

P9

Ismael Crespo

27 de abril de 2022

1. Introducción

Esta práctica introduce la simulación de fenómenos de atracción y de repulsión entre n partículas que están contenidas en un espacio. Cargas de un mismo signo producirán una repulsión mientras cargas opuestas resultan en una atracción — la magnitud de la fuerza estará proporcional a la diferencia de magnitud de las cargas (mayores diferencias resultando en fuerzas mayores), y además la fuerza será inversamente proporcional a la distancia euclídeana entre las partículas (éstas son reglas inventadas de interacción para efectos de demostración). De igual manera se proponen reglas de atracción y repulsión relacionadas con la magnitud de la masa de cada partícula.

2. Objetivo

Estudiar la distribución de velocidades de las partículas en relación con la magnitud de la carga, y la masa de las partículas.

3. Programación en R

La creación y posicionamiento de partículas con cargas definidas y normalizadas se realiza utilizando las rutinas elaboradas por E.Schaeffer [2], se realizó una modificación a las rutinas originales agregando un valor de masa característico para cada partícula, el valor de la masa se seleccionó aleatoriamente de 1 a 5 y se utilizó la ecuación 1 para definir la magnitud de la fuerza, la dirección de esta fuerza (repulsión o atracción) se mantendrá igual a la definida por el signo de sus cargas.

$$F = \frac{G \times m_1 \times m_2}{r^2} \quad (1)$$

En la ecuación 1, G es la gravedad en la tierra, m_1 es la masa de la partícula en turno y m_2 es la masa de cada una de las otras partículas que existen en el sistema e interactúan con la partícula de masa m_1 . En el código 1 se presenta como se agregó a la rutina el parámetro de la masa dentro del cuadro de datos p , la regla presentada en la ecuación 1 para obtener la fuerza del movimiento se ajustó utilizando la variable `suav` para controlar que no existieran desplazamientos fuera del rango en el que se realizó la simulación. Por medio de un ciclo `for.each` se realizó el análisis en paralelo para la interacción de cada partícula con todas las demás durante 100 pasos (código 2). Para consulta a detalle de la rutina véase los códigos publicados por I.Crespo [1].

Código 1: Repulsión y atracción de las partículas debido a la masa.

```
1 p <- data.frame(x = rnorm(n), y=rnorm(n),
2 c=rnorm(n),m=sample(1:5,n,replace=T) )
3
4 masa=(gra*mi*mj)*(suav)/(((sqrt(dx^2 + dy^2))/2)^2 + eps)
5     carga=abs(ci - cj) / (sqrt(dx^2 + dy^2) + eps)
6     factor <- dir * (carga+masa)
```

