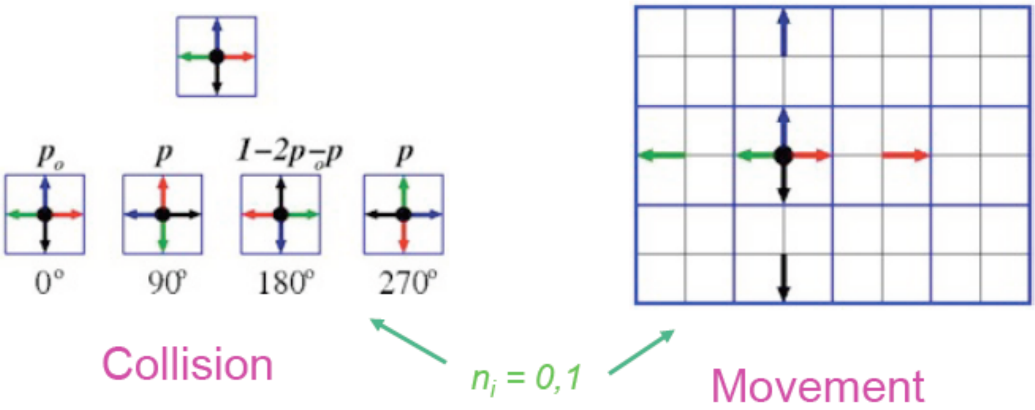
MÉTODOS DE SIMULACIÓN – FÍSICA   Taller 2, Ejercicio 3

AUTÓMATA CELULAR DE DIFUSIÓN 2D

Considere un gas de red bidimensional de retícula cuadrada, donde cada celda tiene cuatro vectores velocidad que transportan a las primeras celdas vecinas, como se muestra en la figura.



En cada celda, cada vector velocidad puede tener o no una partícula. La regla de evolución consiste en que, con cada paso de tiempo, cada celda genera un número aleatorio entre 0 y 1, y de manera independiente decide si quedarse quieta con probabilidad p_0, girar a la derecha 90º con probabilidad p, girar a la izquierda 90º con probabilidad p o girar 180º con probabilidad $1-2p-p_0$. Luego, cada celda transporta sus contenidos a las celdas vecinas. En el límite continuo de celdas infinitamente pequeñas y pasos de tiempo infinitamente seguidos, este autómata cumple la ecuación de difusión

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho \ , \quad \text{con constante de difusión} \quad D = \frac{p+p_0}{2[1-(p+p_0)]} \quad \frac{\text{celdas}^2}{\text{click}} \ .$$

a) Construya un programa que implemente este autómata sobre un espacio de simulación de 256×256 celdas con condiciones de frontera periódicas. Escoja $p = p_0 = 0.25$. Como condición inicial, coloque en el centro una distribución bigaussiana de 2400 partículas y ancho $\sigma_0 = 16$ y deje evolucionar a lo largo de 350 pasos de tiempo. Grafique la varianza σ^2 vs t para $0 < t < 350$ y compruebe que la varianza crece linealmente con el tiempo con pendiente 2D, con D la constante de difusión. Explore para otros valores de p y p0 si la pendiente medida coincide con el valor predicho por la expresión para D dada arriba.

Si uno no está interesado en simular el movimiento de partículas individuales, sino solamente calcular la densidad, se puede construir un modelo alternativo en el que, en vez de mover partículas individuales, se mueven las *probabilidades* de tener partículas en cada dirección. Sean f_n, f_s, f_e y f_w las probabilidades de tener partículas moviéndose en dirección norte, sur, este y oeste, respectivamente, asociadas con los mismos vectores velocidad del autómata discreto anterior. Si siguiéramos las mismas reglas de rotación aleatoria de dicho autómata, las probabilidades nuevas de tener partículas moviéndose en cada dirección luego de la colisión serían:

$$f_{n\,\text{new}} = p_0 f_n + p f_e + p f_w + (1 - 2p - p_0) f_s$$

$$f_{s\,\text{new}} = p_0 f_s + p f_e + p f_w + (1 - 2p - p_0) f_n$$

$$f_{e\,\text{new}} = p_0 f_e + p f_n + p f_s + (1 - 2p - p_0) f_w$$

$$f_{w\,\text{new}} = p_0 f_w + p f_n + p f_s + (1 - 2p - p_0) f_e$$

Este autómata no requiere generar números aleatorios.

b) Construya un programa que implemente este autómata sobre un espacio de simulación de 256×256 celdas con condiciones de frontera periódicas. Escoja $p = p_0 = 0.25$. Como condición inicial, coloque en el centro una distribución bigaussiana de ancho $\sigma_0 = 16$ y deje evolucionar a lo largo de 350 pasos de tiempo. Grafique tanto la distribución inicial como la distribución final. Grafique la varianza σ^2 vs t para $0 < t < 350$ y compruebe que la varianza crece linealmente con el tiempo con pendiente 2D, con D la constante de difusión.

Para la entrega

El envío (.pdf de la presentación y programas .cpp) debe contener:

a) El programa .cpp que implementa la simulación del punto a).
b) Las gráficas de σ^2 vs t para diferentes valores de p y p_0.
c) Una tabla que compare los valores teóricos y medidos de la constante de difusión.
d) El programa .cpp que implementa la simulación del punto b).
e) Las gráficas inicial y final del punto b)
f) La gráfica de σ^2 vs t del punto b).