

Tarea 3 - Computación Científica y Ciencia de los Datos

Simulación de N partículas en una caja: Convección de Rayleigh-Bénard

Prof: Pablo Román

23 de Mayo 2024

1 Objetivos

Simular el movimiento de un sistema de N partículas en una caja $2d$. La caja tiene una temperatura T_1 en la pared inferior y una temperatura $T_2 < T_1$ en la pared superior. Las paredes laterales son aislantes. Se debe lograr mostrar que se reproducen fenómenos típicos que ocurren en los fluidos bajo estas condiciones.

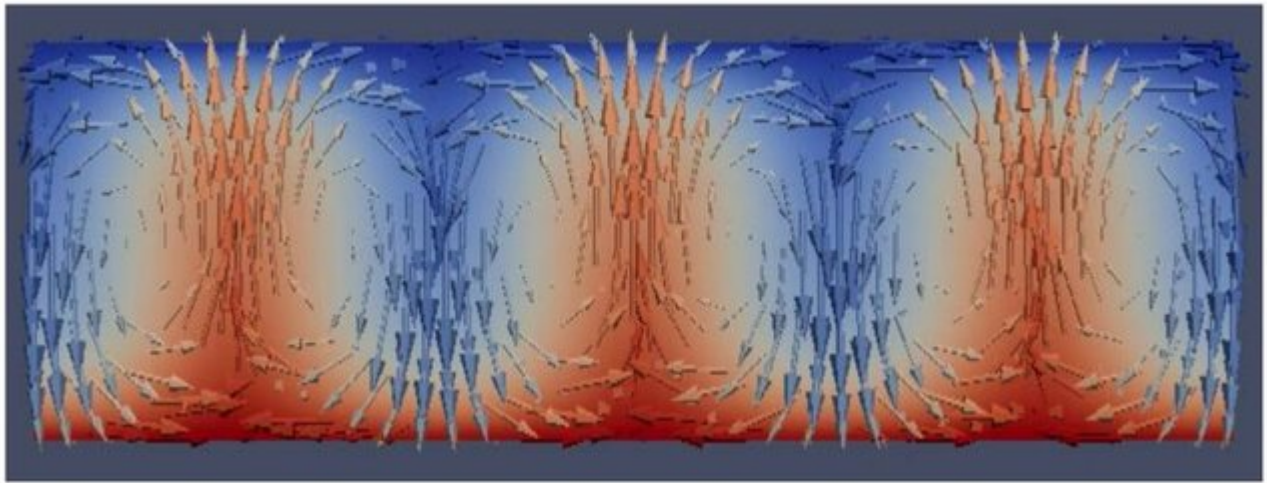


Figure 1: Movimiento por convección en un fluido (Fuente: Alexei Stoukov, ENSEEIHT)

2 Contexto

Toda la materia está compuesta de partículas que interactúan entre ellas. Lo que observamos finalmente en forma macroscópica es un promedio de movimiento y interacciones microscópicas. Este es el fundamento teórico de la teoría cinética de la materia. Se explican mediante el movimiento de las partículas las medidas macroscópicas de presión, temperatura, velocidades, y densidades entre otras. Esto permite explicar propiedades de la materia en función de constantes de las fuerzas con que interactúan las partículas. Sin embargo, la materia está compuesta por una cantidad abismal de partículas comparable con el número de Avogadro $6.02e23$.

La simulación de dicha cantidad de partículas no es posible en los computadores actuales. Tampoco es posible teóricamente obtener la descripción analítica del movimiento del sistema. Teóricamente se disponen de modelos de evolución de los promedios macroscópicos. Recientemente se ha observado que la simulación de pocas partículas, en comparación al número de Avogadro, produce resultados similares a los observados en un laboratorio (Fig. 2 https://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell%E2%80%93Boltzmann_distribution). Para esta tarea se requiere simular una cantidad razonable de partículas para computar pero suficientemente grande como para recuperar un similar comportamiento macroscópico.

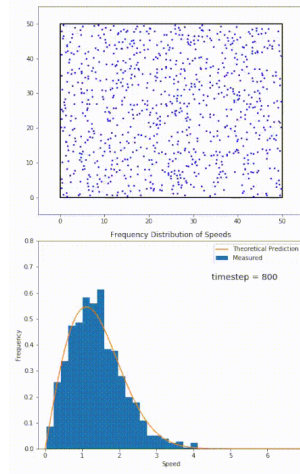


Figure 2: Simulación de un gas con 900 partículas con interacción de choques elásticos. Fuente: Wikipedia Commons

