Sprawozdanie

Symulacja ruchów Browna

Amadeusz Filipek

Laboratorium komputerowe WFiIS AGH

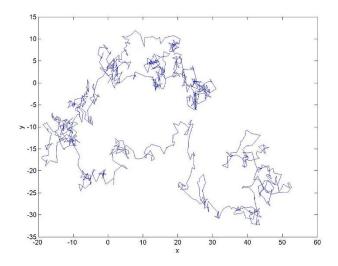
Celem ćwiczenia jest wykonanie symulacji ruchów Browna metodą Monte Carlo oraz analiza uzyskanych wyników.

Ruchy Browna poraz pierwszy zostały zaobserwowane przez Roberta Browna jako nieregularny ruch pyłku kwiatowego w zawiesinie wodnej. Ruchy te wynikają z nieustannych zderzeń zawieszonego pyłku z cząsteczkami wody. Fluktuacje tych zderzeń powodują, że pęd przekazany przez niewielkie i szybkie cząsteczki wody uzyskuje niezerową wartość i także podlega fluktuacjom. Teoria ruchów Browna została opracowana niezależnie przez Alberta Einsteina oraz Mariana Smoluchowskiego. Matematycznie ruchy Browna można opisać jako proces błądzenia przypadkowego, wtedy położenie cząstki wynosi:

$$x(t_i) = x(t_{i-1}) + d$$

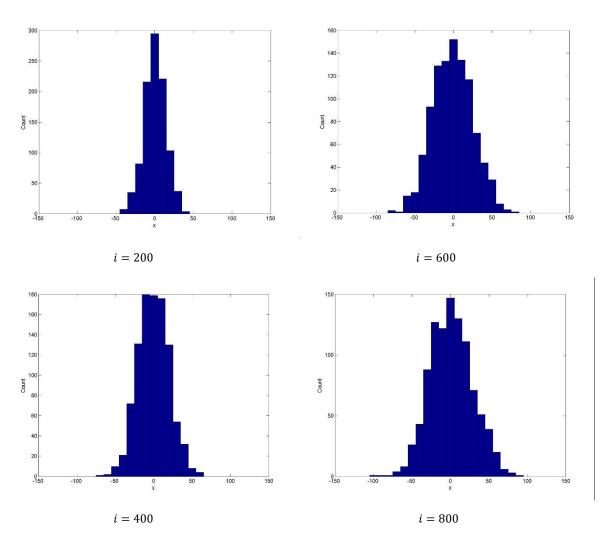
Gdzie d stanowi przemieszczenie cząstki w jednym kroku czasowym i jest liczbą losową.

W symulacji liczbę d generuję ze standaryzowanego rozkładu normalnego. Symulację przeprowadzam w dwóch wymiarach. Symulację rozpoczynam od położenia początkowego równego $[\,0,0\,]$. Symulację przeprowadziłem dla i=1000 kroków czasowych. Uzyskana trajektoria cząstki wygląda następująco :



Wykres 1. Trajektoria cząstki błądzącej przypadkowo, początek w punkcie [0,0]

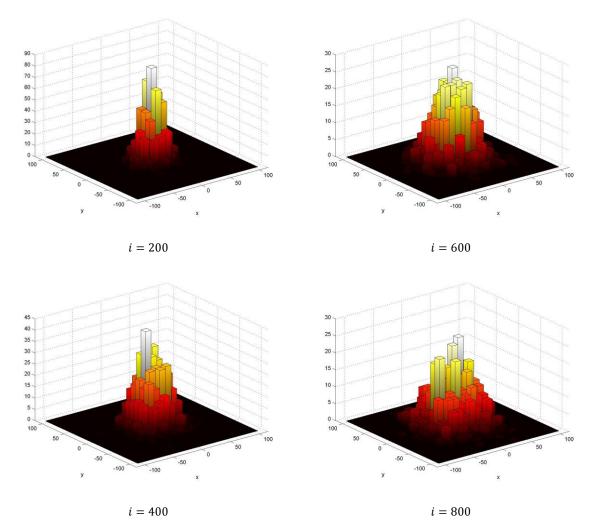
Następnie przeprowadziłem symulację dla N=1000 cząstek błądzących przypadkowo. Uzyskane rozkłady ilości cząstek w osi $x\,$ dla kolejnych punktów czasowych wyglądają następująco :



