

2. Test aus Numerische Methoden und Simulation für Physiker Freitag, 15. 6. 2018

Name:	Matrikelnummer:	Di/Mi:	B1	B2	B3	Σ
			10	8	18	36

WICHTIG: Bitte schreiben Sie die Matrikelnummer **deutlich**, da diese dazu dienen wird, Ihnen Ihre Punkte individuell (voraus. per email) zu übermitteln. Wir werden uns bemühen dies nach bestem Wissen und Gewissen zu tun. Hiermit erklären Sie sich mit diesem Vorgehen einverstanden, und nehmen zur Kenntnis, dass individuelle Fehler passieren können, von deren rechtlicher Verantwortung Sie uns hiermit entbinden.

Wenn Sie mit diesem Vorgehen nicht einverstanden sind, keuzen Sie bitte hier .
Sie können Ihre Punkte dann bei der Testeinsicht erfahren.

Beispiel 1): **Der klassische gedämpfte harmonische Oszillator** 3+3+4=10 Punkte

Die Differentialgleichung zweiter Ordnung des klassischen gedämpften harmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \gamma \frac{d}{dt} + \omega^2 \right] x(t) = 0. \quad (1)$$

γ ist ein Reibungskoeffizient. ω entspricht der Schwingungsfrequenz im ungedämpften Fall. Die Anfangswerte sind gegeben durch $x(0) = x_0$ und $\frac{dx(t)}{dt}|_{t=0} = v_0$.

Fragen:

- Bringen Sie die Differentialgleichung (1) in eine Form, sodass sie mit einem Einschrittverfahren, z.B. dem Euler-Verfahren, gelöst werden kann.
- Skizzieren Sie in einem Flussdiagramm ein Computerprogramm das Gleichung (1) auf Basis des semi-impliziten und expliziten Euler-Verfahrens (erster Ordnung) löst.
Hinweis: Geben Sie die Integrationsgleichungen sowie die erforderlichen Schleifen (DO-loops) in eindeutiger Weise an. Die Verwendung von spezifischen Kommandos oder Syntax einer Programmiersprache ist nicht erforderlich.
- Führen Sie eine Stabilitätsanalyse für Gleichung (1) durch. Geben Sie die Ungleichungen an, welche die Stabilitätsbereiche für das semi-implizite und explizite Euler-Verfahren (erster Ordnung) definieren.
Hinweis: Berechnen Sie die Eigenwerte der Verstärkungsmatrix und geben Sie die entsprechende Ungleichung an.

Beispiel 2): **Der quantenmechanische harmonische Oszillator** 2+3+3=8 Punkte

Die Hamiltongleichung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (2)$$

Das Potential ist definiert durch $V(x) = \frac{x^2}{2}$. Die physikalischen Lösungen für gebundene Zustände erfüllen folgende Gleichungen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad (3)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x) = 0 \quad (4)$$

Fragen:

- a) Geben Sie die Definition der Konsistenzordnung an. Welche Konsistenzordnung hat das Numerow-Verfahren?
- b) Geben Sie die Numerow-Formel zur Lösung von Gleichung (2) an.
- c) Geben Sie die Anfangsbedingung und Integrationsrichtung zur Bestimmung der Lösung von Gleichung (2) mit Hilfe des Numerow-Verfahrens an.

Viel Erfolg!

Beispiel 3) Simulated Annealing

9+1+5+3 = 18 Punkte

Es soll das Annealing eines dreidimensionalen NaCl Kristalls simuliert werden. Als ein einfaches Modell betrachten wir hierfür Na^+ - und Cl^- -Ionen auf einem Gitter und zunächst das großkanonische Ensemble $H - \mu_{\text{Na}}N_{\text{Na}} - \mu_{\text{Cl}}N_{\text{Cl}}$ mit einem unterschiedlichen chemischen Potential $\mu_{\text{Na}/\text{Cl}} = \mu_{\pm 1}$ und Teilchenzahl $N_{\text{Na}/\text{Cl}} = N_{\pm 1}$ für Na^+ - ($\sigma_i = +1$) und Cl^- -Ionen ($\sigma_i = -1$). Die attraktive (repulsive) Coulomb-Wechselwirkung zwischen Na^+ und Cl^- (Na^+ und Na^+ bzw. Cl^- und Cl^-) soll lediglich bis zu den nächsten Nachbarn in H berücksichtigt werden und ist $J \approx -0.9 \text{ eV}$ ($-J \approx 0.9 \text{ eV}$).

- (a) Schreiben Sie einen Algorithmus (C, FORTRAN oder Flußdiagramm, Struktogramm mit gleich mächtigem Befehlssatz), der den Prozess beschreibt, dass ein NaCl-Kristall (vorgegeben als *array mag(L,L,L)*) in einen Ofen mit Temperatur $T_O = 1500 \text{ K} \approx 0.13 \text{ eV}/k_B$ gegeben wird und anschließend langsam auf Raumtemperatur $T_R = 300 \text{ K}$ abgekühlt wird.

Gehen Sie dabei vom Newtonschen Abkühlungsgesetz $dT(t)/dt = -\alpha(T(t) - T_R)$ aus, wobei $T(t)$ die Temperatur zur Zeit t in Stunden ist. Die Konstante $\alpha = 0.05/\text{h}$ ist klein, so dass Sie von einem adiabatischen Abkühlen ausgehen können. Der Teilchenaustausch sei dagegen zunächst sehr schnell/instantan. (Sie müssen daher nicht den genauen physikalischen Prozess des Teilchen- und Energieaustausches simulieren, sondern können (approximativ) einen beliebigen Prozess simulieren, der ins thermische und Teilchen-Gleichgewicht bei der neuen Temperatur führt.)

Ausgegeben werden soll ein repräsentativer Zustand des NaCl-Kristall (als array) nach vier Tagen Annealing, nicht das Ensemble bei T_R .

- (b) Begründen Sie die Wahl Ihrer Sweeps und Zeitschritte, und warum dies den Abkühlungsprozess beschreibt.
- (c) Modifizieren Sie Ihr Programm (Ihre Unterprogramme) so, dass Sie stattdessen dass Annealing im kanonischen Ensemble (kein Teilchenaustausch mit der Umgebung) simulieren.
- (d) Geben Sie die Energiefunktion an, wenn im Sinne einer Ionenbindung auch langreichweitigere Coulomb-Wechselwirkungen berücksichtigt werden (die Sie durch J ausdrücken können). Ist ein Single-Spin-Flip-Algorithmus hier sinnvoll? (Sie müssen für (d) keinen Algorithmus angeben)

Viel Erfolg!

