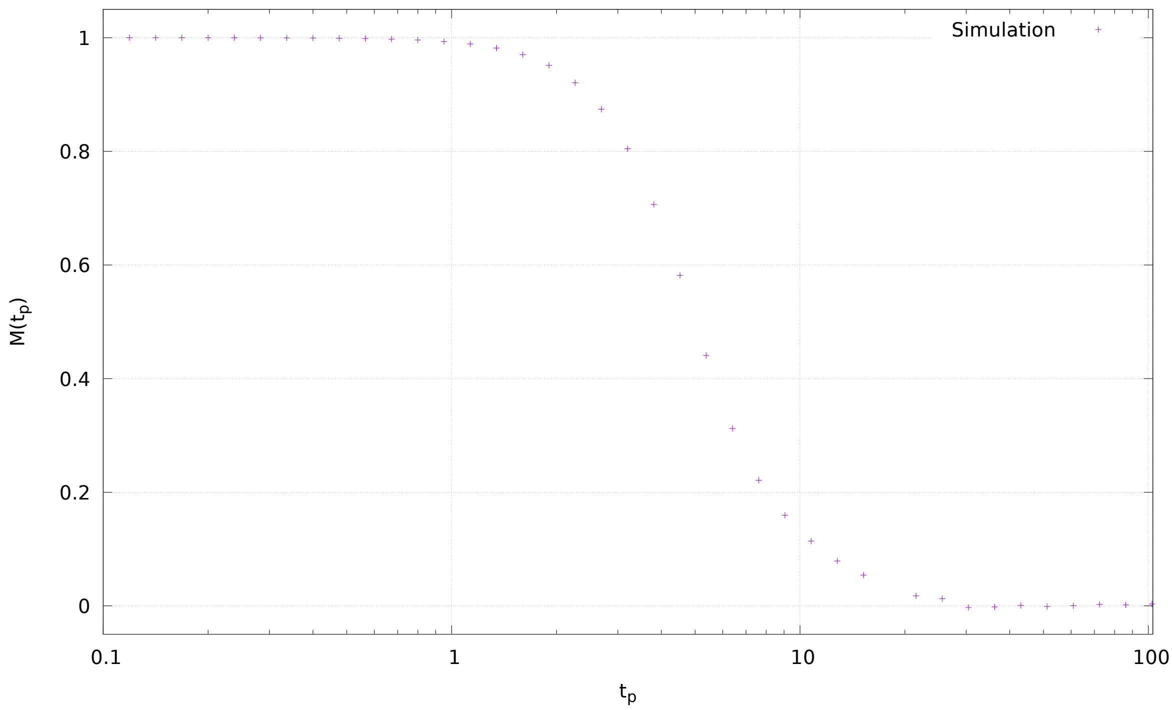

Abbildung 3: Die Magnetisierungskurve $M\left(t_p\right)$ mit $t_p \in [0.1, 100]$, $\tau = 0.75$ und $\alpha = 10°$ für $N = 10^5$ Random Walks.

Aufgabe 2. Monte-Carlo Integration (15 P.)

In dieser Aufgabe sollen Integrale durch Monte-Carlo-Integration berechnet werden. Dafür schreiben wir die Integrale als Mittelwert bezüglich einer Zufallsvariablen x mit Verteilung $p(x)$ um:

$$\langle f \rangle = \int \mathrm{d}x\, p(x) f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i) \tag{10}$$

Das Integral können wir dann durch N-maliges Ziehen einer Zufallszahl aus der Verteilung $p(x)$ berechnen. Wir wollen hier $f(x)$ so wählen, dass wir Standard-Zufallszahlengeneratoren für $p(x)$ verwenden können, die Gleichverteilungen $p(x) = 1$ im Intervall $x \in [0, 1)$ generieren.

a) Das klassische Beispiel ist die Berechnung von π:

$$\int_{|\mathbf{r}|<1} \mathrm{d}^2\mathbf{r} \tag{11}$$

Ziehen Sie dafür N in $[0, 1) \times [0, 1)$ gleichverteilte Zufallszahlenpaare (x_i, y_i) und zählen Sie, wie oft $x_i^2 + y_i^2 < 1$ gilt. Wie berechnet sich daraus das Integral (11) und welcher Wahl von $f(x)$ aus Gleichung 10 entspricht dieses Vorgehen?

