

Proyecto Final

Juan B. Benavides y Juan P. Vanegas

17 de diciembre de 2019

1. Sistema Físico

La entropía es uno de los conceptos físicos más difíciles de comprender. Para llegar a él se puede ver desde el punto de vista termodinámico, o desde un punto de vista más cercano a la teoría de la información. A partir de este segundo camino podemos definir la entropía como la cantidad de información que nos hace falta, en promedio, para saber la posición y velocidad de todas las moléculas (J.D. Muñoz).

En este informe se estudiara la entropía de un sistema difusivo y se estudiara como se relaciona con el estado de equilibrio del sistema. Se comienza con una taza de café a la que se le hecha una gota de crema en el centro. Por simplicidad se asumira que se tiene una taza bidimensional con una distribución inicial de crema como la mostrada en la figura (1). Las figuras 2, 3 y 3 muestran como evoluciona la difusión de la crema usando un algoritmo de Random Walk.

2. Algoritmos y Validación

Para modelar este fenómeno utilizamos dos paradigmas de programación diferentes: Procedimental y Orientado a Objetos, cada uno utilizando un algoritmo de propagación diferente. El algoritmo utilizado para el paradigma procedimental, descrito en la figura 5, que consta en un arreglo de moléculas, donde cada elemento tiene la posición en x y y de una molécula. Para evolucionar el sistema se elige al azar una molécula, y se modifica su posición, de manera que se mueva una unidad en alguna dirección aleatoria. Este procedimiento de elegir una molécula y moverla se toma como un paso de tiempo.

Por otro lado, para el paradigma orientado a objetos se implementó el algoritmo descrito en la figura 6, que consiste en una matriz bidimensional de enteros no negativos, o Lattice, donde se representan las moléculas como el número de cada celda. Para mover las moléculas se recorre el Lattice celda por celda, y en caso de que se encuentre al menos una molécula en una celda se mueve a alguna

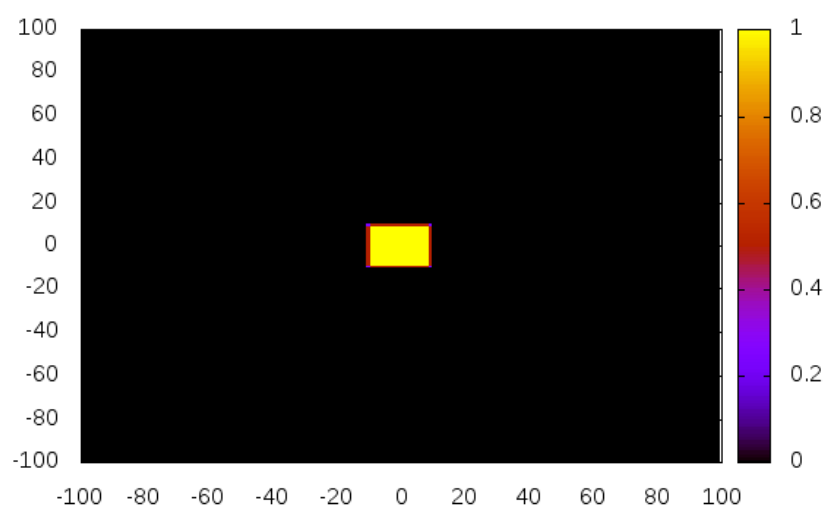


Figura 1: Configuración inicial usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema.

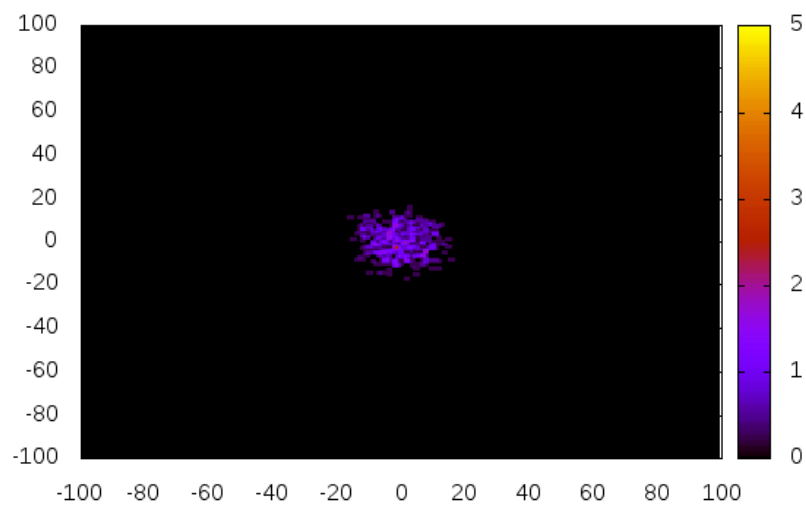


Figura 2: Difusión después de 10^4 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

