UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI TRIESTE

Dipartimento di Fisica

Dipartimento d'Eccellenza 2023-2027

Laboratorio di Fisica Computazionale

FI020004-4

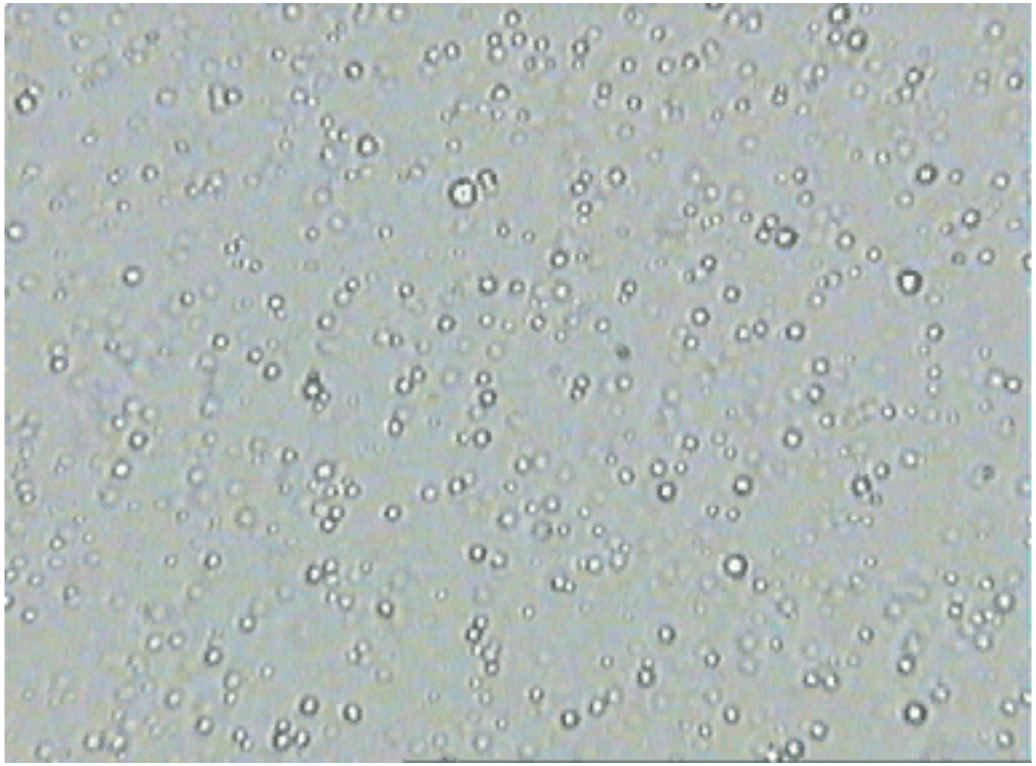
Numeri casuali e approcci stocastici - II parte

Maria Peressi
Università degli Studi di Trieste - Dipartimento di Fisica
Sede di Miramare (Strada Costiera 11, Trieste)
e-mail: peressi@units.it

(molto materiale è frutto di una lunga collaborazione con il collega prof. G. Pastore che ringrazio!)

Il moto browniano: un processo casuale

le goccioline di grasso nel latte viste al microscopio, i granelli di polline o polvere sospesi nell'aria... sembrano muoversi "a caso"

