

Simulación Simplificada de Movimiento Browniano

Morales Zamudio, Ángela; Hernández Álvarez, Claudeth Clarissa; Maldonado Duarte, Amir; Yeomans Reyna, Laura Lorenia.

Universidad de Sonora, División de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Física

angelamz3020@gmail.com, claudeth.clarissa@gmail.com, amir.maldonado@unison.mx, laura.yeomans@fisica.uson.mx

github.com/AngelaMZ3020



“El saber de mis hijos
hará mi grandeza”

Abstract

Las partículas en una suspensión se mueven de manera aleatoria debido al golpeteo térmico de las moléculas de solvente. Dicho movimiento Browniano es relevante en las propiedades de materiales blandos tales como coloides o sistemas biológicos (óvulos de animales marinos, proteínas de membrana). En este trabajo estudiamos un modelo sencillo de movimiento Browniano, simulando caminatas aleatorias. Analizamos estadísticamente el movimiento de 100 partículas en un plano, trazando trayectorias de 10,000 pasos mediante la generación de números aleatorios; comparamos los resultados en situaciones de isotropía probabilística en el movimiento, con situaciones donde la partícula tiene mayor probabilidad de dirigirse en una dirección respecto a otras. Esta situación es relevante cuando las partículas se mueven siguiendo algún gradiente (como la concentración de moléculas señaladoras). Los resultados se comparan con el caso de partículas que interactúan mediante el potencial de Lennard-Jones.

Introducción

El estudio de sistemas biológicos es de vital importancia en la ciencia y cuenta con múltiples aplicaciones. Estos sistemas suelen tener comportamientos caóticos, y por ende, difíciles de modelar de manera exacta. Sin embargo, contamos con que muchos de estos tienen parecido con otros sistemas físicos, tales como los coloides. En este trabajo proponemos modelar estos sistemas bajo dos aproximaciones. La primera será observando el movimiento de las partículas siguiendo caminatas aleatorias. La segunda aproximación será observar el comportamiento bajo un potencial, por cuestiones didácticas, el potencial más sencillo de todos, el de Lennard-Jones.

Marco Teórico

Un sistema coloidal es una solución tal que las partículas del soluto distribuidas en el solvente consisten en moléculas simples o iones. En la ciencia moderna se considera que toda sustancia es coloidal si se mantiene en una condición tal que al menos una de sus dimensiones se encuentre en el rango comprendido entre 10 y 10,000 Å aproximadamente. Ejemplos de esto, son el jabón antibacterial y la gelatina.

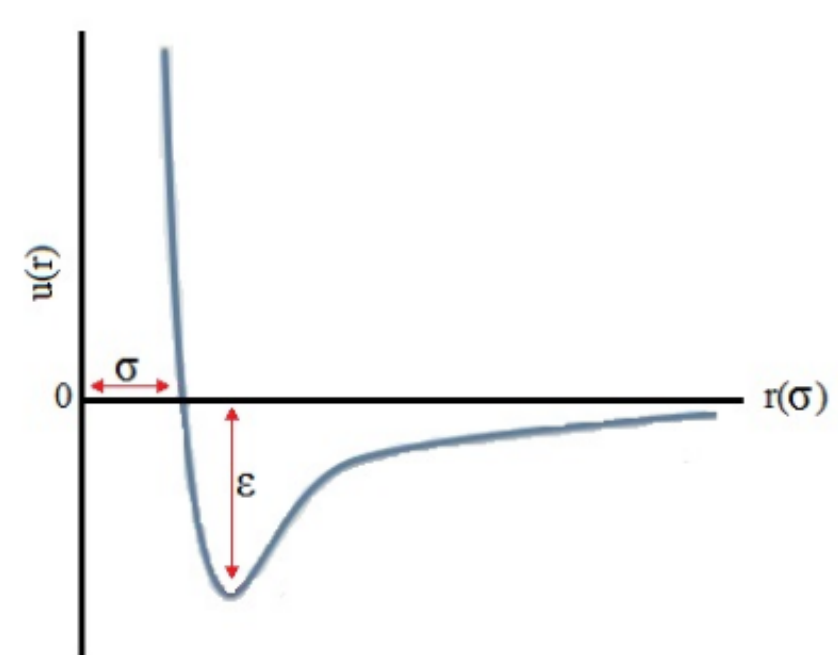
Caminata Aleatoria

Una caminata aleatoria se define como la trayectoria de una partícula en la que su posición en cierto momento sólo depende de su posición en algún instante previo y alguna variable aleatoria que determina su subsecuente dirección y la longitud de paso. En otras palabras, la probabilidad de que todos los pasos posibles estén igualmente distribuidos, por lo que el comportamiento de la trayectoria va a depender únicamente de cómo se realicen los pasos.

