

Procesos de reacción-difusión $A + B \xrightarrow{\beta} C$

Presentado por: Sasiri Juliana Vargas

Módulo de Datos

8 de marzo de 2021

- 1 Sistema de trabajo
- 2 Método computacional
- 3 Código
- 4 Resultados
- 5 Discusión
- 6 Conclusiones

Sistema de trabajo

Sistema de trabajo

Los sistemas de reacción-difusión (RD) son conocidos por:

Características:

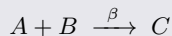
- Mecanismo básico de transporte de materia: **Difusión**
- **Sistema limitado por difusión (DL):** Sistema no homogéneo
- **Sistema limitado por reacción (RL):** Sistema homogéneo

Complejidad:

- Procesos no lineales
- Procesos fuera del equilibrio
- Dependencia con la dimensionalidad espacial
- Dependencia con las condiciones iniciales

Como sistema de trabajo se considera una red unidimensional discreta de longitud $2L$ con reactantes inicialmente separados.

Las partículas están sometidas por la siguiente reacción:



A: Inicialmente en $-L \leq x < 0$

B: Inicialmente en $L \geq x > 0$

C: Partícula inerte

β : Tasa de reacción.

λ : Tasa de salto

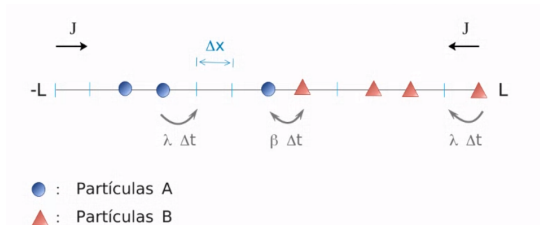
J : Corriente del flujo de partículas

Δt : Paso de tiempo

Δx : Paso espacial

Dinámica del sistema:

- Saltos aleatorios a primeros vecinos
- Ocupación múltiple prohibida
- $\lambda \Delta t$: Probabilidad de salto
- $\beta \Delta t$: Probabilidad de reacción
- $J \Delta t$: Número promedio de partículas que entran a la red



Método computacional

Método Monte Carlo cinético

Para simular la dinámica del sistema se utiliza el método llamado *Monte Carlo cinético*.

Algoritmo:

En un paso de tiempo se escoge aleatoriamente un sitio de red:

- Si en éste hay una partícula, entonces esta cambia de posición moviéndose a uno de sus vecinos
- Si el sitio escogido es uno de los extremos del arreglo se insertan partículas del tipo correspondiente
- Una vez realizado el movimiento, si A y B son vecinos, se efectúa una reacción.

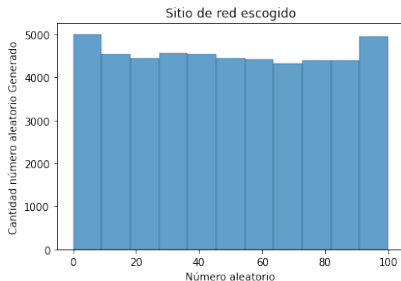
Para resaltar...

El movimiento solo se hace efectivo si el sitio de salto está vacío.

Código

Código de simulación

- Para la simulación y el análisis se realizan dos códigos.
- El primero es el encargado de efectuar la dinámica del sistema y los datos encontrados con el algoritmo son exportados.
- Para la realización de la simulación se evalúa tener iteraciones suficientes tal que, la distribución de números aleatorios sea homogénea (ver imagen).
- Para la escritura de los archivos se utiliza el módulo csv de python.



Código de análisis

- Para obtener variedad de resultados, se repite el algoritmo para diferentes semillas de random (se realizan 10 repeticiones, semilla del 0-9).
- El segundo código se encarga de la lectura y análisis de los datos. Para ello se utiliza la librería de *Pandas*.
- Los datos encontrados a trabajar se representan como un Data Frame, en total se tienen 20 Data Frames almacenados en dos listas, una correspondiente a los datos de la dinámica de las partículas A y la otra correspondiente a las partículas B.

