

Movimiento Browniano

GRUPO 3

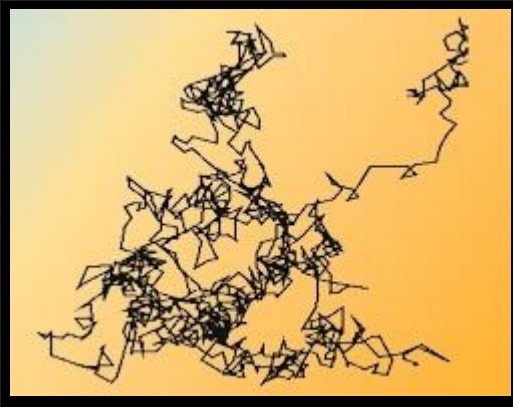
Miguel Di Luca (58460), Facundo Astiz (58333)

[1] Introducción

[1] Sistema físico

Un sistema de movimiento browniano trata sobre un recinto con partículas en movimiento que interaccionan por medio de colisiones. Este sistema simula el comportamiento de fluidos.

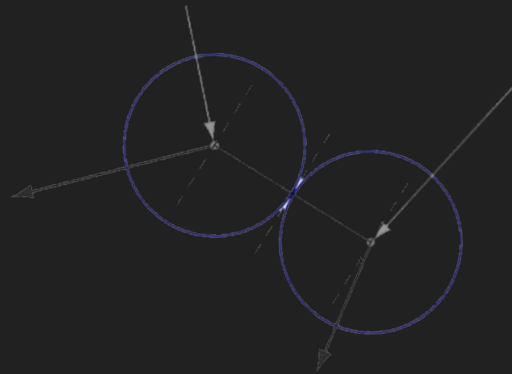
Este sistema tiene la propiedad de tener momento angular nulo y por lo tanto es idóneo para estudiar el comportamiento de random walk de las partículas.



[1] Colisiones

Las colisiones, como se dijo antes, son de tipo totalmente elástico. Es decir, no se pierde energía entre las colisiones y la cantidad de movimiento total del sistema se mantiene.

Para mayor simplicidad en el proyecto se trabaja únicamente con colisiones entre dos partículas o contra las paredes del recinto y estas colisiones se resuelven de forma instantánea.



[1] Simulación dirigida por eventos

Es una simulación dirigida por eventos. Esto es que en lugar de utilizar pasos para ir avanzando el sistema en el tiempo, se calcula analíticamente el tiempo restante para que ocurra cada colisión entre cualquier par de partículas (considerando siempre solo las partículas involucradas e ignorando todo lo demás) y se avanza el tiempo hasta la colisión más próxima. Después se recalculan las colisiones que se habían considerado para las partículas que colisionaron ya que de ahora en adelante quedan obsoletas.

[2] Implementación

[2] Colisiones

Para resolver usamos las siguientes ecuaciones para obtener las velocidades de las partículas luego de la colisión.

$$J_x = \frac{J \Delta x}{\sigma}, \quad J_y = \frac{J \Delta y}{\sigma}, \quad \text{where} \quad J = \frac{2 m_i m_j (\Delta v \cdot \Delta r)}{\sigma (m_i + m_j)}$$

$$\sigma^2 = (rx_i' - rx_j')^2 + (ry_i' - ry_j')^2 \quad \Delta v \cdot \Delta r = (\Delta vx)(\Delta x) + (\Delta vy)(\Delta y).$$

$$vx_i' = vx_i + Jx / m_i, \quad vx_j' = vx_j - Jx / m_j$$

$$vy_i' = vy_i + Jy / m_i, \quad vy_j' = vy_j - Jy / m_j$$

Donde vx y vy son las velocidades horizontales y verticales antes de la colisión y vx' y vy' luego de la colisión, m son masas, rx y ry son las posiciones.

[2] Colisiones

Para resolver las colisiones tomamos una cola de prioridades en la cual las colisiones se organizan según el tiempo.

Al iniciar se calculan todas las colisiones posibles para el tiempo 0.

Luego, cada vez que se genera un choque, para las partículas involucradas, se recalculan los choques y se incrementa la versión, de esta forma, cuando se retira una colisión de la cola, se verifica que la versión de la partícula guardada en la colisión coincida con la versión actual de la partícula, de lo contrario el choque se considera inválido y se continúa con el próximo.

[2] Método de indexado de celdas (o CIM)

Además de hacer la simulación enfocada en eventos, incorporamos el método CIM para considerar los vecinos de forma eficiente.

