Tema 7: Métodos estocásticos

7.3 Difusión

$$\rho(x,y,z,t) \propto P(x,y,z,t)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 \rho$$

En una dimensión

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

Solución analítica.

Podemos comprobar que la función

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} \right)$$

es solución de la ecuación, si se cumple que

$$\sigma = \sqrt{2Dt}$$

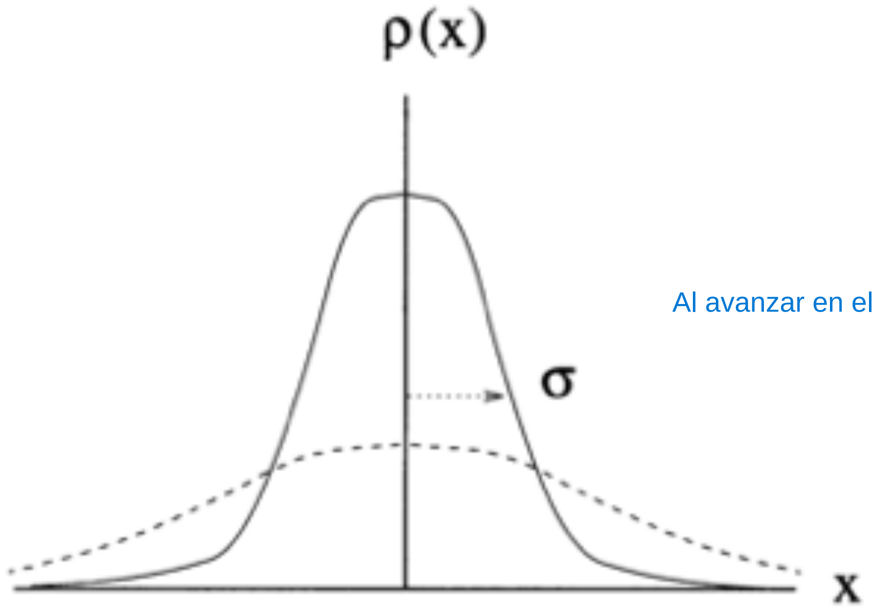
Tema 7: Métodos estocásticos

7.3 Difusión

Ecuación de difusión: $$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 \rho$$

En una dimensión: $$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

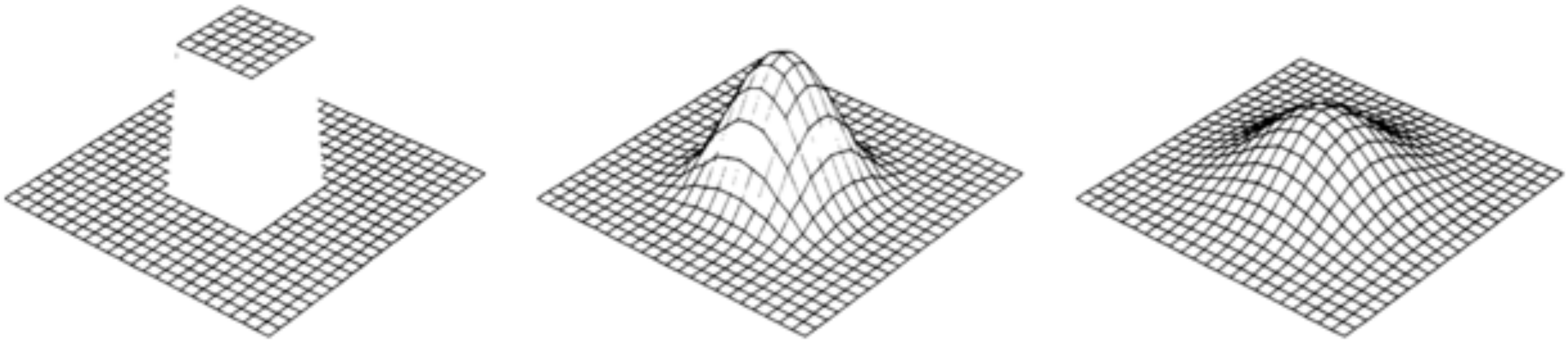
Solución a la ecuación de difusión en 1D:



Al avanzar en el tiempo aumenta sigma

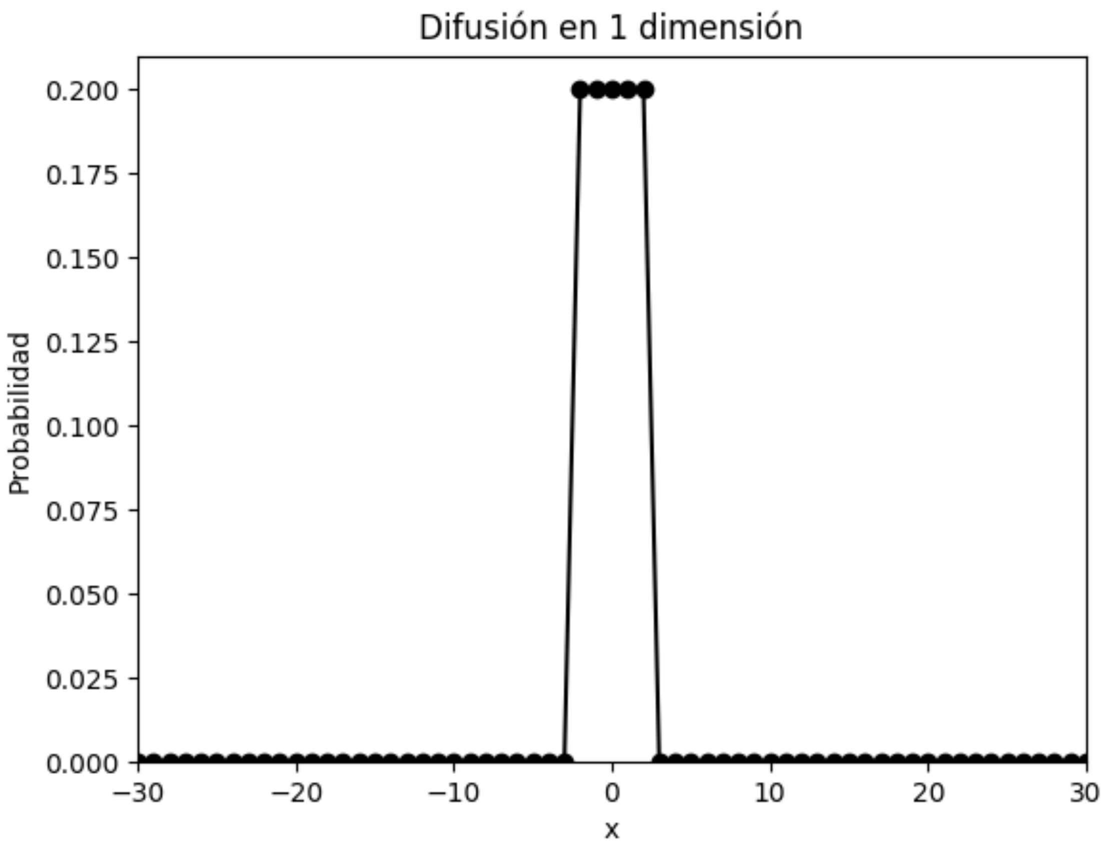
7.3 Difusión

Solución a la ecuación de difusión en 2D:



Se podrían obtener estos resultados de manera numérica como hemos hecho en temas anteriores.

