

Monte Carlo cinético para un sistema de reacción-difusión

Presentado por: Sasiri Vargas

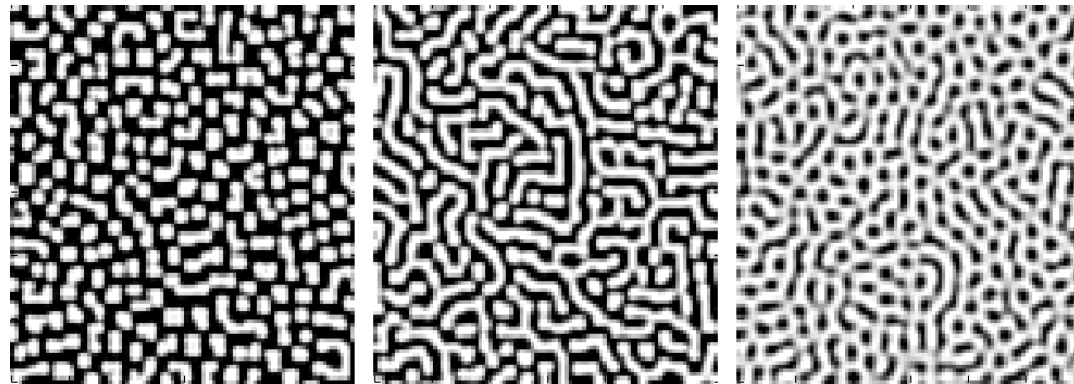
CONTENIDO

- 1. Introducción
- 2. Modelo y aproximaciones
- 3. Algoritmo (Monte Carlo cinético)
- 4. Resultados
- 5- Conclusiones
- 6. Perspectivas

INTRODUCCIÓN

Los sistemas de reacción-difusión (RD) son de gran importancia en la física moderna debido a su gran versatilidad. Sirven como modelos para un gran número de fenómenos como:

- Formación de patrones,
- Crecimiento por agregación
- Evolución de reactantes por reacciones químicas



Patrones de Turing. Imagen tomada de: Google.com

Sistemas de RD para simular el proceso de formación de patrones biológicos:



Imagen tomada por: Chiswick Chap

En los sistemas de RD el mecanismo básico de transporte de materia es la difusión y una vez alcanzado el rango de interacción, los componentes del sistema interactúan entre sí por medio de reacciones.

Los sistemas de RD son, en general, difíciles de estudiar debido a que evolucionan mediante procesos no lineales fuera del equilibrio

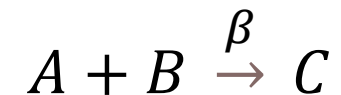
El comportamiento de los sistemas de RD depende:

- Dimensión espacial
 - $d > d_c$: *Aproximación de campo medio*
 - $d \leq d_c$: *Predominan las fluctuaciones espaciales*
- Condiciones iniciales
 - Mezcla aleatoria
 - Reactantes separados

MODELO Y APROXIMACIONES

Se considera una red unidimensional discreta de longitud $2L$ con reactantes inicialmente separados, las partículas A se encuentran en la región del espacio $-L \leq x < 0$ mientras que las B en la región $L \geq x > 0$.