Abgabe: Berechneten Wert von π einschicken

b) Sie kennen das in a) gesuchte Ergebnis exakt. Berechnen Sie den Fehler als Funktion von N für $N = 10^k$ mit $k = 1, ..., 6$ und plotten Sie ihr Ergebnis doppelt-logarithmisch. Welche N-Abhängigkeit sollten Sie finden?

Berechnen Sie 1000-mal das Integral (11) mit $N = 1000$ und plotten Sie ein Histogramm der Verteilung der Ergebnisse. Wie sollte die Verteilung aussehen?

Abgabe: Plot und Histogramm einschicken.

c) Schreiben Sie eine Monte-Carlo-Integrationsroutine zur Berechnung des Flächeninhalts einer Ellipse

$$\int_{(x/a)^2 + (y/b)^2 < 1} \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{12}$$

als Funktion der Parameter a und b.

Abgabe: Plots des Flächeninhalts als Funktion von a und als Funktion von b einschicken.

d) Erweitern Sie die Routine auf die Monte-Carlo-Integration eines Integrals

$$\int_{(x/a)^2 + (y/b)^2 < 1} f(x, y)\; \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{13}$$

einer Funktion $f(x, y)$ über einer Ellipse. Berechnen Sie damit

$$\int_{x^2/2 + y^2 < 1} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\; e^{-x^2} \quad . \tag{14}$$

(Kontrolle: 2.993...)

Abgabe: Ergebnis bis zur fünften Nachkommastelle einschicken.

Lösung 2.

a) Werden nur Werte gezählt für die $x^2 + y^2 < 1$ entspricht dies einer Summation über

$$\langle f \rangle = \iint\limits_{x^2+y^2<1} \mathrm{d}x\mathrm{d}y p\left(x, y\right) f\left(x, y\right) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f\left(x_i\right) \tag{15}$$

mit der Funktion

$$f\left(x, y\right) = \theta\left(1 - x^2 - y^2\right) \tag{16}$$

mit der Stufenfunktion $\theta\left(x\right)$

$$\theta\left(x\right) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}. \tag{17}$$

Die Verteilung $p\left(x, y\right)$ entspricht einer Gleichverteilung in $[0, 1[$.

Wird das zweidimensionale Integral als eindimensionales Integral

$$\langle f \rangle = \int \mathrm{d}x\, p(x) f(x) \tag{18}$$

mit gleichverteiltem $p(x) = \frac{1}{2}$ geschrieben, ergibt sich $f(x) = 4\sqrt{1 - x^2}$

b) Siehe Abbildung 4. Der Fehler sollte mit $\epsilon \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ gehen. Entsprechend ist in einem doppelt logarithmischen Diagramm eine Steigung von $-\frac{1}{2}$ zu erwarten.

c) Siehe Abbildungen 6

d) Das Programm liefert den Wert

$$I = (2{,}983035389 \pm 0{,}000000004) \tag{19}$$

wobei der Wert durch Mittelung über 20 Berechnungen mit $N = 10^9$ berechnet wurde und der dazugehörige Fehler.

In Abbildung 7 ist ein Histogramm mit den dazugehörigen Werten zu sehen.

