

Diffusjon: Simulering og Analyse

Siebe van Albada, April 2018

Oppgavene nedenfor er basisen for presentasjonen i diffusjonsprosjektet. Noen av oppgavene er teoretiske, for andre trenger man simuleringsresultater, for andre trenger man begge deler.

I. Systemet i 1D:

i. Enkel random walker



1. Regn ut diffusjonskoeffisienten D for systemet i 1D.



2.

- Regn ut populasjonsstandardavviket for posisjonen etter ett tidssteg.
- Regn ut populasjonsstandardavviket for posisjonen etter 1000 tidssteg.
- Ta et utvalg bestående av 20 posisjoner etter 1000 tidssteg.
- Bestem et 95%-konfidensintervall for gjennomsnittlig posisjon etter 1000 tidssteg. Bruk z -fordelingen hvor du henter middelveiden fra oppgave c) og populasjonsstandardavviket fra oppgave b).
- Gjenta oppgave d), men bruk nå t -fordelingen med middelveidi og utvalgsstandardavvik fra oppgave c).



3. Estimer sannsynligheten for at partikkelen når kanten av brettet før den returnerer til origo. Varier størrelsen av brettet.



4. En partikkel som beveger seg for hvert tidssteg med sannsynlighet q mot venstre over én rasteravstand, og med samme sannsynlighet q mot venstre, befinner seg etter 100 tidssteg på avstand 20 fra origo. Læreren, som har kjørt denne simuleringen, mener å huske at verdien til q var lik 0.25 i simuleringen hans. Formuler nødvendige hypoteser, og test på 99% konfidensnivå.

ii. Mange partikler




5. Sample sannsynlighetsfordelingen for kvadratisk forflytning r^2 etter 100 tidssteg. Bruk 1000 partikler.



6. Bruk svaret i oppgave 5) for å bestemme en empirisk kumulativ fordelingsfunksjon.

iii. Sannsynlighetsfordeling

 7. Beregn den eksakte sannsynlighetsfordelingen og kumulative fordelingsfunksjonen for gjennomsnittlig kvadratisk forflytning $\langle r^2 \rangle$ etter 100 tidssteg. Sammenlikn resultatene med oppgave 5 og 6, og forklar avvikene.


II. Systemet i 2D:

i. Enkel random walker


 8. Regn ut diffusjonskoeffisienten D for systemet i 2D.

 9.

- Bestem gjennomsnittlig kvadratisk forflytning $\langle r^2 \rangle$ etter 100, 200, ..., 1000 tidssteg. Bruk utvalg av størrelse 20.
- Bruk minste kvadratsummetoden for å finne den beste rette linja som beskriver $\langle r^2 \rangle$ som funksjon av t .
- Beregn et 99% konfidensintervall for stigningstallet.
- Gi et 99% konfidensintervall for diffusjonskoeffisienten D . Bruk svaret fra oppgave c).


 10. Estimer sannsynligheten for at partikkelen når kanten av brettet før den returnerer til origo. Varier størrelsen på brettet.

ii. Mange partikler

 11. Sample diffusjonskoeffisienten. Bruk minst 1000 partikler og en run av lengde 1000.

 12. Regn ut utvalgsstandardavviket for oppgave 11). Hvor nøyaktig er resultatet i den forrige oppgaven?


iii. Sannsynlighetsfordeling


 13. Regn ut diffusjonskoeffisienten. Bruk en simulering av lengde 10.

 14. Regn ut populasjonsstandardavviket for oppgave 13).

III. Systemet i 3D:

i. Enkel random walker

 15. Regn ut diffusjonskoeffisienten for systemet i 3D.

 16. Estimer sannsynligheten for at partikkelen når kanten av brettet før den returnerer til origo. Varier størrelsen på brettet.

ii. Mange partikler og sannsynlighetsfordelingen



17. Regn ut kovariansen mellom sannsynlighetsfordelingen etter 3 tidssteg og posisjonene til 1000 partikler etter 3 tidssteg.