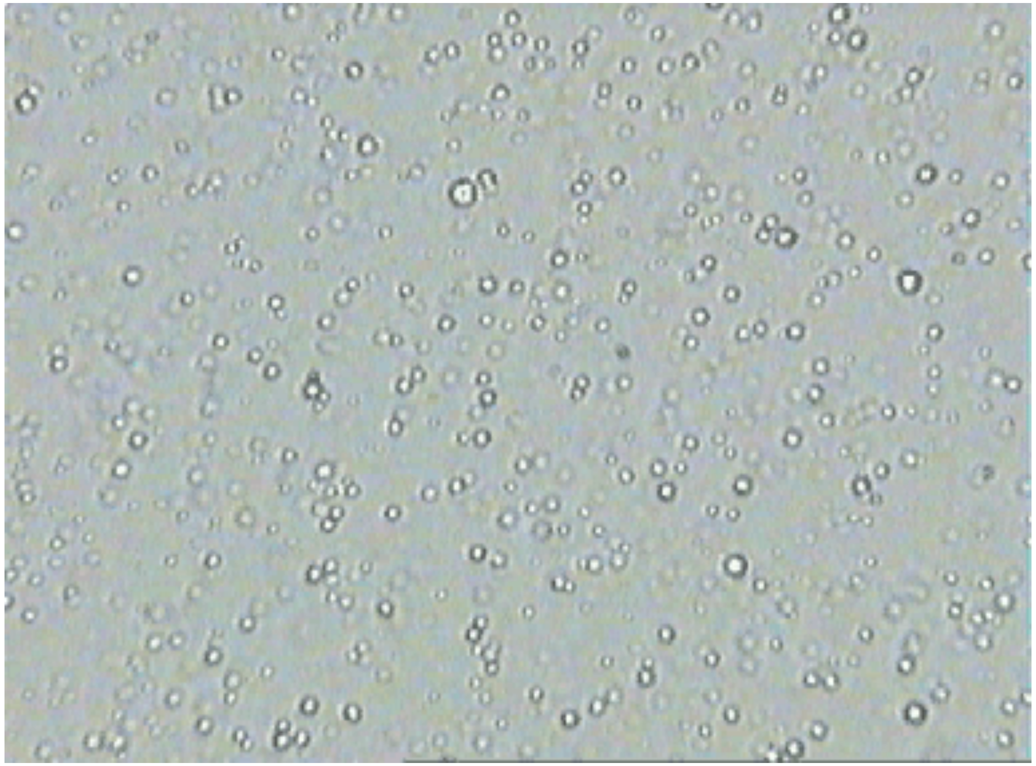


fat droplets (0.5 – 3 μm) in milk (http://www.microscopy-uk.net/dww/home/bmhq1.avi)

- processi "naturalmente" casuali hanno a che vedere con **"variabili casuali"**

Il moto browniano: un processo casuale

le goccioline di grasso nel latte viste al microscopio, i granelli di polline o polvere sospesi nell’aria... sembrano muoversi “a caso”