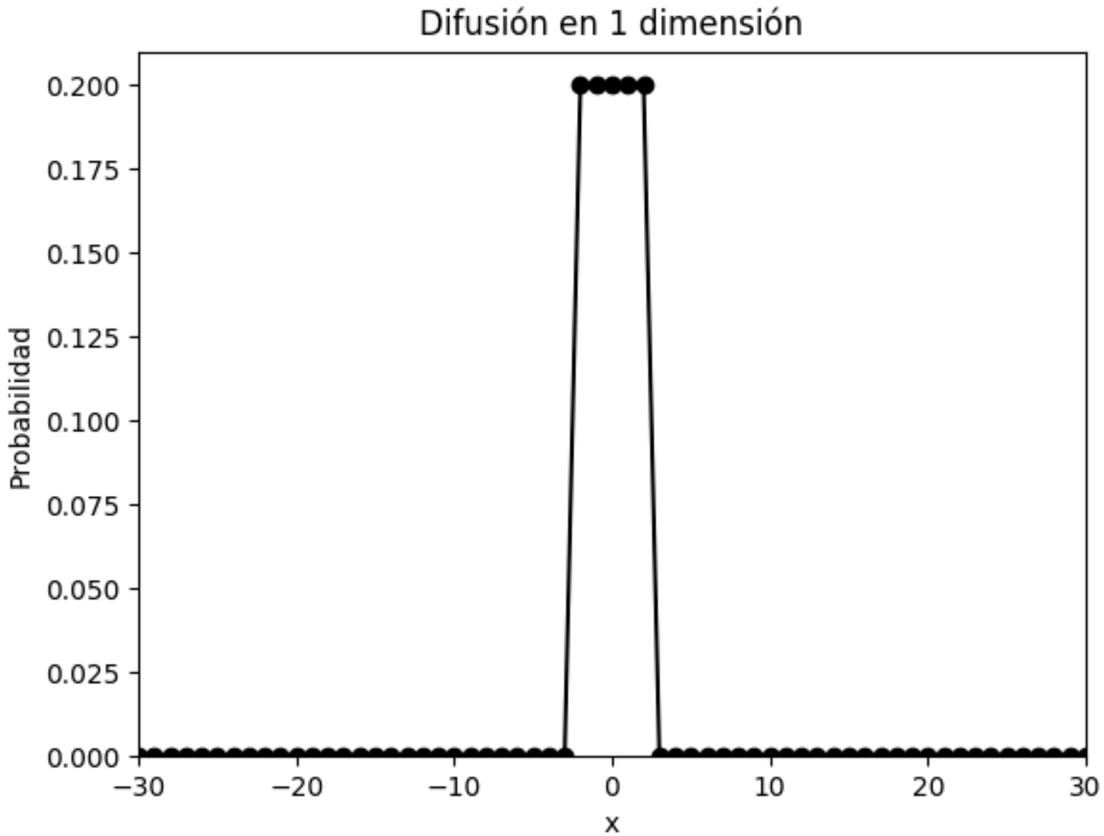
7.3 Difusión



En este caso se han metido 1000 caminantes en 5 posibles posiciones (entre -2 y 2) por eso la densidad de probabilidad es 0.2.

