Práctica 2: correlación de velocidades

Francisco José Clemente García

Curso 2022/23

Dado el código de la Práctica 1, nos disponemos a hacer las modificaciones necesarias para calcular la correlación de velocidades.

Fundamento teórico. Sean X e Y dos variables aleatorias. Podemos definir la *esperanza* de una de ellas, por ejemplo, X; como

$$\langle x \rangle = \int f(x) x \,\mathrm{d}\, x \tag{1}$$

Se define la *varianza* como el momento central de orden 2,

$$\sigma_x^2 = \int f(x)(x - \langle x \rangle) \,\mathrm{d}\, x \tag{2}$$

En dinámica de partículas, es esperable que $\langle v \rangle = 0$, ya que no hay una *dirección preferente* en el movimiento. En tal caso, el desarrollo de la varianza nos lleva a

$$\sigma_x^2 = \int f(x)(x - \langle x \rangle) \,\mathrm{d}\, x = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \langle X^2 \rangle. \tag{3}$$

Dadas (X_t) e (Y_t), tenemos la covarianza $\operatorname{cov}[X, Y]$,

$$\begin{aligned}
\operatorname{cov}[X, Y] &= \int \int f(x)(x - \langle x \rangle) f(y)(y - \langle y \rangle) \,\mathrm{d}\, x \,\mathrm{d}\, y \\
&= \langle (\langle x \rangle - x)(\langle Y \rangle - y) \rangle \\
&= \langle \langle x \rangle \langle y \rangle - x \langle y \rangle - y \langle x \rangle + xy \rangle \\
&= \langle \langle x \rangle \langle y \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle + xy \rangle \\
&= \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle, \qquad (4)
\end{aligned}$$

y para el caso de medias nulas queda reducida la expresión a la igualdad $\operatorname{cov}[X, Y] = \langle xy \rangle$.

Es evidente que $\operatorname{cov}[X, X] = \sigma_x^2$.

Consideremos la variable velocidad evaluada en el tiempo, $v_t = (v_{x,t}, v_{y,t})$. La autocovarianza de v_t para un cierto instante $t > 0$ será $\operatorname{cov}[v_t, v_0]$. Luego, en un sistema de $n_{\mathrm{part}} \in \mathbb{Z}^+$ partículas, tendremos

$$\langle v_{x,t} \rangle = \frac{1}{n_{\mathrm{part}}} \sum_{i=1}^{n_{\mathrm{part}}} v_{i,x,t} \tag{5}$$

$$\langle v_{y,t} \rangle = \frac{1}{n_{\mathrm{part}}} \sum_{i=1}^{n_{\mathrm{part}}} v_{i,y,t} \tag{6}$$

La autocovarianza en cada eje, para un instante $t > 0$ será

$$\operatorname{cov}[v_{x,0}, v_{x,t}] = \frac{1}{n_{\mathrm{part}}} \sum_{i=1}^{n_{\mathrm{part}}} (v_{i,x,0} - \langle v_{x,0} \rangle)(v_{i,x,t} - \langle v_{x,t} \rangle) \tag{7}$$

$$\operatorname{cov}[v_{y,0}, v_{y,t}] = \frac{1}{n_{\mathrm{part}}} \sum_{i=1}^{n_{\mathrm{part}}} (v_{i,y,0} - \langle v_{y,0} \rangle)(v_{i,y,t} - \langle v_{y,t} \rangle) \tag{8}$$

Finalmente, se definen las *autocorrelaciones* como

$$\rho_{x,t} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{part}}} (v_{i,x,0} - \langle v_{x,0} \rangle)(v_{i,x,t} - \langle v_{x,t} \rangle)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{part}}} (v_{i,x,0} - \langle v_{x,0} \rangle)^2} \tag{9}$$

$$\rho_{y,t} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{part}}} (v_{i,y,0} - \langle v_{y,0} \rangle)(v_{i,y,t} - \langle v_{y,t} \rangle)}{\sum_{i=1}^{n_{\text{part}}} (v_{i,y,0} - \langle v_{y,0} \rangle)^2} \tag{10}$$

Programación. Sean las matrices `Matvx` y `Matvy`. Dichas matrices almacenarán la información sobre velocidades en los ejes OX y OY, respectivamente. Cada una ellas almacena en la fila i la información sobre la partícula i y la columna denota el instante. Así, `Matvx[i,j]` denota la velocidad en el eje OX de la partícula `i` en el instante `j`.

Así, la media de las velocidades, supongamos en OY en un instante `j` será, de manera general,

```
np.corrcoef(Matvy[:,0],Matvy[:,j])
```

Pedimos el instante y mostramos por pantalla:

```
while(True):
    j = int(input("Instante de tiempo para calcular la autocorrelación: "))
    if(lx > nt):
        print(f"Tiempo fuera de rago, debe estar en [{0},{nt}]")
    else:
        break
print(Matvx)
coefx = np.corrcoef(Matvx[:,0],Matvx[:,j])
coefx = coefx[0,1]
coefy = np.corrcoef(Matvx[:,0],Matvx[:,j])
coefy = coefy[0,1]
print(f"La correlación en el eje OX es {coefx}")
print(f"La correlación en el eje OY es {coefy}")
```