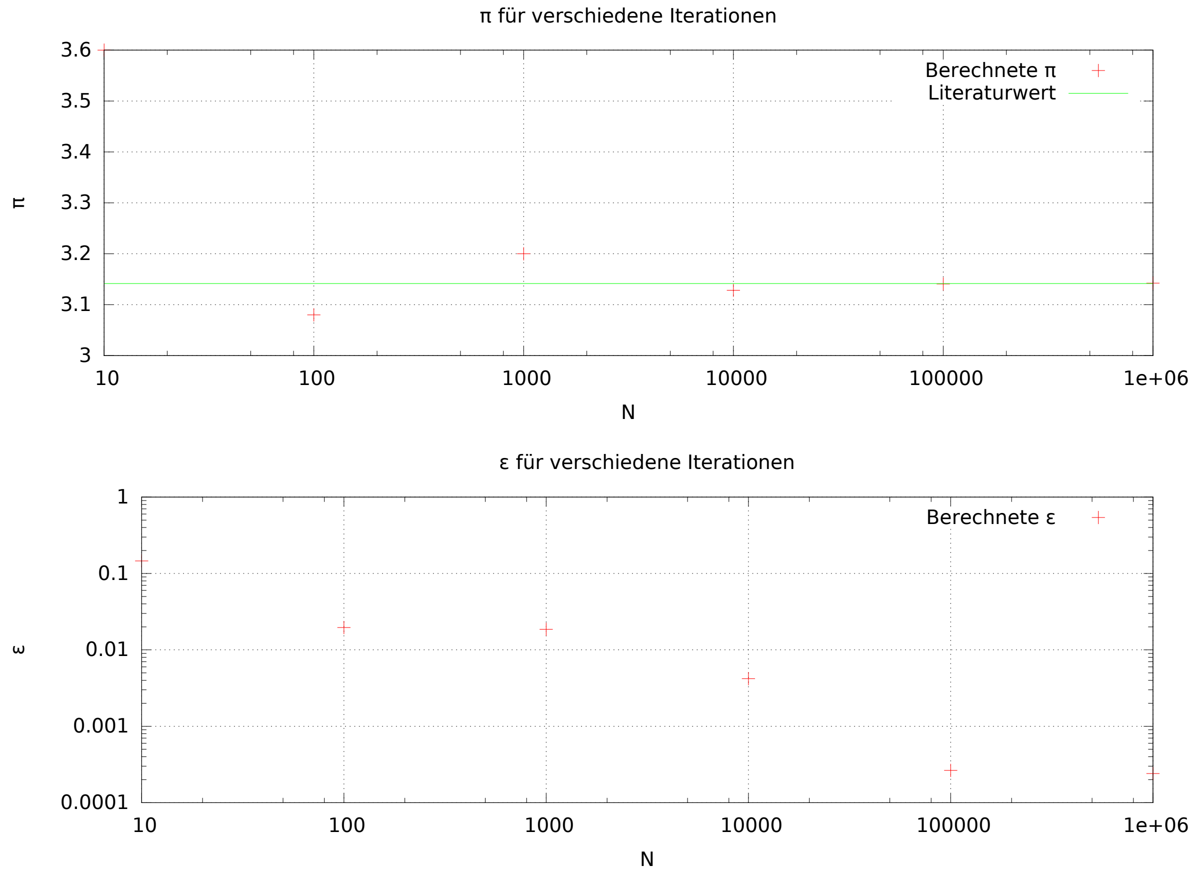

Abbildung 4: Fehler in Abhängigkeit von N bei mittels Monte-Carlo-Integration berechnetem π.