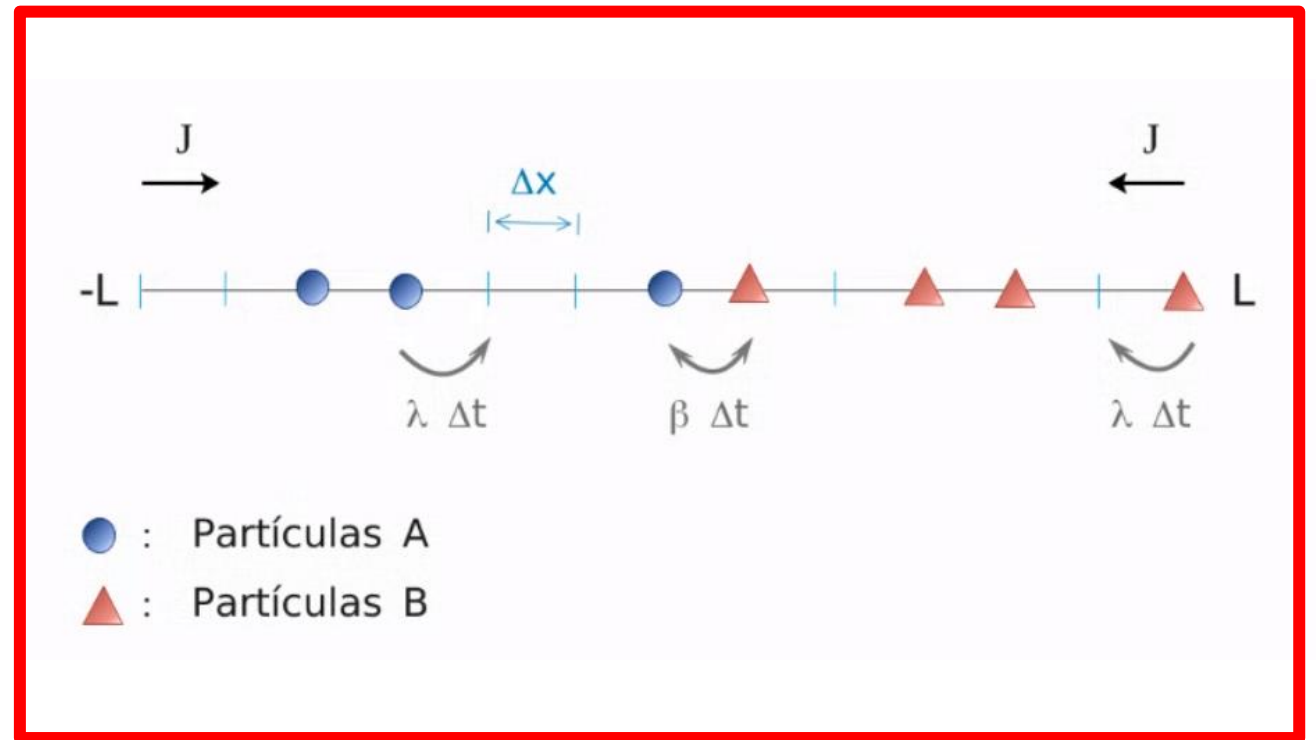
Cada sitio de la red puede estar ocupado cuando más por una sola partícula y dichas partículas están sometidas por la siguiente reacción:



donde C es una partícula inerte y β es la tasa de reacción.

- Las partículas ejecutan saltos aleatorios exclusivamente entre sus vecinos más cercanos vacíos
- Los saltos ocurren con una probabilidad $\lambda \Delta t$
 λ : es la tasa de salto
 $D = \lambda \Delta x^2$: coeficiente de difusión
- En los sitios de red $-L$ y L , se tiene flujos de partículas A y B respectivamente, cada uno con corriente j .
- La reacción ocurre con una probabilidad $\beta \Delta t$ cuando dos partículas A y B son vecinas.
 $k = \beta \Delta x$: constante de reacción

DINÁMICA DEL SISTEMA



Para el desarrollo del modelo se definen las siguientes cantidades características:

- RMA : Designa la partícula de tipo A ubicada más a la derecha
- LMB : Designa la partícula de tipo B ubicada más a la izquierda
- $\rho_i = \frac{n_i}{2L}$: Determina la densidad local discreta. Siendo n_i el número de partículas en el sitio i

Distribución de espaciamientos discreta:

$$P_i(t) = \begin{cases} 1 & \text{si en } t \text{ } |RMA - LMB| = i \\ 0 & \text{de otra manera} \end{cases}$$