Tema 7: Métodos estocásticos

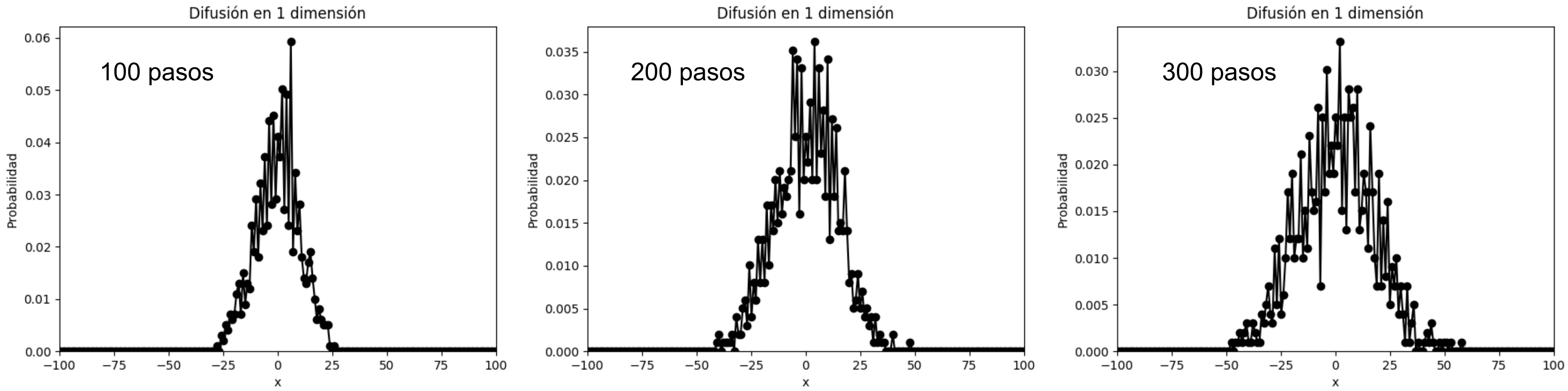
7.3 Difusión



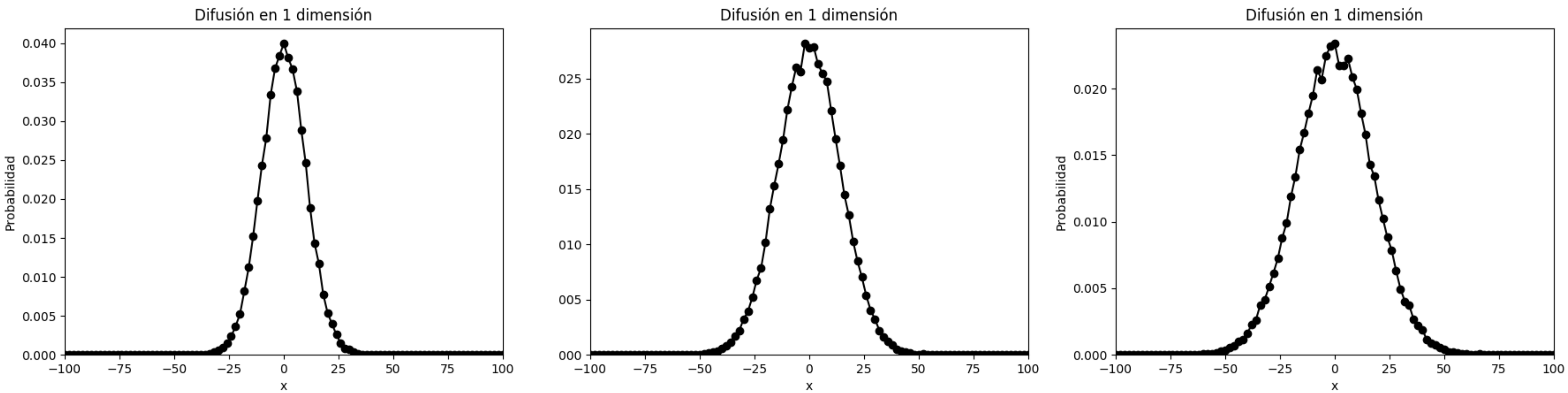
Tema 7: Métodos estocásticos

7.3 Difusión

1000 caminantes



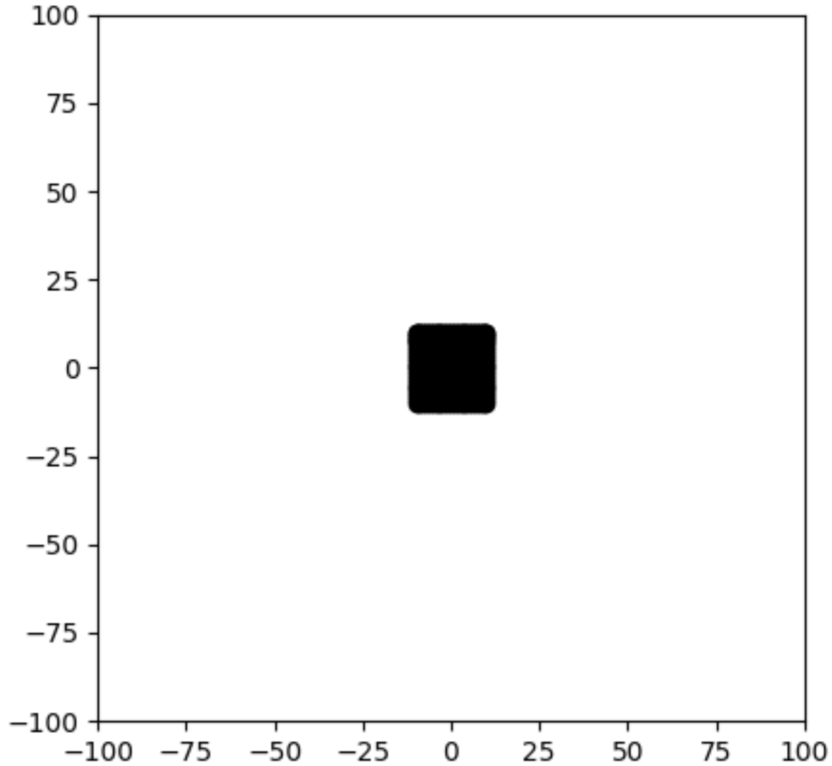
60000 caminantes



Aquí se han aumentado los caminantes y se ha duplicado el tamaño de las clases del histograma, lo cuál suaviza el histograma en sí.

7.4 Entropía y flecha del tiempo

Difusión de una gota de leche en una taza de café



Dimensión de la taza: 200x200. La gota se sitúa en [-5,5].

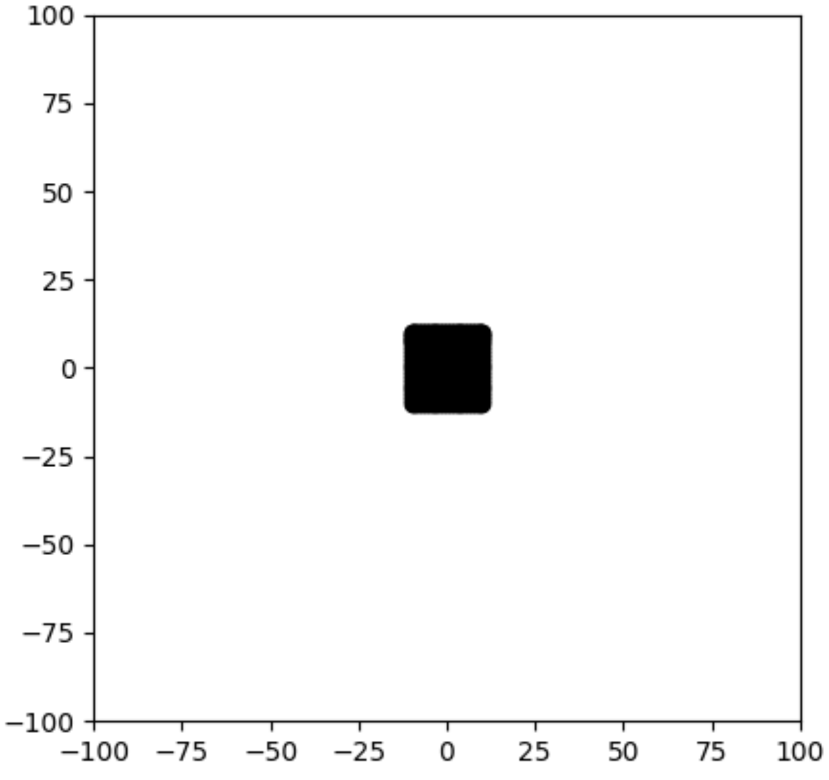
4 partículas por punto: 484 partículas

11 puntos en la dirección horizontal y 11 en la vertical (121 posiciones posibles). 121x4 = 484

Cuando una partícula llega al borde da la taza no pueden sobrepasarla.