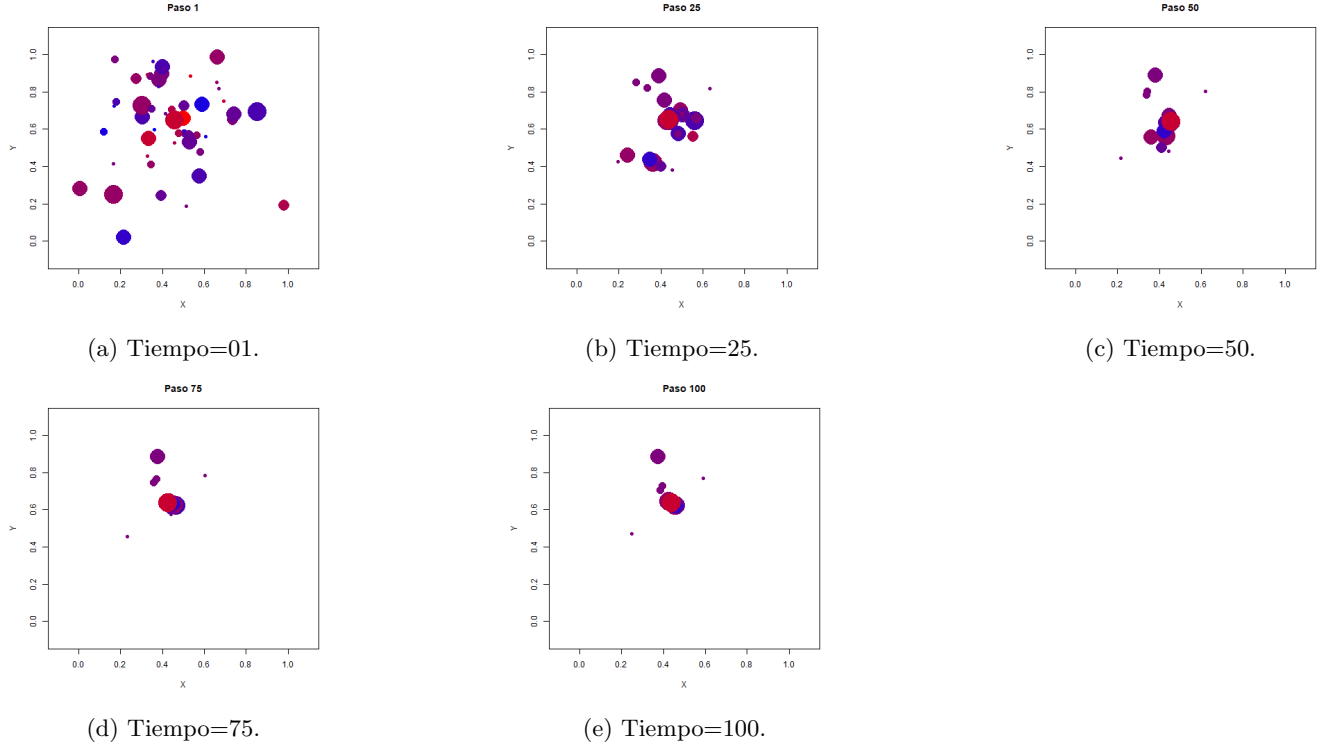


Figura 1: Repulsión y atracción de partículas gobernado por la masa y la carga de cada una.

Código 2: Ciclo for para el número de pasos a simular y foreach para cada partícula.

```

1 for (iter in 1:tmax) {
2   f <- foreach(i = 1:n, .combine=c) %dopar% fuerza(i)
3   delta <- 0.02 / max(abs(f)) # que nadie desplace una paso muy largo
4   p$x <- foreach(i = 1:n, .combine=c) %dopar% max(min(p[i,]$x
5     + delta * f[c(TRUE, FALSE)][i], 1), 0)
6   p$y <- foreach(i = 1:n, .combine=c) %dopar% max(min(p[i,]$y
7     + delta * f[c(FALSE, TRUE)][i], 1), 0)
8 }

```

Para realizar las gráficas se le atribuyó un color a cada carga desde -5 a 5 y la masa de cada partícula se distingue con el tamaño del punto de cada partícula. El análisis del impacto de la fuerza de la masa en la velocidad de las partículas se realizó considerando la posición inicial y final de cada partícula y se dividió entre el número total de pasos.

4. Resultados

La secuencia gráfica de la repulsión y atracción causada por la masa y la carga se muestra en la figura 1, véase el repositorio de I.Crespo [1] para la animación completa. Se observa la agregación de todas las partículas en una misma zona, y se observa un estado de estacionario a partir del paso 75. En la imagen 2 se presenta la secuencia gráfica de la interacción de partículas solamente gobernadas por la carga de cada una de estas. Véase el repositorio de I.Crespo [1] para la animación completa.

