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.

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:

$$\langle f \rangle = \int \mathrm{d}x\, p(x) f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i) \tag{8}$$

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:

$$\int_{|\mathbf{r}|<1} \mathrm{d}^2\mathbf{r} \tag{9}$$

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 (9) und welcher Wahl von $f(x)$ aus Gleichung 8 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 (9) 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

$$\int_{(x/a)^2 + (y/b)^2 < 1} \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{10}$$

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

$$\int_{(x/a)^2 + (y/b)^2 < 1} f(x, y)\, \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{11}$$

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

$$\int_{x^2/2 + y^2 < 1} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\, e^{-x^2} \quad . \tag{12}$$

(Kontrolle: 2.993...)

Abgabe: Ergebnis bis zur fünften Nachkommastelle einschicken.