Daniel Izquierdo Juncàs
M1

PRÀCTICA 5
MOVIMENT BROWNIÀ

1. Escriu un programa per generar variables aleatòries distribuïdes segons una distribució normal de mitjana m i variança σ arbitràries, N(m,σ), fent servir el mètode de Box-Müller. Produeix un histograma de freqüències i compara'l amb la distribució normal

$$\boldsymbol{P_{N(\mu,\sigma)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}}$$

El mètode de Box-Müller permet obtenir dos valors independents per a la construcció d'una distribució normal (o gaussiana) N(y;μ,σ). Tenint en compte que si N(x;0,1) s'obtindran dos valors de la variable normal estàndard. Aquests prenen la forma:

$$x_1 = \sqrt{-2ln\varepsilon_1}\cos(2\pi\varepsilon_2)$$

$$x_2 = \sqrt{-2ln\varepsilon_1}\sin(2\pi\varepsilon_2)$$

On ε_1 i ε_2 són variables aleatòries. Llavors generalitzant a qualsevol mitjana μ i variància σ:

$$y = \mu + x\sigma$$

El programa de Box-Müller està estructurat en dues subrutines: una pel mètode i l'altra per la creació del histograma. La subrutina de Box-Müller implementa el que s'ha explicat anteriorment, notar que només s'utilitza una de les variables aleatòries. En la part principal del programa es cridarà aquesta subrutina per escriure cada nombre fins a N en un fitxer extern.

La subrutina del histograma permet triar el nombre de caixes d'aquest i a continuació llegeix les dades desordenades del fitxer que s'ha generat amb l'altra subrutina i les classifica en intervals. A més compta les dades de cada interval en forma de la freqüència que és normalitzada.

El programa Gaussiana és més senzill: a partir d'una mitjana i variància introduïdes per consola genera la distribució de probabilitat d'una gaussiana d'aquestes característiques.

En les Figures 1 i 2 es poden observar les dades del mètode de Box-Müller al triar una distribució normal estàndard (mitjana=0 i variància=1) representades en histogrames. A més caixes i a més nombres aleatoris generats més s'ajusta a la gaussiana de la Figura 3.

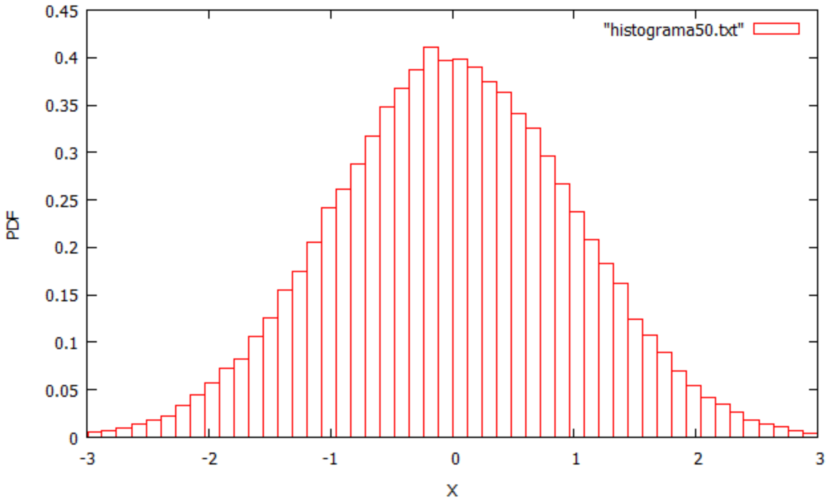


Figura 1: Mètode de Box-Müller per a distribució normal estàndard. N=10000, ncaixes=50