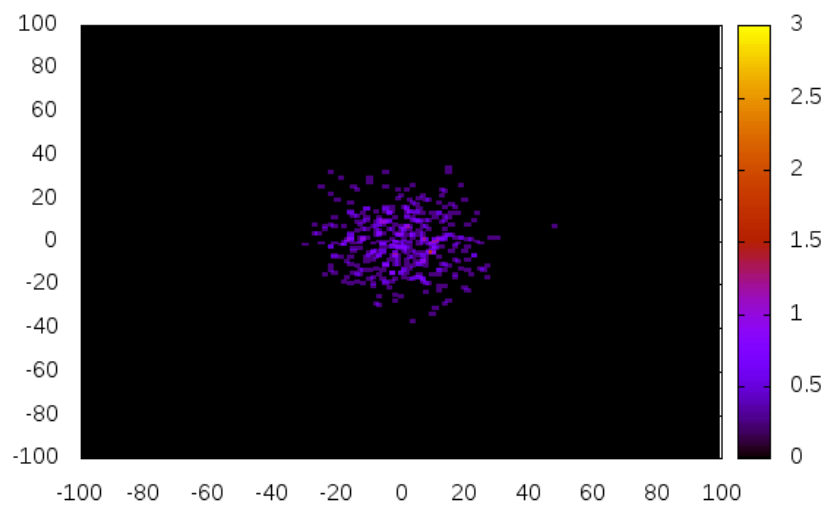


Figura 3: Difusión después de 10^5 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

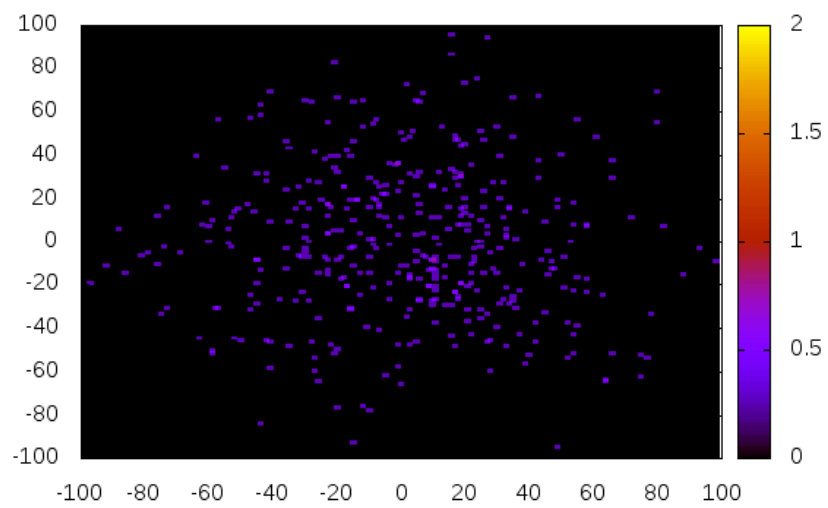


Figura 4: Difusión después de 10^6 pasos de tiempo usando algoritmo procedimental con 400 partículas de crema