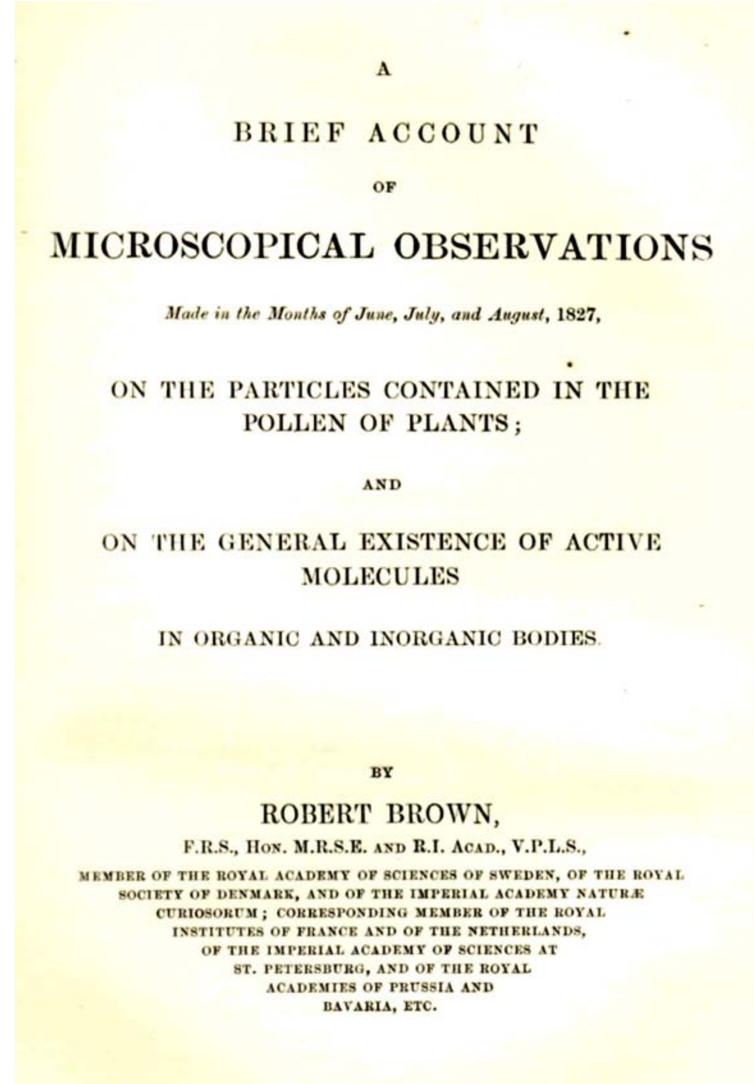


fat droplets (0.5 – 3 μm) in milk (http://www.microscopy-uk.net/dww/home/bmhq1.avi)

- **come possiamo descrivere questo moto ?**
- **da che cosa e’ determinato ?**

Le ricerche di Robert Brown

(1773-1858)



A

BRIEF ACCOUNT

OF

MICROSCOPICAL OBSERVATIONS

Made in the Months of June, July, and August, 1827,

ON THE PARTICLES CONTAINED IN THE POLLEN OF PLANTS;

AND

ON THE GENERAL EXISTENCE OF ACTIVE MOLECULES

IN ORGANIC AND INORGANIC BODIES.

BY

ROBERT BROWN,

F.R.S., HON. M.R.S.E. AND R.I. ACAD., V.P.L.S.,

MEMBER OF THE ROYAL ACADEMY OF SCIENCES OF SWEDEN, OF THE ROYAL SOCIETY OF DENMARK, AND OF THE IMPERIAL ACADEMY NATURÆ CURIOSORUM; CORRESPONDING MEMBER OF THE ROYAL INSTITUTES OF FRANCE AND OF THE NETHERLANDS, OF THE IMPERIAL ACADEMY OF SCIENCES AT ST. PETERSBURG, AND OF THE ROYAL ACADEMIES OF PRUSSIA AND BAVARIA, ETC.

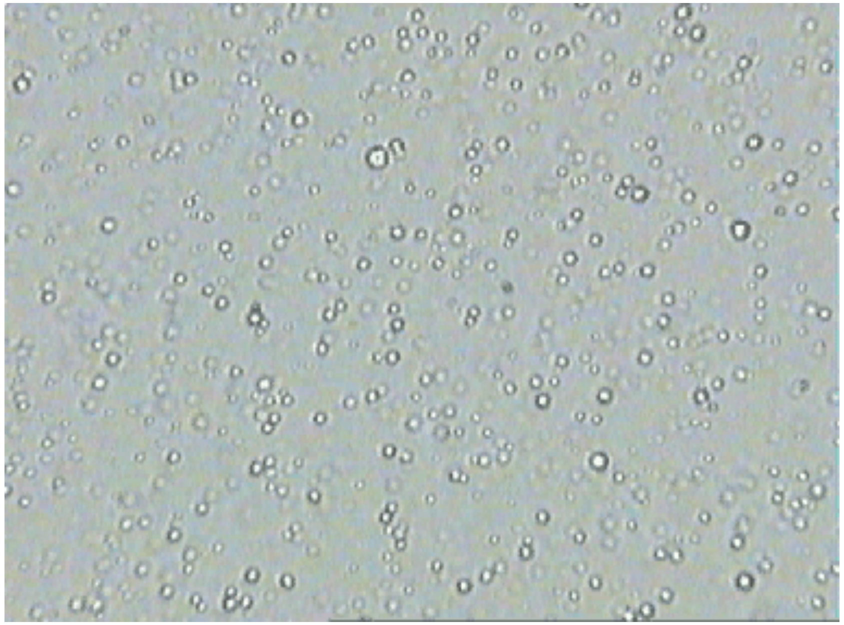
- prima del 1827 questo moto era attribuito all'esistenza di particelle "viventi"
- Brown lo osserva anche in particelle inanimate (parla comunque di "*active molecules*"), ma non sa spiegare la **causa**

Quale causa?

