

	AKADEMIA GÓRNICZO – HUTNICZA KRAKÓW	Tomasz Kąkol
Symulacja ruchów Browna		
Modelowanie procesów fizycznych		
Data wykonania ćwiczenia: 05.03.2018	Data złożenia sprawozdania: 12.03.2018	Ocena:

Wprowadzenie

Celem przeprowadzonego ćwiczenia było wykonanie symulacji ruchów Browna z zastosowaniem metody Monte Carlo oraz zweryfikowanie własności teoretycznych omawianego zagadnienia, w oparciu o uzyskane wyniki symulacyjne.

Ruchy Browna to zjawisko fizyczne, którego cechą charakteryzującą są chaotyczne ruchy cząstek w płynie (cieczy lub gazie). Przyczyną występowania tych *ruchów* są zderzenia zawiesiny z cząsteczkami płynu. *Ruchy Browna* można opisać tak samo jak proces błędzenia przypadkowego. Wektor położenia cząstki w $n+1$ kroku czasowym jest zależny od położenia w n -tym kroku czasowym oraz od wielkości przemieszczenia cząstki w pojedynczym kroku d :

$$x_n = x_{n-1} + d \quad (1)$$

Przesunięcie po n krokach jest sumą n liczb przypadkowych. Zgodnie z centralnym twierdzeniem granicznym suma n liczb przypadkowych podlega rozkładowi normalnemu o parametrach $\mu = \langle x \rangle = 0$, $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle$.

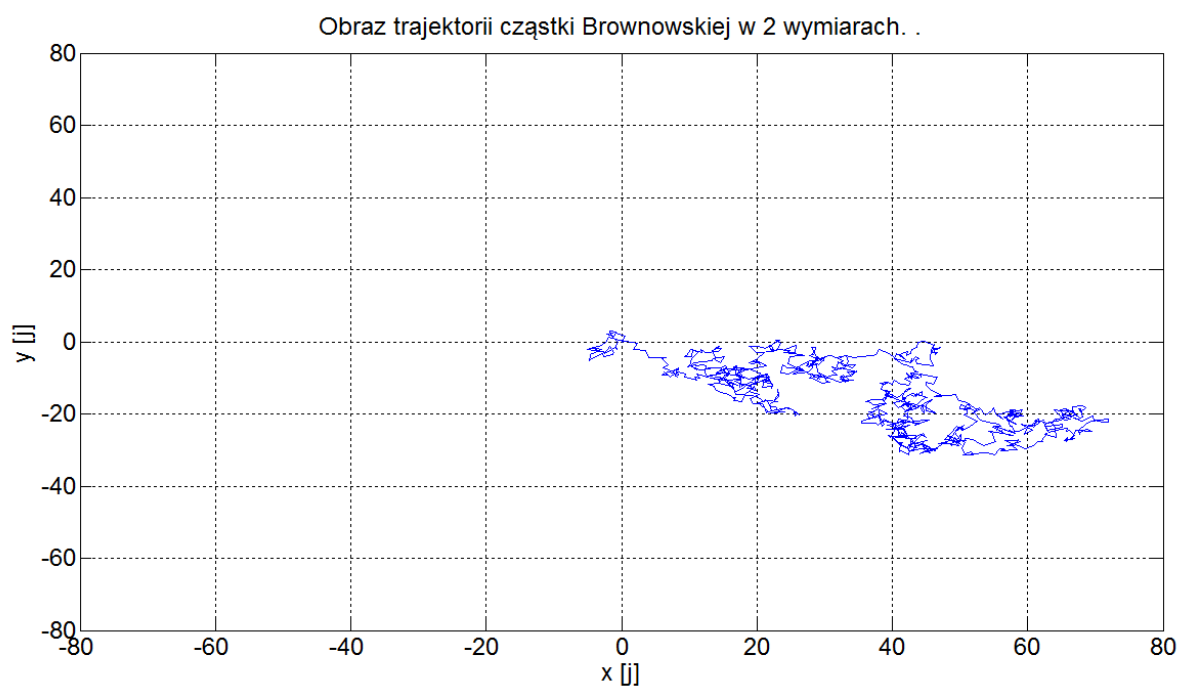
Albert Einstein i Marian Smoluchowski sformułowali prawo, znane dzisiaj jako twierdzenie fluktuacyjno-dysypacyjne, głoszące, iż opory ruchu (lepkość) na poziomie molekularnym wynikają z cieplnego ruchu cząsteczek.