El código para la lectura de archivos luce de la siguiente manera:

In [2]: `#Para La Lectura de archivos`

```
Lista_A = []
Lista_B = []

for i in range(0,10):
    Lista_A.append(pd.read_csv('./Datos_CoNGA/Archivo_A_semilla'+str(i)+'.csv', sep=',', index_col=0, header = 0))
    Lista_B.append(pd.read_csv('./Datos_CoNGA/Archivo_B_semilla'+str(i)+'.csv', sep=',', index_col=0, header = 0))

Lista_A[0]
```

Out[2]:

	-50.0	-49.0	-48.0	-47.0	-46.0	-45.0	-44.0	-43.0	-42.0	-41.0	...	41.0	42.0	43.0	44.0	45.0	46.0	47.0	48.0	49.0	50.0
0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
2.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
3.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
4.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
...
49996.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
49997.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
49998.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
49999.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
50000.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	...	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

50001 rows × 101 columns

En esta imagen también se encuentra una representación de los Data Frames con los que se van a trabajar. Las filas representan la evolución del tiempo y las columnas la evolución espacial.

A partir de los Data Frames encontrados se encuentra el perfil de densidad para cada semilla, siguiendo la expresión:

$$\rho_i(x) = \frac{\langle n_i \rangle}{v}$$

Donde $v = 1$ ya que estamos trabajando con un arreglo unidimensional, ρ_i es el perfil de densidad para las $i = A, B$ partículas y n_i es el número de partículas en la posición x para diferentes tiempos. El promedio se realiza sobre el tiempo.

Para ello se encuentran los perfiles de densidad para cada semilla y se hace una lista con cada uno de los promedios por simplicidad.

```
#Perfiles de densidad para cada semilla de random

densidad_ListaA = []
densidad_ListaB = []

for i in range(0,10):
    densidad_ListaA.append(list(Lista_A[i].mean()))
    densidad_ListaB.append(list(Lista_B[i].mean()))
```

Se convierte lo encontrado anteriormente en un Data Frame para utilizar nuevamente las funciones de Pandas.

```
#Densidad de A en Data Frame
densidad_DF_A=pd.DataFrame(densidad_ListaA)

#Densidad de B en Data Frame
densidad_DF_B=pd.DataFrame(densidad_ListaB)
```

Para poder tener una estadística de los datos, se realiza un promedio sobre los ρ_i de las diferentes semillas de números aleatorios, este nuevo promedio se denomina perfil de densidad total. Igualmente es posible encontrar la desviación estándar de estos datos. Para ello se hace:

```
#Promedio de la densidad de todas las semillas

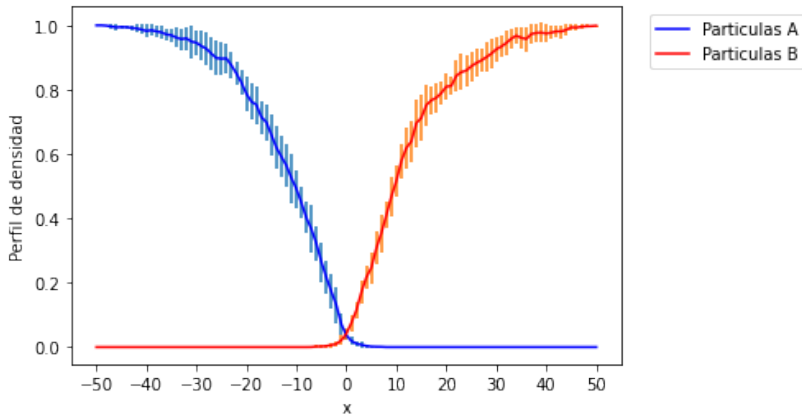
prom_densidad_ListaA=list(densidad_DF_A.mean())
prom_densidad_ListaB=list(densidad_DF_B.mean())

#Desviacion estandar
desviacion_A = list(densidad_DF_A.std(ddof=0))
desviacion_B = list(densidad_DF_B.std(ddof=0))
```

