

3^{era} tarea del curso de Física Computacional

“Método de Monte Carlo y Caminata aleatoria en una dimensión”

Prof. Ramón Darías

Departamento de Física, Universidad Simón Bolívar

13 de noviembre de 2019

La siguiente tarea consta de 8 preguntas las cuales deben ser resueltas completamente y entregadas una semana después de su asignación. La entrega extemporánea de esta tarea no está permitida.

Para la entrega de la misma, es obligatorio que usted abra un subdirectorio con el nombre **“Tarea_3”**, dentro de su directorio principal en DropBox, luego, dentro de este subdirectorio, colocará los archivos fuentes correspondientes a las respuestas planteadas. Cada programa desarrollado debe estar depurado y bien documentado y cada pregunta respondida debe estar acompañada de su correspondiente gráfica. Recuerden que las gráficas deben cumplir todos los criterios de elaboración de gráficos.

Difusión de un gas (1D)

N moléculas de un gas están contenidas en el lado izquierdo del contenedor bipartito mostrado en la Fig. (1). En $t = 0$ (u.t), se abre la llave de paso dejando que el gas difunda hasta alcanzar el estado de equilibrio. Considerando que el movimiento de las moléculas es complejo, se puede hacer una descripción de este sistema viéndolo como un proceso aleatorio, donde las moléculas no interactúan entre sí, tal que la probabilidad por unidad de tiempo de que una ellas pase a través del orificio sea la misma para todas, independiente de cuantas moléculas hay en cada lado del contenedor. Consideraremos además, que el orificio tiene un tamaño tal que solo una molécula puede pasar a través de él por unidad de tiempo.

Una manera muy simple de simular este proceso aleatorio, es escoger una molécula al azar y moverla al otro lado. Como solo nos interesa conocer el número de moléculas en un lado del contenedor, estudiaremos el lado izquierdo. Entonces, si n , es el número de moléculas en este lado, $n' = N - n$, es el

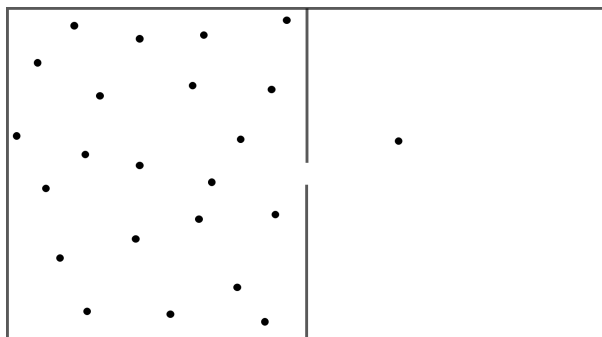


Figura 1: Difusión de N moléculas de un gas a través de un orificio en un contenedor bipartito.

número de moléculas en el lado derecho. Como todas las moléculas tienen la misma probabilidad de pasar a través del orificio, la probabilidad por unidad de tiempo de que una molécula se mueva de izquierda a derecha es igual al número de moléculas en el lado izquierdo dividido por el número total de moléculas en el contenedor, esto es, la probabilidad de moverse de izquierda a derecha es $p = n/N$.

Para simular este proceso aleatorio utilizaremos un modelo de *Caminata aleatoria*, donde la evolución sistema puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Genere un número aleatorio r , uniformemente distribuidos en el intervalo $0 \leq r < 1$.
2. Compare r con el valor actual de la probabilidad $p = n/N$, del lado izquierdo del contenedor.
3. Si $r \leq n/N$, mueva la molécula de izquierda a derecha; caso contrario, mueva la molécula de derecha a izquierda.
4. Incremente el “tiempo” en una unidad. Recuerde que en el método de Monte Carlo, la variable temporal no tiene un sentido físico formal. Es decir, la evolución del sistema se hace a través de pasos (iteraciones), donde la variable “temporal” usada es de alguna manera una representación del tiempo.

En base a este algoritmo haga los siguientes cálculos y responda las preguntas propuestas.

1. Ejecute el programa y estudie la evolución de $n(t)$, para un número total de moléculas $N = 10, 20, 50, 100, 250, 500, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000$. Grafique $n(t)$ para todos los casos y estime para cada uno el tiempo en que el sistema alcanza el equilibrio (tiempo de relajación). Para esto, deje evolucionar suficiente el sistema en cada caso.
2. ¿Cómo depende el tiempo de relajación t_r , con el número total de moléculas N ? Grafique y discuta lo que observa.
3. ¿Cuál es el comportamiento cualitativo de $n(t)$, antes de alcanzar el equilibrio? Use gráficas para explicar.
4. Para cada valor de N , ¿cómo se relaciona el valor de $n(t)$ en el equilibrio con el número total de moléculas N . Use gráficas para sustentar su respuesta.
5. ¿Cuál es la desviación de $n(t)$ en el equilibrio respecto de $N/2$, para $N = 10, 20, 50, 100, 250, 500, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000$. Grafique la desviación de $n(t)$ como función de N y discuta lo que observa.
6. Una manera de cuantificar las fluctuaciones en el equilibrio es a través del cálculo de la varianza σ^2 , definida como $\sigma^2 = \overline{(n - \bar{n})^2} = \overline{n^2} - \bar{n}^2$. Donde los promedios son tomados sobre los valores de $n(t)$, cuando el sistema a alcanzado el equilibrio. Calcule en base a la varianza de $n(t)$, la magnitud relativa de las fluctuaciones σ/\bar{n} , para todos los valores de N de la parte (1) y grafíquelos como función de N . ¿Cómo depende la magnitud relativa de las fluctuaciones σ/\bar{n} con N . Grafique y discuta los resultados obtenidos.
7. Tal y como usted puede observar en la parte (1), $n(t)$ decrece en el “tiempo”, entonces, si $N \gg 1$ y se toma el límite $\Delta t \rightarrow 0$, se puede demostrar que:

$$\dot{n}(t) = 1 - \frac{2}{N}n(t). \quad (1)$$

Demuestre la ec. (1), y halle su solución analítica para la condición inicial $n(t = 0) = N$. Explique exhaustivamente cómo llegó a esta ecuación y si su resultado es acorde con la Física del problema. Observe que a través de una suposición estocástica, hemos logrado encontrar una solución determinista, discuta sobre este hecho.

8. Compare la solución analítica de la ec. (1), con los resultados obtenidos a través del Método de Monte Carlo en (1). Para esto, grafique la solución analítica sobre los datos (no va a ajustar los datos, va a mostrar ambas soluciones en una misma gráfica).