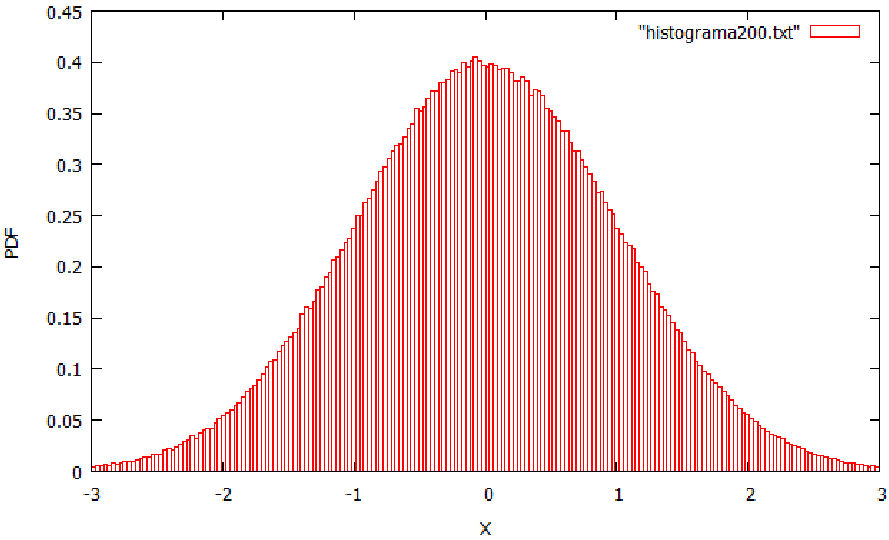


Figura 2: Mètode de Box-Müller per a distribució normal estàndard. N=1000000, ncaixes=200

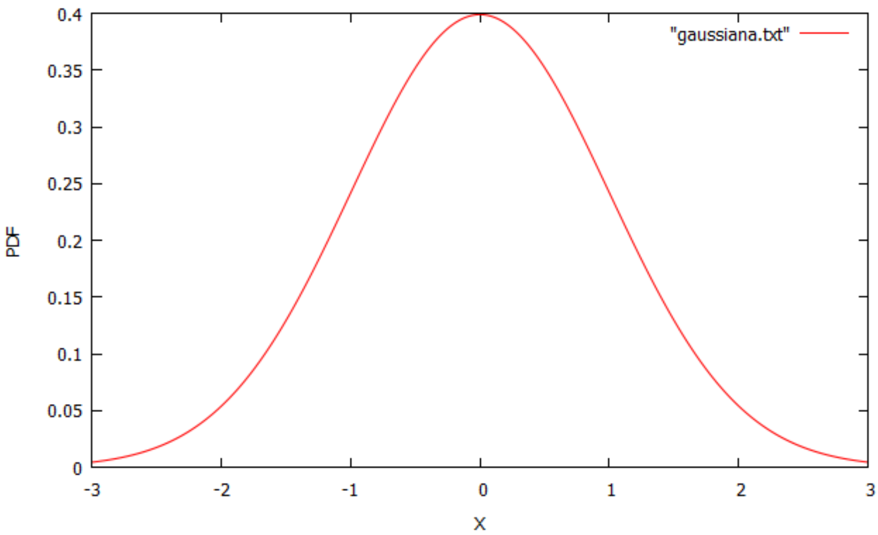


Figura 3: Gaussiana per a distribució normal estàndard

2. Simula numèricament el moviment aleatori de N partícules independents en dues dimensions. Per fer-ho, considera que totes les partícules es troben a l'origen de coordenades a l'instant t=0, i evolucionen amb el temps de manera que per a cada pas de temps, la seva posició es determina a partir de les següents expressions

$$x_n(t+\Delta t)=x_n(t)+\Delta x$$
$$y_n(t+\Delta t)=y_n(t)+\Delta y$$

On Δx i Δy són nombres aleatoris gaussians de mitjana nul·la i variància igual a $\Delta t(2k_BT/\lambda)$. Aquest senzill algoritme reprodueix la solució (en el sentit estadístic) de les equacions de moviment anteriors.

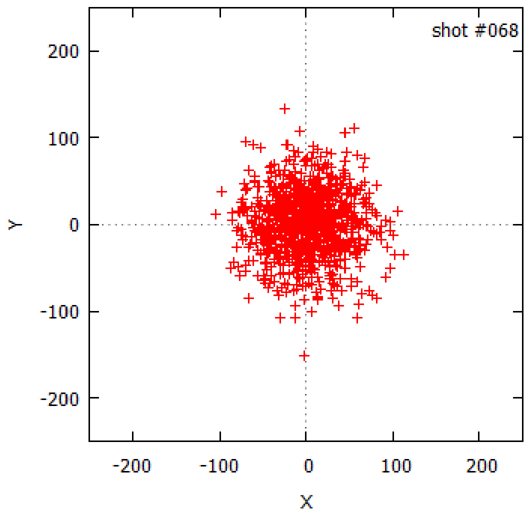
Representa gràficament desplaçament mig i el desplaçament quadràtic mig per la col·lectivitat de partícules en funció del temps.