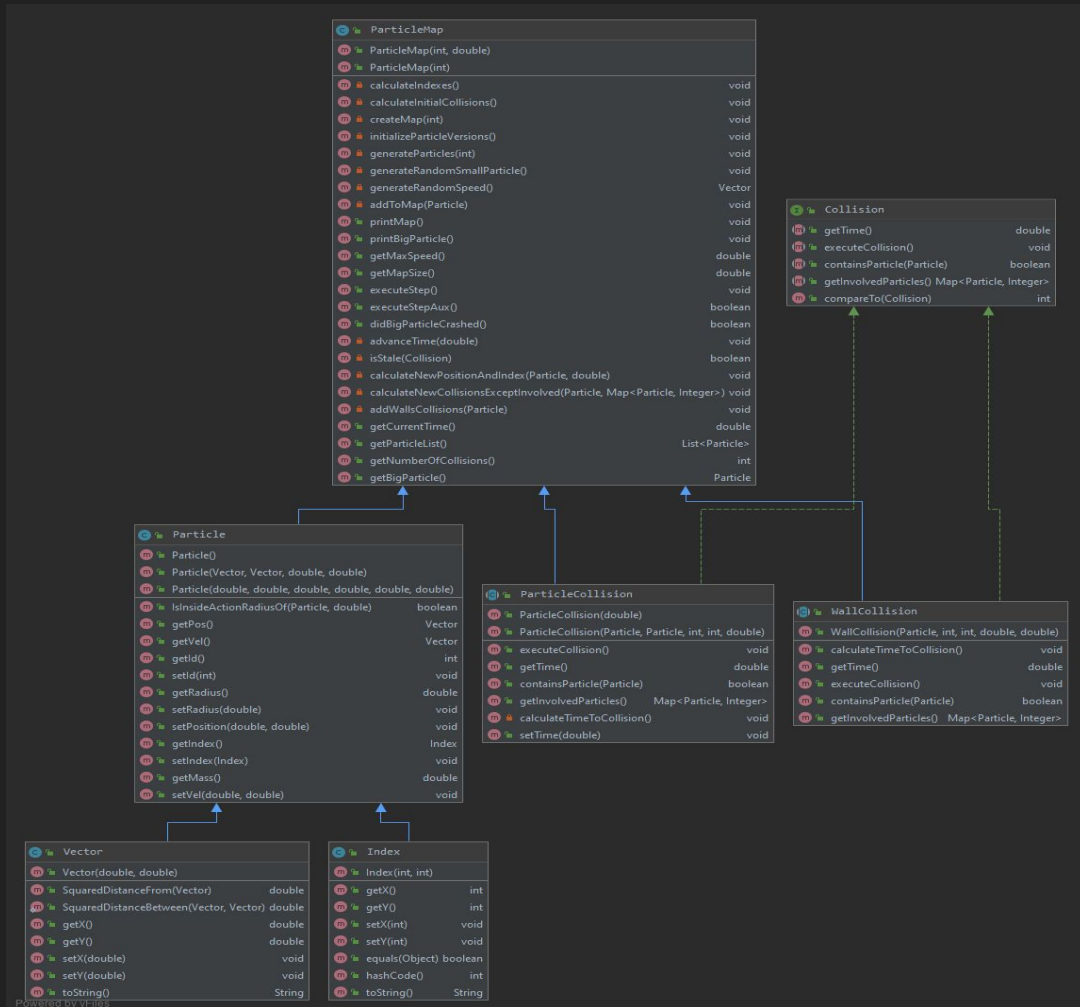
Para esto definimos el radio de búsqueda del método cim de la siguiente forma:

$$R_b = T \cdot 2 \cdot V_{\max} + 2 \cdot R_{\max}$$

donde T es una variable temporal.

Gracias a este R_b podemos saber que si no encontramos colisiones que sucedan en menos que un tiempo T , entonces podremos avanzar un paso T estando seguros que no nos perdemos una colisión.

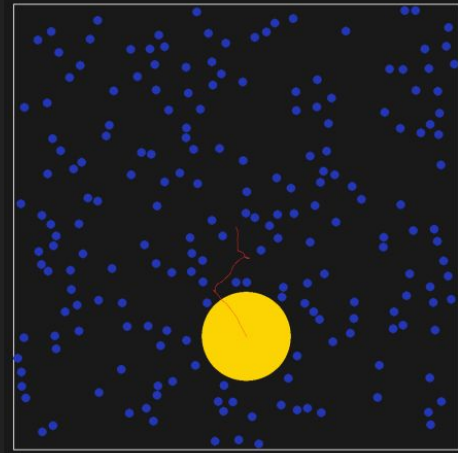
[2] Diagrama UML



[3] Simulaciones

[3] Sistema físico

Nuestro sistema en particular consiste en un recinto cargado de partículas pequeñas con velocidades iniciales al azar y una partícula de mayor tamaño sin velocidad inicial en el medio del recinto. Las partículas se mueven por el recinto y colisionan con otras de forma totalmente elástica. Además se coloca una partícula de mayor tamaño en el medio del recinto.



[3] Parámetros utilizados

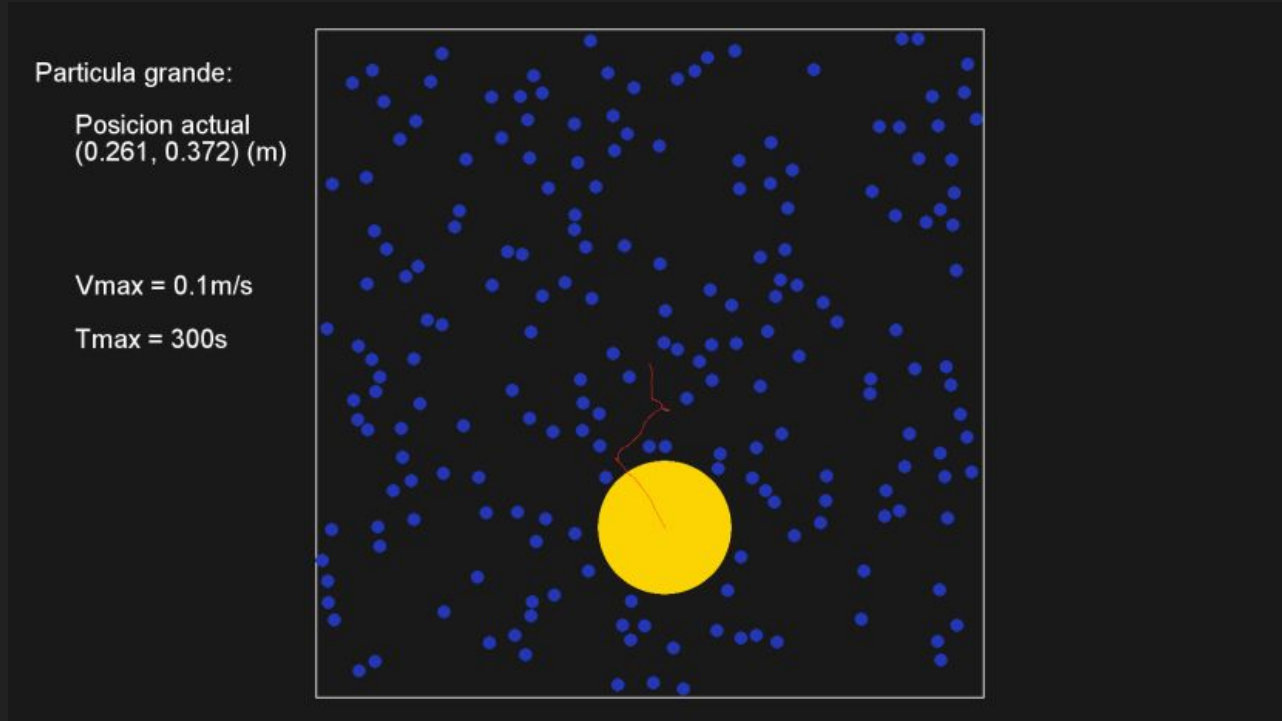
Se tomó un dominio cuadrado de lado $L = 0,5\text{m}$. Se colocan N partículas pequeñas de radio $R = 0,005\text{m}$ y masa $m = 0,1\text{g}$. Y una partícula grande de radio $R = 0,05\text{m}$ y masa $m = 100\text{g}$.