Wykres 2. Rozkłady ilości zliczeń cząstek na osi x dla czterech wybranych punktów czasowych

Na powyższych wykresach widać, że rozkład ilości cząstek na osi x przypomina rozkład Gaussa. W miarę upływu czasu rozkład się rozszerza – dyspersja rozkładu rośnie. Wynik jest zgodny z teorią, ponieważ rozkład cząstek rozpuszczonych w zawiesinie opisany jest równaniem dyfuzji. Wprowadzenie rozpuszczalnika punktowo prowadzi do jego równomiernego rozpływu o rozkładzie Gaussa.

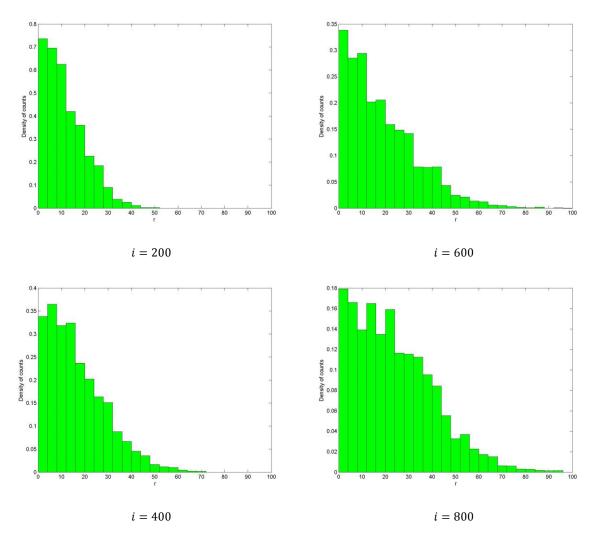
W następnej kolejności wykonałem rozkłady ilości cząstek w dwóch wymiarach x,y dla wybranych punktów czasowych :



Wykres 3. Rozkłady ilości zliczeń na płaszczyźnie xy dla czterech wybranych kroków czasowych

Rozkład dwuwymiarowy cząstek w przestrzeni dla wybranego punktu czasowego wygląda analogicznie do rozkładu jednowymiarowego i przypomina dwuwymiarowy rozkład Gaussa. Na podstawie powyższych wykresów można stwierdzić, że proces błądzenia losowego jest izotropowy, żaden kierunek w przestrzeni nie jest wyróżniony.

Jeżeli proces jest izotropowy to wykazuje symetrię sferyczną – dla dwóch wymiarów jest to symetria kołowa. Korzystając z tego faktu warto przejść do współrzędnych biegunowych, wtedy cała informacja o rozkładzie cząstek zawarta jest we współrzędnej radialnej r – odległości od środka układu. Uzyskane przeze mnie rozkłady gęstości cząstek w funkcji odległości od centrum układu dla wybranych punktów czasowych przestawione są poniżej :



Wykres 3. Rozkłady gęstości cząstek w funkcji odległości od centrum dla czterech wybranych kroków czasowych

Na powyższych wykresach widać, że maksimum gęstości zawsze pozostaje w punkcie centralnym. Z biegiem czasu rozkład gęstości cząstek poszerza się.

Podsumowując, wykonałem symulację ruchów Browna w dwóch wymiarach metodą Monte Carlo opisanych jako proces błądzenia losowego. Dla uzyskanych trajektorii cząstek wykonałem histogramy w osi x, płaszczyźnie xy oraz w odległości od centrum dla czterech wybranych punktów czasowych. Zauważyłem, że proces błądzenia losowego jest izotropowy i prowadzi do zjawiska dyfuzji.