NOTA: per aquest apartat he utilitzat un programa que he trobat del Francesc Salvat pel Moviment Brownià i l'he modificat lleugerament. Bàsicament l'he traduït, comentat una mica més i algunes coses les he fet de forma una mica diferent. En tot cas el programa modificat ve a fer el mateix que l'original (que també adjunto a la pràctica).

L'objectiu d'aquest apartat és analitzar el moviment de les partícules brownianes en 2 dimensions quan estan sotmeses a una certa temperatura i a una fricció. Prendrem 'captures de pantalla' en diferents instants de temps i analitzarem la posició de les diferents partícules, a més de la seva mitjana i mitjana quadràtica.

Com a paràmetres a introduir s'agafa com a exemple:
-Nombre de partícules: 1000
-Paràmetre de fricció (λ): 1.0
-Temperatura: 100K
-Pas de temps: 0.0005s
-Nombre de passos de temps per captura: 200
-Nombre de captures: 200

El resultat de les posicions es representa en la Figura 4.



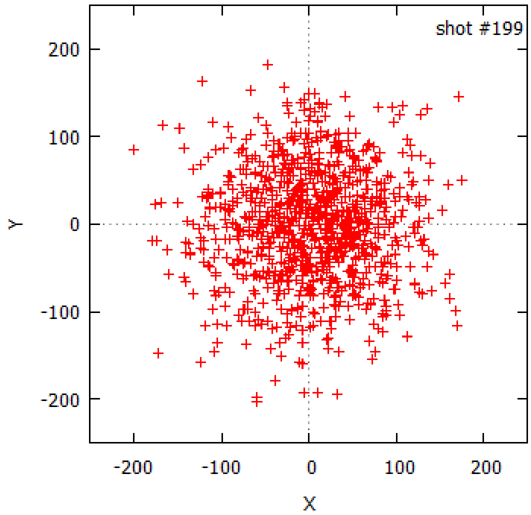


Figura 4: Posicions de cada partícula en dos instants de temps diferents

El desplaçament mig teòric es defineix com $\sigma = \sqrt{\frac{2\Delta t T k_B}{\lambda}}$ i té un valor de $0.3162278/\sqrt{k_B}$. La posició mitjana en l'últim instant val (2.744179,-1.061894) $/\sqrt{k_B}$. En les figures 5 i 6 es representa com evoluciona el desplaçament mig de les partícules en cada instant per a l'eix x i l'eix y respectivament. Es pot observar com pels dos eixos la posició mitja varia en un rang petit, no gaire lluny del valor teòric predit.

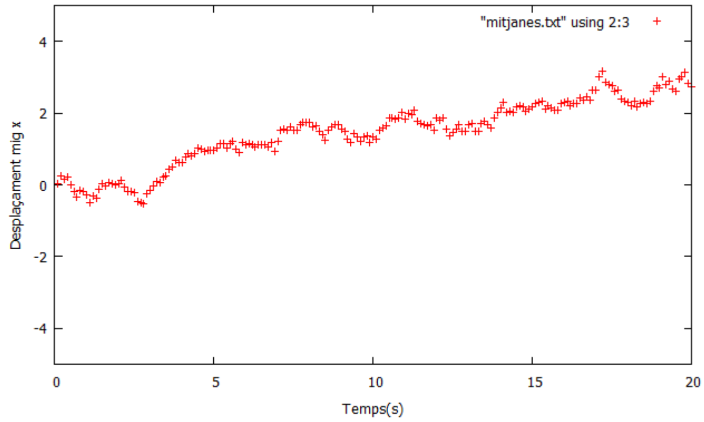


Figura 5: Desplaçament mig de l'eix x en funció del temps

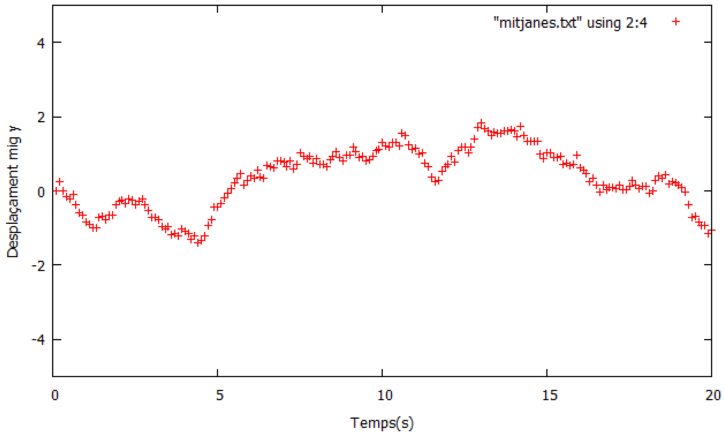


Figura 6: Desplaçament mig de l'eix y en funció del temps

En les figures 7 i 8 es representen el desplaçament quadràtic mig de l'eix x i y respectivament.