Expresiones continuas:

$$P(x, t) = \frac{\langle P_{i(t)} \rangle}{\Delta x}$$

$$\rho(x, t) = \frac{\langle \rho_{i(t)} \rangle}{\Delta x}$$

De acuerdo a la dinámica presentada, es posible encontrar la ecuación maestra del sistema de trabajo en términos de la distribución de espaciamientos

$$P_i(t + \Delta t)_{\{diff\}} = P_{i+1}(t) 2 \lambda \Delta t + P_{i-1}(t) 2 \lambda \Delta t \{1 - Q_i(t)\} \\ + P_i(t) \{1 - 4\lambda \Delta t + 2 \lambda \Delta t Q_{i+1}(t)\}$$

$$P_i(t + \Delta t)_{\{reac\}} = P_i(t) \{1 - \delta_{i0}\} + P_0(t) \beta \Delta t T_i(t) + P_0(t) \{1 - \beta \Delta t\} \delta_{i0}$$

Donde T_i y Q_i son probabilidades condicionales que no dependen de P_i

Entonces la ecuación maestra total es:

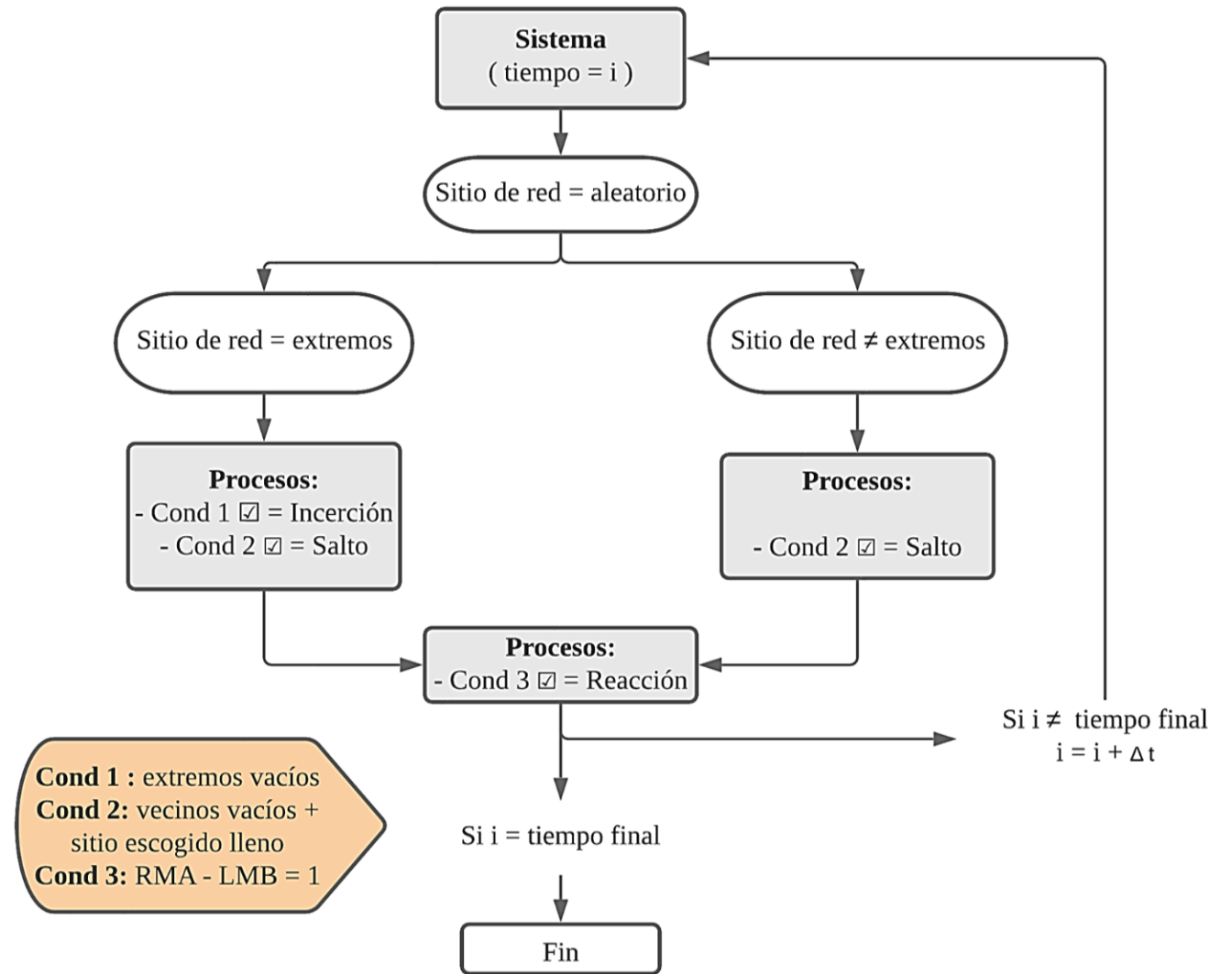
$$P_i(t + \Delta t) = P_i(t + \Delta t)_{\{diff\}} + P_i(t + \Delta t)_{\{reac\}}$$

