Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum

Universität Konstanz

Versuchsanleitung
Monte Carlo Simulation

Version: 07.10.2024

Sie erstellen ein Programm, welches ein Brownsches Teilchen in verschiedenen Potentialen simuliert, immer in einer Dimension. Sie starten mit einem freien Teilchen zur grundlegenden Charakterisierung der Diffusion. Darauf folgt ein Potential-Topf, der aus dem IK-4 bekannt sein sollte. Danach simulieren Sie eine optische Pinzette, die als harmonisches Potential genährt wird $V(x) = \frac{k}{2}x^2$, und vergleichen mit der theoretischen Kurve. Im letzten Teil simulieren Sie ein Doppelmuldenpotential $V(x) = a(\,(x/b)^2 - 1)^2$ und messen die Übergangsrate für verschiedene Potentialhöhen. Die gemessene Gesetzmäßigkeit ist nach Svante Arrhenius benannt und stellt eine einfache Modellierung chemischer Reaktionen dar. Dieser letzte Teil benötigt größere Rechenleistung, weshalb Sie hier mit dem Computer-Grid des PhyMa arbeiten.

Es wird empfohlen den Code in Python zu implementieren, da die Tutoren darauf vorbereitet sind. Sollten Sie eine andere Programmiersprache bevorzugen, können Sie diese verwenden, was die Betreuung jedoch einschränken kann. Der Versuch findet in Mittelerde (P745) statt.

Themen zur Vorbereitung

- Erstellen Sie sich einen PhyMa-Account oder installieren Sie Python auf ihrem eigenen PC und testen Sie die Installation.
- Beschäftigen Sie sich mit den Grundlagen von Python: (i) Befüllen Sie ein numpy array mit 1000 gleichverteilten Zufallszahlen und berechnen Sie Mittelwert und Varianz. (ii) Erstellen Sie ein normiertes Histogramm der Zufallszahlen im Array und plotten Sie dieses.
- Was ist Diffusion und welche Zeitabhängigkeit hat ein Diffusionsgesetz?
- Berechnen Sie den Diffusionskoeffizienten im Falle einer Schrittweite von $\Delta x = 0.01$. Betrachten Sie hierzu die Varianz der Summe von unabhängigen Zufallszahlen als ein Vielfaches der Varianz der einzelnen Zufallszahlen.
- In den obigen Potentialen treten die Parameter k, a, b auf. Diskutieren Sie deren Dimension. Was sind die Längenskalen im Fall des harmonischen und des Doppelmuldenpotentials?
- Betrachten Sie die stationäre Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Orte im Fall der optischen Pinzette i.e. $p(x) = e^{-\beta V(x)}/Z$. Berechnen Sie Z. Plotten Sie $p(x)$ (bsp. Matplotlib). Welche Einheit hat die x-Achse?
- Beschäftigen Sie sich mit der Methodik der Monte-Carlo Simulation, insbesondere dem Metropolis Hastings Algorithmus.
- Welche funktionale Abhängigkeit von $V(x)$ tritt im Arrhenius-Gesetz auf?

Literatur (mit Links, nur im Uni-Netz funktionsfähig)

[Link zu Vorlesungsfolien Stefan Gerlach]

M.P. Allen, D.J. Tildesly: *Computersimulation of Liquids;* insb. Kap. 4; Exemplare in der Bib

Durchführung

Erstellen Sie für jeden Versuchsteil eine neue Datei, indem Sie die alte Datei kopieren und an der neuen Datei weiterarbeiten. Dieses Vorgehen erleichtert das Debuggen.

Freies Teilchen

Starten Sie mit einem Teilchen bei $x_0 = 0$ ohne Potential und nehmen Sie $N_T = 50$ Trajektorien auf. Verwenden Sie eine Schrittweite von $\Delta x = 0.01$. Plotten Sie diese Trajektorien und den Mittelwert der einzelnen Trajektorien über den Simulationsschritten. Plotten sie das mittlere Verschiebungsquadrat über den Simulationsschritten. Zeichnen Sie das zu erwartende Diffusionsgesetz in die Grafik ein.

Potentialtopf

Implementieren Sie ein Brownsches Teilchen im Potentialtopf. Verwenden Sie eine Schrittweite von $\Delta x = 0.01$ und platzieren Sie die Potential-Barriere an Position 0 und 1. Starten Sie die Teilchen jeweils bei $x_0 = 0.5$, simulieren sie $N_T = 10$ Trajektorien für jeweils $N_S = 500000$ Schritte. Plotten Sie das normierte Histogramm. Was fällt ihnen auf? Starten Sie das Teilchen nun an einer zufälligen Position und wiederholen Sie den Versuch.

Optische Pinzette

Implementieren Sie ein Potential der Form $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Starten Sie Simulationen mit den Parametern $x_0 = 0$ und $\beta k \Delta x^2 = 0.001$. Mitteln Sie über jeweils $N_T = 500$ Runs. Simulieren Sie jeweils für $N_S = 100,1000,2000,10000$ Schritte und plotten Sie das jeweilige Histogramm. Vergleichen Sie mit dem theoretischen Wert für die stationäre Verteilung.

Ein Beispiel, welches das obige Verhältnis erfüllt wäre $\Delta x = 0.01$, $\beta = 1$, $k = 10$.

Doppelmuldenpotential

Implementieren Sie ein Potential der Form $V(x) = a((x/b)^2 - 1)^2$. Starten Sie in der Mulde bei $x_0 = b$ und verwenden Sie eine Schrittweite $b/\Delta x = 100$. Simulieren Sie $N_T = 20$ Trajektorien und brechen Sie die Läufe jeweils ab, sobald die Position des Teilchens ihr Vorzeichen wechselt. Messen Sie die mittlere Anzahl der Schritte, die dafür benötigt werden. Verwenden Sie als Parameter $a\beta = 1,2,\ldots,10$. Es ist möglich diesen Teil auf Ihrem eigenen PC zu simulieren. Alternativ können Sie die PhyMa-Grid zur parallelen Berechnung der verschiedenen Parameter a benutzen. Tragen Sie die mittlere Entweichzeit über $a\beta$ auf.

Cheat sheet

Grid Befehle:

```
qsub jobscript.sh        #schickt das jobscript.sh an die queue

qstat                    #zeigt den aktuellen Status der Rechenjobs
```

qdel <jobid>   #löscht den aktuellen Job, falls Fehler auffallen

Python

import sys; a = float(sys.argv[1])

#Liest den Parameter, der übergeben wurde ein: python3 simulation.py <a>

out = "sweep/transitions_" + str(a) + ".out"; np.savetxt(out,escape_step,delimiter=',',fmt='%i')

#Erstellt einen Dateinamen, der mit a durchnummeriert ist. Danach wird das Array ‚escape_step' unter diesem Namen abgespeichert.