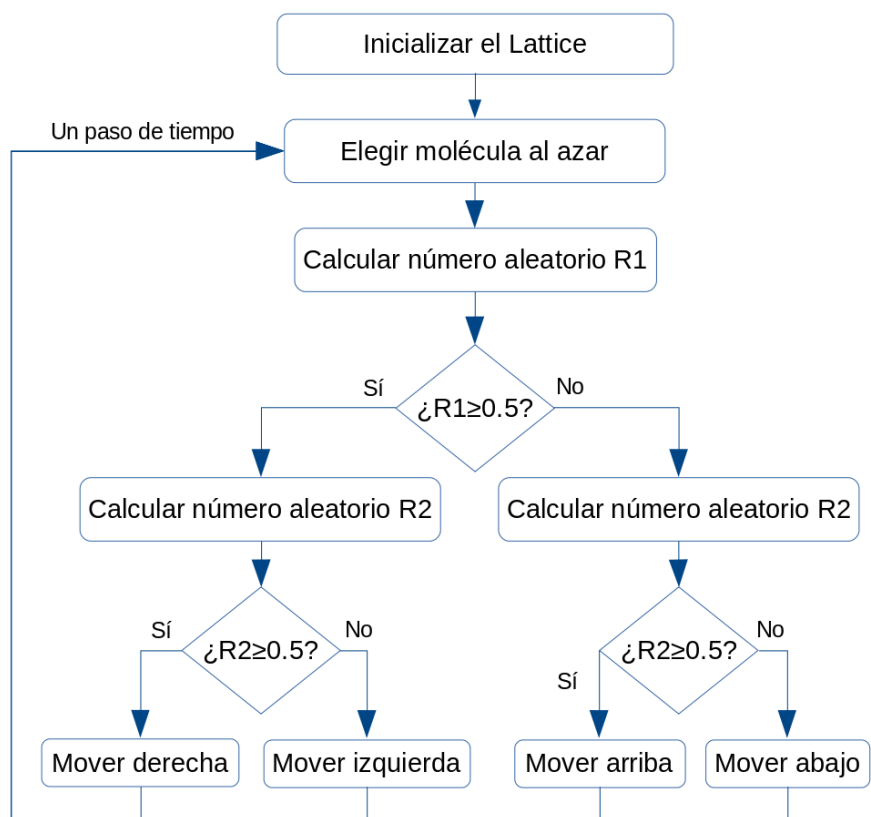


Figura 5: Algoritmo 1.

casilla inmediatamente adyacente a la celda. Utilizando este algoritmo se toma un paso de tiempo está dado por un recorrido completo al Lattice, a diferencia del criterio empleado en el paradigma procedimental.

Dos factores a considerar en este algoritmo es que, primero, en dado caso que una molécula al desplazarse se ubique en la celda donde el algoritmo continúa buscando, esta se moverá dos veces. Este caso, aunque poco probable, conlleva a una ligera pérdida de información frente al algoritmo procedimental.

En segundo lugar, dado que un paso de tiempo del paradigma orientado a objetos implica mover aproximadamente todas las moléculas, cada paso de tiempo de este algoritmo es N veces más rápido que el algoritmo procedimental, con N el número inicial de moléculas. Por lo tanto, cualquier cálculo que se realice en función del tiempo se verá directamente afectado, resultando en que el algoritmo orientado a objetos solo calcula una variable cada 400 cálculos del algoritmo procedimental. Este factor sí debe tenerse en cuenta, y solo puede ser despreciado en caso de que el tiempo computacional total que se deba utilizar para hallar resultados concluyentes sea mucho mayor a 400.

Para validar cada uno de estos métodos se calculó la entropía en función del tiempo de cómputo, donde esperamos que inicialmente halla un crecimiento muy rápido de la entropía del sistema, que para este caso corresponde a la gota de crema difundiéndose por la taza. Luego esperamos que la entropía se es-

tabilice y tenga un comportamiento asintótico alrededor de algún valor, que corresponde al momento en el que la crema se halla distribuido de manera más o menos uniforme alrededor de la taza.

Vemos que en ambos paradigmas, y por lo tanto, algoritmos, el comportamiento de la entropía en función del tiempo es el esperado, por lo que ambos métodos quedan validados para modelar este sistema. Vemos también que el tiempo de computo total empleado para el paradigma orientado a objetos es mucho mayor a 400, con lo que también podemos despreciar la información perdida por utilizar este método. A partir de este punto se transformará el tiempo del paradigma orientado a objetos multiplicando el tiempo de cómputo por un factor de 400, lo que permite comparar directamente los resultados obtenidos en ambos paradigmas.