ALGORITMO

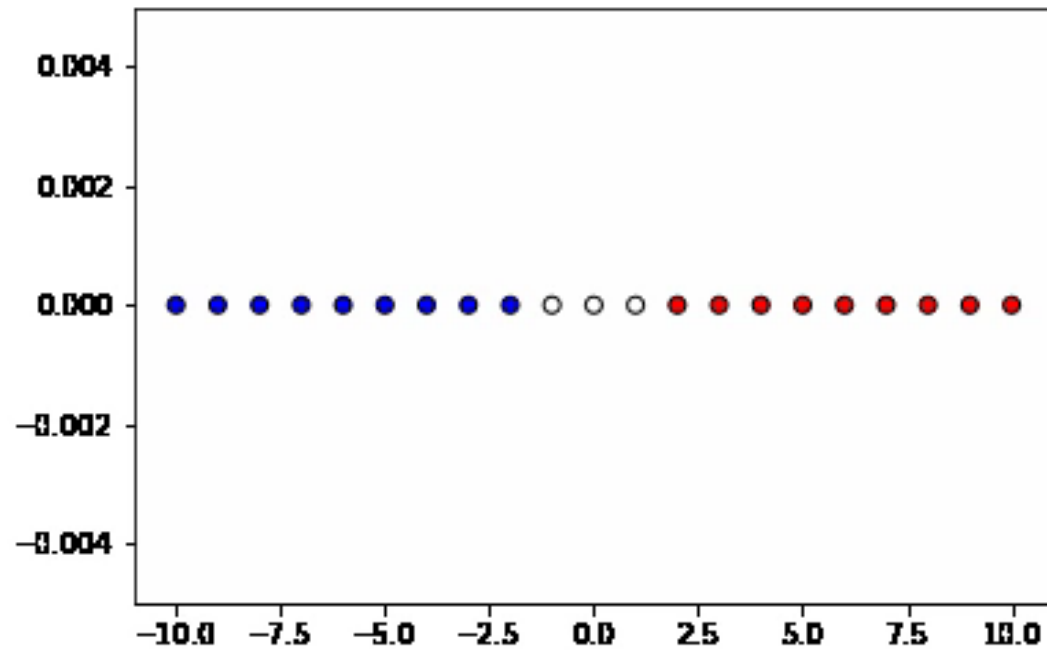
Monte Carlo cinético

Para realizar la simulación computacional, se considera una red unidimensional discreta con $\Delta x = 1$ y se parte de la siguiente condición inicial.

