ДЗ №1. Броуновского движение

В данном задании вы будете моделировать движение малых объектов в сплошной среде.

Выполнять на ядре версии `3.7` .

Требования к сдаче задания

1. Дедлайн **4 марта в 23:59 по МСК**. После дедлайна работы не принимаются, кроме случаев наличия уважительной причины.
2. Сдача будет организована через google-форму.
3. У каждого студента будет свой **трёхзначный** уникальный номер (далее — `<ID>`).
4. Код генерации вместе с импортами должен быть рабочим и помещен в отдельный py-файл с именем `code_1_<ID>.py` , который надо загрузить в google-форму.
5. Также необходимо загрузить заполненный ноутбук как в формате `ipynb` , так и в формате `pdf` . В браузере можно `Print Page (Ctrl+P/Command+P) -> Save as PDF (без бэкграунда, хедера и футера)` . Имена должны быть `1_<ID>.ipynb и 1_<ID>.pdf` соответственно.
6. Графики необходимо загружать в формате **`PNG`** в соответствии с комментариями к заданиям.
7. Для зачёта по заданиям блока `B` необходимо выполнить **все** задания блока `A` .

Теория

Абсолютное значение скорости движения частиц идеального газа, находящегося в состоянии ТД-равновесия, есть случайная величина, имеющая распределение Максвелла и зависящая только от одного термодинамического параметра — температуры T.

В общем случае плотность вероятности распределения Максвелла для n-мерного пространства имеет вид:

$$p(v) = \mathrm{C}\, e^{-\frac{mv^2}{2kT}}\, v^{n-1},$$

где $v \in [0, +\infty)$, а константа C находится из условия нормировки $\int\limits_0^{+\infty} p(v)\mathrm{d}v = 1$.

Физический смысл этой функции таков: вероятность того, что скорость частицы входит в промежуток $[v_0, v_0 + \mathrm{d}v]$, приближённо равна $p(v_0)\mathrm{d}v$ при достаточно малом $\mathrm{d}v$. Тут надо оговориться, что математически корректное утверждение таково:

$$\lim_{\mathrm{d}v \to 0} \frac{\mathbb{P}\{v | v \in [v_0, v_0 + \mathrm{d}v]\}}{\mathrm{d}v} = p(v_0).$$

Поскольку это распределение не ограничено справа, определённая доля частиц среды приобратает настолько высокие скорости, что при столкновении с макрообъектом может происходить заметное отклонение как траектории, так и скорости его движения.

Мы предполагаем идеальность газа, поэтому компоненты вектора скорости частиц среды v_i можно считать независимыми нормально распределёнными случайными величинами, т.е.

$$v_i \sim \text{Norm}(0, s^2),$$

где s зависит от температуры и массы частиц и одинаково для всех направлений движения.

При столкновении макрообъекта с частицами среды происходит перераспределение импульса в соответствии с законами сохранения энергии и импульса, но в силу большого числа подобных событий за единицу времени, моделировать их напрямую достаточно затруднительно. Поэтому для выполнения этого ноутбука сделаем следующие предположения:

- Приращение компоненты координаты броуновской частицы за фиксированный промежуток времени (или за шаг) Δt имеет вид $\Delta x_i \sim \text{Norm}(0, \sigma^2)$.
- σ является конкретным числом, зависящим как от Δt, так и от параметров броуновской частицы и среды.
- При этом σ не зависит ни от координат, ни от текущего вектора скорости броуновкой частицы.

Если говорить формальным языком, в этом ноутбуке мы будем моделировать [Винеровский случайный процесс (https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D1%80%D0%BE%D0%B2%D](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D1%80%D0%BE%D0%B2%D) с фиксированным шагом.

In [1]:
```
import typing

from os import mkdir
from os.path import isdir, join as join_path
from functools import partial

import numpy as np
import scipy.stats as scs
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.cm as cm

from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D


np.random.seed(200)          # Для воспроизводимости результатов

DATA_DIR = 'homework_data/'  # Папка, куда мы будем сохранять все файлы
if not isdir(DATA_DIR):
    mkdir(DATA_DIR)

to_data_dir = partial(join_path, DATA_DIR)  # Склеивает путь к DATA_DIR с именем
print(f"Пример работы функции 'to_data_dir': {to_data_dir('test.file')}")

%matplotlib inline
```

```
Пример работы функции 'to_data_dir': homework_data/test.file
```

Любые другие библиотеки подключать запрещено, как и прописывать любые другие импорты.