Las velocidades iniciales para las partículas pequeñas son variables aleatorias uniformes entre 0 y $0,1\text{m/s}$ y sus posiciones son también uniformes a lo largo de todo el dominio (siempre y cuando no se superpongan). Para la partícula grande su velocidad inicial será 0 y se encontrará en el centro del recinto.

Para algunos gráficos las velocidades iniciales se modifican.

[4] Resultados

[4] Animación



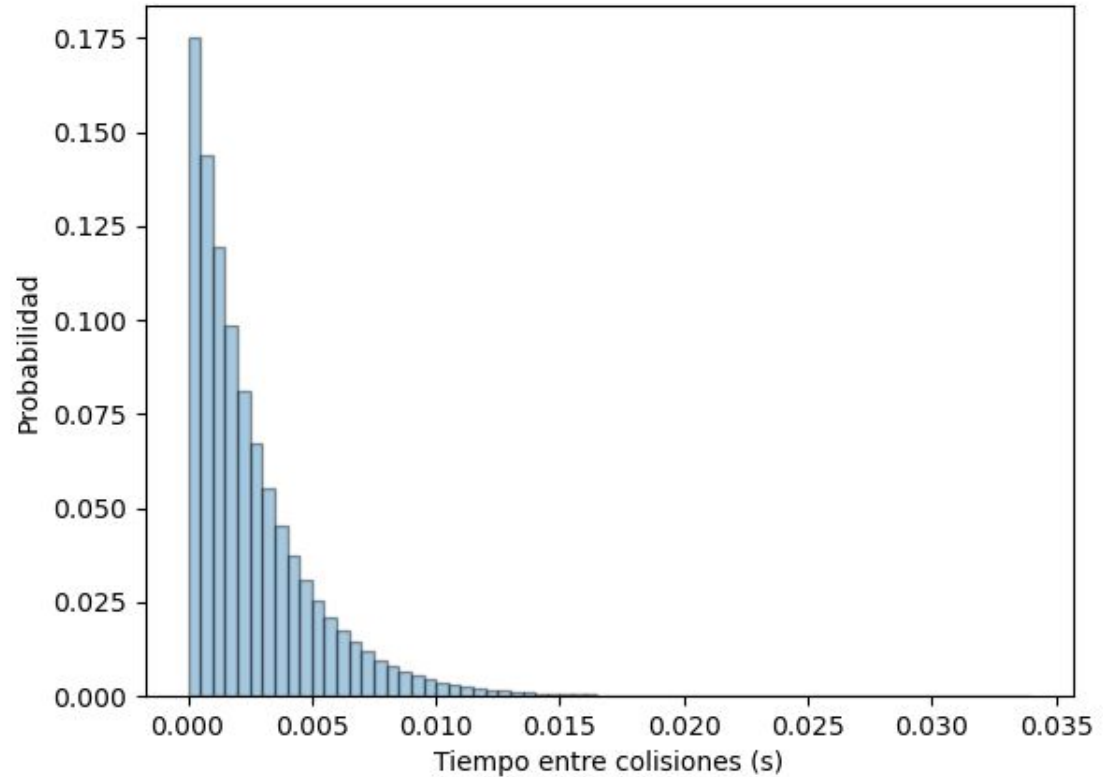
<https://www.youtube.com/watch?v=cYVbYV5lpyw&feature=youtu.be>

[4] Colisiones

A partir de la simulación se obtuvo un gráfico de la función de probabilidad del tiempo entre colisiones.

Se ejecutó 20 veces la simulación para estimar mejor la función.

