Pràctica 5: Nombres aleatoris 1

Objectius: Simulació de difusió, generació de nombres aleatoris, histogrames normalitzat, Box-Müller, caminants aleatoris

— Nom del programa principal **P5-18P.f** incloent les subroutines **subgaussians** i **histograma**.
Precisió de reals: **double precision**.
Inicialitza els nombres aleatoris amb el teu NIUB.

1) Genera 120000 nombres gaussians de mitjana igual a zero i variància igual a 1. Genera un histograma normalitzat (densitat de probabilitat) amb 120 caixes amb $x_a = -5$ i $x_b = 5$ i fes una figura **P5-18P-fig1.png** comparant-lo amb la distribució exacta. Escriu lels dades de l'histograma (punts, valors i errors) al fitxer **P5-18P-res1.dat**.

2) Dins de l'aire, simula el moviment aleatori de $N_M = 250$ molècules d'oxigen independents en dues dimensions. Considera que les molècules es troben a l'origen $(x, y) = (0, 0)$ a $t = 0$ i evolucionen amb el temps de manera que a cada pas de temps,

$$\begin{aligned} x_n(t + \Delta t) &= x_n(t) + \Delta x\,, \qquad n = 1, \ldots, N_M \\ y_n(t + \Delta t) &= y_n(t) + \Delta y\,, \qquad n = 1, \ldots, N_M \end{aligned}$$

on Δx i Δy segueixen una distribució normal de mitjana 0 i variància $\delta\,\Delta t$, on $\delta = 2.21 \times 10^{-5} m^2/s$ i $\Delta t = 0.02$ s. Fes servir els nombres generats a 1).

Es pot provar que el coeficient de difusió ve donat per,

$$D = \lim_{t \to \infty} \frac{\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2}{2t}\,.$$

on les mitjanes s'han de fer de totes les molècules, $\langle A(t) \rangle = \frac{1}{N_M} \sum_{i=1}^{N_M} A_i(t)$.

Simula 240 passos de temps amb el $\Delta t = 0.02$s

Pista: per passar de nombres x amb variància igual a 1 a nombres y amb variància igual a σ^2, nomès cal el canvi de variable: $y = \sigma x$.

a) Fes una figura representant la trajectòria durant tota l'evolució de 5 de les molècules, **P5-18P-fig2.png**.

b) Calcula $\mathrm{Var}(y(t)) = \langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2$ en funció del temps. Escriu-lo al fitxer **P5-18P-res2.dat**: $t, \mathrm{Var}(y(t))$.

c) Fes una figura **P5-18P-fig3.png** mostrant: $t, \mathrm{Var}(y(t))$ comparat amb $2Dt$, ajusta a ull el coeficient de difusió D i anota'l a la figura.

Extra) Considera la distància final de cada molècula a l'origen, $d_i = \sqrt{x_i(t_f)^2 + y_i(t_f)^2}$, calcula l'histograma normalitzat (densitat de probabilitat) de la variable d_i. Escriu els valors, $d, p(d)$, al fitxer **P5-18P-extra.dat** i genera una figura **P5-18P-extra.png** mostrant la densitat de probabilitat de la variable d (d'unes 10/15 caixes).

* Si tot et funciona bé, prova de fer la última figura amb 10 vegades més de molècules (i de nombres aleatoris) i fes l'histograma d) amb unes 100 caixes.

Entregable: P5-18P.f, P5-18P-res1.dat, P5-18P-res2.dat, P5-18P-extra.dat P5-18P-fig1.png, P5-18P-fig2.png, P5-18P-fig3.png, P5-18P-extra.png, scripts de gnuplot