Potencial de Lennard-Jones

El potencial de Lennard-Jones es de la forma:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$



- ϵ es la profundidad del potencial.
- σ es la distancia finita en la que el potencial entre partículas es cero.
- r es la distancia entre partículas.

El término r^{-12} describe la repulsión y el término r^{-6} describe la atracción. Los parámetros σ y ϵ están determinados por la estructura de las moléculas individuales. Para $r > \sigma$ la pendiente de $V(r)$ es positiva, la fuerza es atractiva; para $r < \sigma$, la pendiente es negativa y la fuerza es fuertemente repulsiva; mientras que para $r = \sigma$ la fuerza es nula (mínimo de la energía potencial).

Metodología

Las primeras simulaciones proporcionadas se basaron en un Generador de Números Aleatorios para cada partícula para determinar las parejas (X, Y) de pasos de cada una. En las segundas aproximaciones, se utilizaron simulaciones de Monte Carlo para partículas que interactúan entre sí mediante el potencial de Lennard-Jones. Para el análisis de datos se utilizó el lenguaje de programación *Python*, empleando las bibliotecas necesarias, entre ellas *scipy.stats*, para poder visualizar gráficas y aplicar pruebas a un conjunto de datos (generados por medio de simulaciones en *Fortran* bajo condiciones de aleatoriedad, y luego bajo un potencial).

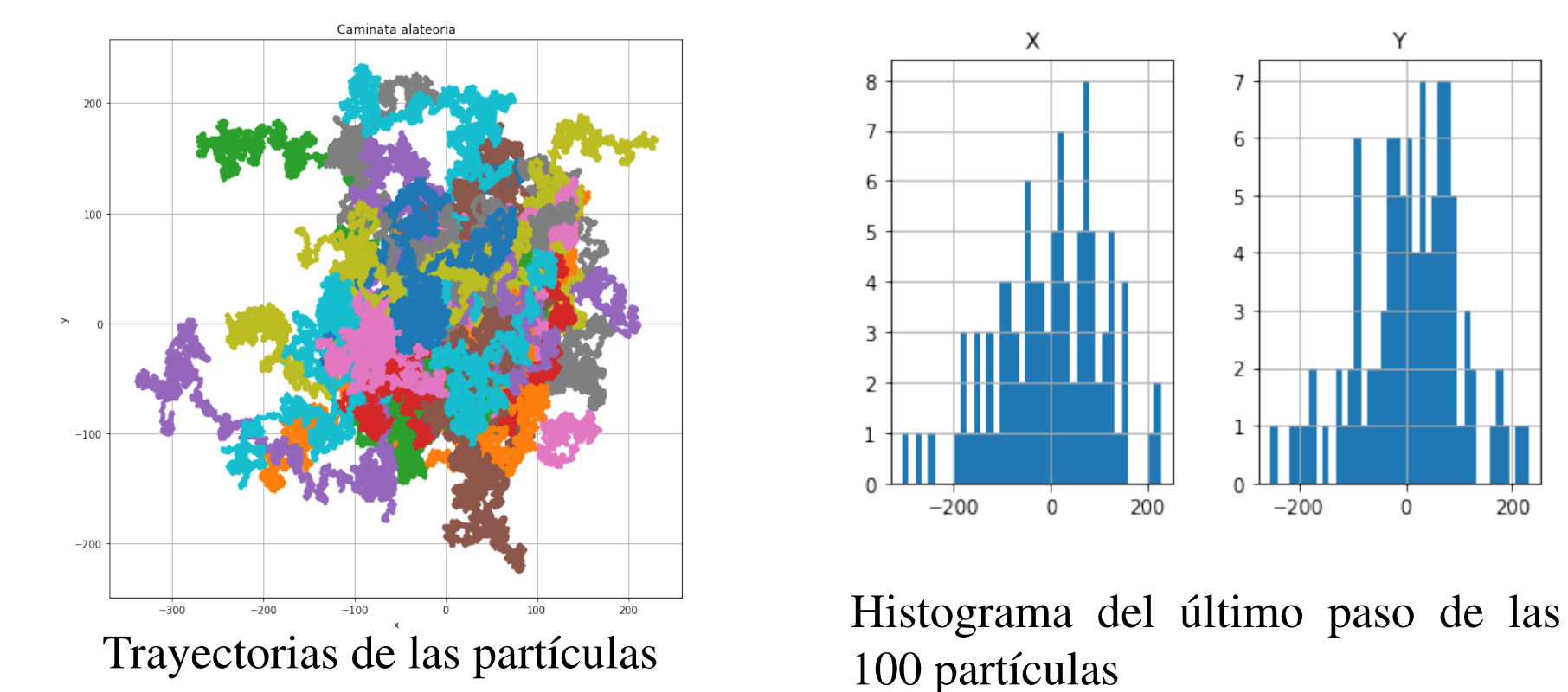
A cada conjunto de datos, haciendo uso de un análisis estadístico, se le realizó diagramas de caja, histogramas (en las posiciones x y y), y una prueba de *Shapiro-Wilk* de normalidad, donde:

- H_0 : La muestra sigue una distribución Gaussiana.
 H_1 : La muestra no sigue una distribución Gaussiana.