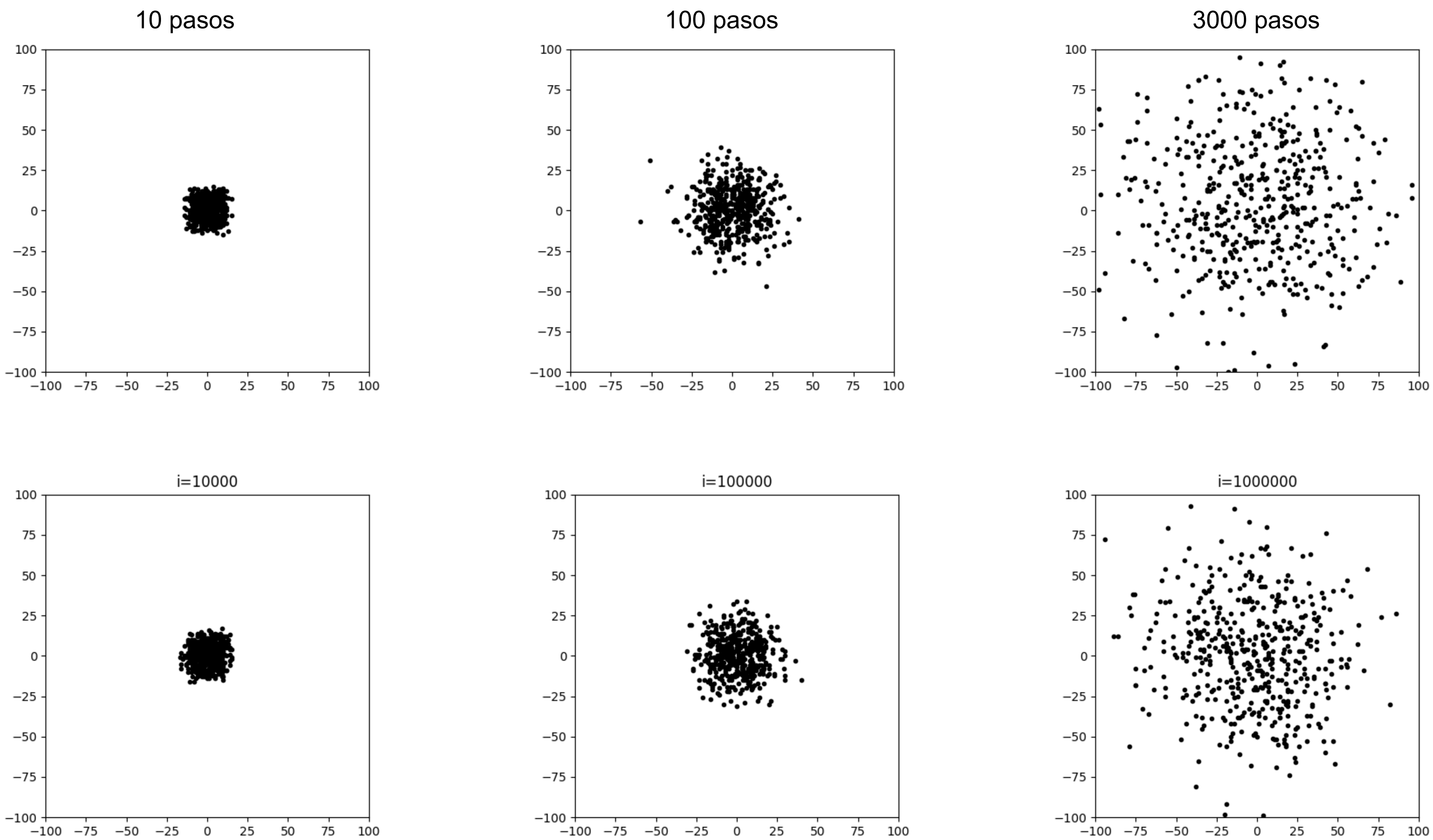
7.4 Entropía y flecha del tiempo

Difusión de una gota de leche en una taza de café



7.4 Entropía y flecha del tiempo

Difusión de una gota de leche en una taza de café



7.4 Entropía y flecha del tiempo

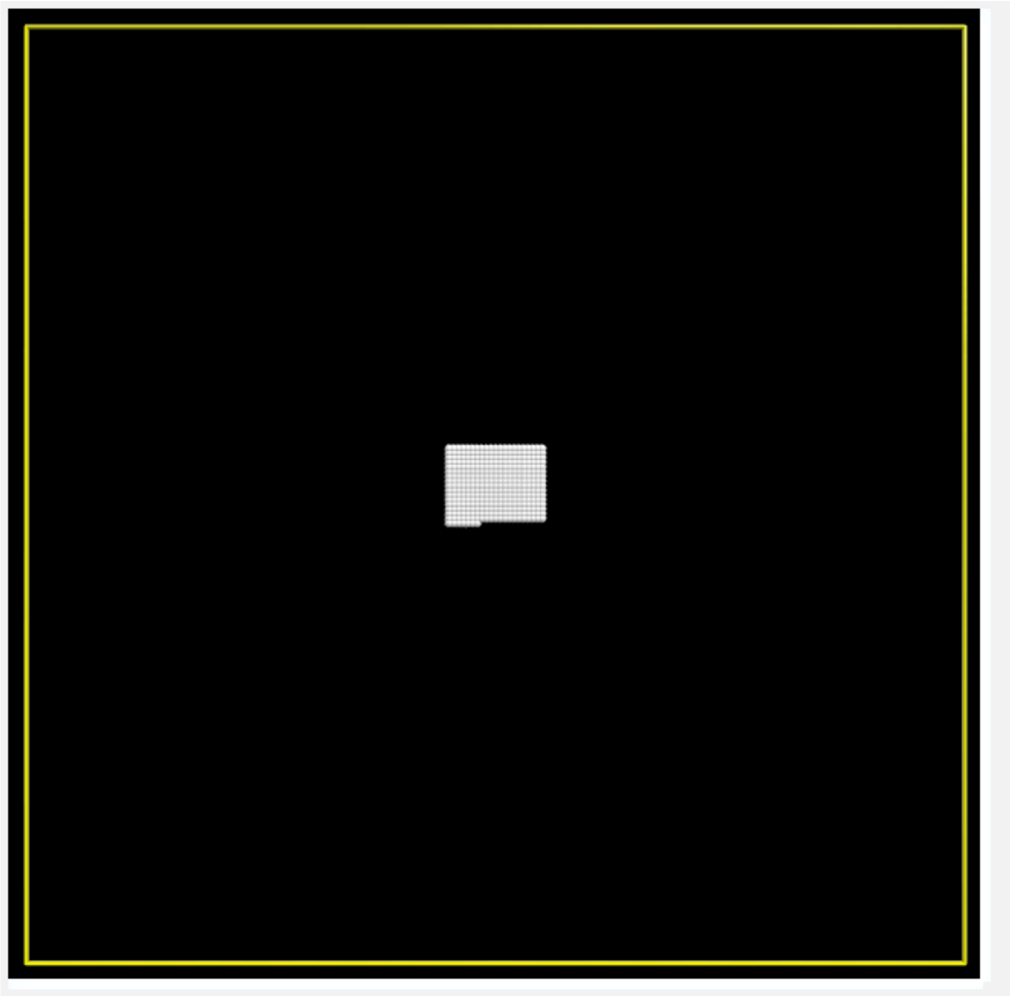
```
scene.height=640              # Para hacer la pantalla cuadrada.
scene.range=105
curve(vector(-101,-101,0), vector(-101,101,0), color=color.yellow, radius=0.5)
curve(vector(-101,101,0), vector(101,101,0), color=color.yellow, radius=0.5)
curve(vector(101,101,0), vector(101,-101,0), color=color.yellow, radius=0.5)
curve(vector(101,-101,0), vector(-101,-101,0), color=color.yellow, radius=0.5)
cs = np.empty(N_caminantes,sphere)
```

```
cs[i]=sphere(pos=vector(x[i],y[i],0), radius=1, color=color.white)
```

```
rate(100)
```

```
cs[j].pos=(vector(x[j],y[j],0))
```

7.4 Entropía y flecha del tiempo



7.4 Entropía y flecha del tiempo

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

En <u>equilibrio</u>, $p_i = 1/\Omega$, donde Ω es el nº de microestados

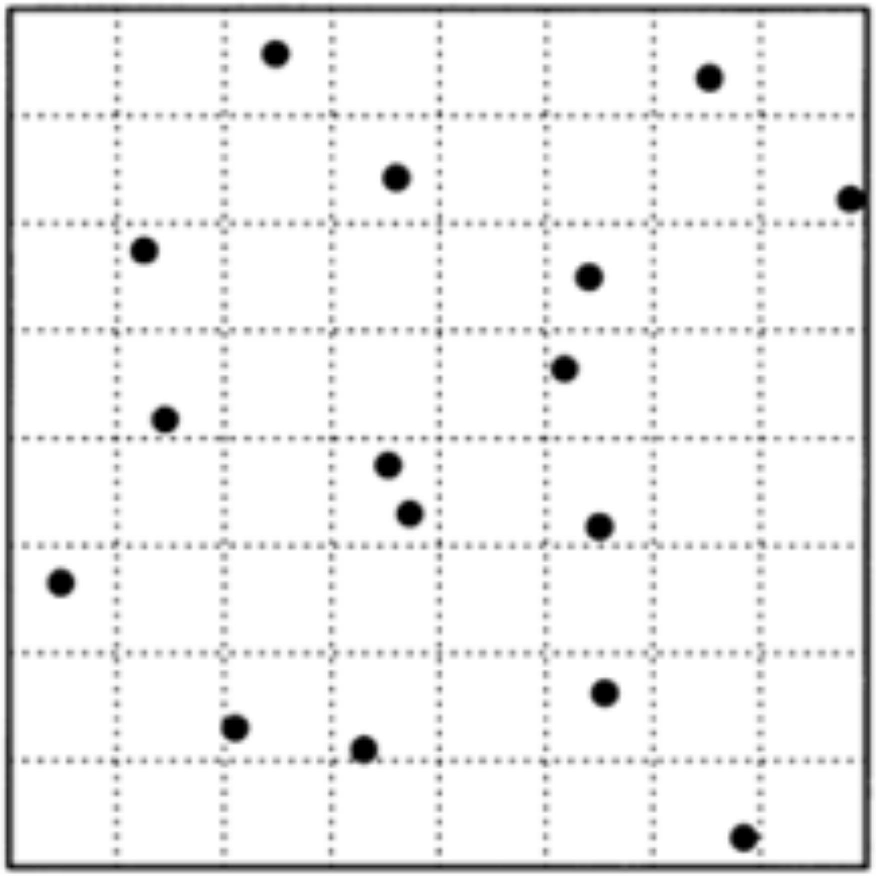
$$S = k_B \ln \Omega$$

Antes de disolverse, la gota de leche está alejada del equilibrio.
Tomamos $k_B = 1$

$$S = -\sum_i p_i \ln p_i$$

7.4 Entropía y flecha del tiempo

Para obtener la entropía dividimos el espacio en regiones, o "estados"