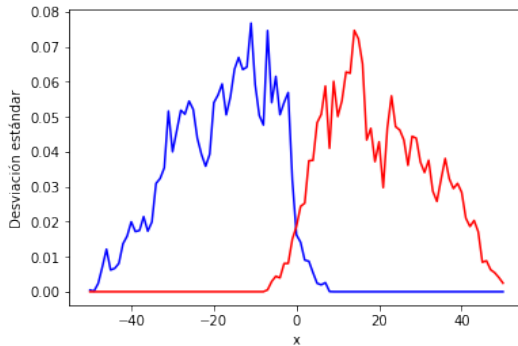
Resultados

Resultados

Para una mejor visualización de los datos, se muestra el perfil de densidades de las partículas A y B junto a su respectiva desviación estándar, siendo esta última representada por barras de error.

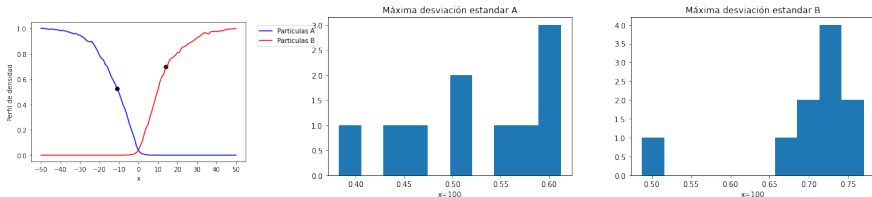


La gráfica de la desviación estándar para cada posición x se muestra a continuación.



Representándose las partículas A con el color azul y las partículas B con el color rojo.

Para analizar los puntos con la mayor dispersión, se busca la máxima desviación estándar para el perfil de densidades de cada una de las partículas. Dentro de la figura del perfil de densidad total, se grafican los puntos correspondientes a la posición de la máxima desviación estándar y se presentan los histogramas de los datos en estos puntos.



Discusión

Discusión

- Como un aspecto importante para la realización del método Monte Carlo cinético, cabe resaltar la necesidad de tener un gran número de números aleatorios, ya que el tener uniformidad en la escogencia de los sitios de red, es indispensable para no favorecer un sitio más que otro. Más aún, debido a que el método presentado no es un método libre de rechazos (método en el cual siempre hay un salto en cada iteración), entonces la importancia de la cantidad de los números aleatorios resalta aún más. En este caso se realizaron 5001 iteraciones.

- Ya que para encontrar el perfil de densidades total se necesita realizar un promedio sobre el número de repeticiones del algoritmo, como un futuro trabajo, se podría implementar el mismo procedimiento mostrado en esta presentación, pero para más semillas de números aleatorios, a partir de esto se podría encontrar una mejor estadística. Sin embargo, los resultados encontrados presentan adecuadamente el comportamiento dinámico del sistema.
- El manejo de datos como un Data Frame, es realmente favorecedor, ya que permite trabajar con una gran cantidad de datos de manera sencilla, en este caso se tenían 10 arreglos, cada uno de 50001 filas \times 101 columnas. Lo cuál aumentaría si se hace crecer la longitud del arreglo y el número de iteraciones.

- Se puede observar en las gráficas de la máxima desviación estándar, que los puntos donde ocurre esta misma, se encuentran dentro de una zona denominada: 'Zona de reacción', región en la cual, la densidad de partículas A y B empieza a decrecer debido a que $A + B \xrightarrow{\beta} C$, siendo C una partícula inerte que no interacciona ni con A ni con B. De acuerdo a los histogramas se puede decir que estos sitios de red, permanecen más veces ocupados que vacíos.

Conclusiones

Conclusiones

- Se concluye que el uso de los Data Frames para el tratamiento de datos es bastante útil, ya que permite trabajar y realizar procedimientos estadísticos a los datos con más facilidad.
- Para obtener una mejor estadística se requiere realizar una mayor cantidad de veces el procedimiento, sin embargo, con 10 repeticiones se logra ilustrar adecuadamente la dinámica de la aniquilación de un sistema de reacción-difusión en una dimensión.

Gracias