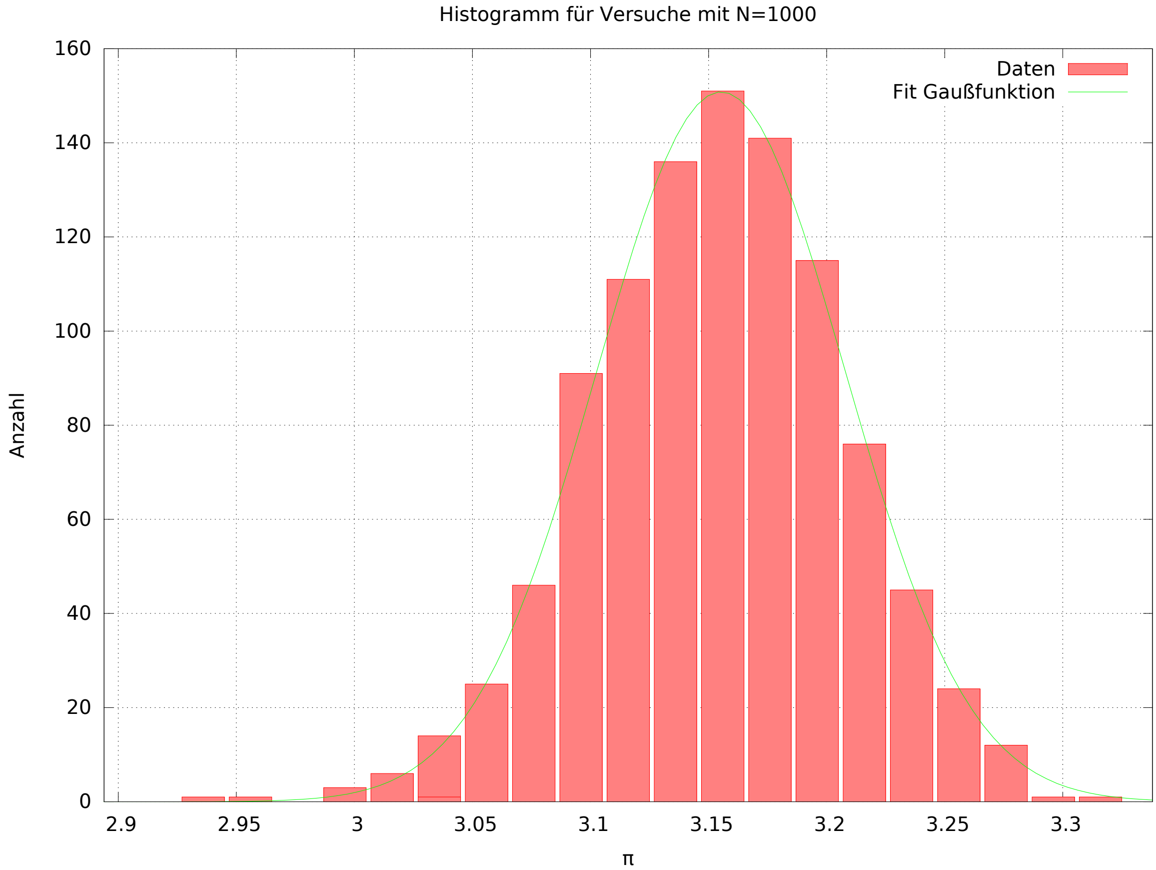

Abbildung 5: Histogramm für 1000 Berechnungen von π mit$N = 1000$.