Задание

1. Разработать функцию симуляции броуновского движения

Которая считает приращение координаты частицы на каждом шаге как $\Delta x_{ijk} \sim \mathrm{Norm}(0, \sigma^2)\ \forall i, j, k$ (где i — номер частицы, j — номер координаты, а k — номер шага) и принимает в качестве аргументов:

- Параметр σ;
- Количество последовательных изменений координат (шагов), приходящихся на один процесс;
- Число процессов для генерации (количество различных частиц);
- Количество пространственных измерений для генерации процесса.

Возвращаемое значение:

- 3-х мерный массив `result` , где `result[i,j,k]` — значение j-й координаты i-й частицы на k-м шаге.

Общие требования

- Функцию реализовать на основе черновика ниже (ничего из уже написанного не менять и не удалять).
- Считать, что все частицы в начальный момент времени находятся в начале координат.
- Пропущенные описания принимаемых аргументов дописать на русском.
- Если код будет не понятен проверяющему, оценка может быть снижена.

Требования блока `A`

- Реализовать функцию для двумерного броуновского движения, то есть только для `n_dims=2` .

Требования блока `B`

- Реализовать функцию для произвольной размерности, не используя циклы.
- Дописать проверки типов для остальных аргументов.

Обратите внимание на использование аннотаций для типов аргументов и возвращаемого значения функции. В новых версиях Питона подобные возможности синтаксиса используются в качестве подсказок для программистов и статических анализаторов кода, и никакой дополнительной функциональности не добавляют.

Например, `typing.Union[int, float] означает "или int, или float"` .

Что может оказаться полезным

- Генерация нормальной выборки: `scipy.stats.norm` . [Ссылка (https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.norm.html)](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.norm.html)

- Кумулятивная сумма: метод `cumsum` у `np.ndarray`. [Ссылка (https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.ndarray.cumsum.html)](https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.ndarray.cumsum.html)

In [2]:
```
def generate_brownian(sigma: typing.Union[int, float, complex] = 1,
                      *,
                      n_proc: int = 10,
                      n_dims: int = 2,
                      n_steps: int = 100) -> np.ndarray:
    """
    :param sigma:    стандартное отклонение нормального распределения,
                     генерирующего пошаговые смещения координат

    :param n_proc:   число процессов для генерации (количество различных частиц)

    :param n_dims:   количество пространственных измерений для генерации процесса

    :param n_steps:  количество последовательных изменений координат (шагов), при

    :return:         np.ndarray размера (n_proc, n_dims, n_steps), содеражащий на
                     [i,j,k] значение j-й координаты i-й частицы на k-м шаге.
    """
    if not np.issubdtype(type(sigma), np.number):
        raise TypeError("Параметр 'sigma' должен быть числом")
    # Для кандидатов в отличники: <ДОПИСАТЬ ПРОВЕРКИ ТИПОВ>

    for par in [n_proc, n_dims, n_steps]:  # проверка типов данных
        if not np.issubdtype(type(par), np.number):
            raise TypeError("Параметр '{}' должен быть числом".format(par))

    result = np.random.normal(0, sigma**2, (n_proc, n_dims, n_steps - 1))  # ген
    result = np.concatenate([result, np.zeros((n_proc, n_dims, 1))], axis=2)  # 
    result = np.cumsum(result, axis=2)  # считаем координаты частиц на каждом ша

    return result
```

Символ `*` в заголовке означает, что все аргументы, объявленные после него, необходимо определять только по имени.

Например,

```
generate_brownian(323, 3)           # Ошибка
generate_brownian(323, n_steps=3)   # OK
```

При проверке типов остальных аргументов, по аналогии с `np.number`, можно использовать `np.integer`. Вы можете задаться вопросом, почему мы используем конструкцию `np.issubdtype(type(param), np.number)`? А всё потому что стандартная питоновская проверка `isinstance(sigma, (int, float))` не будет работать для нампаевских чисел `int64, int32, float64` и т.д.

In [3]:
```
brownian_2d = generate_brownian(2, n_steps=12000, n_proc=500, n_dims=2)
brownian_3d = generate_brownian(2, n_steps=12000, n_proc=500, n_dims=3)
assert brownian_2d.shape == (500, 2, 12000)
```

2. Отобразить траектории для 9-ти первых броуновских частиц

Требования блока `A`

- Реализовать 2D-графики для `brownian_2d` . Загрузить в форму с именем `1_<ID>_1.png` .