Agitazione termica? (ipotesi di Loschmidt, 1870)

- Teoria cinetica dei gas

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T$$



v = ???

(non sapremmo misurarla!)

(bisogna sempre porsi le domande giuste !!!)

Albert Einstein e il suo "annus mirabilis" (1905)

- Effetto fotoelettrico

  ("Su un punto di vista euristico riguardo la produzione e trasformazione della luce")

- Moto browniano

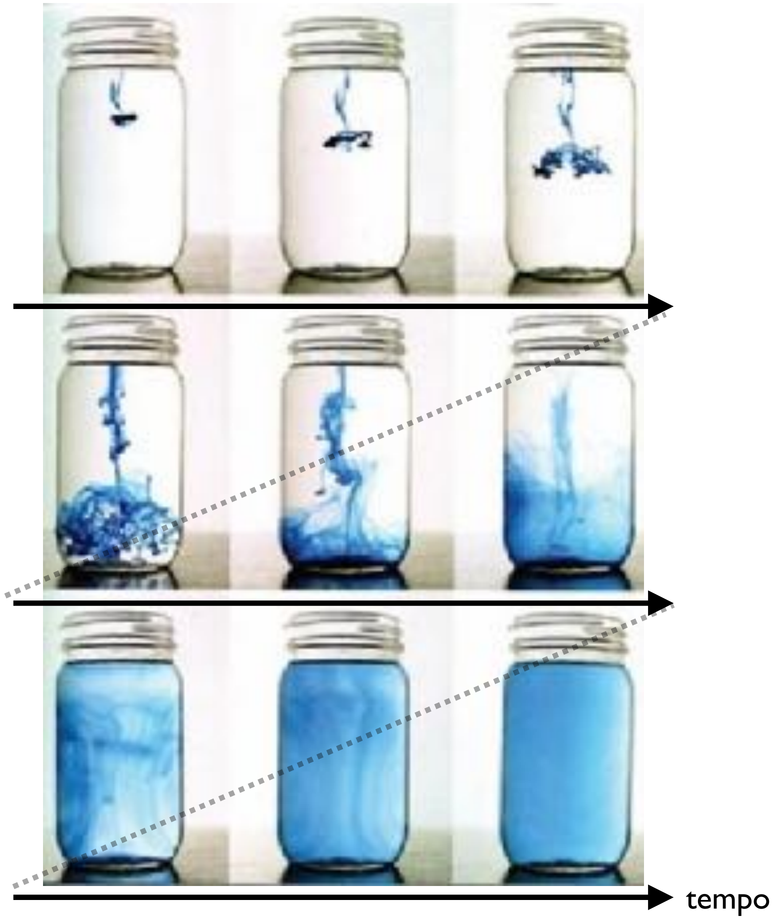
  ("Sul moto richiesto dalla teoria cinetica degli atomi a piccole particelle sospese in un liquido")

- Teoria della relativita' ristretta

- ("Sull' elettrodinamica dei mezzi in movimento")

Il moto browniano: la strada di Einstein

Un fenomeno connesso e' quello della **diffusione** (osservazioni su scale di tempo sufficientemente lunghe)