Program symulujący ruchy Browna.

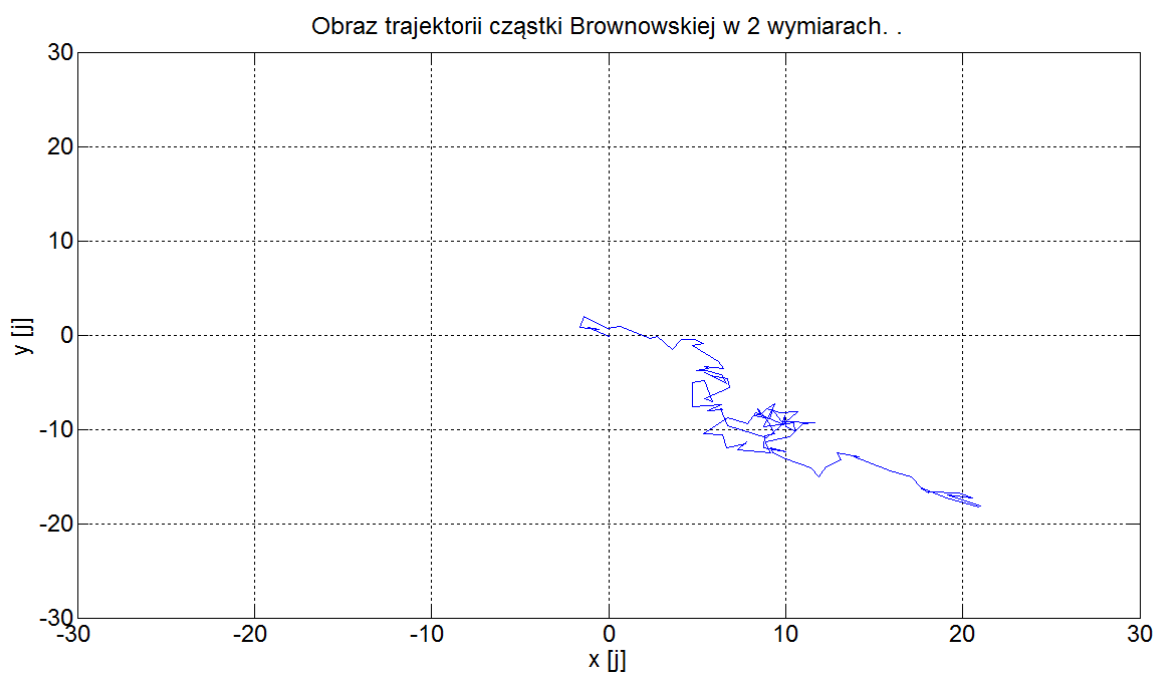
```
1 %% Cwiczenie 1: Symulacja ruchów Browna. 05.03.2018 ( pon.13:00 ), Kąkol Tomasz
2 clear all; close all; clc;
3
4 %% Dane początkowe - wszystkie parametry posiadają jednostki nominalne
5 u = 0; % wartość średnia (rozkład normalny)
6 sigma = 1; % odchylenie standardowe (rozkład normalny)
7 k = 100; % liczba kroków
8 dt = 0.5; % wartość przyrostu czasu
9 t = 0:dt:k/2; % wektor czasu
10 D = 0; % dyfuzja (wartość początkowa)
11 x = zeros(k,k); % początkowa definicja macierzy położenia, startowa definicja wartości początkowych [0 0]
12 y = zeros(k,k);
13
14 %% Symulacja metodą Monte Carlo
15 for j=1:k
16     for i=1:k
17         dx = normrnd(u, sigma);
18         dy = normrnd(u, sigma);
19         dr2 = dx.^2 + dy.^2; % kwadrat pojedynczego przemieszczenia
20         D = D + dr2/(2*2*dt); % <dr2> = 2*n*D*dt, n-liczba wymiarów 2D
21         x(j,i+1) = x(j,i) + dx;
22         y(j,i+1) = y(j,i) + dy;
23     end
24 end
25 R = x.^2 + y.^2; % macierz przemieszczeń
26 r = cumsum(R,1)/(length(R));
27
28 %% Podgląd
29
30 % pierwsza trajektoria cząstki Brownowskiej w 2 wymiarach
31 figure(1);
32 plot(x(1,:),y(1,:));
33 xlabel('x [m]');
34 ylabel('y [m]');
35 title('Obraz trajektorii cząstki Brownowskiej w 2 wymiarach. ');
36 grid on;
37
38 % krzywa reprezentująca średnią z n trajektorii cząstek
39 figure(2);
40 plot(t,r(end,:), 'r');
41 xlabel('Czas [s]');
42 ylabel('Średni kwadrat przemieszczenia [m^2]');
43 title('Zależność średniego kwadratu przemieszczenia od czasu. ');
44 grid on;
45
46 % podgląd wartości parametru dyfuzji
47 disp(D/(k*k)); % całkowita suma wartości podzielona przez k^2 elementów macierzy
48
```