$[A, A, A, \dots, A, B, \dots, B, B, B]$



RESULTADOS



NO ES LIBRE DE RECHAZOS

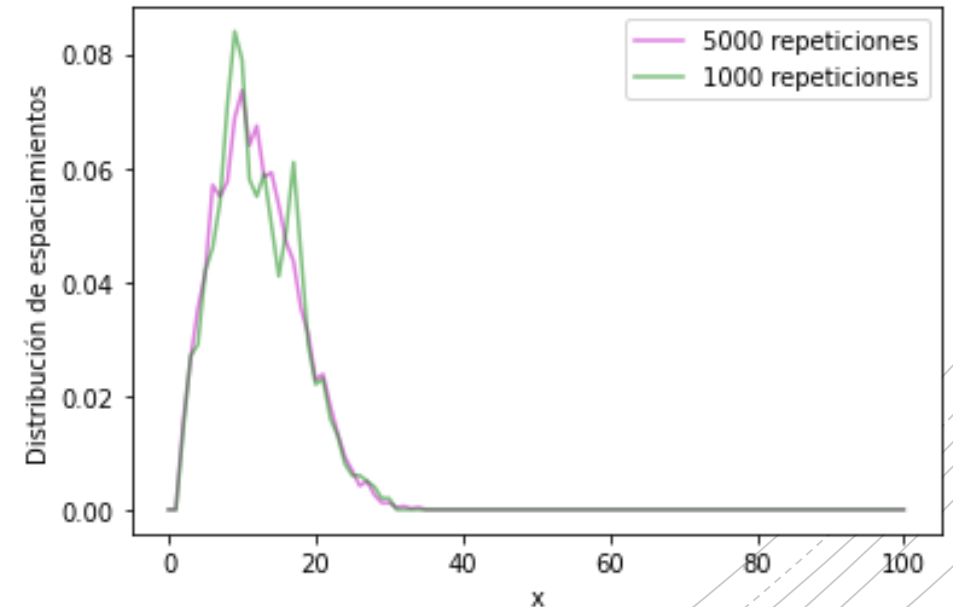
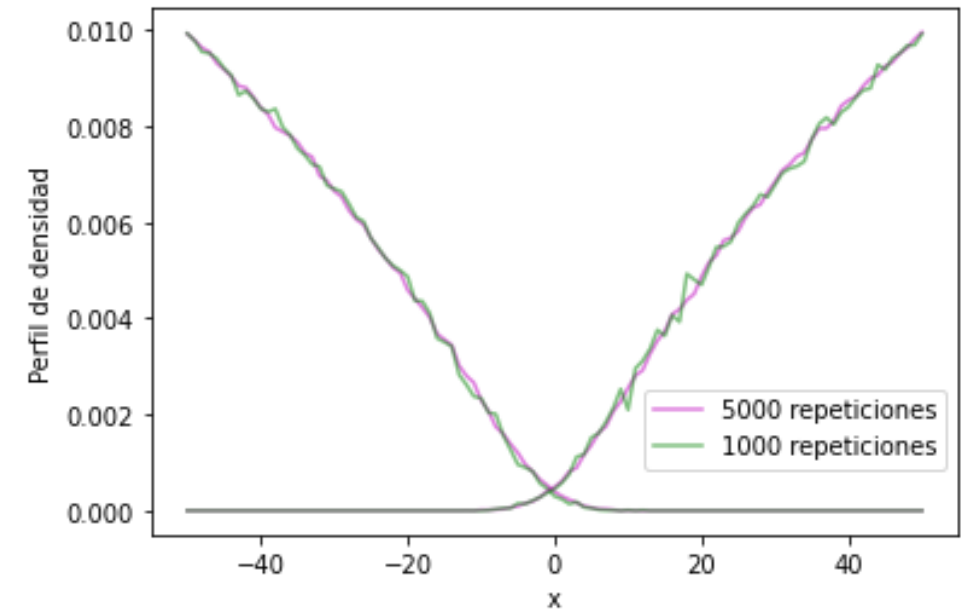
- Para entender un poco más la dinámica del sistema, se realizó una animación con $L=10$, prob. de reacción = prob. de salto = prob. Inserción = 1

¿CONVERGENCIA?