Resultados

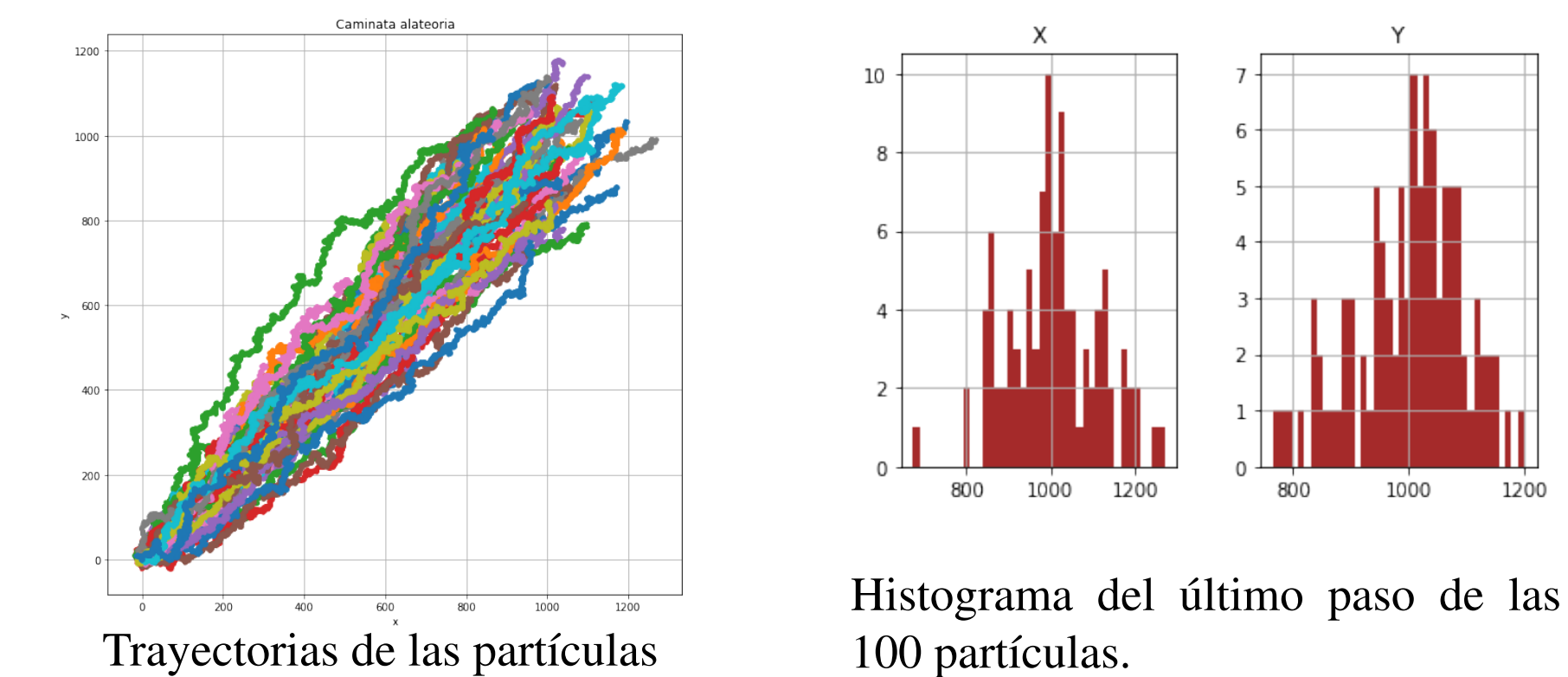
Primer Conjunto de Datos con Caminata Aleatoria

En X: La probabilidad de dar un paso a la derecha es de 0.50.
En Y: La probabilidad de dar un paso hacia arriba es de 0.50.