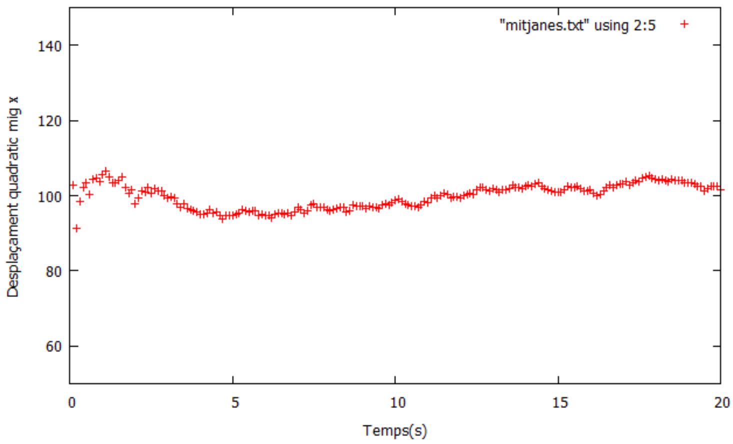


Figura 7: Desplaçament quadràtic mig de l'eix x en funció del temps

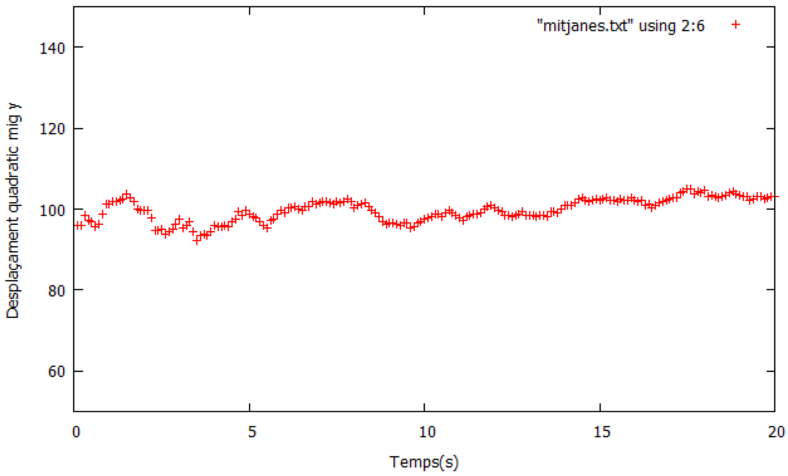


Figura 8: Desplaçament quadràtic mig de l'eix y en funció del temps

3. Ajustant les dades del gràfic anterior, obté el coeficient de difusió. Discuteix si coincideix amb el que has utilitzat dins la variància de la distribució de Δx i Δy.

El coeficient de difusió teòric ve donat per:

$$D = \frac{Tk_B}{\lambda} = \frac{100}{1}k_B = 100k_B$$

Si s'agafen els coeficients de difusió de cada instant i es fa la mitjana s'obté:
-D_x=99.79622k_B
-D_y=99.73094k_B

I l'error relatiu és:

$$\varepsilon_x = \frac{D - D_x}{D} = 2.0378 \cdot 10^{-3}$$

$$\varepsilon_y = \frac{D - D_y}{D} = 2.6906 \cdot 10^{-3}$$

Per tant el valor observat i la variància de la distribució coincideixen molt satisfactòriament.

4. Introdueix ara una paret que reflecteixi les partícules orientada perpendicularment a l'eix x , i localitzada en una posició on arribi una fracció suficient de partícules per a que es noti el seu efecte. Aquesta paret ha de invertir la component x de la direcció de desplaçament de las partícules que xoquin. Representa en aquest cas el desplaçament mig i el desplaçament quadràtic mig en funció del temps.

Per aquest apartat s'ha realitzat una petita modificació a l'exercici 2. S'introdueix la condició de contorn tal que si la posició de la partícula x_i>x_{paret}, la posició es modifica per $x_i' = x_{paret} - (x_i - x_{paret})$. La implementació al programa s'ha fet amb un if.

