

# Simulering og Statistikk – Simulering og Analyse Modul 4: Diffusjon

*Dr S.B. van Albada, Mars 2015*

Utgangspunktet for oppgavene er en simulering av diffusjon i 2D eller 3D. De følgende simuleringene skal brukes:

- Random walk av en enkel partikkel
- Diffusjon av mange partikler samtidig
- Eksakt utregning av sannsynlighetsfordelingen etter  $n$  tidssteg.



1. Regn ut diffusjonskoeffisienten  $D$  for systemet.



2. Sample diffusjonskoeffisienten ved å måle  $\langle |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$ . Bruk 1000 partikler og en run av lengde 1000.



3. Regn ut utvalgsstandardavviket for den forrige oppgaven. Hvor nøyaktig er resultatet i den forrige oppgaven?



4. Regn ut et 95% konfidensintervall for diffusjonskoeffisienten, og sammenlikn med den teoretiske verdien. Prøv å forklare eventuelle avvik.



5. Bruk sentralgrensesetningen for å finne sannsynlighetsfordelingen for  $x$ -posisjonen etter 10 tidssteg (tilnærmet). Sammenlikn med den eksakte simuleringen av sannsynlighetsfordelingen etter 10 tidssteg. Forklar avvikene.



6.

- Regn ut populasjonsstandardavviket for  $x$ -posisjonen etter ett tidssteg.
- Regn ut populasjonsstandardavviket for  $x$ -posisjonen etter 1000 tidssteg. Bruk svaret fra oppgave a) i utregningen.
- Ta et utvalg av 10  $x$ -posisjoner etter 1000 tidssteg.
- Bestem et 95%-konfidensintervall for  $x$ -posisjonen etter 1000 tidssteg. Bruk  $z$ -fordelingen med middelveiden fra oppgave c) og populasjonsstandardavviket fra oppgave b).
- Gjenta oppgave d), men bruk nå  $t$ -fordelingen med middelveidi og utvalgsstandardavvik fra oppgave c).
- Sammenlikn resultatene i oppgave d) og e), og forklar forskjellen.
- Sammenlikn resultatene i oppgave d) og e) med simuleringen: Ligger 95% av resultatene innen konfidensintervallene?



7.

- Bestem gjennomsnittlig kvadratisk avstand  $\langle |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$  etter 100, 200, ..., 1000 tidssteg. Bruk utvalg av størrelse 10.
- Bruk minste kvadratsumsmetoden for å finne den beste rette linja som beskriver  $\langle |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$  som funksjon av  $t$ .

- c. Finn et 99% konfidensintervall for stigningstallet.
- d. Gi et 99% konfidensintervall for diffusjonskoeffisienten  $D$ . Bruk svaret fra oppgave c). Sammenlikn med den teoretiske verdien, og prøv å forklare eventuelle avvik.



8. Regn ut kovariansen mellom  $\langle |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2 \rangle$  og tid. Bruk datapunktene fra den forrige oppgaven.



9. Regn deretter ut korrelasjonskoeffisienten.



10. Regn ut kovariansen mellom sannsynlighetsfordelingen etter 2 tidssteg og posisjonene til 1000 partikler etter 2 tidssteg.



11. Regn deretter ut korrelasjonskoeffisienten.



12. Sample sannsynlighetsfordelingen for den kvadratiske avstanden  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2$  etter 100 tidssteg. Bruk en samplestørrelse på 10 000 partikler.



13. Bruk svaret i oppgave 12) for å bestemme en empirisk kumulativ fordelingsfunksjon.