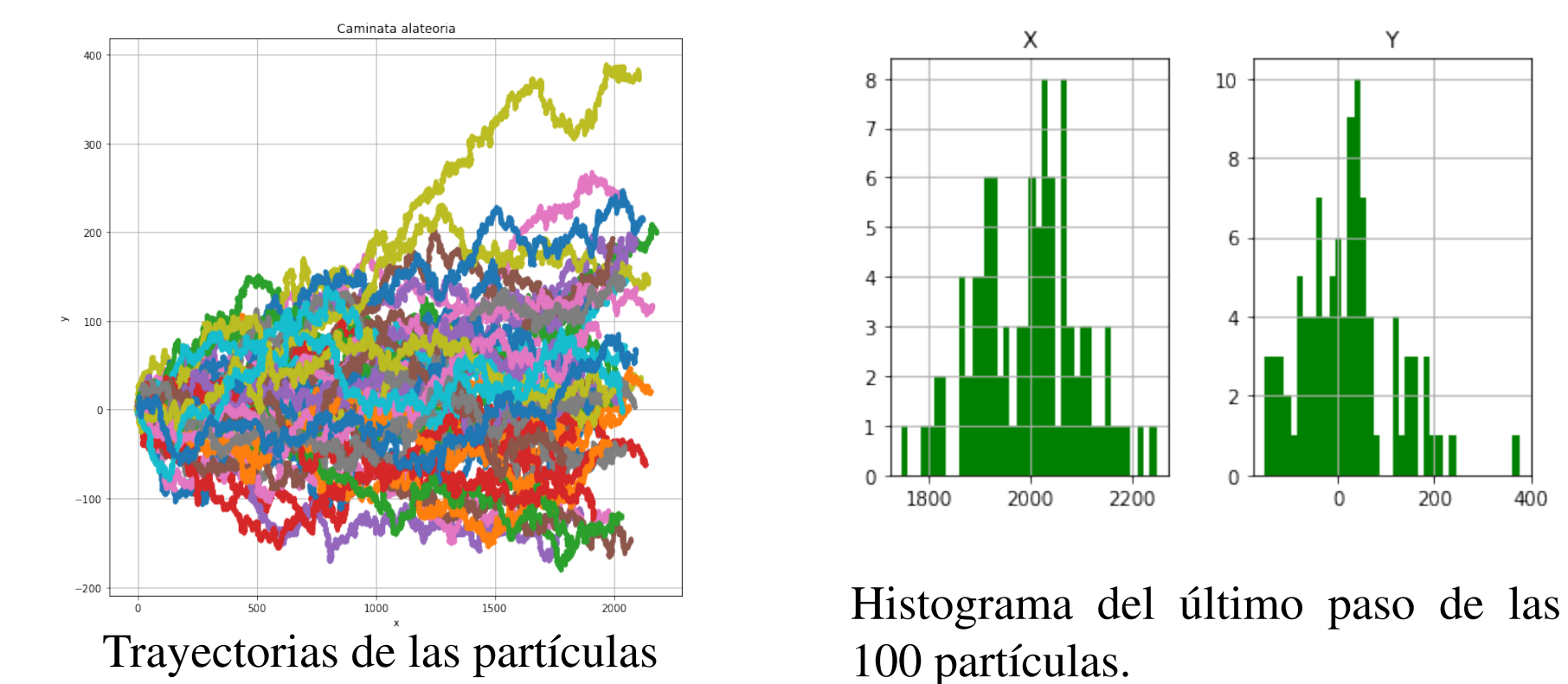
Segundo Conjunto de Datos con Caminata Aleatoria

En X: La probabilidad de dar un paso a la derecha es de 0.55.
En Y: La probabilidad de dar un paso hacia arriba es de 0.55.



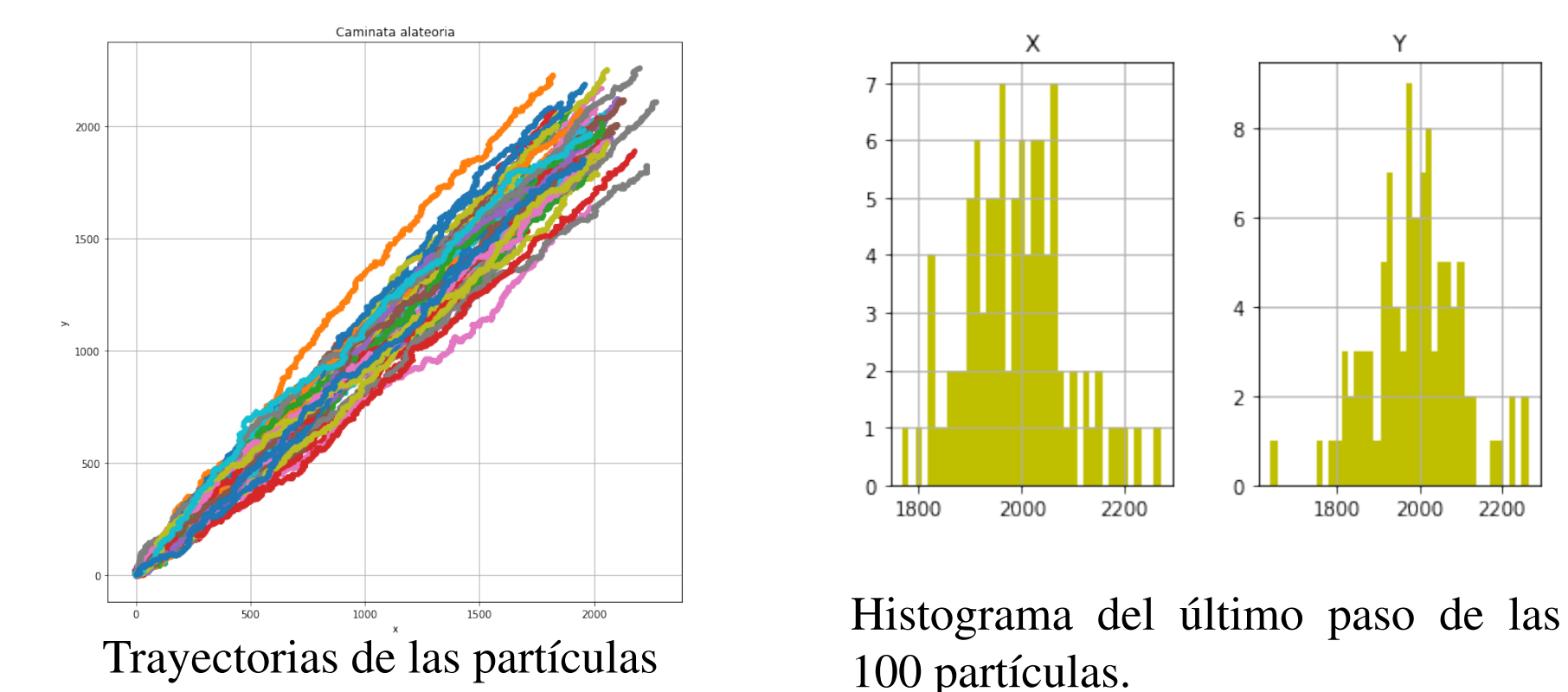
Tercer Conjunto de Datos con Caminata Aleatoria