Com a paràmetres a introduir s'agafa com a exemple els mateixos que a l'exercici 2:
-Nombre de partícules: 1000
-Paràmetre de fricció (λ): 1.0
-Temperatura: 100K
-Pas de temps: 0.0005s
-Nombre de passos de temps per captura: 200
-Nombre de captures: 200
-Posició de la paret: 50

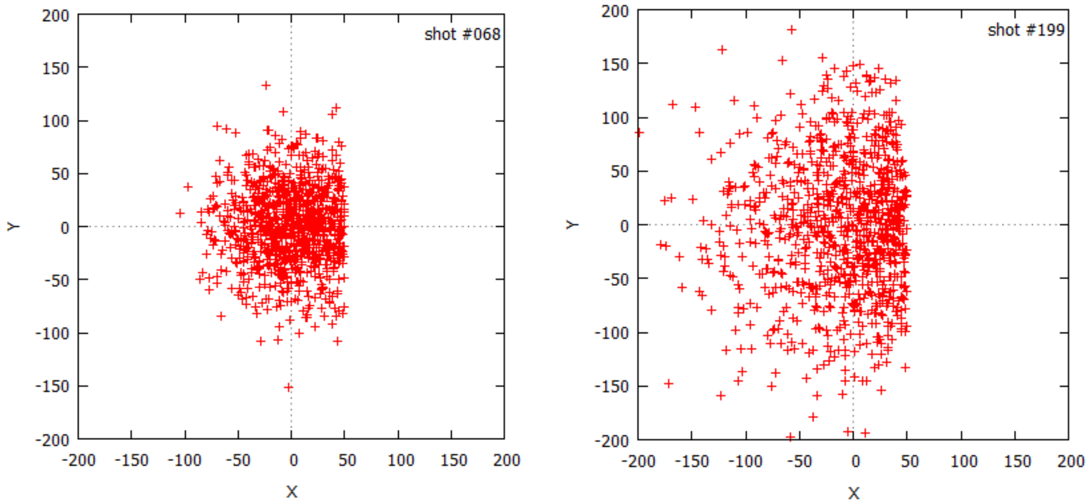


Figura 9: Posicions de cada partícula en dos instants de temps diferents amb paret