3 La ley de gases por simulación

El descubrimiento de la ley de gases ideales (Ec. 1) permitió el surgimiento de la primera revolución industrial. Se diseñaron maquinas a vapor mas eficientes y posteriormente a petroleo. Se requirieron 200 años y cientos de científicos (Boyle, Charles, Avogadro, Gay-Lussac, Clapeyron) para lograr un entendimiento de dicha ecuación. En la actualidad se estudia para el caso de gases no ideales y fuera del equilibrio. El equilibrio se alcanza cuando se observa que valores macroscópicos convergen a un valor fijo.

$$PV = NkT \quad (1)$$

La ecuación de gases ideales 1 describe el equilibrio según cuatro cantidades:

1. P : La presión de un gas o fuerza realizada por unidad de área. Desde el punto de vista de las partículas del gas se trata del promedio en un periodo de tiempo $\Delta t = h$ de cada fuerza ejercida al chocar una partícula con la pared. Dicha fuerza por partícula que choca es $F = \frac{2v_x}{h}$ en cada paso de intervalo de tiempo h de la simulación si es que choca en una pared perpendicular al eje x . Para el caso de dos dimensiones la presión se calcula como la suma cada fuerza producida por choque en dicho intervalo de tiempo y se divide por el largo de toda la pared.

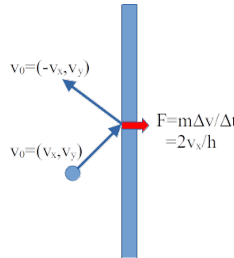


Figure 3: Choque de partícula con pared

2. V : Volumen donde se encuentra retenido el sistema.
3. N : Cantidad de partículas retenidas en dicho volumen.
4. T : Es la temperatura del sistema y proporcional a la energía cinética promedio por partícula. La constante de proporcionalidad es k . Desde el punto de vista de la simulación. Se calcula la energía cinética total ($\sum_k \frac{1}{2}mv_k^2$) y se divide por el numero total de partículas N .

La simulación de este sistema se realiza hasta que la presión promedio durante un periodo de tiempo sea aproximadamente constante.

4 La distribución de rapidez de Maxwell-Boltzmann

En un gas ideal las velocidades se distribuyen según la distribución de Maxwell-Boltzmann. Dicha distribución de probabilidad en $2d$ se muestra en https://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell%E2%80%93Boltzmann_distribution.

$$p(v \in [v, v + dv]) = \frac{mv}{kT} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (2)$$

La densidad de probabilidad de la rapidez por partícula se tipifica como una densidad χ con parámetro igual a 2 https://en.wikipedia.org/wiki/Chi_distribution.

Esta distribución se obtiene al realizar la simulación y obtener el histograma de la distribución de rapidez en el sistema (Fig. 2).

5 Convección de Rayleigh-Bernard

Este corresponde a un fenómeno fuera del equilibrio. Se trata de un fluido que esta sometido a gravedad, constreñido a una caja, y dos paredes opuestas (arriba mas frío y abajo mas caliente) tienen temperaturas diferentes (T_1 y T_2 Fig. 1). Dado la diferencia de temperatura el fluido mas frío cae por gravedad y el mas caliente sube. EL fenómeno ocurre a partir de cierta diferencia de temperatura, en el caso que la diferencia sea muy grande el fluido se vuelve turbulento y se destruye la estructura de convección.

La simulación se realiza considerando choques elásticos (pared aislante) en la paredes verticales y choques aleatorios en las paredes donde la rapidez se distribuye según la distribución de Maxwell-Boltzman con temperatura T y el ángulo de rebote es uniformemente aleatorio.

6 Fuerzas de interacción de Lennard-Jones

Dichas fuerzas se proponen para estudiar la interacción entre pares de partículas para distintos fluidos y materiales. Corresponde a una fuerza que en laboratorio ajusta con suficiente realismo una variedad muy general de casos https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential. La fuerza entre dos partículas depende solo de la distancia entre ellas y viene dado por la siguiente ecuación:

$$F_{ij} = \frac{48\epsilon}{r_{ij}^2} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] R_{ij} \quad (3)$$
$$r_{ij} = |R_{ij}|, \quad R_{ij} = R_i - R_j$$

Donde $|\cdot|$ es la norma del vector (raíz de suma de coordenadas al cuadrado) y R_i es la posición de la partícula i . Se identifica σ como el ancho en el cual dicha interacción opera y ϵ la intensidad de dicha fuerza por unidad de distancia. Si $r_{ij} > 2.5\sigma$ la interacción es despreciable, si $2^{\frac{1}{6}}\sigma \leq r_{ij} \leq 2.5\sigma$ la interacción es atractiva, y si $r_{ij} \leq 2^{\frac{1}{6}}\sigma$ es repulsiva. Esto ayuda a simplificar los cálculos y a considerar solo las partículas en un radio de 2.5σ para interactuar. Para las simulaciones se debe obtener un valor de σ razonable y esto va a depender del ancho a de la caja y del número de partículas N . Consideremos que las partículas están equiespaciadas entonces en un reglón del ancho a de la caja se tendrán del orden de \sqrt{N} partículas por lo que $2^{\frac{1}{6}}\sigma < \frac{a}{\sqrt{N}}$ para tener movilidad. Si que queremos que en promedio las partículas se muevan sin chocar (largo del camino libre medio) un ancho de $m\sigma$ entonces $\sigma = \frac{a}{m\sqrt{N}2^{\frac{1}{6}}}$. Una consideración física indica que si el camino libre medio ($\sim m\sigma$) es mas pequeño es mas posible que el sistema salga del equilibrio, si es muy pequeño entonces llega a ser turbulento.