En X: La probabilidad de dar un paso a la derecha es de 0.60.
En Y: La probabilidad de dar un paso hacia arriba es de 0.50.



Curto Conjunto de Datos con Caminata Aleatoria

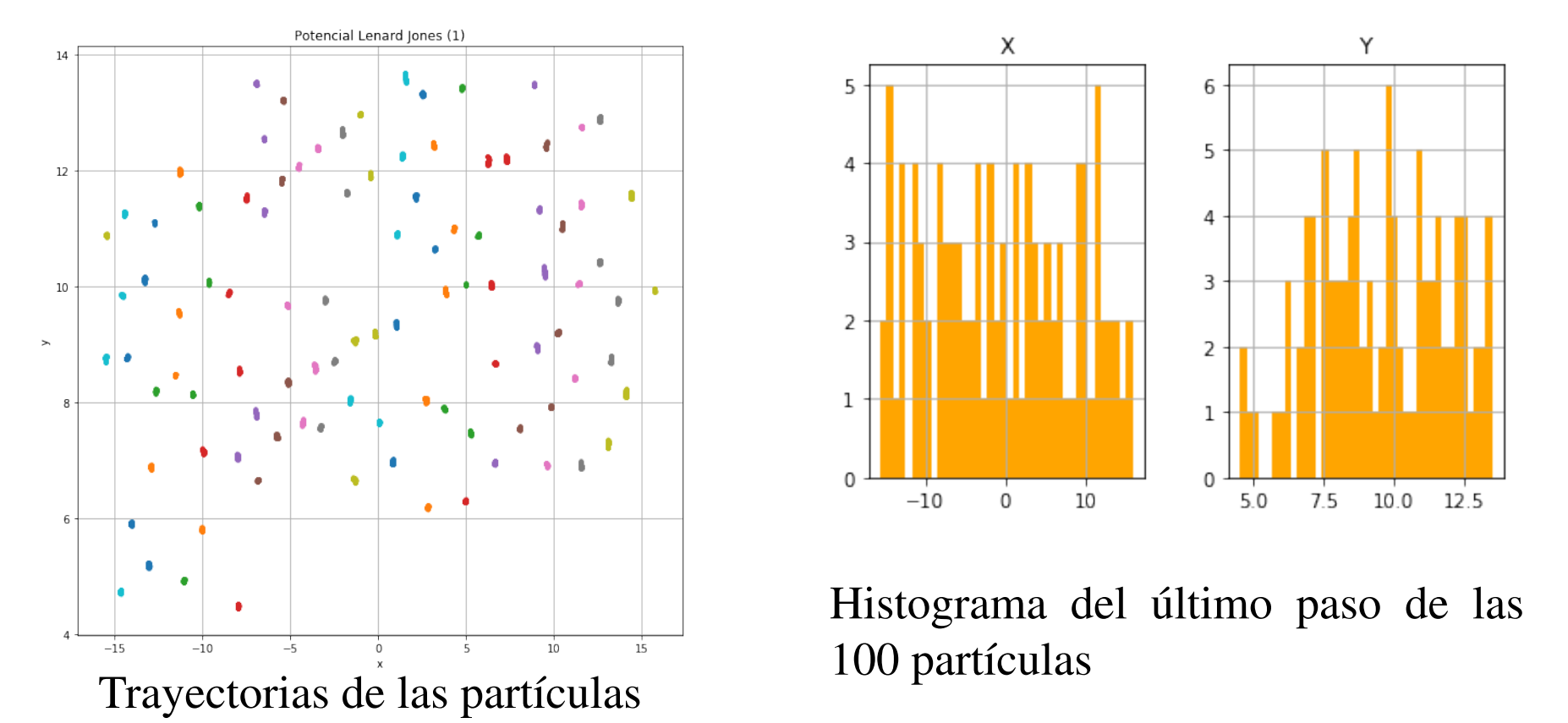
En X: La probabilidad de dar un paso a la derecha es de 0.60.
En Y: La probabilidad de dar un paso hacia arriba es de 0.60.



