

Ćwiczenie 1: Symulacja ruchów Browna

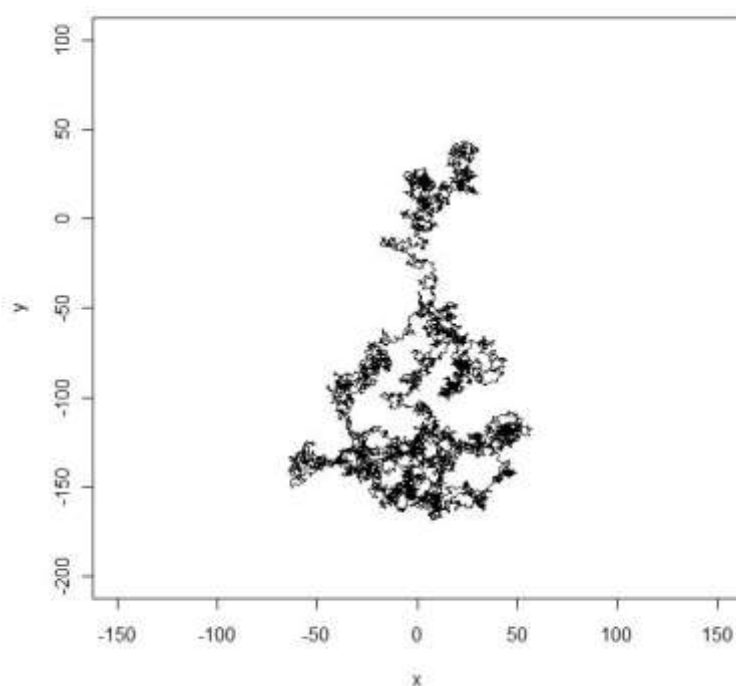
Cel

Celem ćwiczenia jest symulacja ruchów Browna metodą Monte Carlo oraz weryfikacja własności wynikających z teorii na podstawie uzyskanych wyników.

Wstęp

Ruchy Browna zawdzięczają swą nazwę szkockiemu botanikowi Robertowi Brownowi. W trakcie badań prowadzonych w 1827 roku zaobserwował on gwałtowne i nieregularne ruchy pyłków roślin w zawiesinie wodnej. Początkowo tłumaczono to jakąś tajemniczą „siłą życiową”, jednak Brown wykazał, że takie same ruchy wykonują obumarłe pyłki oraz cząstki materii nieorganicznej. Nawiasem mówiąc wykorzystał do tego okruchy słynnego sfinksa. Mimo licznych prób, na naukowe wytłumaczenie tego zjawiska trzeba było czekać niemal 100 lat. Teorię ruchów Browna przedstawili niezależnie dwaj uczeni, Albert Einstein w 1905 roku oraz Marian Smoluchowski w 1906. Stwierdzili oni, że ruchy te wywoływane są zderzeniami z cząsteczkami rozpuszczalnika, a zatem dowodzą istnienia takich cząsteczek. Ponadto podali ilościowy opis swoich teorii, który między innymi pozwolił na doświadczalne wyznaczenie stałej Avogadro.[1]

Rysunek 1 ilustruje przykładowy kształt trajektorii cząstki wykonującej ruchy Browna.



Rysunek 1 Obraz trajektorii cząstki Brownowskiej w 2 wymiarach. Ilość kroków czasowych N=1000

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 d, a zatem po n krokach położenie cząsteczki będzie wynosiło:

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

gdzie:

d- przemieszczenie cząstki w pojedynczym kroku

Zatem przesunięcie po N krokach jest sumą N liczb przypadkowych. Zgodnie z *centralnym twierdzeniem granicznym* suma N liczb przypadkowych podlega rozkładowi normalnemu o parametrach $\mu=\langle x \rangle=0$, $\sigma^2=\langle x^2 \rangle$. [2]

Średni kwadrat przesunięcia po N krokach wynosi:

$$\langle x_N^2 \rangle = \nu a^2 t \quad (2)$$

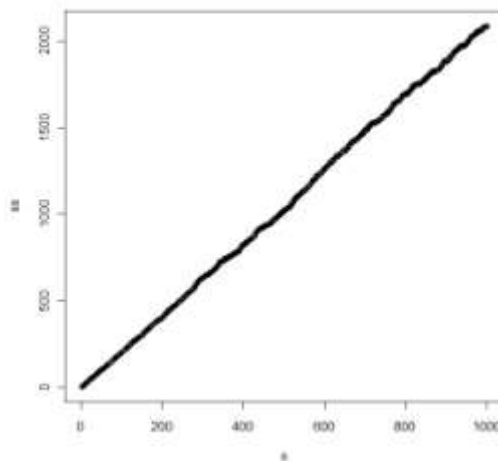
gdzie:

$a^2 = \langle d^2 \rangle$ - średni kwadrat pojedynczego przemieszczenia

ν – średnia ilość przesunięć w jednostce czasu

t – czas

Poniższy rysunek ilustruje zależność (2) dla symulacji 1000 trajektorii metodą Monte Carlo.



Rysunek 2 Zależność średniego kwadratu przemieszczenia od czasu. Krzywa reprezentuje średnią z 1000 trajektorii cząstek

Symulacja metodą Monte Carlo

Do symulacji konieczne jest wykorzystanie generatora liczb pseudolosowych o normalnym rozkładzie prawdopodobieństwa .

Dla symulacji 1 wymiarowej położenie x cząstki obliczamy w następujący sposób:

1. Ustalamy początkowe położenie równe 0
2. Rozpoczynamy pętlę czasową
3. Losujemy liczbę losową a podlegającą rozkładowi normalnemu o $\mu=0$ i $\sigma=1$
4. Obliczamy położenie za pomocą wzoru (1)
5. Powtarzamy punkty 3 i 4 określoną ilość razy.

Program ćwiczenia

1. Napisanie programu symulującego ruchy Browna wykorzystującego opisaną wyżej metodę w 1 wymiarze
2. Obserwacja uzyskanych trajektorii
3. Sprawdzenie, czy średni kwadrat przemieszczenia cząstki jest proporcjonalny do czasu (konieczna jest symulacja co najmniej kilkuset trajektorii).

4. Obserwacja własności samo podobieństwa uzyskanych krzywych. Obliczenie funkcji autokorelacji dla przykładowej trajektorii.
5. Obserwacja rozkładu gęstości cząstek startujących z jednego punktu w funkcji czasu (konieczna jest symulacja co najmniej kilkuset trajektorii).
6. Wnioski

Program może być napisany w dowolnym języku lub środowisku obliczeniowym (np. Matlab, R). Listing programu zaopatrzony w niezbędne komentarze należy umieścić w sprawozdaniu. Sprawozdanie musi zawierać punkty 1, 2 i 6 oraz opcjonalnie (do decyzji prowadzącego) jeden z punktów 3 - 5.

Literatura

- [1] Paweł F. Góra. 2005. Sto lat teorii ruchów Browna. Foton **91** str. 12- 17
- [2] Janusz Adamowski. Metody obliczeniowe fizyki. Rozdział 19.