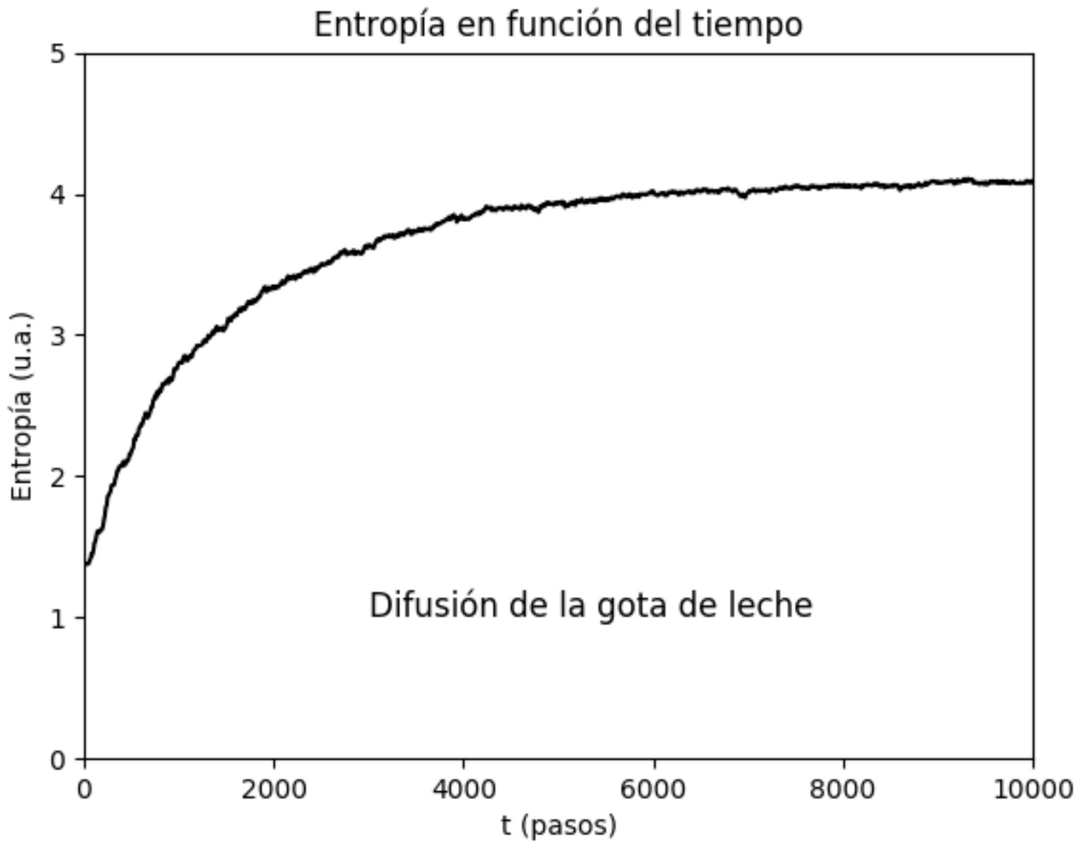


```
H,bordes_x,bordes_y = histogram2d(x,y,bins=Nbins,range=[[xmin,xmax],[ymin,ymax]])
```

7.4 Entropía y flecha del tiempo

Podemos usar la función histogram2d de numpy

```
H,bordes_x,bordes_y = histogram2d(x,y,bins=Nbins,range=[[xmin,xmax],[ymin,ymax]])
```



7.5 Modelos de crecimiento de agregados

El crecimiento de agregados o cúmulos de partículas puede simularse mediante caminos aleatorios y métodos estocásticos.

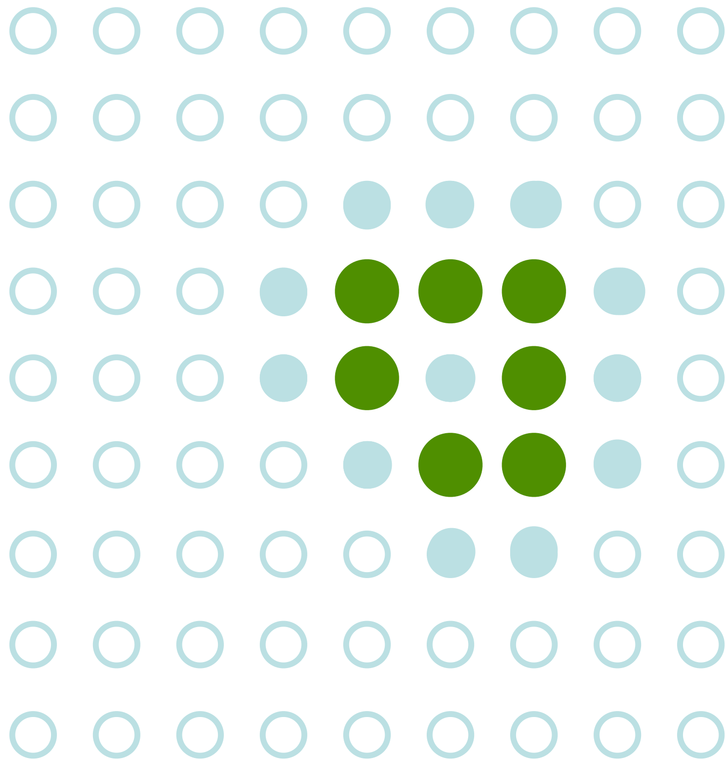
Dos modelos

- Modelo de Eden
- Modelo DLA (Diffusion limited aggregation)

