Appell an die wissenschaftliche Ehrlichkeit:
Schreiben Sie Ihre Programme und Diskussion eigenständig!

**Computational Physics**
Sommersemester 2024
Blatt 9, Abgabe: Montag, 01. Juli, 8:00

Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. A. Bäcker

# Stochastische Prozesse

**Aufgabe 9.1:** **(16 Punkte)**

Simulieren Sie unter Verwendung der numerischen Implementation des Smoluchowski-Feynman-Ratschen-Modells (siehe Vorlesung) die Diffusion von Teilchen in einem Potential, das periodisch an- und ausgeschaltet ist. Betrachten Sie dabei das Potential $V(x,t) = f(t)\,(g(x) + h(x))$. Nutzen Sie eine dimensionslose Betrachtung, d. h. die zeitliche sowie die örtliche Periode haben eine Länge von 1. Der zeitlich-periodische Anteil $f(t)$ startet in jeder Periode mit dem Zustand „Aus", der nach einer Zeit $t_{\text{aus}}$ durch den Zustand „An" abgelöst wird. Verwenden Sie für die örtlichen Anteile die Formen

$$g(x) = V_0\,(\cos(2\pi x) + a\sin(4\pi x)) \quad \text{(räumlich periodischer Anteil)}\,, \tag{1}$$
$$h(x) = \alpha x \quad \text{(räumliches Kipp-Potential)}\,. \tag{2}$$

Betrachten Sie die Entwicklung im Zeitintervall $[0, N_{\text{Perioden}}[$ für die Parameter: Anzahl der betrachteten Perioden $N_{\text{Perioden}} = 5$; Verhältnis „An" zu „Aus" $\theta = t_{\text{an}}/t_{\text{aus}} = 0{,}7$; Potentialhöhe $V_0 = -0,7$; Asymmetriefaktor $a = 0{,}2$; Kippwinkel $\alpha = 0{,}0$; Diffusionskonstante $D = 0{,}08$ und Anfangsort $x_0 = 0{,}0$. Führen Sie diese Simulation für $R = 10000$ Realisierungen mit einer Zeitschrittweite $\Delta t = 1/S$ mit $S = 3000$ durch.

- Bestimmen Sie nach jeweils $k = 100$ Zeitschritten, d. h. für $t_n = nk\Delta t$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots$, aus der Simulation die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x, t_n)$ mittels `ax.hist` und stellen Sie diese in dem Bereich $[x_{\min} = -4, x_{\max} = 4]$ dynamisch dar. Wählen Sie für das Histogramm eine zu allen Zeiten gleiche feste Anzahl $N_{\text{bin}}$ von Bins.
- Stellen Sie in diesem Plot zusätzlich, in geeigneter Skalierung, das Potential $V(x,t)$ zu den Zeiten $t_n$ dynamisch dar.
- Berechnen Sie zu den Zeiten $t_n$ den Erwartungswert direkt aus den Orten der Teilchen und stellen Sie dessen Abhängigkeit von $t_n$ in einem zusätzlichen Subplot dynamisch dar. Heben Sie dabei farblich hervor, ob das Potential zu dem entsprechenden Zeitpunkt $t_n$ an- oder ausgeschaltet war.
- Geben Sie Ihr Programm für obige Parameter ab und diskutieren Sie im abschließenden Kommentar folgende Punkte:
  (a) Beschreiben und erklären Sie auf mikroskopischer Ebene den Effekt, den Sie bei obiger Wahl der Parameter im zeitlichen Verhalten des Erwartungswertes beobachten.
  (b) Finden Sie ein Parameterpaar $(\theta, a)$ mit $\theta \in\, ]0, 2[$ und $a \in [0, 1]$, das den in (a) beschriebenen Effekt für den Erwartungswert (i) maximiert und (ii) minimiert, so dass dieser nicht mehr zu beobachten ist. Begründen Sie Ihre Wahl!
  (c) Betrachten Sie nun zusätzlich das Kipp-Potential $h(x)$. Finden Sie für die Abgabeparameter einen Kippwinkel $\alpha \in [0, 2]$ für den der Einfluss des Kipp-Potentials den in (a) beschriebenen Effekt des Erwartungswertes im angegebenen Zeitraum kompensiert.

**Vorgaben und Hinweise:**

- Starten Sie die Dynamik mittels Mausklick.
- Verwenden Sie eine separate Funktion zur Berechnung eines einzelnen Zeitschritts.
- Um zu verhindern, dass die dynamische Darstellung immer langsamer (und unübersichtlicher) wird, müssen Sie das vorherige Histogramm mittels `ax.patches.clear()` löschen, wobei `ax` der Plotbereich ist.
- Nutzen Sie bei der dynamischen Darstellung wieder das Konstrukt (siehe Blatt 7)

```
event.canvas.flush_events()
event.canvas.draw()
```

- Für Teil (a) kann es hilfreich sein, das Verhalten des Histogramms sowie des Erwartungswertes für $V_0 = 0,2$ zu betrachten.
- Importieren Sie das Modul für Zufallszahlen `np.random` und benutzen Sie die interaktive Hilfe mittels `help("np.random")` bzw. z.B. `help("np.random.uniform")` (oder mittels `?` in `IPython`) um die nötigen Befehle zu finden und zu verstehen.
- Achten Sie beim Verwenden von `ax.hist` darauf, dass die Verteilung normiert sein soll.