$N = 300$
 $T = 100s$

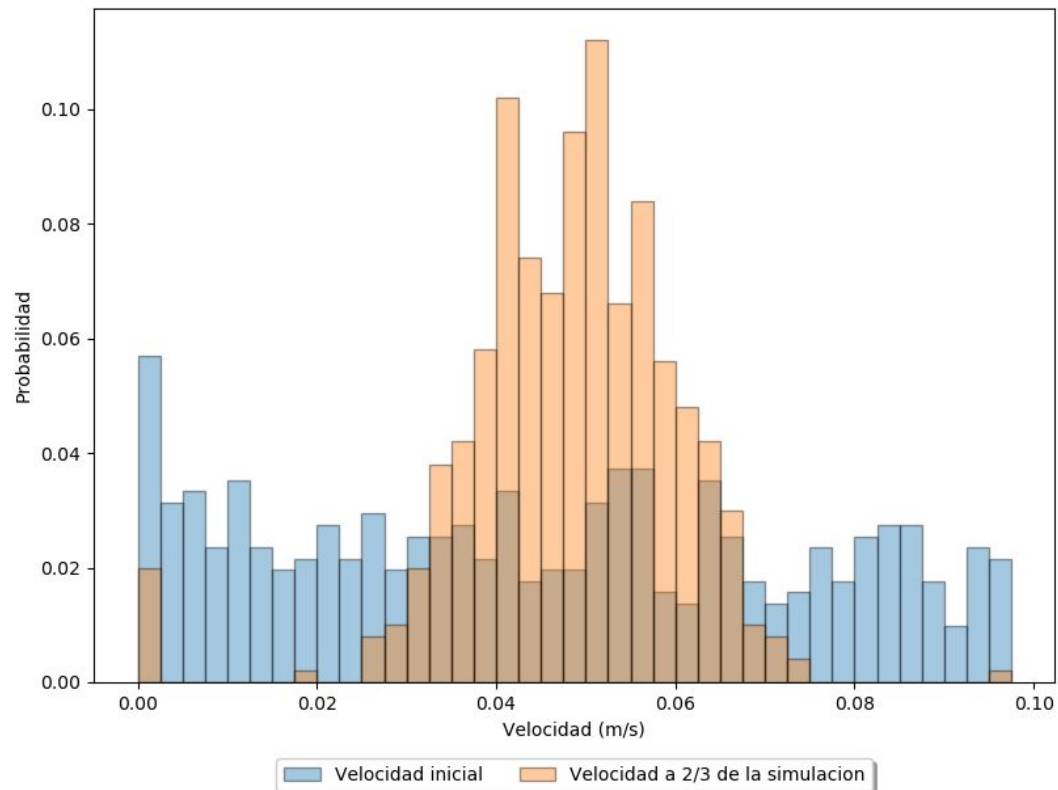


[4] Módulo de velocidades

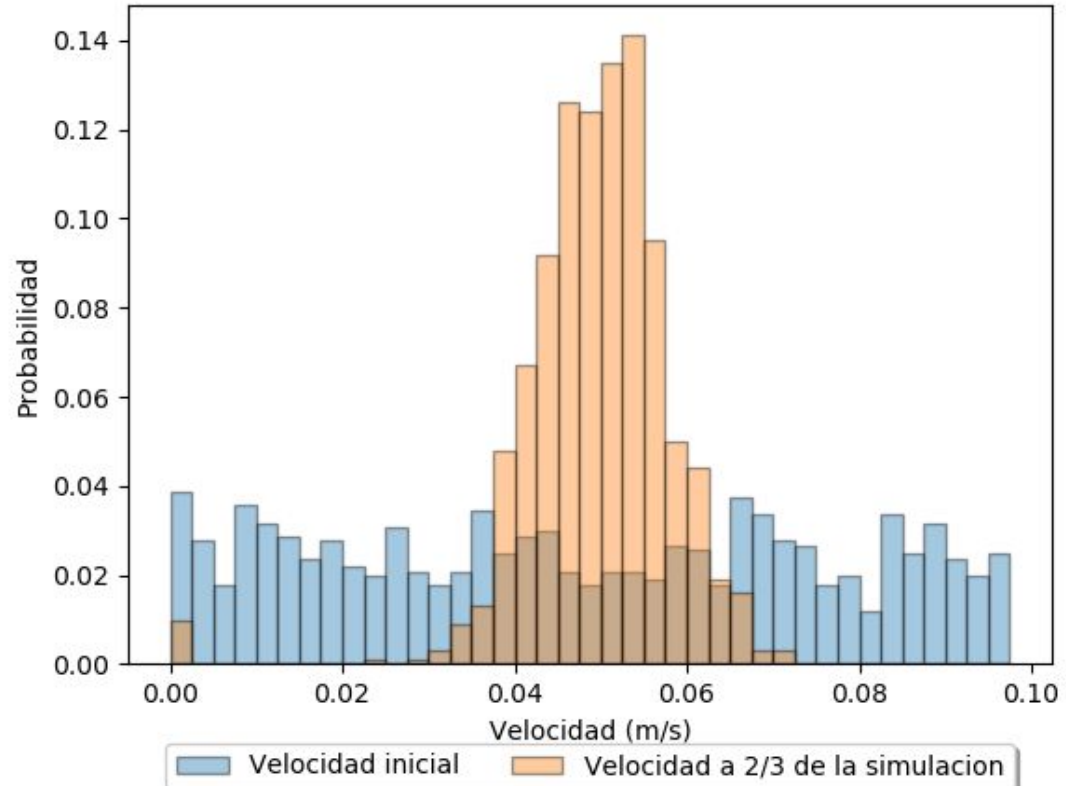
Se graficó la distribución de probabilidades del módulo de las velocidades en el último tercio de la simulación contra los del momento inicial.

Para mejorar los datos obtenidos ejecutamos la simulación 20 veces.