3. Resultados y Análisis

parametro $\tau = 55433,6s$

4. Conclusiones

■

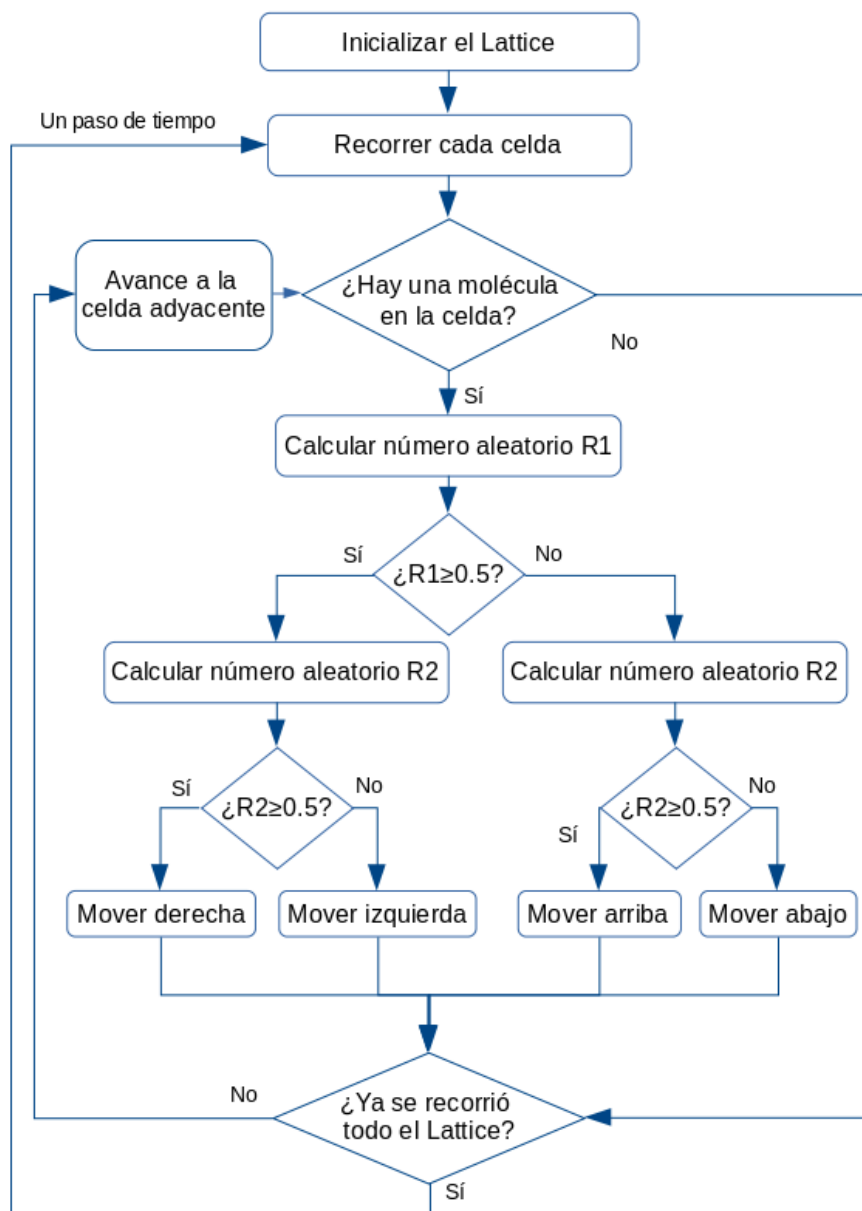


Figura 6: Algoritmo 2.

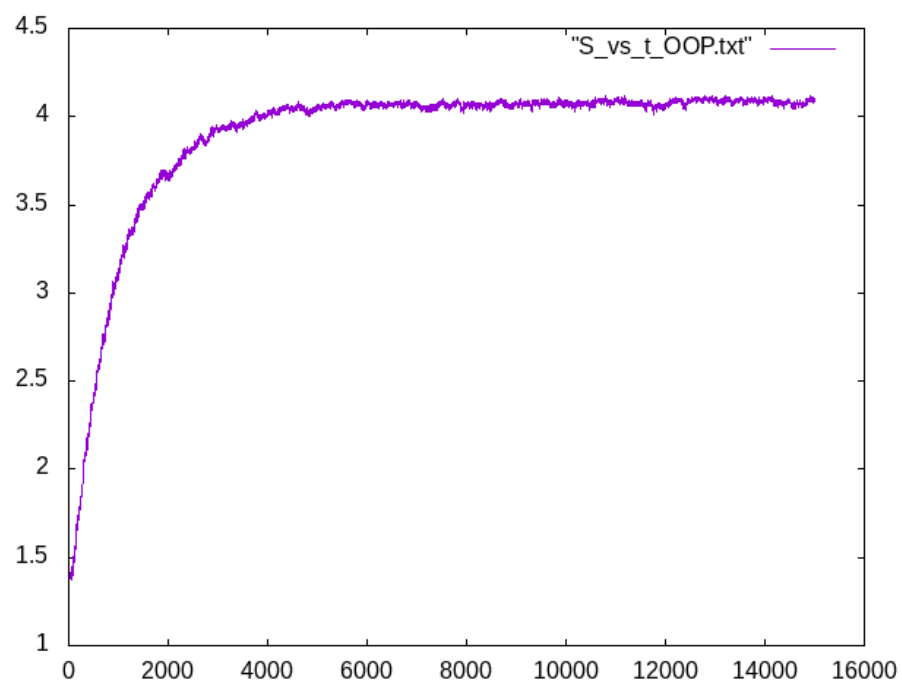


Figura 7: Entropía en función del tiempo para paradigma orientado a objetos.