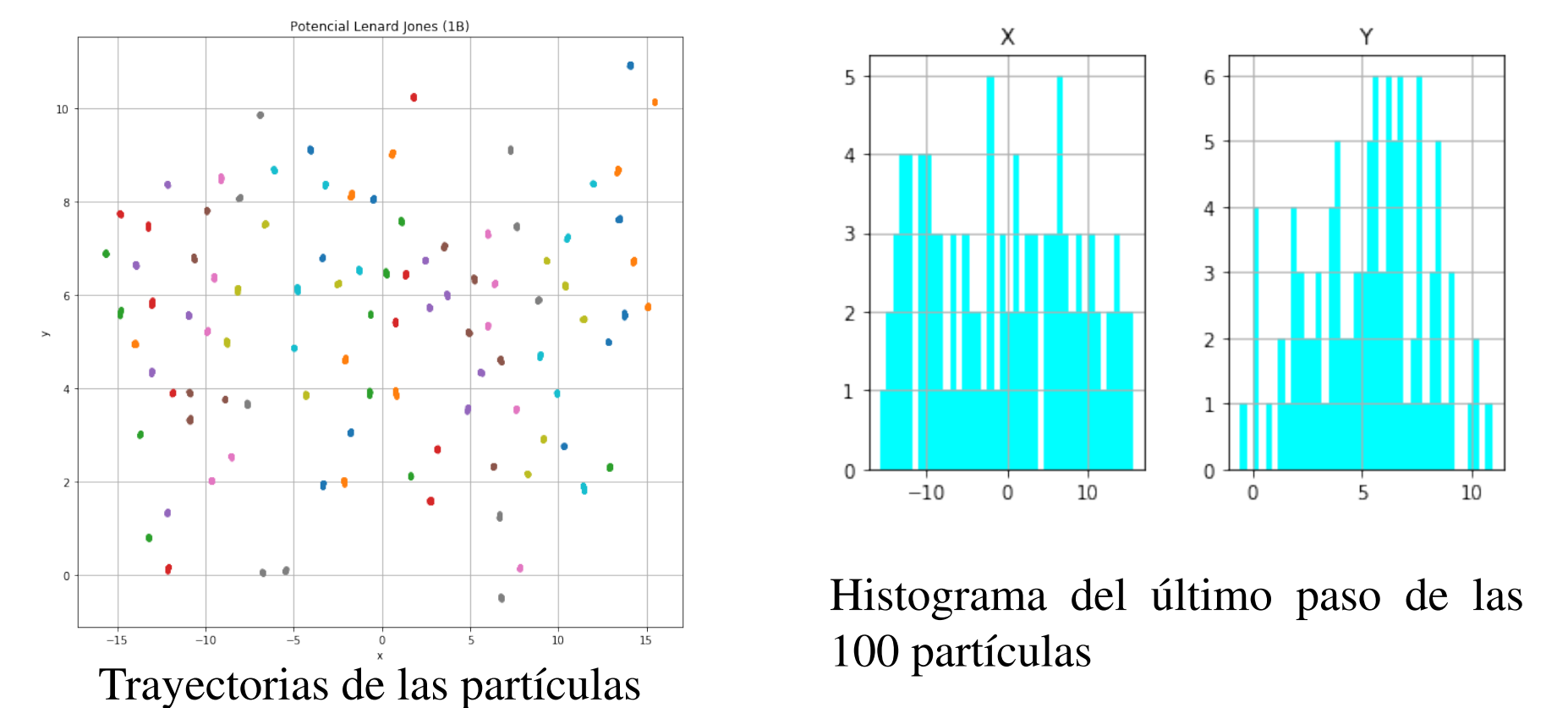
En los cuatro conjuntos de datos basados en Caminata Aleatoria, la prueba *Shapiro-Wilk* concluyó en que los datos provenían de una distribución *Gaussiana*.