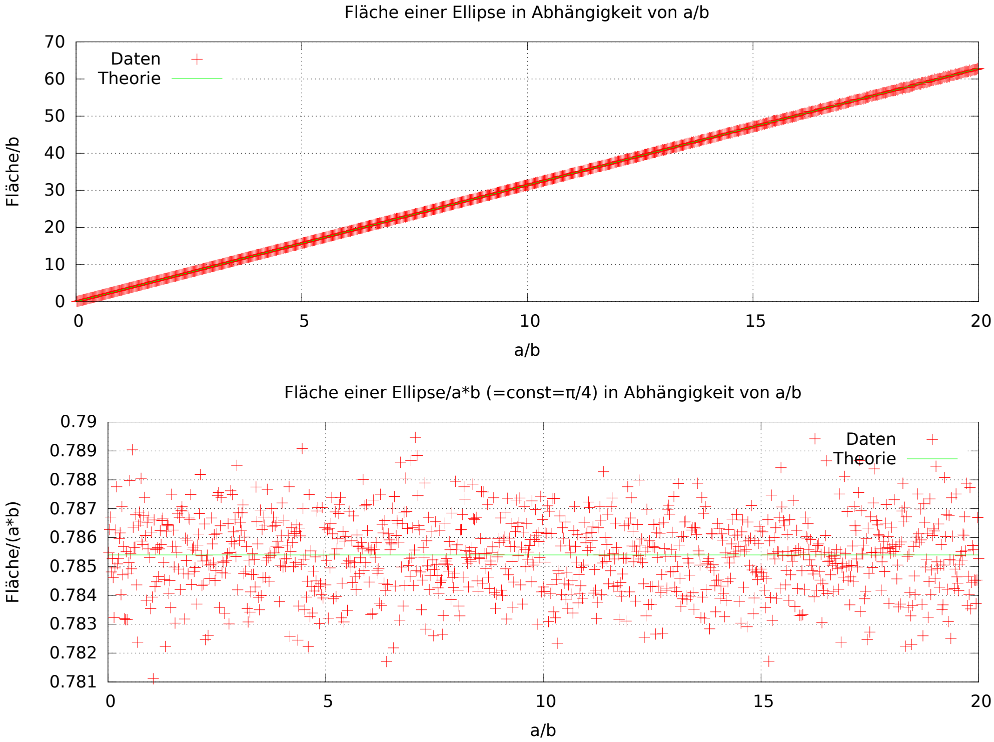

Abbildung 6: Flächeninhalt einer Ellipse in Abhängigkeit von $\frac{a}{b}$.

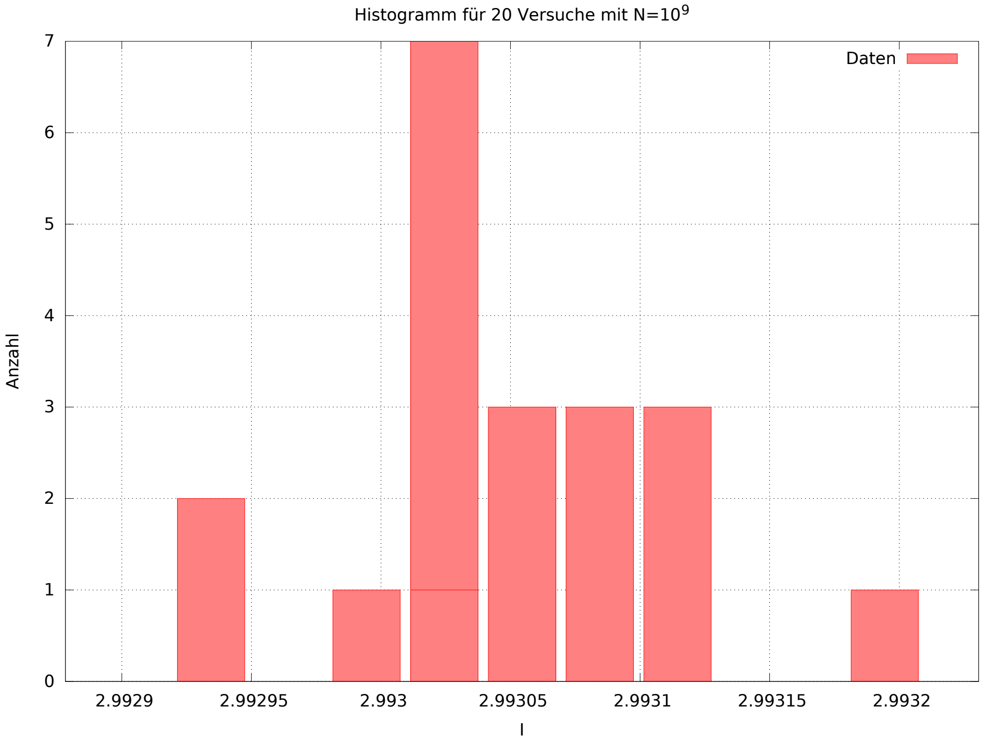

Abbildung 7: Ergebnisse von 20 Berechnungen des Integrals für d) mit $N = 10^9$ in einem Histogramm.