Требования блока `B`

- Реализовать 3D-графики для `brownian_3d = generate_brownian(2, n_steps=12000, n_proc=500, n_dims=3)` . Загрузить в форму с именем `1_<ID>_2.png` .

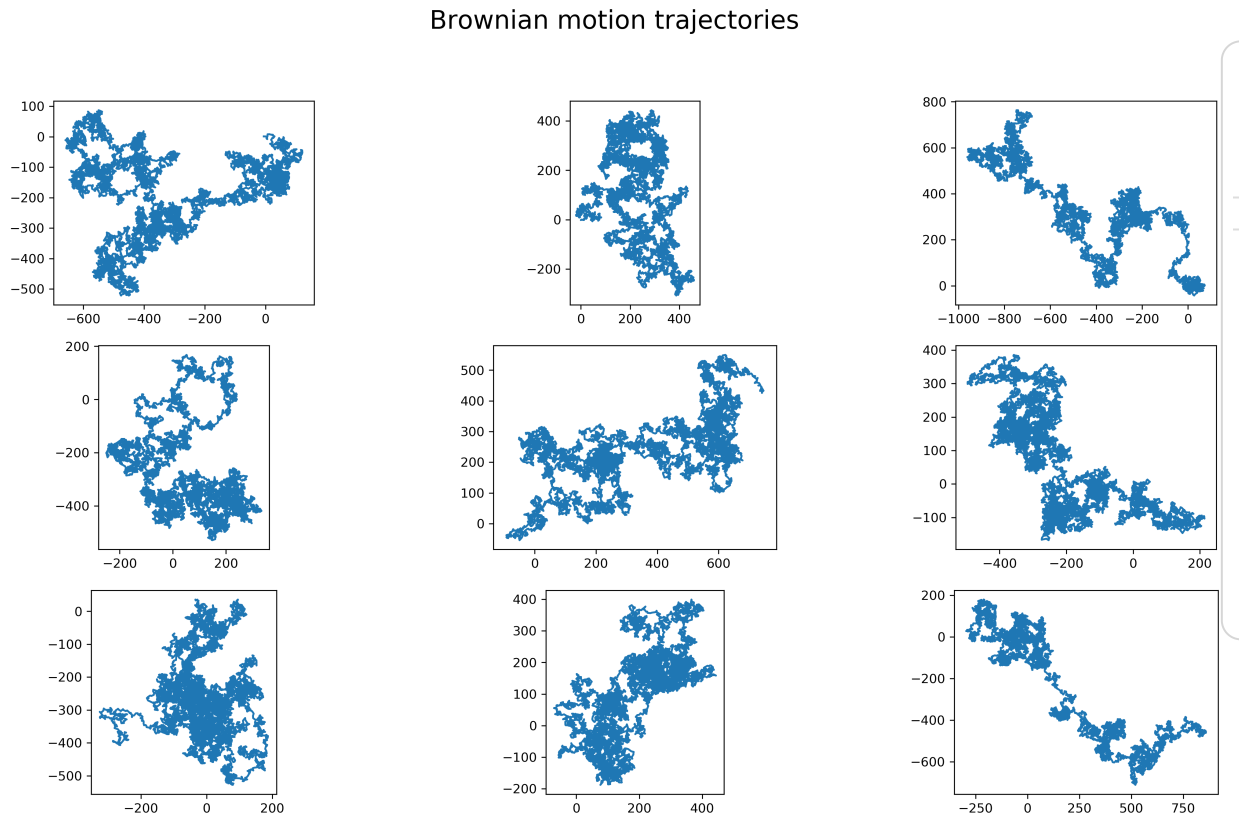
Общие требования

- Установить соотношение масштабов осей, равное 1, для каждого из подграфиков.