Primer Conjunto con Potencial Lennard-Jones

Resultados luego de 15,000 pasos.
Concentración Reducida $n^* = 0.4$
Temperatura Reducida $T^* = 1.500$

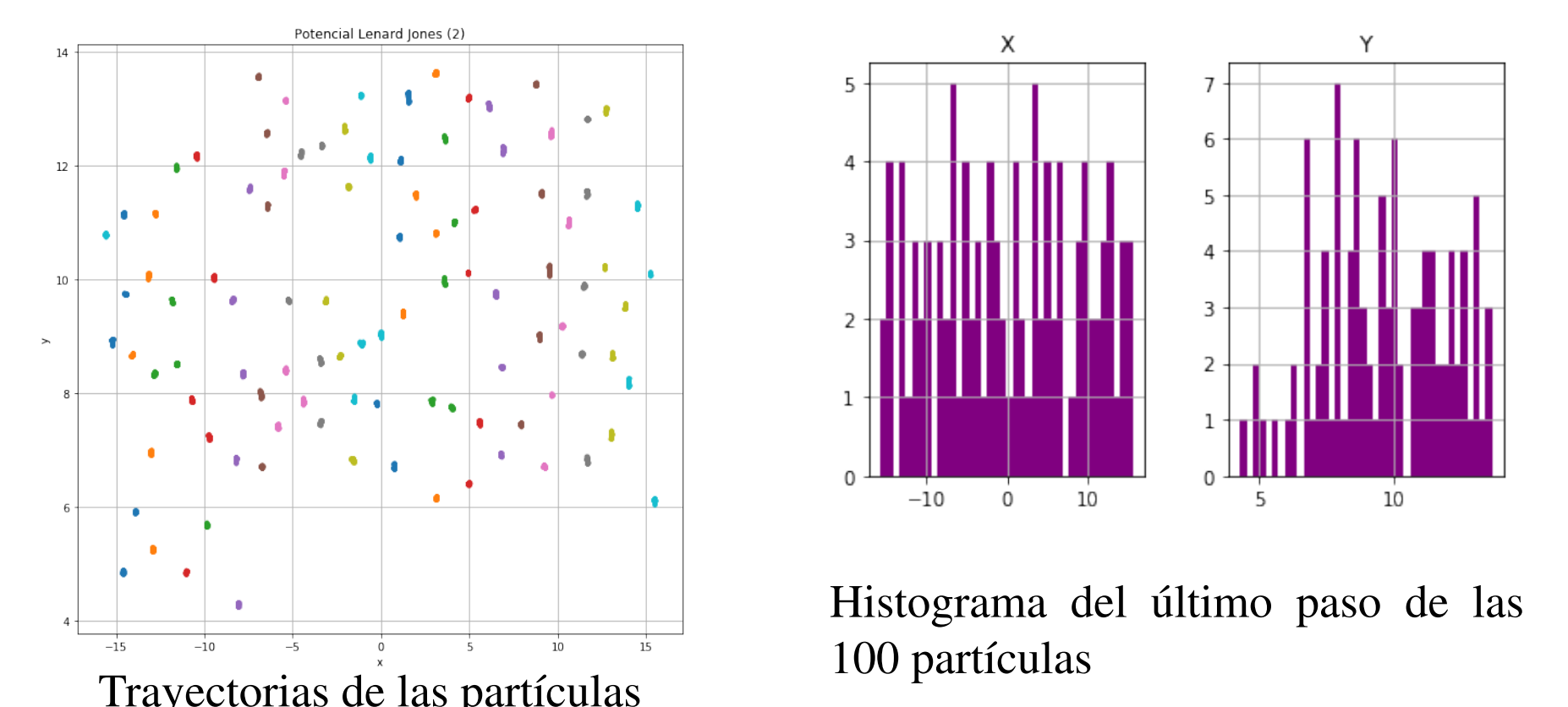


Resultados luego de 100,000 pasos.