Cada interacción se replicó un total de 15 veces, la media de las velocidades cuando las interacciones están gobernadas solamente por la carga es de $0,0696$ unidades/paso y cuando la interacción es debido a la masa y a la carga la media de las velocidades resultó $0,0605$ unidades/paso. La velocidad resultó mayor cuando la interacción era determinada

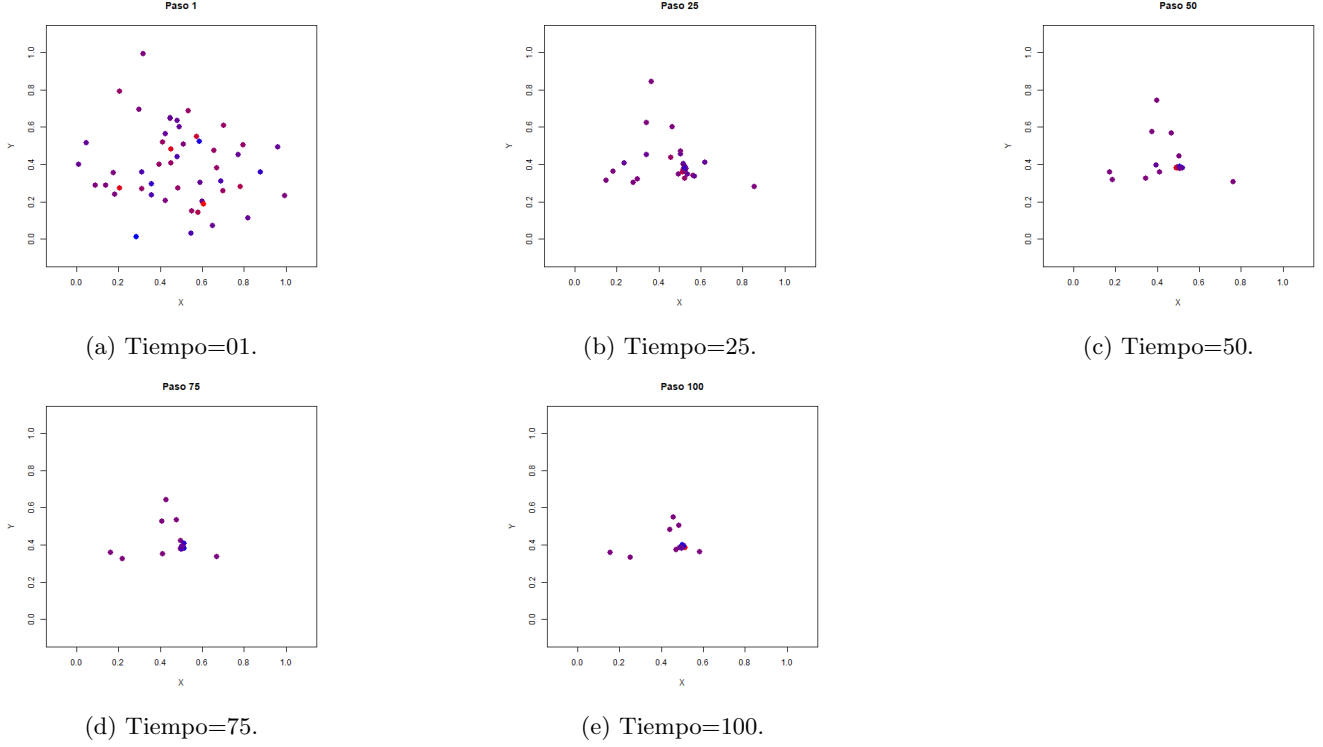


Figura 2: Repulsión y atracción de partículas gobernado solamente por la carga de cada una.

solamente por la carga ($pvalue = 0,019$).

5. Conclusiones

La integración de la masa dentro de las interacciones entre partículas ocasionó una disminución en la velocidad de las partículas cuando la simulación duró 100 pasos y utilizando un factor suavizante $suav=0.005$, sin embargo las partículas se agregan en un mismo punto en menos pasos cuando se integra la componente de la masa en la interacción.

Referencias

- [1] I. Crespo. P9: interacciones entre partículas. 2022. URL <https://github.com/IsmaelHC/Simulacion-NANO-2022/tree/main/P9>.
- [2] E. Schaeffer. Simulación. 2022. URL <https://satuelisa.github.io/simulation>.