Tema 7: Métodos estocásticos

7.5 Modelos de crecimiento de agregados

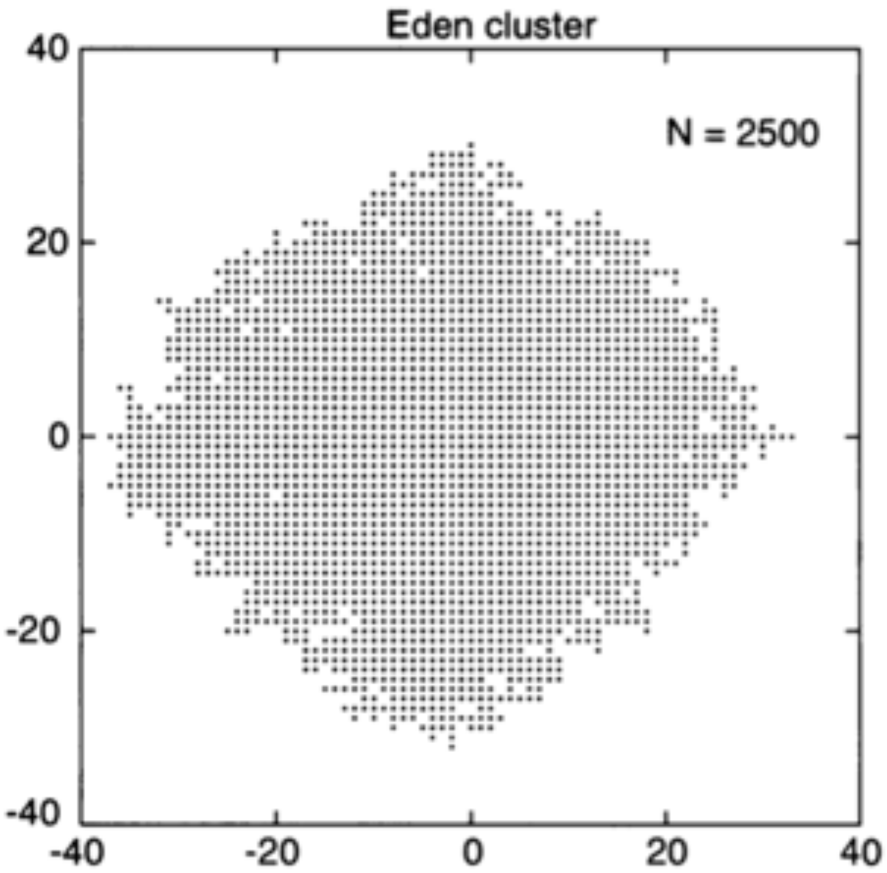
Modelo de Eden



Tema 7: Métodos estocásticos

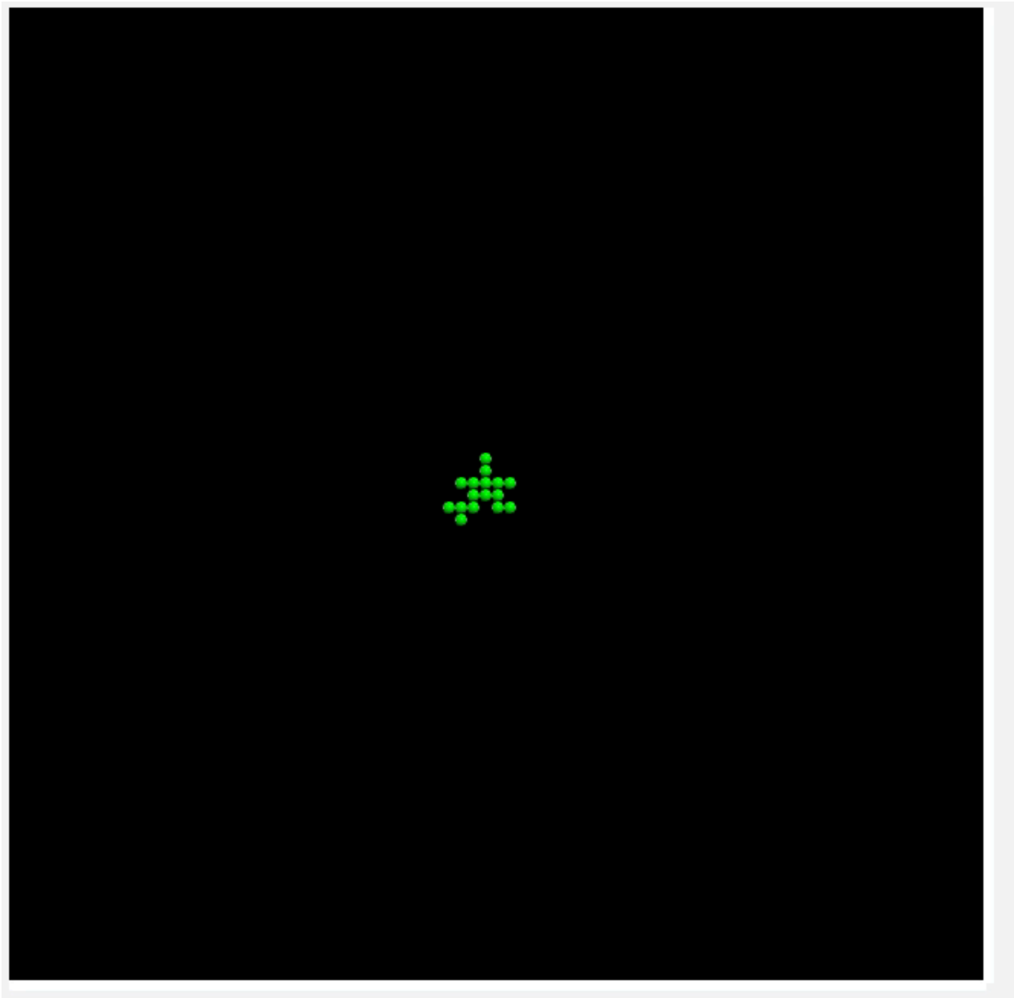
7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo de Eden