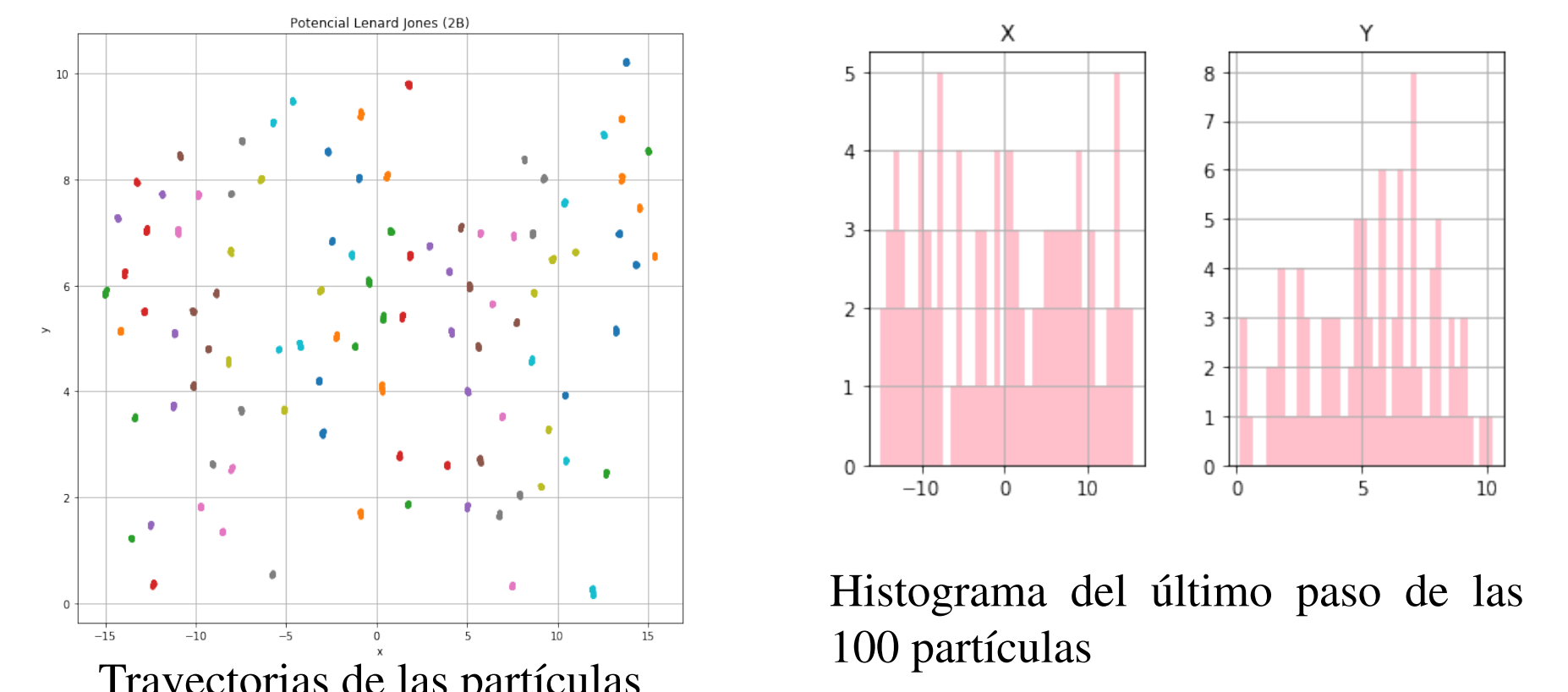


Segundo Conjunto con Potencial Lennard-Jones

Resultados Con 15,000 pasos. Concentración Reducida $n^* = 0.4$.
Temperatura Reducida $T^* = 0.7500$.



Resultados luego de 100,000 pasos.



En estos conjuntos de datos, la prueba *Shapiro-Wilk* concluyó en que ningún conjunto provenía de una distribución *Gaussiana*.

Conclusiones

En el primer caso, pudimos observar cómo la trayectoria de las partículas no seguía ningún patrón bien definido, incluso se comprobó la aleatoriedad mediante pruebas de normalidad y haciendo uso del *Teorema Límite Central*. Al cambiar el peso de probabilidades de las posiciones posteriores de cada partícula, observamos una tendencia hacia una dirección particular. Una vez agregado el potencial, las partículas tendían a vibrar con respecto a posiciones fijas, con separaciones similares entre ellas. Esto muestra un enorme parecido al comportamiento de las partículas suspendidas en sistemas coloidales y, mejor aún, el comportamiento de algunos constituyentes de ciertos sistemas biológicos.

References

- [1] Kielbowicz Valarezo, Augusto A. . (2017). Análisis estadístico y modelado numérico de trayectorias de partícula única: mecanismos de difusión y confinamiento. Mayo, 2019, de Universidad de Buenos Aires Sitio web: <http://users.df.uba.ar/gpuentes/UBAThesis.pdf>
- [2] Anónimo. (2019). Camino Aleatorio. Mayo, 2019, de Wikipedia Sitio web: https://es.wikipedia.org/wiki/Camino_aleatorioDefinición
- [3] Sir Maurice Kendall . (2015). ANALISIS DE TRAYECTORIA Y CONSTRUCCION DE MODELOS . Mayo, 2019, Sitio web: https://repositorio.cepal.org/bitstream/handle/11362/12592/NP14-03_es.pdf?sequence=1
- [4] NIST/SEMATECH. (2012). Anderson-Darling and Shapiro-Wilk tests. Mayo, 2019, de Engineering Statistics Handbook Sitio web: <https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/prc/section2/prc213.htm>

Agradecimientos: A la profesora Gudelia Figueroa por el aporte estadístico y Fidel Navarro por motivarnos a presentar esta idea.