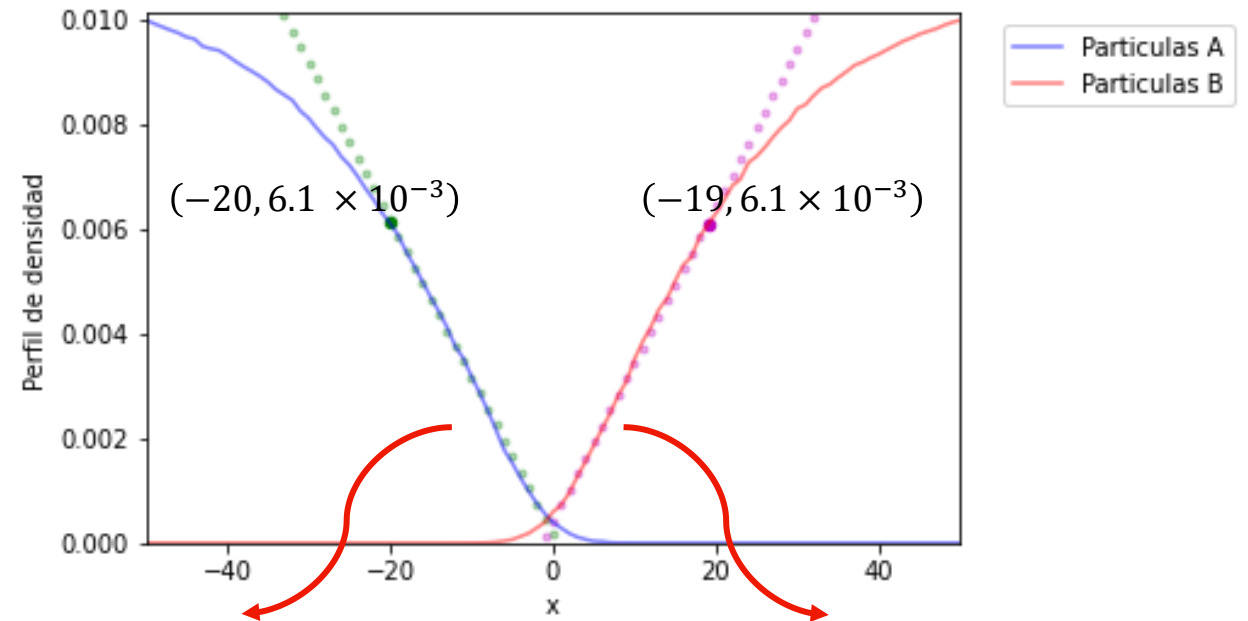
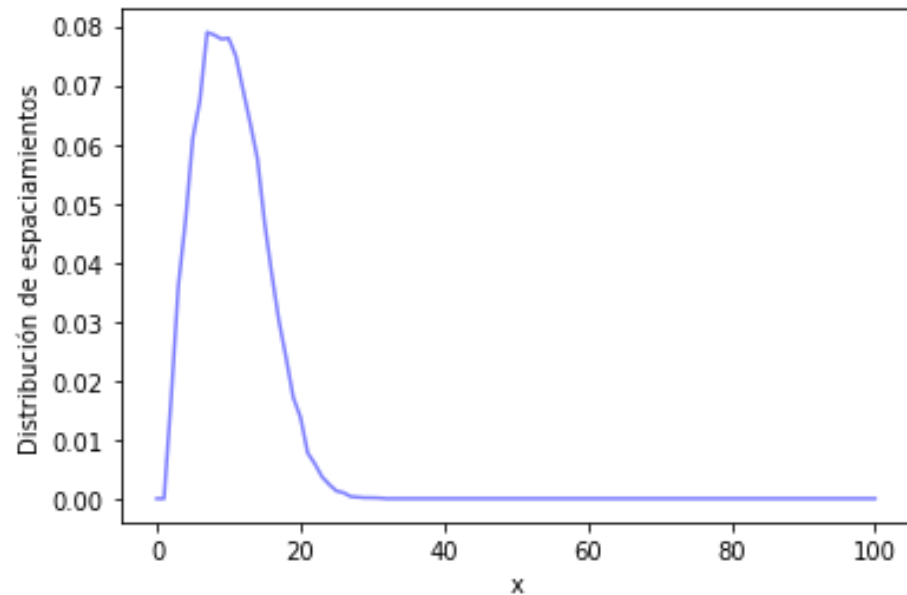
Se realizó una simulación considerando $k = \lambda = 0.5$, $j=1$ y tiempo de simulación igual a 100.000 para 1.000 y 5.000 repeticiones