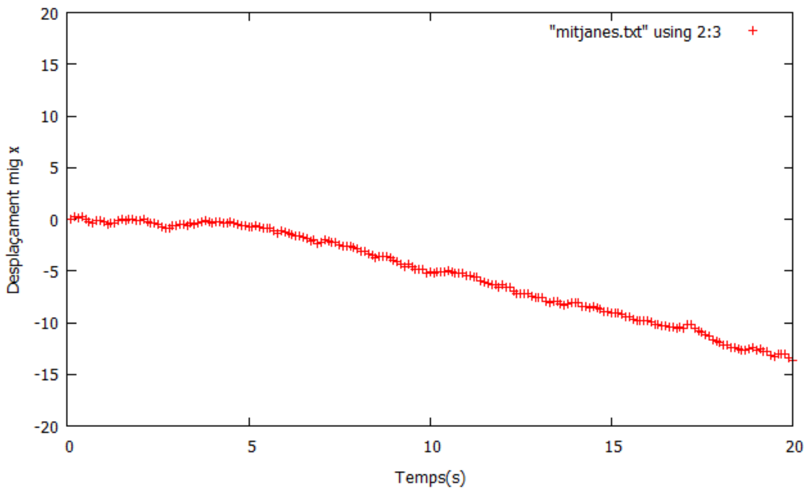


Figura 10: Desplaçament mig de l'eix x en funció del temps amb paret

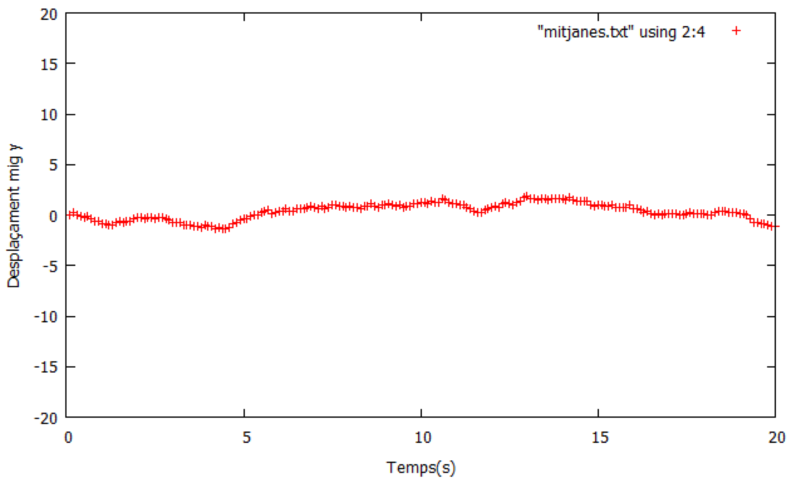


Figura 11: Desplaçament mig de l'eix y en funció del temps amb paret

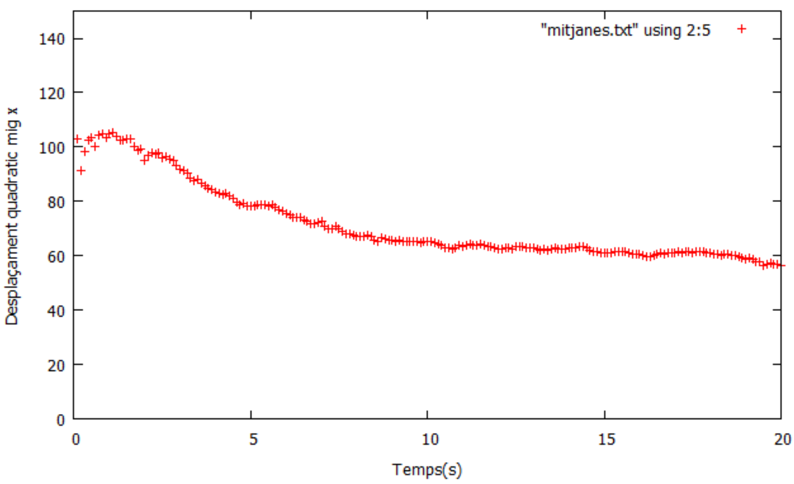


Figura 12: Desplaçament quadràtic mig de l'eix x en funció del temps amb paret

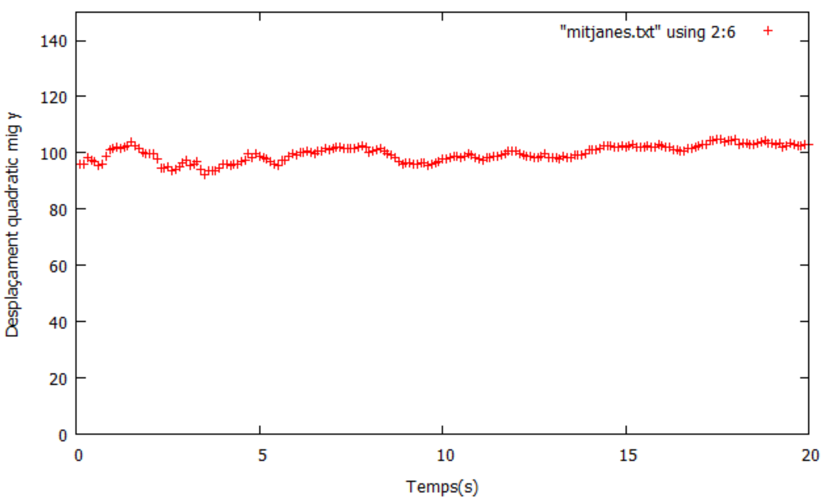


Figura 13: Desplaçament quadràtic mig de l'eix y en funció del temps amb paret

5. Compara amb les corbes obtingudes en els apartats 3 i 5, i discuteix els resultats obtinguts.

S'observa que les representacions de la mitjana i de la mitjana quadràtica en l'eix y es mantenen igual (comparant la Figura 11 amb la Figura 6, i la Figura 13 amb la 8). Això és justament el que calia esperar ja que la paret és simètrica per aquesta component.

En canvi la Figura 10 i la Figura 12 sí que representen un canvi significatiu respecte les de l'exercici 2. En absència de paret el desplaçament mig en l'eix x era constant mentre que amb aquesta s'observa com en un primer tram també es força constant, però a partir d'un moment el desplaçament comença a decaure cap a valors negatius (fins arribar al voltant del -13.6 en t=20s). Això és degut a que en els primers instants la paret es troba massa lluny de les partícules per a produïr cap efecte. D'igual forma també s'observa un decaïment en el desplaçament quadràtic mig