7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo de Eden

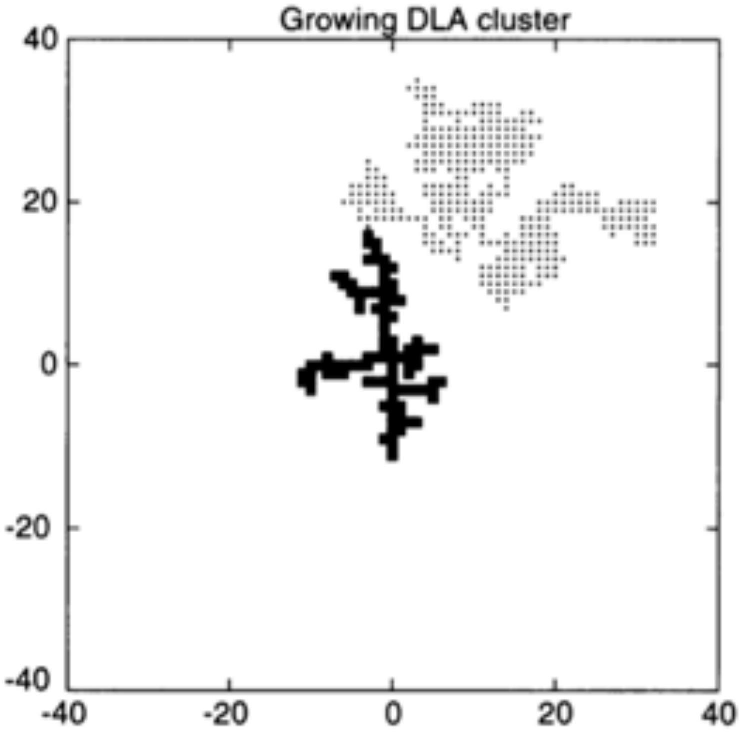


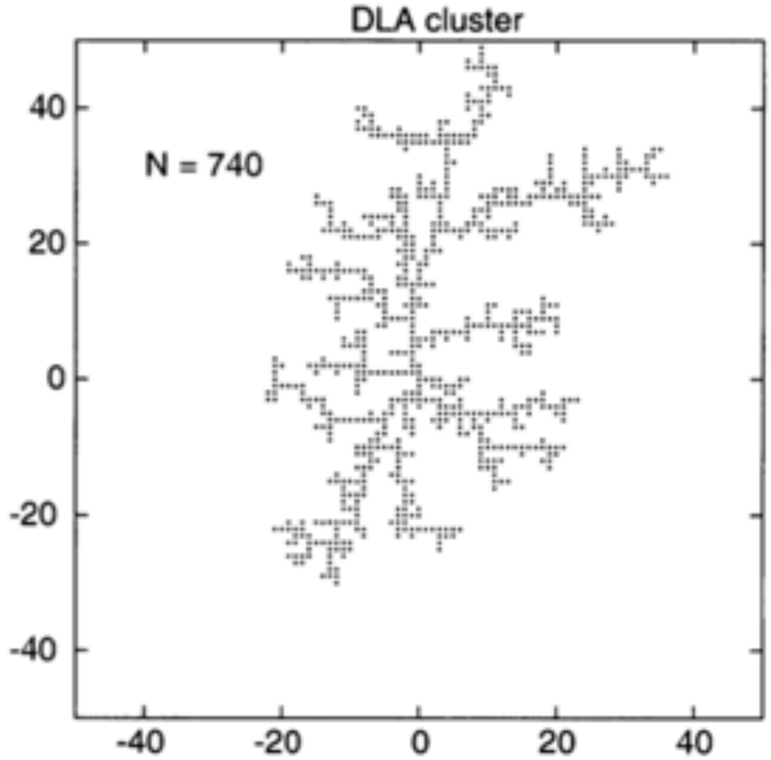
Tema 7: Métodos estocásticos

7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo DLA

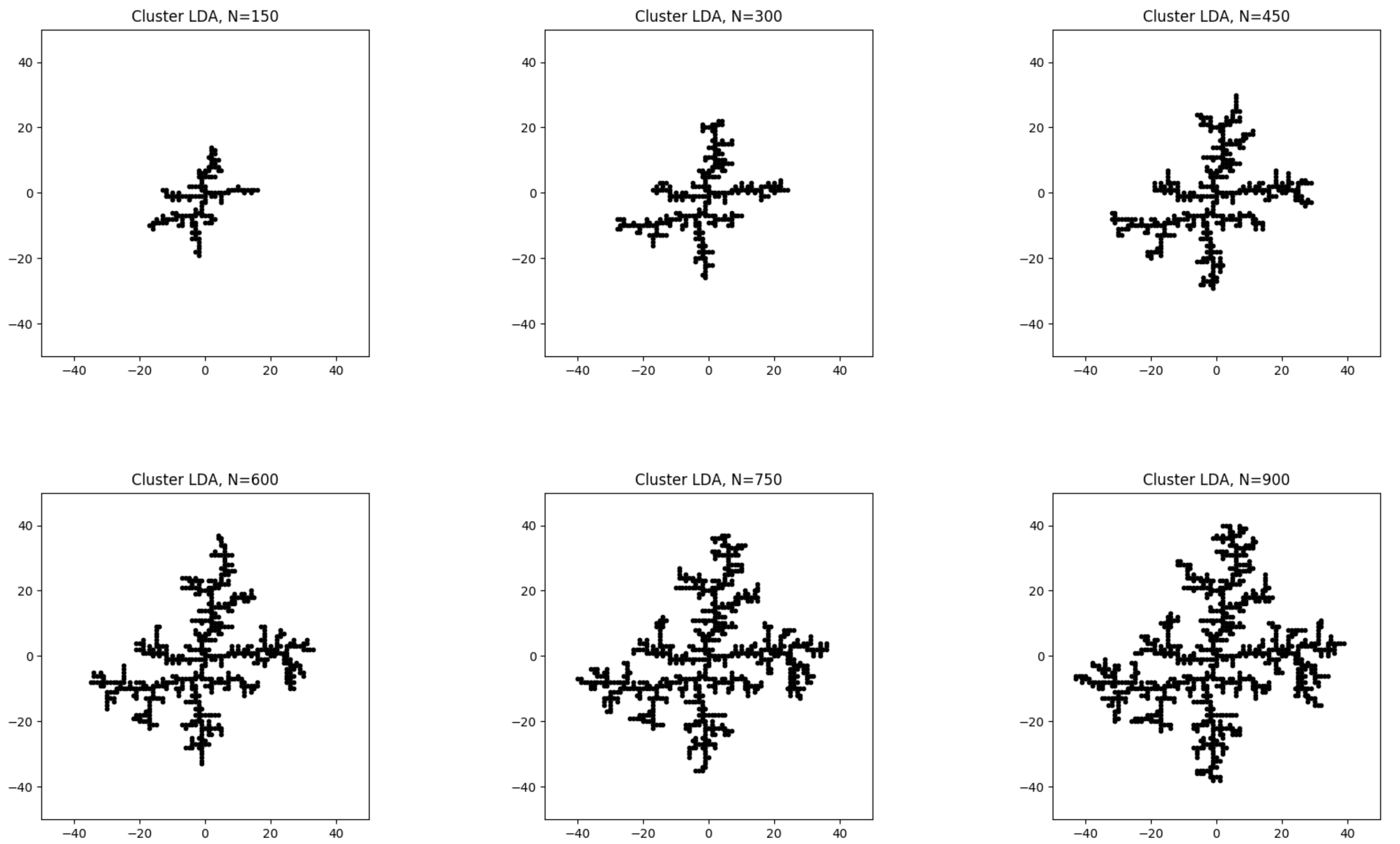
Basado en caminos aleatorios. Se comienza con una semilla y se "sueltan" uno o varios caminantes en posiciones aleatorias que van haciendo sus caminos. Cuando un caminante. Cuando el caminante o partícula alcanza un punto del perímetro del agregado, se queda en esa posición, pasando a formar parte del mismo.





