

Übung 3

Diffusion und Zufallspfade (random walks)

Sie erhalten eine Klassenvorlage zur Erstellung von Random-Walks.

Simple Sampling mit Zufallspfaden

1. Samplen Sie Zufallspfade aus 512 Schritten und bestimmen Sie die Häufigkeitsverteilung der Endpositionen der Zufallspfade. Vergleichen Sie die entstehende Verteilung mit den erwarteten Verteilungen in 1D und radial.
2. Berechnen Sie die mittleren End-zu-End Abstände und Gyrationsradien einer Serie an Zufallspfaden um den Zusammenhang $R^2 = b^2 N$ zu überprüfen. Implementieren Sie dazu die Funktionen für die Berechnung von R_{ee} und R_g . Welche Werte erhalten Sie jeweils für die Bindungslänge b ?

Die Monte-Carlo Bibliothek LeMonADE

Ihnen wird die Software LeMonADE (github.com/LeMonADE-project/LeMonADE) zur Verfügung gestellt. Machen Sie sich zunächst mit dem Programm vertraut. Was ist ein „Ingredients“ Objekt und welche Funktionen erfüllt die „Molecules“ Klasse innerhalb dieses Objekts? Was ist ein Feature und welche Features können Sie nutzen? Wie funktioniert ein Updater, ein Analyzer und was macht der Task Manager?

Simple Sampling mit Zufallspfaden

1. Bearbeiten Sie die Fragestellung zu den Zufallspfaden mit geeigneten Analyzern und Updatern aus der LeMonADE-Bibliothek.

Importance Sampling für die Dynamik von Polymeren

1. Nutzen Sie einen geeigneten Updater aus dem LeMonADE Repository um den Zufallspfad mit einer Importance Sampling Methode zu untersuchen. Das zu Grunde liegende Simulationsmodell des Bindungs-Fluktuationsmodells wird in der nächsten Übung im Detail erläutert.
2. Bestimmen Sie die Autokorrelationsfunktion des End-zu-End Vektors

$$c(\Delta t) = \left\langle \vec{R}_e(t_0) \cdot \vec{R}_e(t_0 + \Delta t) \right\rangle / \left\langle \vec{R}_e^2 \right\rangle$$

einer Kette aus 64 Bindungsvektoren, die für eine große Zahl an verschiedenen Systemen als Funktion des Zeitintervalls Δt gemittelt wird. Wie groß ist die Relaxationszeit und für welche Δt erhält man statistisch unkorrelierte Konformationen? Welche Art der Dynamik erwartet man?

3. Vergleichen Sie die Effizienz dieser Methode mit Simple Sampling bei der Berechnung von R_{ee} und R_g .