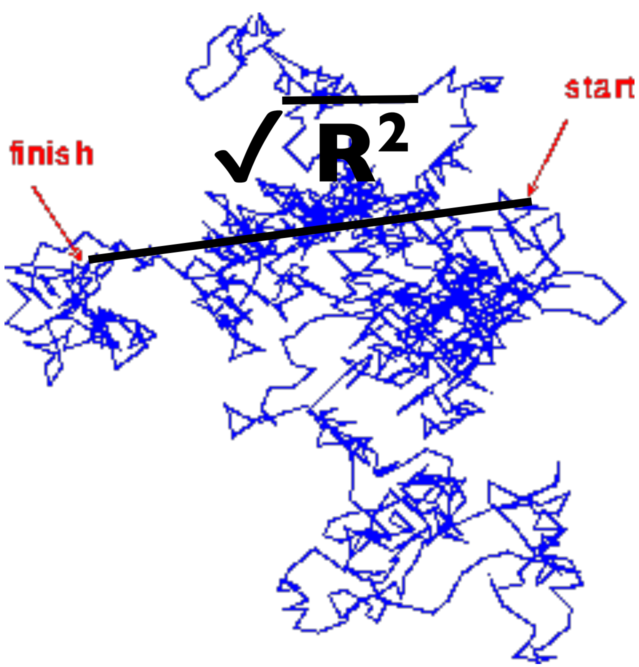


- come possiamo descrivere QUANTITATIVAMENTE questo fenomeno ? (cioe', cosa possiamo misurare ?)

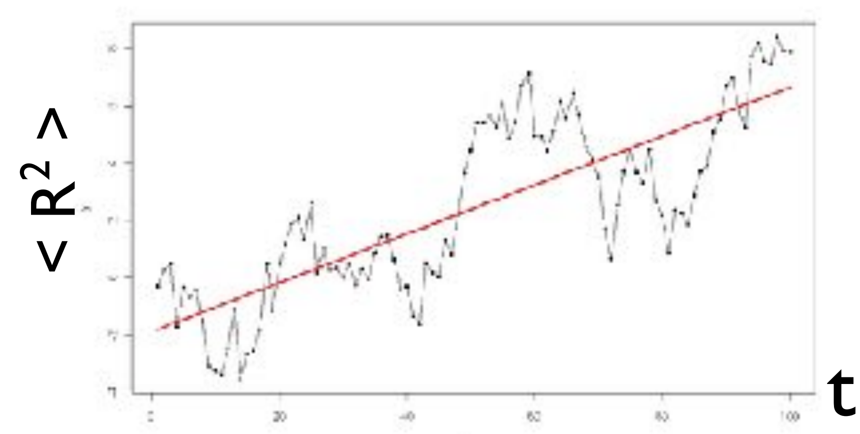
Potremmo misurare **il coefficiente di diffusione D** delle particelle blu che e' legato alla **velocita' del loro spostamento quadratico medio $< R^2 >$** dal punto di partenza.

Questo si trova essere linearmente dipendente dal tempo:

$$< R^2 > = 2d\ D\ t$$



(d e' la dimensione dello spazio, qui d=2)



in nero: risultato per un singolo camminatore, in rosso: andamento atteso, ottenibile da media su molti camminatori

$< R^2 > = 2d\, D\, t$

D dipende dai parametri del solvente (temperatura T e coefficiente di attrito η) e delle particelle (forma e raggio P) *[questo non lo dimostriamo]:*

$$D = k_B T \,/\, 6\pi\eta P$$

e, tra l'altro, e' legato (legge di Stokes) alla forza di attrito del solvente:

$$\gamma = 6\pi\eta P$$

e quindi:

$$< R^2 > = 2d\, k_B T \,/\, \gamma$$

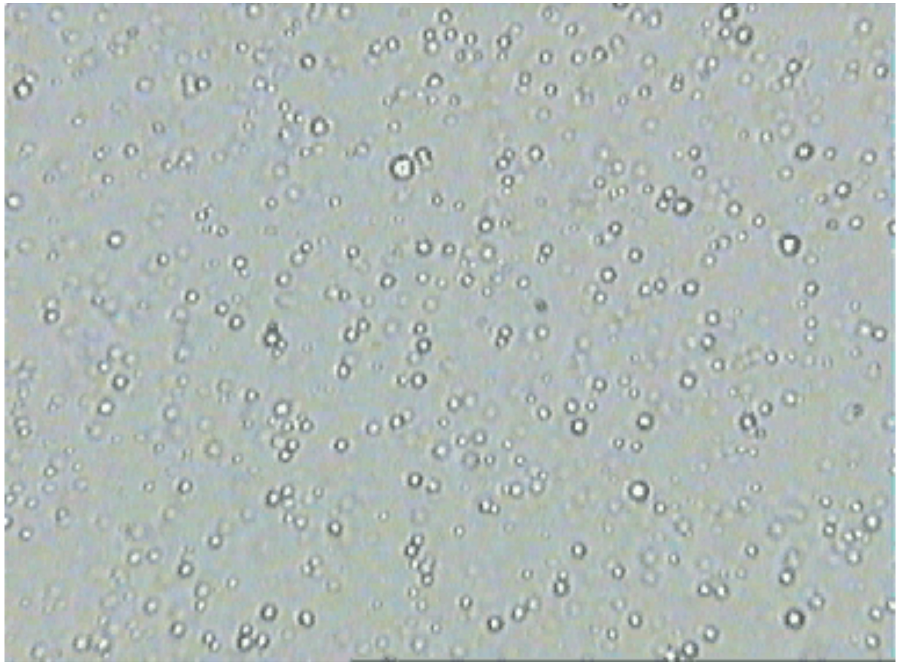
Il moto browniano: la strada di Einstein

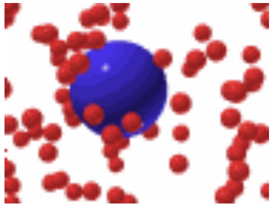
"Se il movimento qui discusso potra' essere realmente osservato (insieme alle proprieta' che ci si aspetta di trovare)... diverra' possibile determinare esattamente le vere dimensioni degli atomi."

Visto che k_B, T, η sono noti,
se misurassimo $< R^2 >$ avremmo γ,
e riusciremmo a determinare
il raggio P delle particelle !

Il moto browniano: la strada di Einstein

Einstein predice che **particelle microscopiche** (qui: goccioline di grasso) disperse nell'acqua **mostrano un moto casuale come risultato di collisioni** (dovute a forze stocastiche) **con molecole** (acqua) **molto piu' leggere e piccole** (non visibili sulla scala di osservazione scelta).





Il moto browniano: la strada di Langevin

ma la trattazione di Einstein e' matematicamente complicata e qui smettiamo di seguirlo... Preferiamo quella del fisico francese **Paul Langevin** che quasi contemporaneamente (1906) arriva a dimostrare la stessa relazione, lavorando con un'equazione del moto con un termine di attrito proporzionale alla velocita' (γv) e una forza "casuale", stocastica (F_s) dovuta al solvente:

$$ma = F = -\gamma v + F_s$$

riferimento : De Grooth BG, Am. J. Phy. 67, 1248 (1999)

Il moto browniano: la strada di Langevin

URTI ELASTICI tra le particelle grandi (M,V) e quelle piccole (m,v). Ad ogni collisione:

- conservazione dell'energia
- conservazione della quantita' di moto

(caso 1D)

$$\begin{cases} MV + mv = MV' + mv' \\ \frac{1}{2}MV^2 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}MV'^2 + \frac{1}{2}mv'^2 \end{cases}$$

Si puo' dimostrare **(...)** che, nell'ipotesi m<<M, si ottiene:

Urto elastico (1D)

$$V' \simeq \frac{2m}{M} v + \left(1 - \frac{2m}{M}\right) V$$

$$\Delta V = V' - V \simeq \frac{2m}{M} v - \frac{2m}{M} V$$

N collisioni (*n* in ogni Δt)

$$M\Delta V = 2m(v_0 + v_1 + \ldots + v_{N-1}) - 2m(V_0 + V_1 + \ldots + V_{N-1})$$

$$V_i \simeq V$$

$$N = n\Delta t$$

$$2mNV = 2mn\Delta t V(t)$$

$$M\Delta V = 2m(v_0 + v_1 + \ldots + v_{N-1}) - 2mn\Delta t V(t)$$

$$Ma = M\frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{2m(v_0 + v_1 + \ldots + v_{N-1})}{\Delta t} - 2mn\Delta t V(t)$$

N collisioni

$$Ma = F_s - \gamma V(t)$$

$$\gamma = 2mn$$

$$F_s = \frac{2m(v_0 + v_1 + \ldots + v_{N-1})}{\Delta t}$$

Forza stocastica e attrito hanno la stessa origine!

Un algoritmo per il moto browniano

$$V_{q+1} = V_q - \gamma V_q \frac{\Delta t}{M} + \Delta V_s$$

1 collisione

$$\Delta V_s = \frac{2mv}{M} = \frac{2}{M}\frac{v}{|v\ |}\sqrt{m^2v^2} = \frac{2}{M}\frac{v}{|v\ |}\sqrt{m^2v^2} =$$

$$= \frac{2}{M}\frac{v}{|v\ |}\sqrt{mkT} = \frac{1}{M}\frac{v}{|v\ |}\sqrt{\frac{2\gamma kT}{n}}$$

Un algoritmo per il moto browniano

$$\Delta V_N = w_q \frac{1}{M}\sqrt{2\gamma kT\Delta t}$$

$$V_{q+1} = V_q - \frac{\gamma V_q}{M}\Delta t + w_q \frac{\sqrt{2\gamma kT\Delta t}}{M} + \frac{F_{ext}}{M}\Delta t$$

$$X_{q+1} = X_q + V_{q+1}\Delta t$$

Possiamo adesso risolvere le equazioni del moto sul computer per scoprire - verificare la relazione di Einstein

$$\left\langle R^2 \right\rangle = \frac{2dkT}{\gamma} t$$

d : n. dimensioni spaziali

Il programma **Brown** in java

- sono definiti tre array `vel, pos, posPrec` che contengono le componenti cartesiane delle velocità, posizione e posizione al passo precedente di ciascuna particella browniana;

- l' utilizzo del programma di libreria (metodo) `random.nextGaussian()` che fornisce valori distribuiti secondo una distribuzione a campana (gaussiana) standard di media zero e $\sigma = 1$.

- il programma prevede la possibilità che sulla particella agisca anche una forza esterna (rappresentata dall' array `forza`). Da notare però che nell' implementazione proposta tale forza è sempre zero.

- `NDIM` e `nPart` rappresentano il numero di dimensioni spaziali e il numero di particelle di cui si calcola il moto.

```
  ...
double posPrec[]=new double[NDIM];
for (int ip=0;ip<nPart;ip++) {
    for (int jc=0;jc<NDIM;jc++) {
posPrec[jc]=pos[ip][jc];
vel[ip][jc] =
    vel[ip][jc] * ( 1 - gamma*dt/massa ) +
    dt*forza[ip][jc]/massa +
    random.nextGaussian()*Math.sqrt(2*gamma*kT*dt)/massa;
pos[ip][jc] += vel[ip][jc] * dt;
    }
```

Parametri fisici:

massa **Mass**, temperatura **kT**, il coefficiente di attrito **Gamma**, γ)

