Computación

Año 2015

Prof: T. S. Grigera — JTP: C. Grunfeld — AD: G. Sieben

Práctica 10 — Simulaciones numéricas

Esta práctica abarca los siguientes temas:

- El concepto de simulación. La simulación numérica. Ejemplos.
- Procesos estocásticos. El movimiento Browniano. Simulación de la ecuación de Langevin para el movimiento Browniano en los casos con y sin inercia. Números pseudoaleatorios. Estructura de la simulación, cálculo de valores medios e histogramas.

Bibliografía: Press et al. (1992, cap. 7).

Para completar esta práctica deberá resolver el primer problema y uno cualquiera de los otros tres.

Problema 1. Caminante aleatorio y movimiento Browniano sobreamortiguado. Desarrolle un programa para estudiar mediante simulación la ecuación de Langevin para el movimiento Browniano sobreamortiguado (o caminante aleatorio) en una dimensión,

$$\frac{dx}{dt} = \xi(t),$$

donde $\xi(t)$ es una fuerza aleatoria. Para ello escriba una versión apropiada de la ecuación anterior en tiempo discreto, y utilice para $\xi(t)$ una distribución uniforme de ancho a centrada en 0. Estime $\langle x(t)\rangle$, $\langle x^2(t)\rangle$ y $P(x,t)$. Grafique $\langle x^2(t)\rangle$ vs. t en escala logarítmica y determine la potencia del tiempo que mejor describe la curva. Proponga una forma funcional para ajustar $P(x,t)$.
Números aleatorios: Recuerde que para obtener números (pseudo)aleatorios puede utilizar las rutinas de la GSL o la `ran2()` de Numerical Recipes. Esta última se debe utilizar como sigue:

```
long sem=...;
float r;
r=ran2(&sem);
```

donde `sem` se inicializará a alguna semilla apropiada (un valor negativo) antes de la primera llamada y luego no se debe modificar. Las sucesivas llamadas a `ran2` devuelven un número real (de tipo `float`), uniformemente distribuido en el intervalo $(0,1)$ (abierto).

Problema 2. Efectos de la concentración. Modifique el programa anterior para poder considerar simultánemente N caminantes (sin interacción entre sí). Calcule la corriente en $x = 0$ (número de partículas que cruzan el punto $x = 0$ de izquierda a derecha por unidad de tiempo), $I(t)$ como función del tiempo, para una condición inicial en la que la densidad de partículas es uniforme y para el caso en que inicialmente la densidad es mayor a la izquierda de $x = 0$.

Problema 3. Caminante asimétrico en el retículo. Considere un caminante aleatorio sobre un retículo unidimensional, donde ahora en cada paso temporal el caminante salta siempre a uno de los sitios vecinos, elgiendo con probabilidad p el vecino derecho, y con probabilidad $q = 1 - p$ el vecino izquierdo. Calcule $\langle x(t)\rangle$ y $\langle x^2(t)\rangle$ para distintos valores de p. Estime la probabilidad de retorno a tiempo t contando la fracción de caminantes que se encuentran en $x = 0$ después de t pasos.

Problema 4. Movimiento Browniano con inercia. Modifique el programa del primer problema para resolver la ecuación de Langevin con masa para la velocidad,

$$m\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \xi(t).$$

Utilice para el ruido una distribución uniforme en el intervalo $[-\sigma, \sigma]$. Estudie el comportamiento de $\langle v^(t) \rangle$ para tiempos muy largos. ¿Alcanza un valor asintótico? Estudie ese límite para distintos valores de σ, a m y γ fijos. Recordando el teorema de equipartición de la energía, ¿qué valor límite esperaría para $\langle v^2(t) \rangle$? ¿Cómo interpreta la dependencia de este valor con σ?