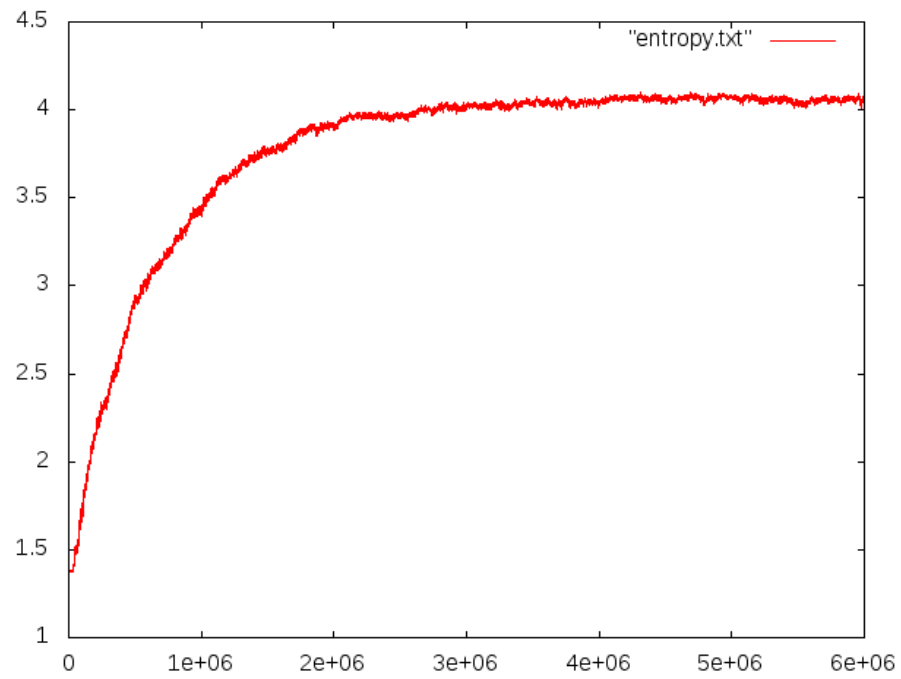


Figura 8: Entropía en función del tiempo para paradigma procedimental.

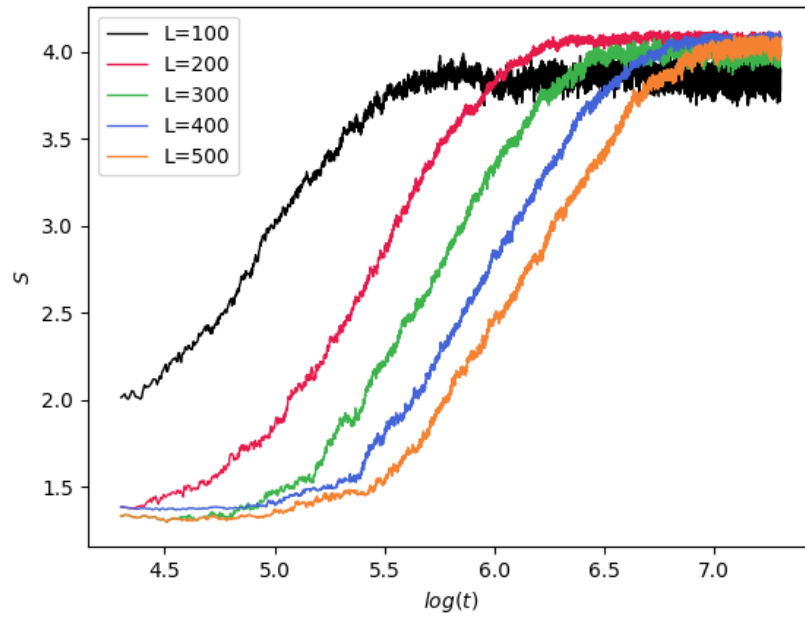


Figura 9: Comparación de la Entropía en función del tiempo para diferentes tamaños de Lattice.