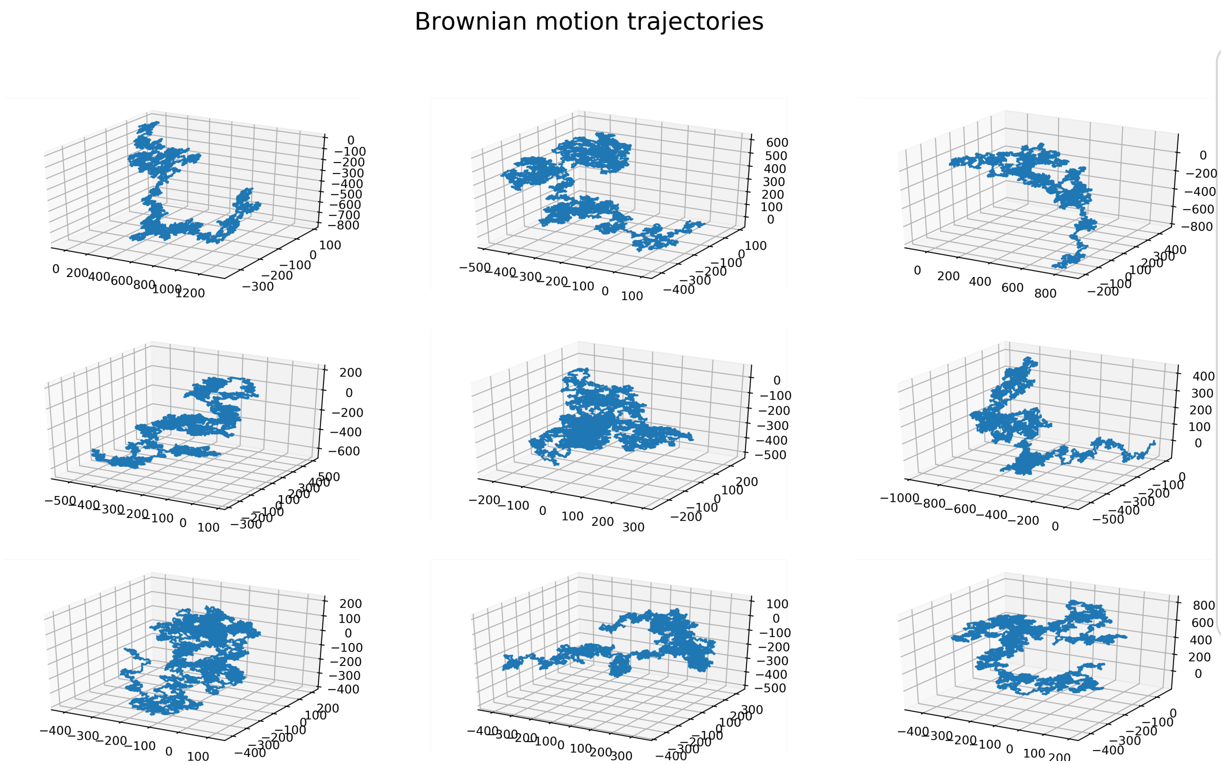
Что может оказаться полезным

- [Туториал (https://matplotlib.org/devdocs/gallery/subplots_axes_and_figures/subplots_demo.html)](https://matplotlib.org/devdocs/gallery/subplots_axes_and_figures/subplots_demo.html) по построению нескольких графиков на одной странице.
- Метод `plot` у `AxesSubplot` (переменная `ax` в цикле ниже).
- Метод `set_aspect` у `AxesSubplot` .

In [4]:
```
# Для блока A
fig, axes = plt.subplots(3, 3, figsize=(18, 10), dpi=300)
fig.suptitle('Brownian motion trajectories', fontsize=20)

for ax, (xs, ys) in zip(axes.flat, brownian_2d):
    # Place your code here
    ax.set_aspect(1)
    ax.plot(xs, ys)
plt.savefig(to_data_dir('brownian_motion.png'))
```



In [5]:
```
# Блок B
fig = plt.figure(figsize=(18, 10), dpi=300)
fig.suptitle('Brownian motion trajectories', fontsize=20)

for i, (xs, ys, zs) in zip(range(1, 10), brownian_3d):
    # Place your code here
    ax = fig.add_subplot(3, 3, i, projection='3d')
    ax.plot(xs, ys, zs)
plt.savefig(to_data_dir('brownian_motion_3d.png'))
```



3 [Только для блока B]. Построить график среднего расстояния частицы от начала

3 [только для блока 3]. Построить график среднего расстояния частицы от начала координат в зависимости от времени (шага)

- Реализовать для `n_dims` от 1 до 5 включительно.
- Кривые должны быть отрисованы на одном графике. Каждая кривая должна иметь легенду.
- Для графиков подписи к осям обязательны.
- Загрузить в форму с именем `1_<ID>_3.png` .