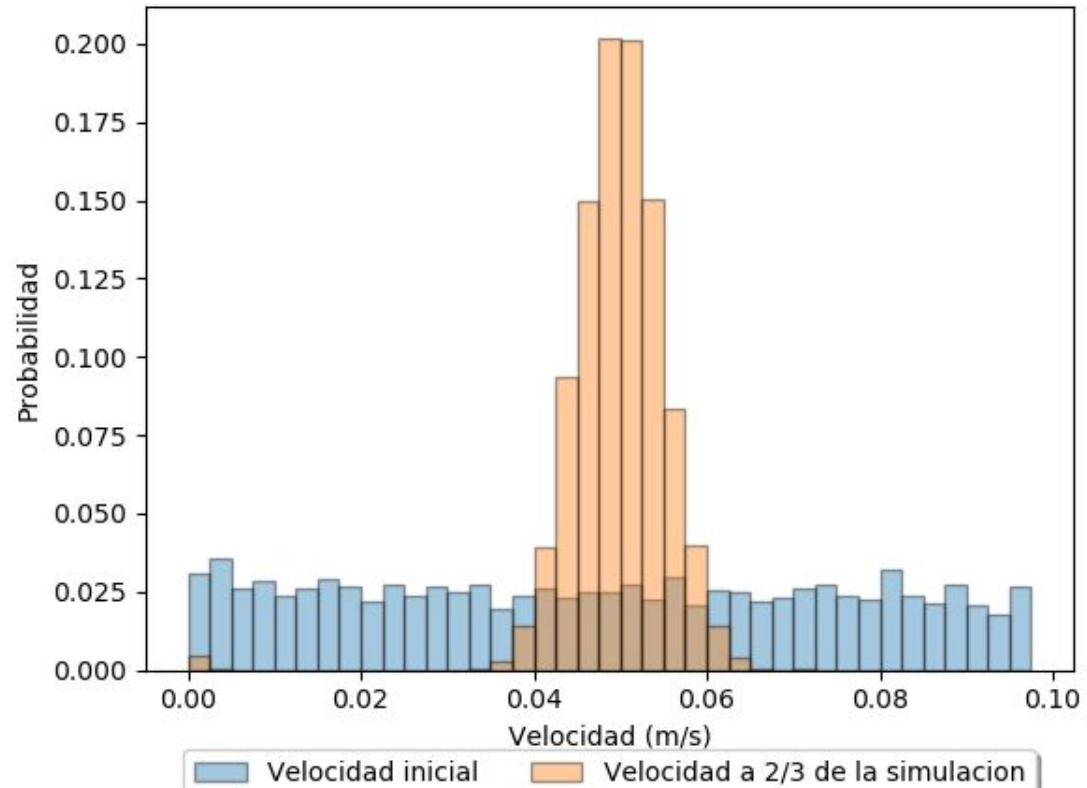
$N = 50$
 $T = 180s$



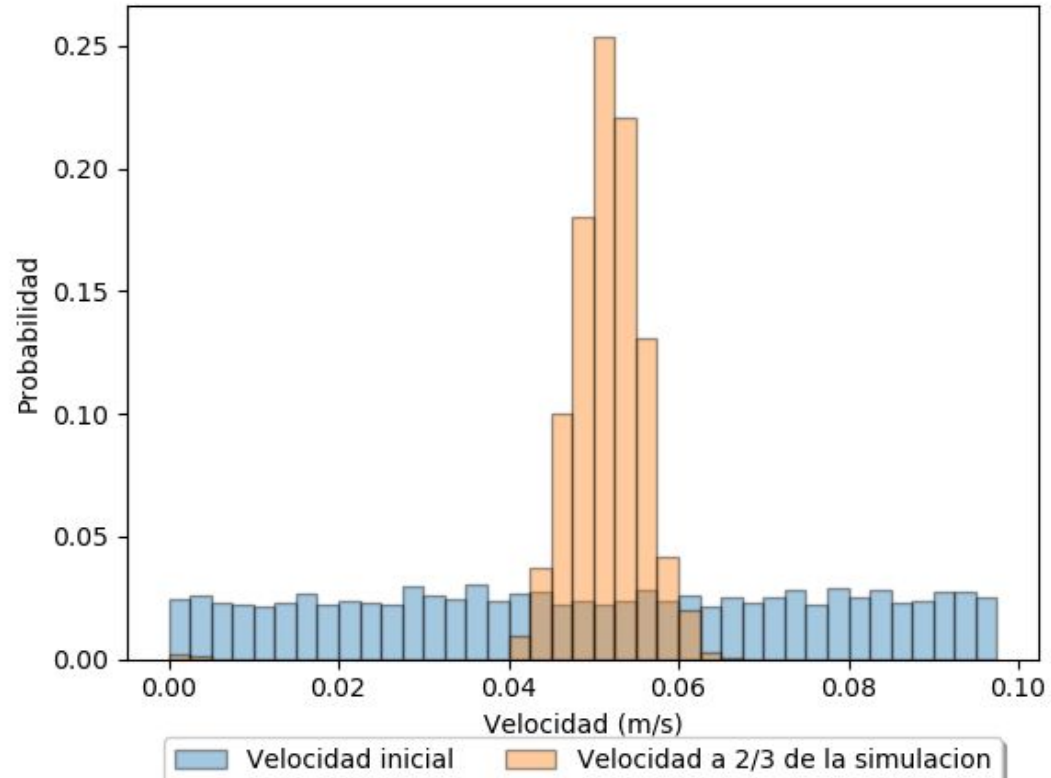
$N = 100$
 $T = 180s$



$N = 200$
 $T = 180s$



$N = 300$
 $T = 180s$

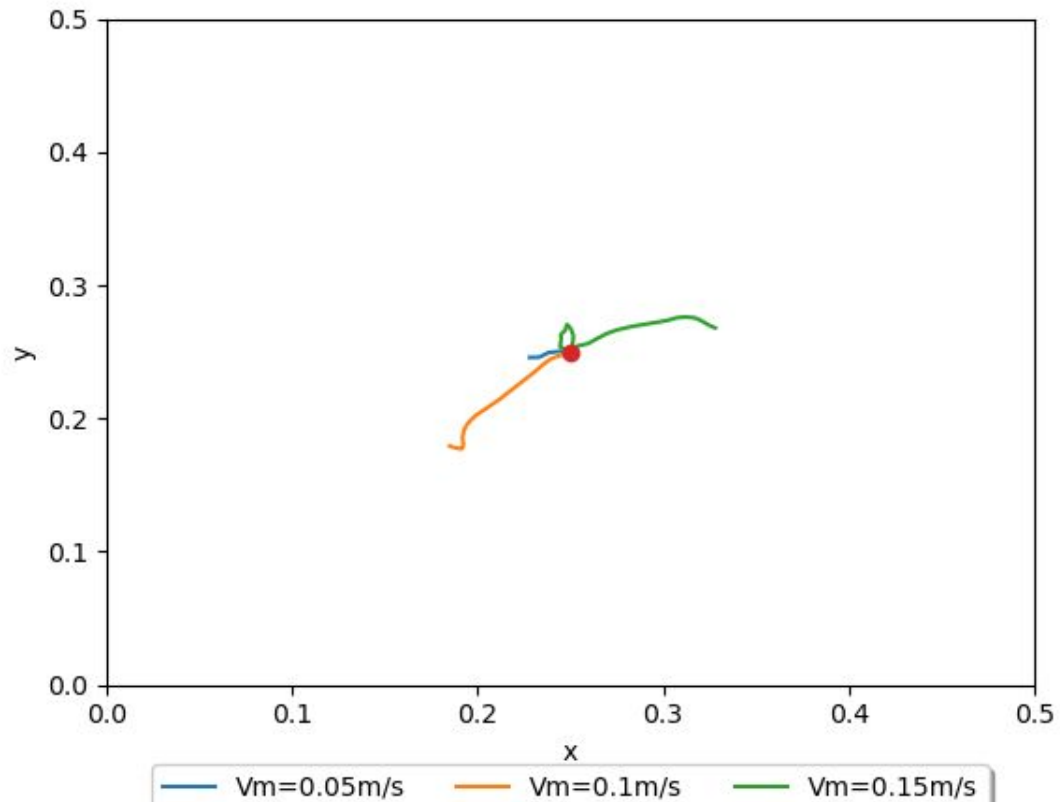


[4] Recorrido al variar la temperatura

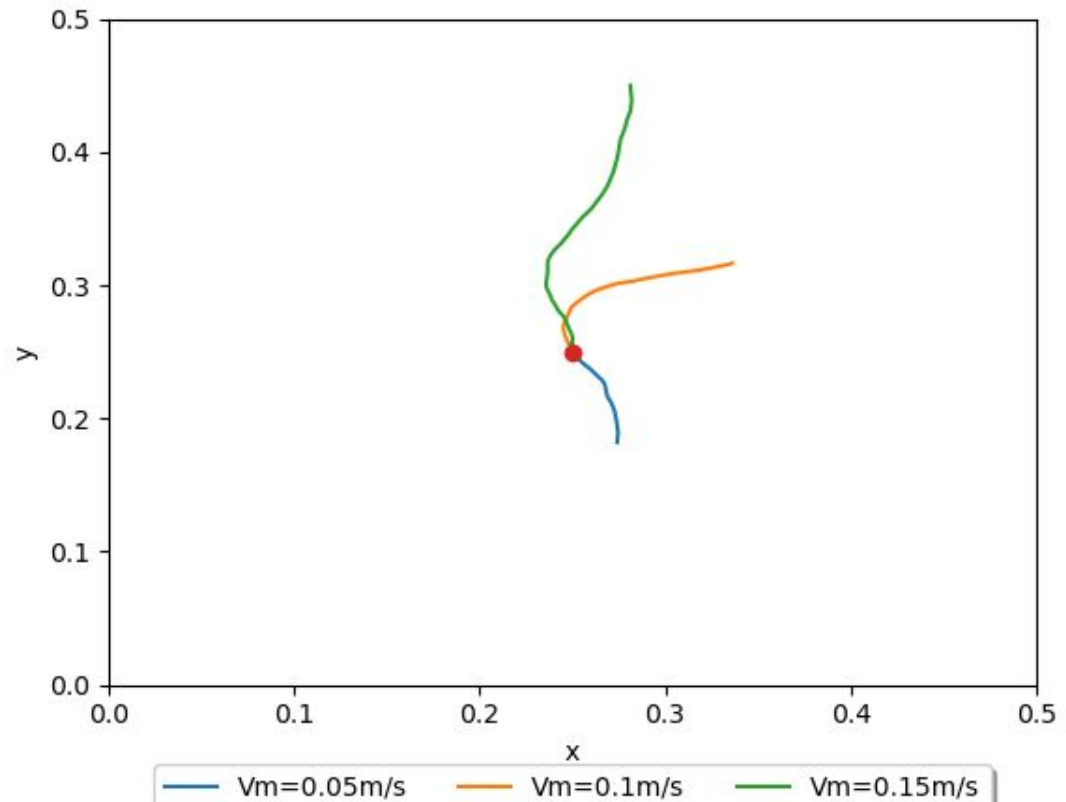
La temperatura es una medida de la energía cinética promedio de las partículas de un sistema, al crecer la velocidad de las partículas, crece la energía cinética, y por lo tanto, la temperatura.

A continuación graficamos el movimiento de la partícula grande variando el máximo para la velocidad inicial de las partículas pequeñas.