Se obtienen sistemas dinámicos similares

Debido a la definición de la distribución de espaciamientos, es necesario tomar una mayor cantidad de repeticiones.



- Para el sistema en el estado estacionario, se realiza una simulación con $k = 1$, $\lambda = 0.5$, $j = 1$, cantidad de iteraciones igual a 100.000 y 50.000 repeticiones.

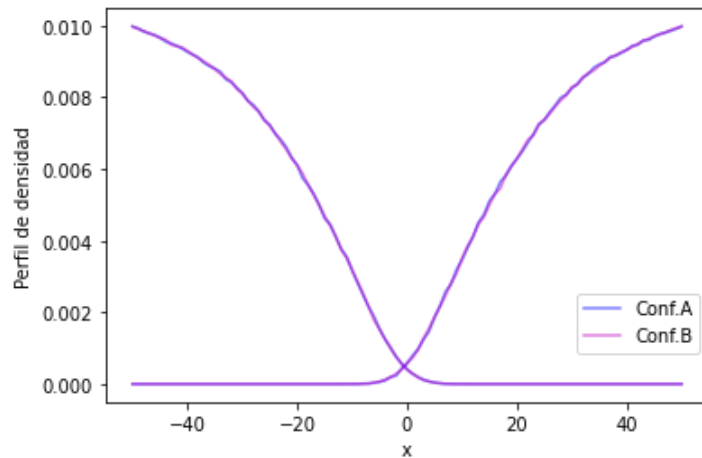


$$f(x) = -(2.99 + 1.54) \times 10^{-4}$$

$$f(x) = (2.99 + 4.31) \times 10^{-4}$$

- Solapamiento entre los perfiles de concentración para las partículas A y las partículas B
- Decaimiento lineal de los perfiles de concentración decaen dentro de la zona de reacción
- Simetría

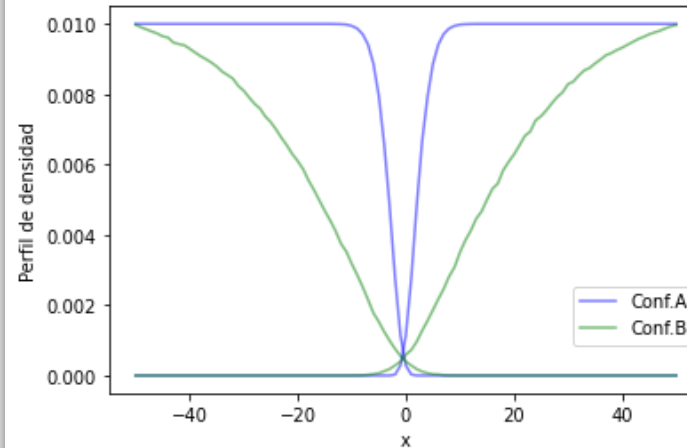
Estado estacionario



Conf. A = $\{ L=50, \lambda=0.5, j=1, k=0.1 \}$
 Conf. B = $\{ L=50, \lambda=0.5, j=1, k=1 \}$