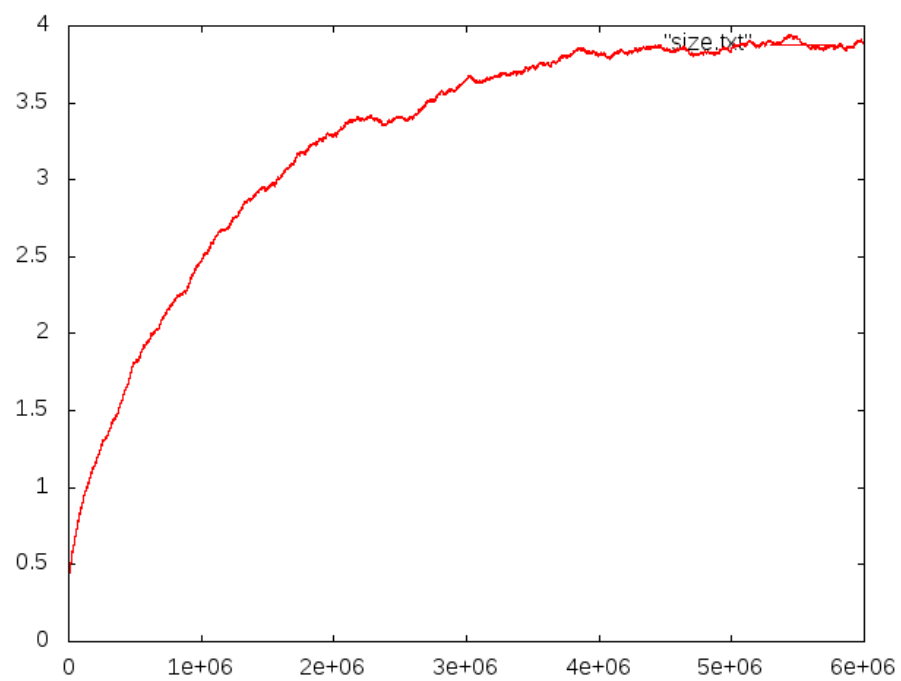


Figura 10: Tamaño de la gota de crema en función del tiempo.

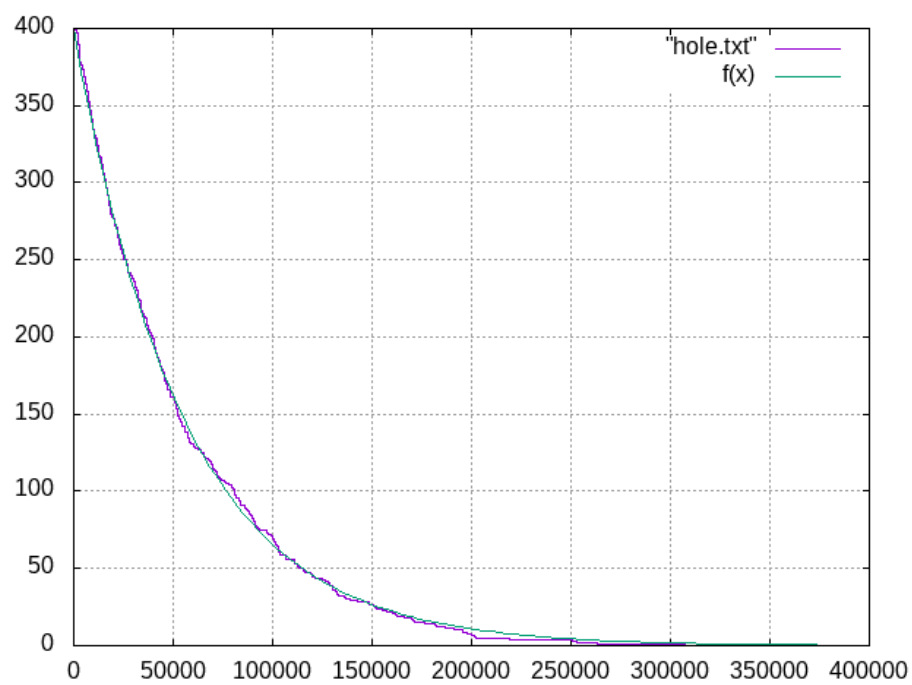


Figura 11: Propagación de las moléculas con un agujero en la pared.