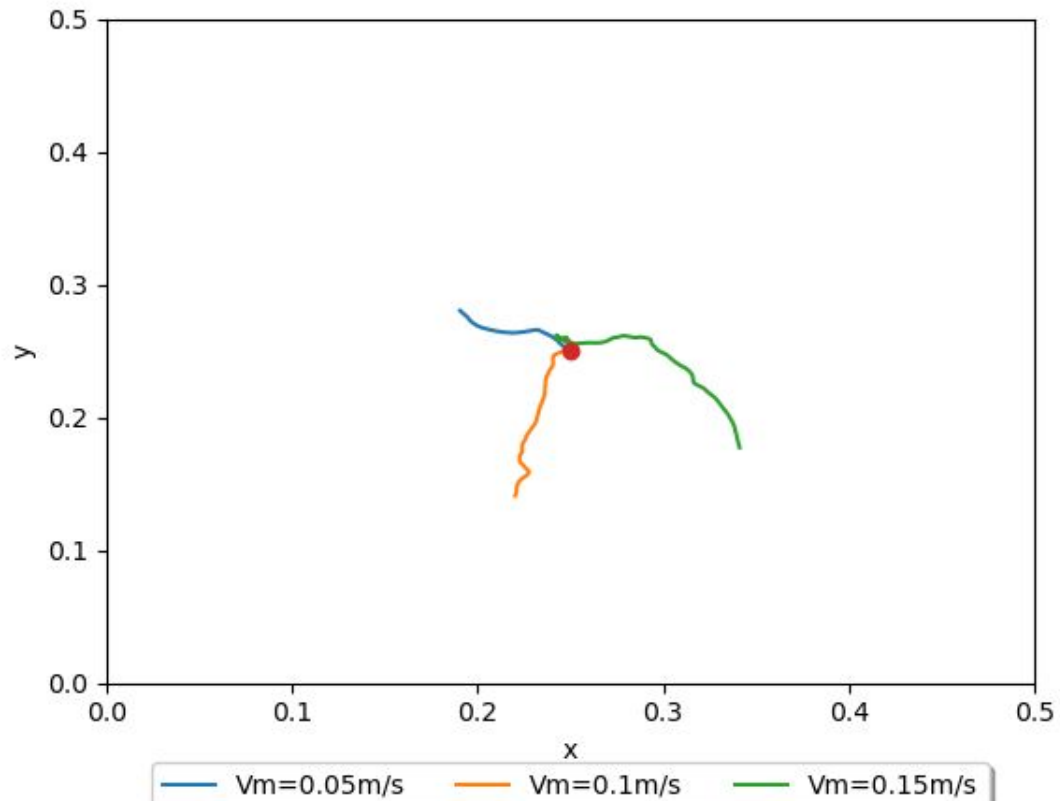
$N = 50$
 $T = 280\text{s}$



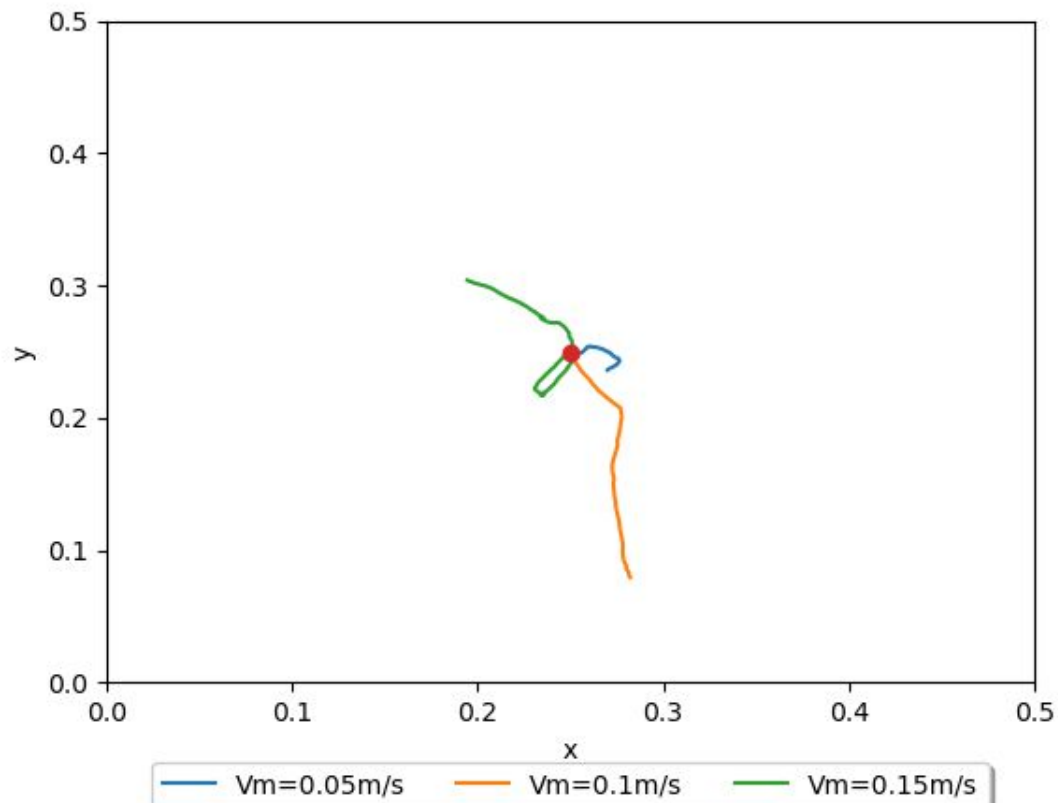
$N = 100$
 $T = 280\text{s}$



$N = 200$
 $T = 120s$



$N = 300$
 $T = 120s$



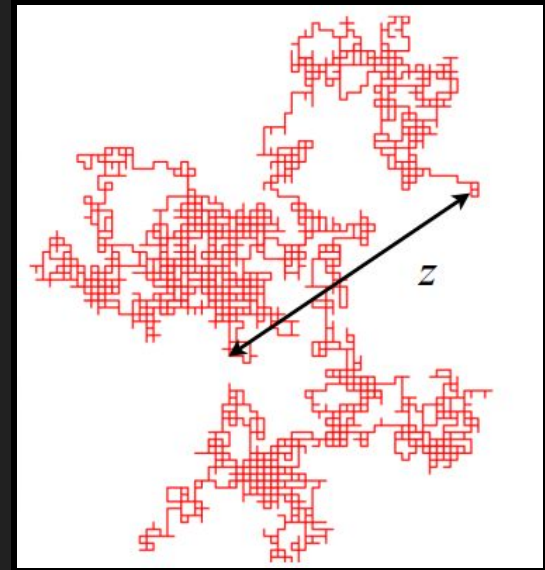
[4] Desplazamiento cuadrático medio

Obteniendo resultados de los movimientos de la partícula grande y una pequeña elegida al azar podemos graficar el desplazamiento cuadrático medio para luego encontrar el coeficiente de difusión.

$$\langle Z^2 \rangle = 2.D.t$$

Z es el módulo de la distancia
D es el coeficiente de difusión
t es el tiempo transcurrido

El coeficiente de difusión representa la facilidad de un soluto para moverse a través de un líquido. Cuanto mayor, es también la facilidad.