Rys.1. Kod programu 'Symulacja ruchów Browna'.

Obserwacja uzyskanych trajektorii

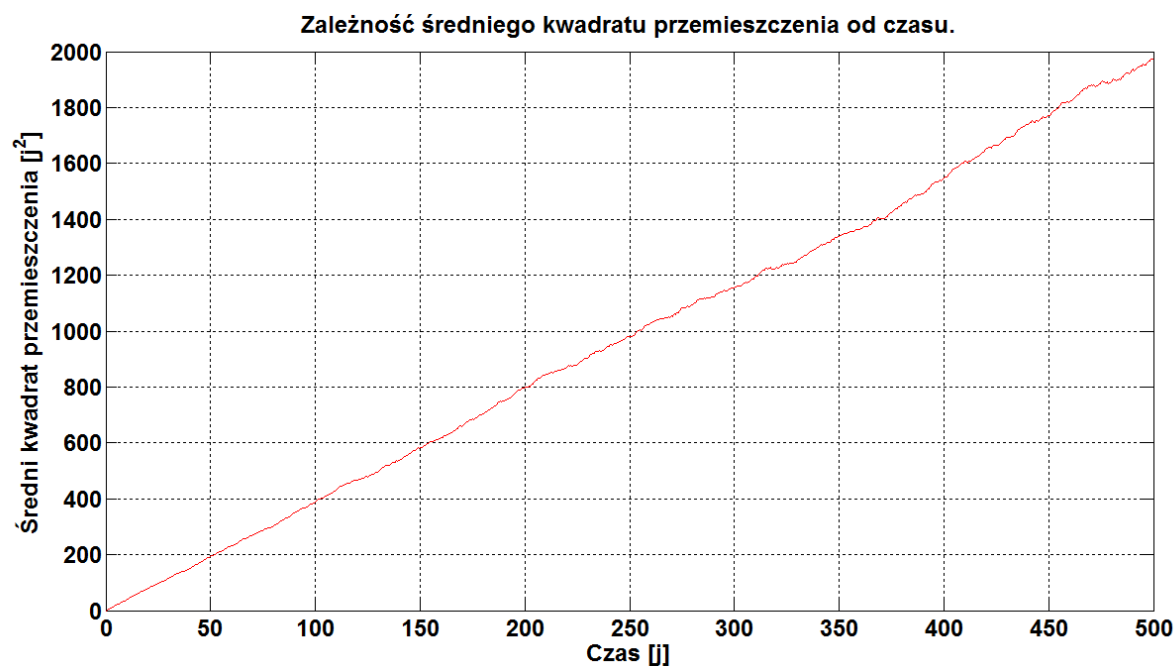


Rys.2. Przykładowy kształt trajektorii cząstki wykonującej ruchy Browna ($k=1000$).