7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo DLA

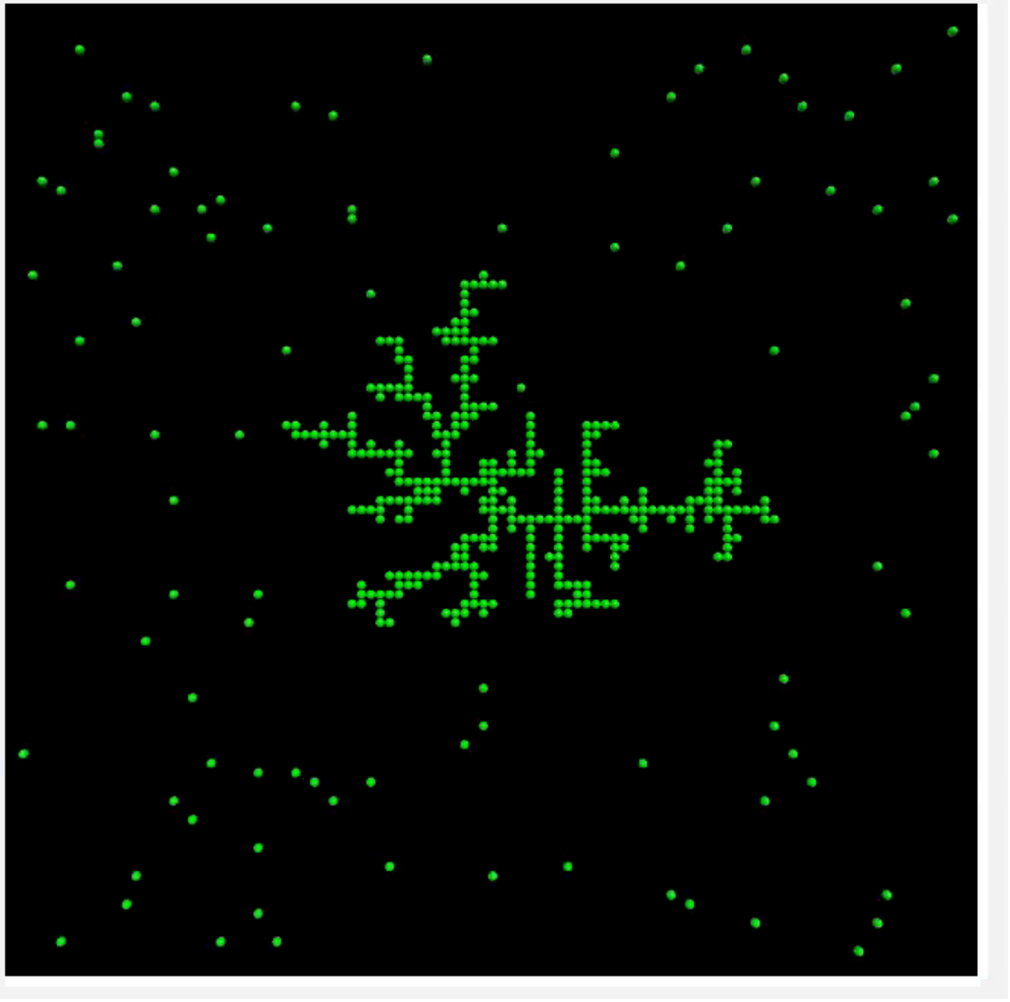


7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo DLA

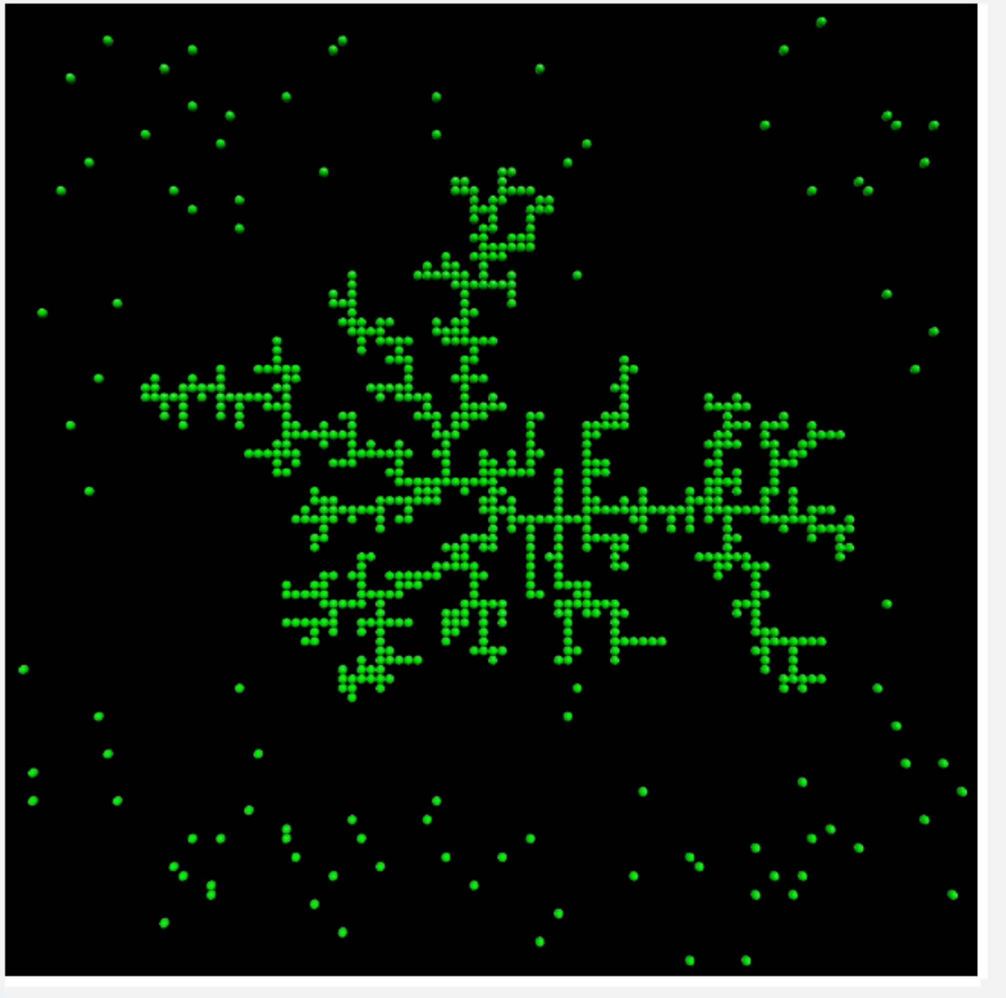
7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Modelo DLA



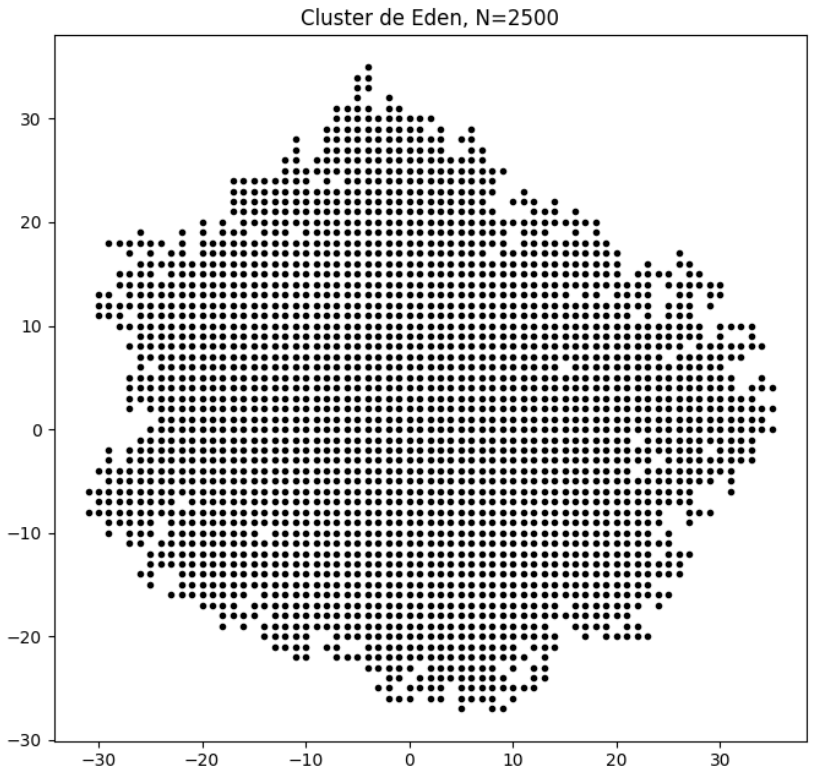
7.5 Modelos de crecimiento de agregados

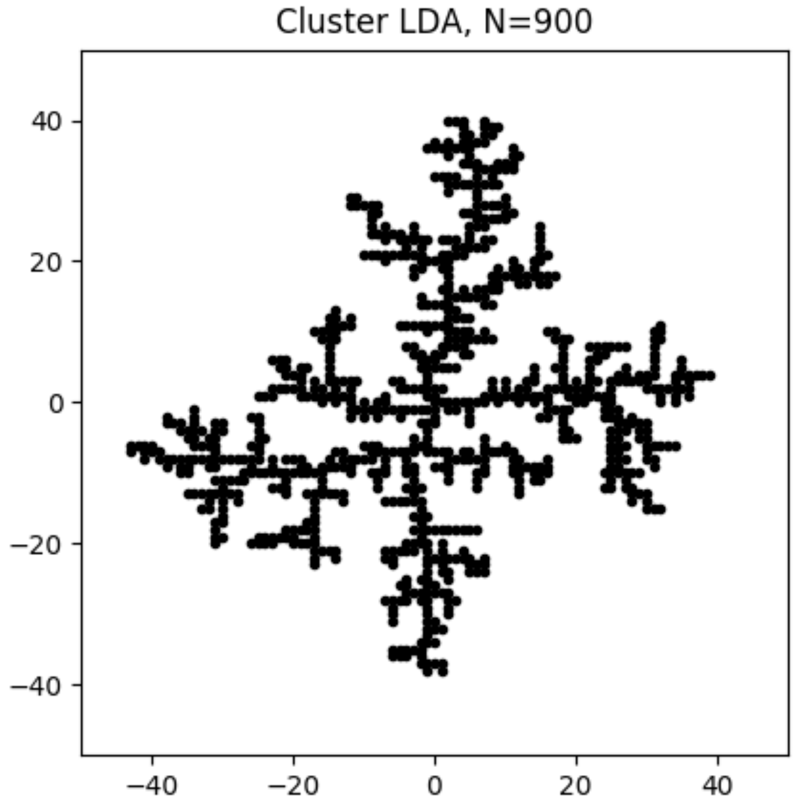
Modelo DLA



Tema 7: Métodos estocásticos

7.5 Modelos de crecimiento de agregados





7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Para un disco de radio r, con una densidad superficial σ:

$$m(r) = \sigma \cdot \pi \cdot r^2$$

Para un hilo de longitud l, con una densidad lineal λ:

$$m(l) = \lambda \cdot l$$

Podemos generalizar

$$m(r) \propto r^{d_f}$$

$$\ln(m) = d_f \cdot \ln(r) + cte.$$

7.5 Modelos de crecimiento de agregados

Dimensionalidad fractal de los agregados tipo Eden y tipo DLA