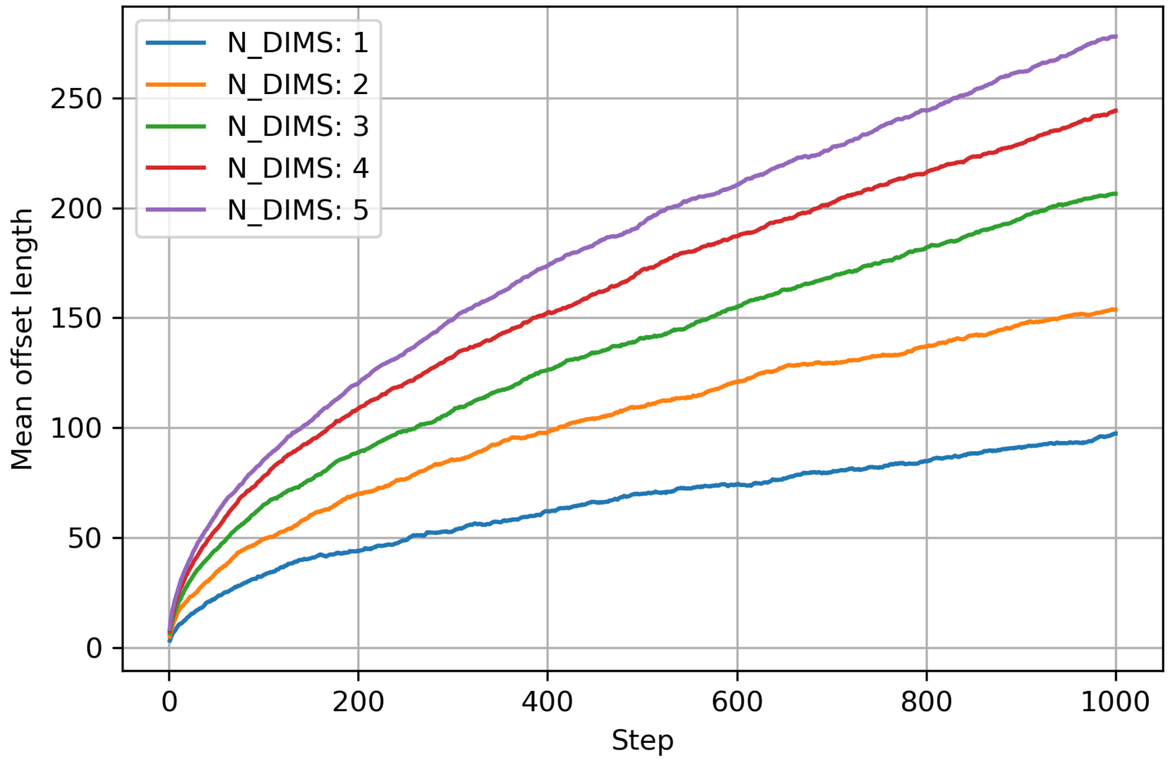
Дополнительные вопросы

- Как вы думаете, какой функцией может описываться данная зависимость?
- Сильно ли её вид зависит от размерности пространства?
- Можно ли её линеаризовать? Если да, нарисуйте график с такими же требованиями и загрузите его в форму с именем `1_<ID>_4.png` .