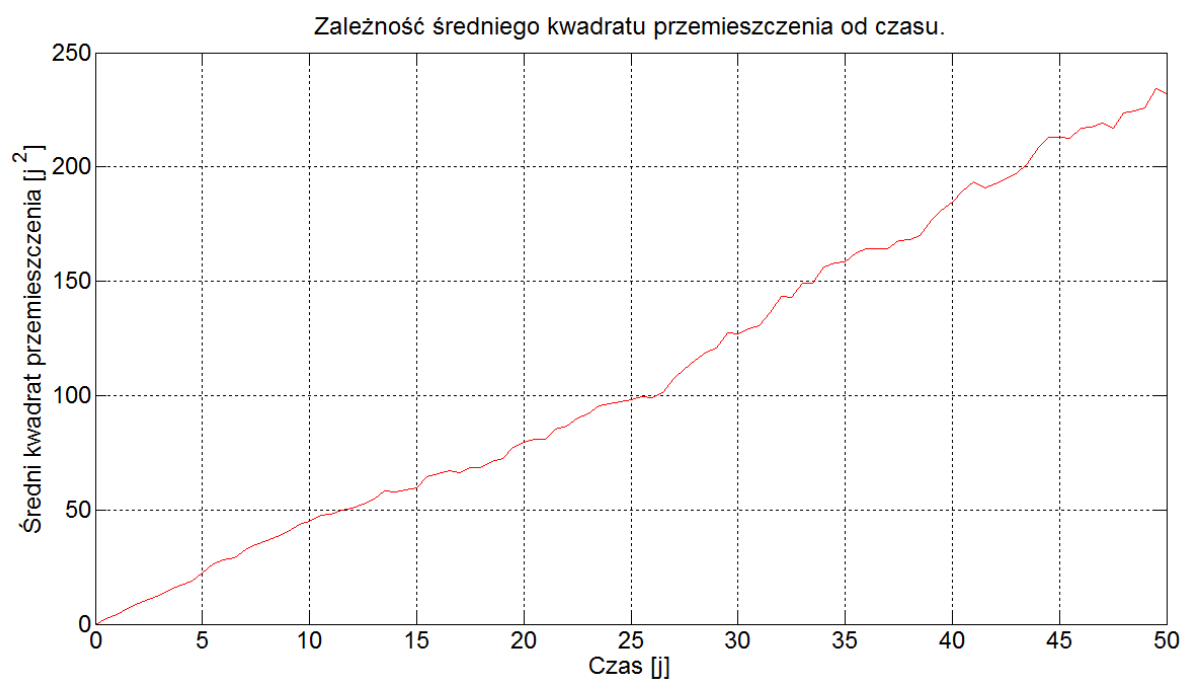


Rys.3. Przykładowy kształt trajektorii cząstki wykonującej ruchy Browna ($k=100$).

Średni kwadrat przemieszczenia cząstki



Rys.4. Zależność średniego kwadratu przemieszczenia od czasu. Krzywa reprezentuje średnią z 1000 trajektorii cząstek ($\Delta t = 0.5$ j). Współczynnik dyfuzji równy 0.9992 j.



Rys.5. Zależność średniego kwadratu przemieszczenia od czasu. Krzywa reprezentuje średnią z 100 trajektorii cząstek. Współczynnik dyfuzji równy 1.0094 j.

Wnioski

- Na podstawie otrzymanych wyników z przeprowadzonych symulacji stwierdzono, że twierdzenie „Średni kwadrat przemieszczenia cząstki jest proporcjonalny do czasu” jest prawdą. Im większa liczba kroków (tj. większa liczba danych pomiarowych kolejnych przemieszczeń cząstki) tworzących trajektorię cząstki, tym zależność średniego kwadratu przemieszczenia cząstki względem czasu jest względnie proporcjonalna z węższym zakresem niepewności pomiarowej. Dla liczby ruchów cząstki dążącej do nieskończoności średni kwadrat przemieszczenia cząstki jest proporcjonalny do czasu.
- Wraz ze wzrostem liczby ruchów cząstki w pojedynczej trajektorii lub wzrostem liczby trajektorii wartość parametru dyfuzji dąży do stabilności globalnej do wartości 1 jednostki podstawowej. Dla liczby ruchów cząstek w pojedynczej trajektorii i liczby trajektorii (wartość kroku) równych 1000 odchył od wartości oczekiwanej (dyfuzja równa 1j) nie przekraczał 0.0010j (tj. 0.1% wartości oczekiwanej).
- Przemieszczanie cząstek w zjawisku ruchu Brown’a jest procesem losowym.
- Na podstawie dowodu Mariana Smoluchowskiego (1872–1917), parametry opisujące każdy makroskopowy (lecz skończony) układ fizyczny w równowadze termodynamicznej muszą się zmieniać w czasie w sposób, znany jako „biały szum gaussowski” – wobec tego dowodu ruchy Browna są cechą każdego fizycznego układu makroskopowego w stanie równowagi.