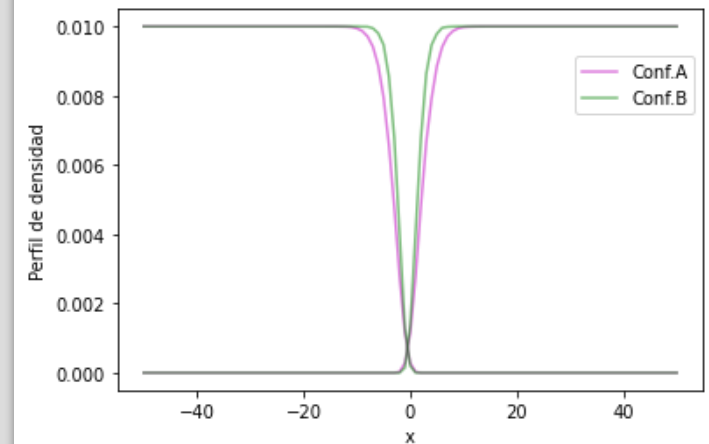
100.000 iteraciones y 10.000 repeticiones

Estado estacionario vs. Estado dinámico



Conf. A = $\{ L=50, \lambda=0.5, j=1, k=1, 1000 \text{ iteraciones} \}$
 Conf. B = $\{ L=50, \lambda=0.5, j=1, k=1, 100.000 \text{ iteraciones} \}$
 50.000 repeticiones

Estado dinámico

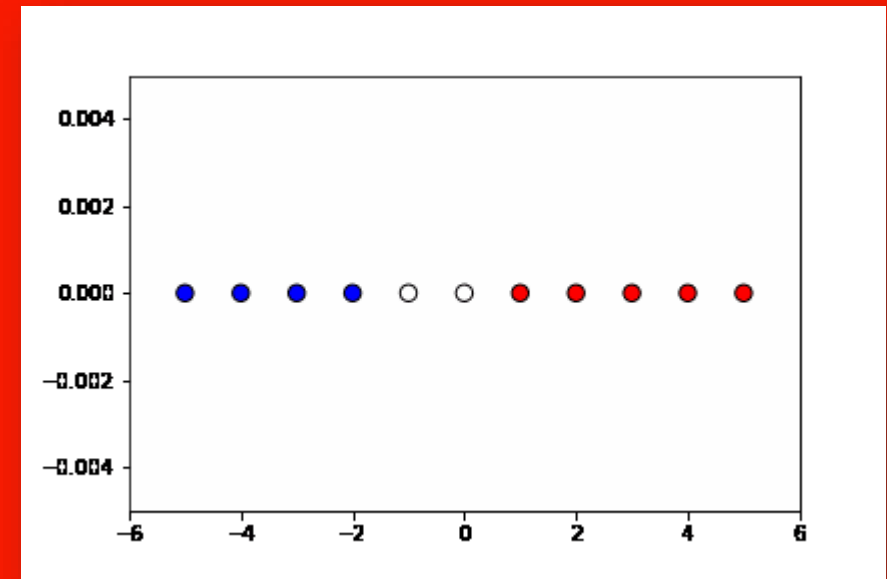


Conf. A = $\{ L=50, \lambda=0.5, j=1, k=1 \}$
 Conf. B = $\{ L=50, \lambda=0.2, j=1, k=0.5 \}$

1000 iteraciones y 5.000 repeticiones

CONCLUSIONES

- Se concluye que el algoritmo para el método Monte Carlo implementado para representar la dinámica de un sistema de aniquilación de dos reactantes, reproduce su comportamiento
- Se recomienda tomar valores por encima a 5.000 repeticiones.
- La dificultad para encontrar buenas simulaciones, recae en los parámetros utilizados.
- El costo en tiempo computacional del algoritmo es elevado, debido a que el algoritmo no es libre de rechazos, puede llegar a demorarse hasta más de 12 horas para tiempos muy grandes.





PERSPECTIVAS

- Agilizar el código:
 - (1er opción) Paralelizar el código
 - (2da opción) Uso de la librería Numba
- Analizar el sistema en el régimen limitado por difusión ($\beta \gg 1$) y en el régimen limitado por reacción ($\beta \ll 1$).
- Ampliar la piscina de números aleatorios



GRACIAS