7 Datos y cálculos necesarios

Para poder simular este sistema debe escribir un programa eficiente y vectorizado que calcule la evolución en el tiempo mediante el método de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso h de tiempo. Debe implementar el caso de paredes con choques elásticos y con choques que retornan velocidades con distribución termal. La evolución de las partículas se debe hacer con la interacción de la Fuerza de Lennard-Jones que se recorta a una distancia de 2.5σ entre partículas vecinas. Debe encontrar los parámetros que logren mostrar los fenómenos predichos. Puede considerar siempre $m = 1; \epsilon = 1; k = 1$, pero falta encontrar $\sigma, h, T_1, T_2, N, a$ y distribuciones iniciales de velocidad. El parámetro N siempre debe ser lo mayor posible de acuerdo a la memoria del computador y cuanto se disponga de tiempo de cómputo. Programe en Numpy y utilice cupy solo cuando se encuentre realmente seguro-seguro que ya esta todo correctamente programado.

8 Experimentos a realizar

Debe concebir un conjunto de datos por ud mismo que sea demostrativo para la implementación que debe realizar. No se permite el uso de loop de Python salvo que lo justifique.

1. (1 pto) Documente en forma clara y prolija en jupyter notebook la resolución de sus tarea y experimentos realizados. Describa en detalle su enfoque utilizado e interprete sus resultados. Limite su documentación, aproximadamente a 8 hojas carta sin gráficos. Ejemplifique mediante gráficos. Un gráfico bien desarrollado vale más que mil palabras (o nulo si no es autoexplicativo).
2. (2.5 pts) Realice el siguiente experimento. Se tiene una caja de tamaño $a \times a$ (ancho,alto), los choques con las paredes son elásticos, N partículas distribuidas inicialmente al azar con fuerzas de Lennard-Jones con ancho σ y velocidades iniciales al azar. Simule la evolución del sistema con Runge-Kutta y encuentre el tiempo en que se llega al equilibrio, es decir cuando el histograma de la distribución de rapidez permanece aproximadamente estable. Estime la temperatura de equilibrio del sistema con dicho histograma utilizando la distribución de Maxwell-Boltzman. En dicho equilibrio calcule la presión promediando esta en un intervalo de tiempo razonable. Con la temperatura T , el volumen ($V = a^2$), la cantidad de partículas N y la presión P concluya la relación entre estas 3 variables. Puede utilizar valores de a en el entorno de 1 y para N que pueda computarse en un tiempo razonable y suficientemente grande para observar la fenomenología. Para los cálculos anteriores desarrolle funciones.
3. (2.5 pts) Realice el siguiente experimento. Se tiene una caja de tamaño $2a \times a$ (ancho,alto), N partículas con fuerzas de Lennard-Jones. La pared superior tiene temperatura T_2 y la pared inferior tiene temperatura $T_1 > T_2$, en estas paredes las partículas al chocar se devuelven con rapidez aleatoria dada por la distribución de Maxwell-Boltzmann y dirección al azar un uniforme. En las paredes laterales son choques elásticos. Inicialmente el sistema parte en equilibrio considerando todas las paredes con choques elásticos. Una vez llegado al equilibrio se inicia la simulación con las paredes (superior e inferior) con temperatura. El sistema queda fuera del equilibrio y se inician movimientos de partículas que pueden lograr flujos de convección. La pared de la parte superior se puede asignar a una temperatura menor o igual al equilibrio inicial y la pared inferior (Mayor al equilibrio inicial) la debe variar para encontrar una configuración que muestre rollos convectivos después de un cierto tiempo de simulación. Puede probar tiempos múltiplos enteros de lo que demoró en llegar al equilibrio de partida.
4. (1 pts de bonus, puede terminar con un 8,0) Genere un mapa de calor de temperatura y flujo de velocidades en el momento que converge a rollos de convección. Para ello puede considerar la definición de temperatura que es un promedio de la energía cinética en cierta área. Lo mismo para las velocidades en promedio en las mismas áreas.

9 Entrega

Debe subir su Jupyter Notebook en classroom con plazo al día Lunes 17 de Junio antes de las 23:55 hrs.