Parametri tecnici della simulazione: Δt

Suggerimento: considerare $\gamma\Delta t/M << 1$

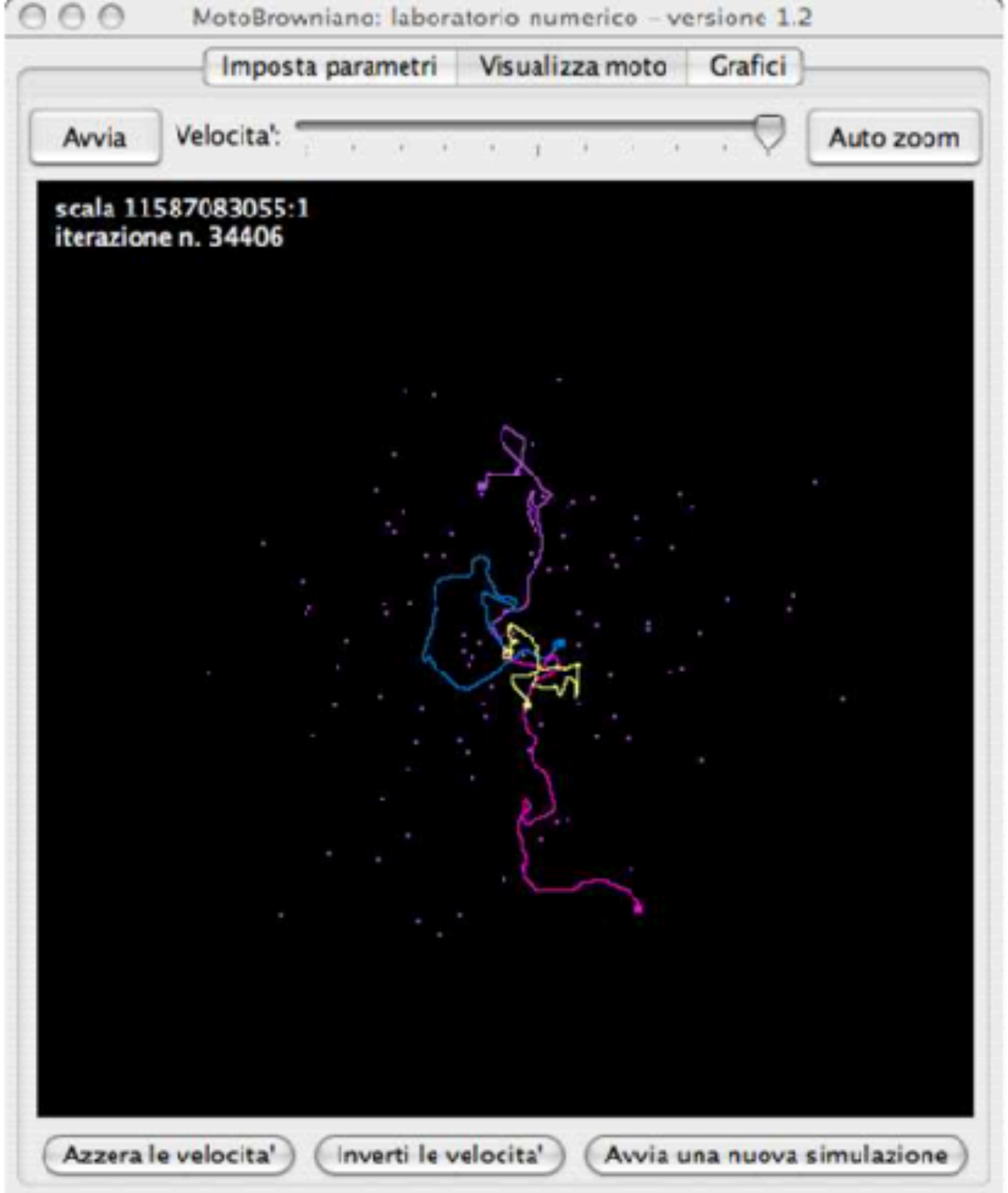


Figura 3: Random walk in due dimensioni corrispondente ad un moto browniano con i valori $\gamma = 8 \cdot 10^{-7} Ns/m$, $kT = 4 \cdot 10^{-21} J$ e $M = 1.4 \cdot 10^{-10} kg$, ragionevoli per il caso di una particella di polline in acqua a temperatura ambiente.