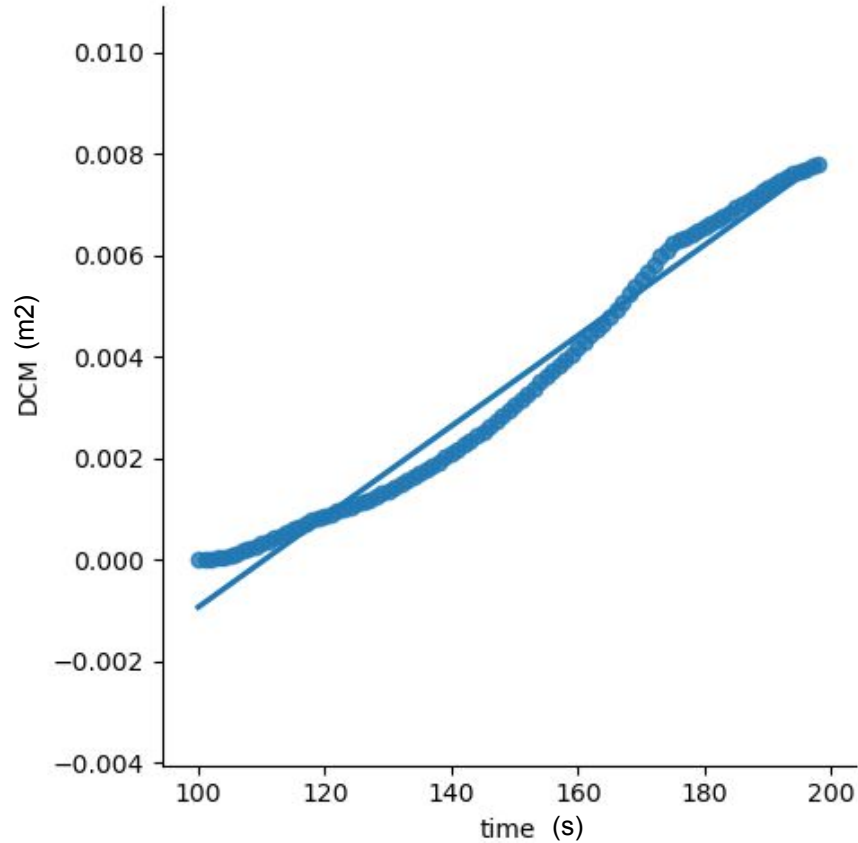


PARTÍCULA GRANDE

$$m = 8,8926e-5$$

$$2D = 8,8926 \times 10^{-5}$$

$$D = 4,4463 \times 10^{-5}$$



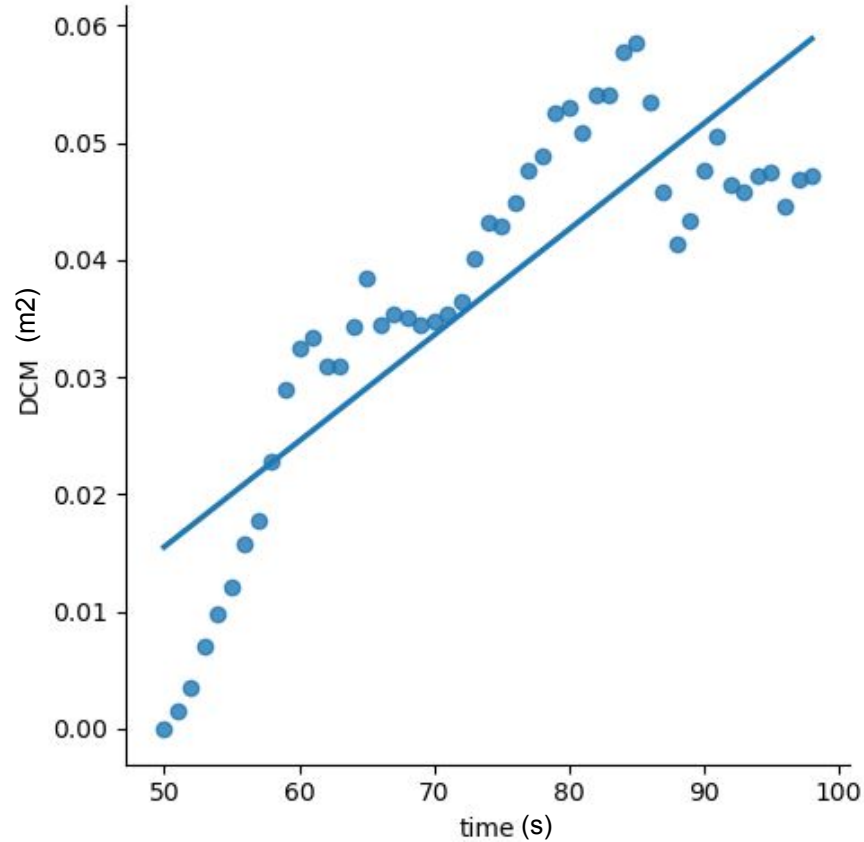
PARTÍCULA CHICA

$$m = 9,0943 \times 10^{-4}$$

$$2D = 9,0943 \times 10^{-4}$$

$$D = 4,5472 \times 10^{-4}$$

No se utiliza un t mayor porque colisiona contra la pared



[4] Método de indexado de celdas

Comparamos los tiempos de ejecución del sistema utilizando en algunos casos el método y en otros no para comparar la eficiencia.

Se utilizó como velocidad máxima inicial menor a 1m/s y se calculó la media de 5 ejecuciones.

	Con indexado	Sin indexado
N = 200, t = 200	10.42s	50.28s
N = 300, t = 100	17.552s	30.01s
N = 400, t = 100	47.31s	87.32s

[5] Conclusión

[5] Conclusión

En cuanto a las colisiones, la función de distribución parecería ser exponencial. Vemos como para intervalos mayores la probabilidad disminuye.

Las velocidades a lo largo del tiempo se ve como tienden a tomar valores más cercanos a la velocidad promedio.

Los recorridos de las partículas se puede ver como son más largos cuanto mayor sea la temperatura.

Por último, para el desplazamiento cuadrático medio, vemos que para la partícula grande se obtiene una curva más ordenada mientras que para la pequeña mucho más errática. Y en cuanto al coeficiente de difusión vemos que el de la partícula más chica tiene un valor mayor, que es coherente porque se mueve con mayor facilidad.