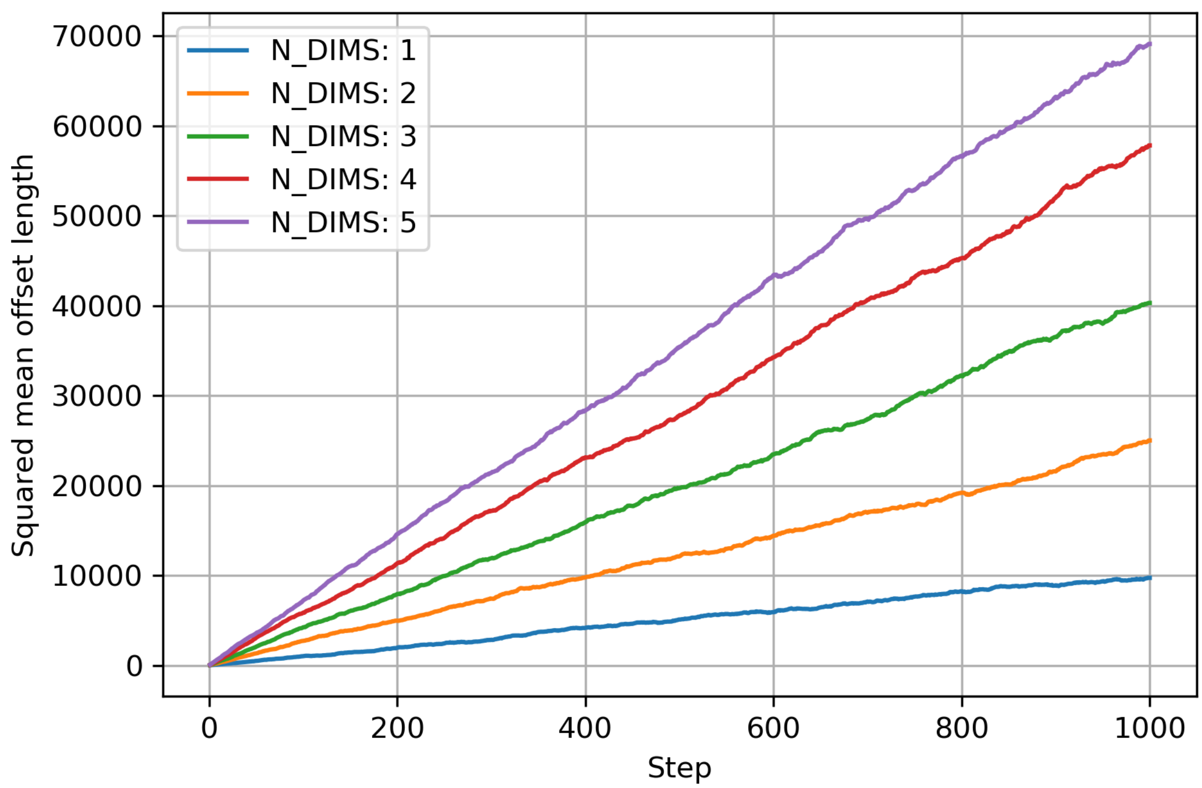
Дополнительные вопросы ¶

- Зависимость описывается законом <<$\sqrt{N}$>>
- $\textbf{Вид}$ зависимости не зависит от размерности пространства, он все время $\sqrt{N}$
- Линейна в координатах $y^2 - N$

In [6]:
```
def mean_distance(n_dims):
    """
    :param: n_dims:    размерность пространства

    :return:           np.ndarray размера n_proc
    """
    brownian = generate_brownian(2, n_steps=1000, n_proc=500, n_dims=n_dims)  # (
    means = np.zeros((brownian.shape[0], brownian.shape[2]))

    for k in range(brownian.shape[2]):  # итерация по номеру шага
        for i in range(brownian.shape[0]):  # итерация по номеру частицы
            means[i, k] = np.linalg.norm(brownian[i, :, k])  # вычисляем расстоя

    means = np.mean(means, axis=0)  # усредняем значения по частицам
    return means


plt.figure(dpi=300)

for n_dims in range(1, 6):
    y = mean_distance(n_dims)
    plt.plot(
        # Place your code here
        range(1, len(y) + 1),
        y,
        label=f'N_DIMS: {n_dims}'
    )

plt.ylabel('Mean offset length')
plt.xlabel('Step')
plt.legend(loc='best')
plt.grid()
plt.tight_layout()
plt.savefig(to_data_dir('brownian_lengths.png'))
```


N_DIMS: 1
N_DIMS: 2
N_DIMS: 3
N_DIMS: 4
N_DIMS: 5
Mean offset length
0
50
100
150
200
250
0
200
400
600
800
1000
Step

In [7]:
```
plt.figure(dpi=300)

for n_dims in range(1, 6):
    y = mean_distance(n_dims)**2
    plt.plot(
        # Place your code here
        range(1, len(y) + 1),
        y,
        label=f'N_DIMS: {n_dims}'
    )

plt.ylabel('Squared mean offset length')
plt.xlabel('Step')
plt.legend(loc='best')
plt.grid()
plt.tight_layout()
plt.savefig(to_data_dir('brownian_lengths_1.png'))
```



Подготовил [Андрей Сонин (https://github.com/andrewsonin)](https://github.com/andrewsonin)