

# Modelación y Simulación 2024

Lab 05

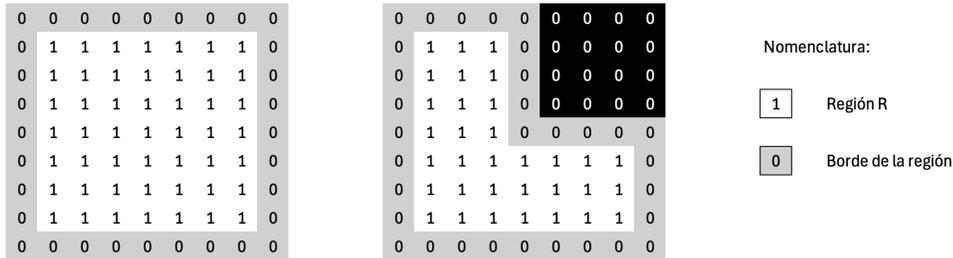
05.septiembre.2024

En este laboratorio implementaremos simulaciones de un proceso de difusión, mediante un autómata, y mediante partículas en un ambiente 2D.

Recordemos que la ecuación de difusión 2-dimensional es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = K\Delta u = K\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right),$$

Vamos a simular el proceso de difusión en dos ambientes: (1) un grid rectangular de tamaño  $M \times N$ ; y (2) una región en forma de L, de tamaño  $M \times N$ , en donde sea ha removido un subgrid de tamaño  $r \times s$ , como se ilustra en la figura.



(En el caso más general, esta simulación puede hacerse en cualquier región rectangular, pasando como input una máscara de bits que especifica la región a usar).

Usaremos también un grid temporal  $[0, T]$ , donde  $T \in \mathbb{N}$  es un parámetro que marca el tiempo donde termina la simulación.

En su simulación, su función deberá recibir los siguientes parámetros:

- $M, N$ : tamaño del grid a utilizar, y  $r, s$  en el caso de la región L-shape (Como alternativa, puede pasar la máscara de bits que indica la forma de la región  $R$  a utilizar),
- $T$ : límite temporal para la simulación,
- $u_0$ : la distribución inicial de probabilidad de la cantidad de sustancia en el grid. Este debe ser un array de tamaño  $M \times N$  con entradas float no-negativas, y que suman 1 en total.
- $neigh$ : el tipo de vecindad a usar (en este lab usaremos la vecindad de 8 vecinos),
- $K$ : el parámetro de velocidad de difusión,  $0 \leq K \leq 1$ ,

La idea de la simulación es la siguiente. Al inicio, hay una distribución inicial  $u^{(0)}$  de sustancia.

En cada momento de la simulación, usted deberá considerar cada celda  $(i, j)$  y actualizar la cantidad de sustancia  $u_{ij}^{(t)}$  según la dinámica de difusión

$$u_{ij}^{(t+1)} = (1 - K)u_{ij}^{(t)} + \frac{K}{8} \left( \sum_{(p,q) \in \mathcal{N}(i,j)} u_{pq}^{(t)} \right), \quad t = 1, 2, \dots, T.$$

Aquí,  $\mathcal{N}(i, j)$  representa la colección de vecinos de la celda  $(i, j)$  que se encuentran dentro de la región de difusión.

La simulación y los valores  $u^{(t)}$  se actualizan únicamente para las celdas dentro de la región  $R$ .

En todo momento de su simulación, debe guardar un registro del grid completo (los valores  $u_{ij}^{(t)}$  de cada celda). En la salida de su simulación, deberá devolver el historial de estados del grid, a lo largo de toda la simulación. El historial del grid servirá para graficar de forma dinámica la evolución espacial del contagio:

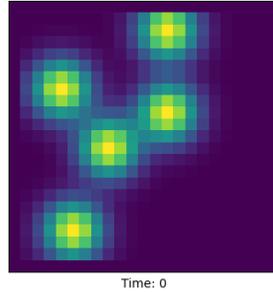


Figure 1: Distribución inicial de  $u^{(t)}$ .

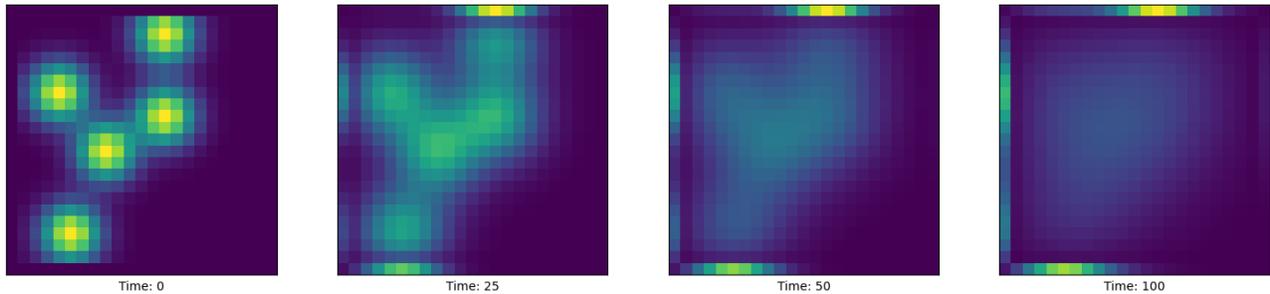


Figure 2: Secuencia de difusión en el tiempo  $t = 0$ ,  $t = 25$ ,  $t = 50$  y  $t = 100$ .

1. Ejecutar una simulación del modelo de difusión, con parámetro de probabilidad  $K$ . Graficar una secuencia de imágenes del grid, para ilustrar la dinámica espacial de la difusión a lo largo de la región  $R$ .
2. Implemente ahora una simulación de la dinámica de difusión usando partículas. Defina un número  $P > 0$  de partículas, y distribúyalas de manera aleatoria en el grid, siguiendo la distribución inicial  $u^{(0)}$ . En cada momento de la simulación, cada partícula dentro de la región se mueve a alguno de sus 8 vecinos (con igual probabilidad de  $\frac{1}{8}$  cada vecino). Asuma que cada partícula tiene una probabilidad  $K$  de moverse a sus vecinos, y una probabilidad  $1 - K$  de no moverse y quedarse en la misma celda.

Defina  $N_{exp}$  para un número de repeticiones de la simulación. Repita la ejecución de su simulador un total de  $N_{exp}$  veces, todas con la misma distribución inicial  $u^{(0)}$  y grafique el promedio espacial de las simulaciones. Generar un video en formato mp4 en el que se visualice la dinámica espacial obtenida de esta simulación promedio.

Reescale el promedio obtenido a una escala de probabilidad (normalizar dividiendo dentro de la suma), y contraste el resultado de la simulación de partículas contra la evolución de la EDP del ejercicio 1.

3. Experimente las simulaciones anteriores con diferentes formas de la región, con varias distribuciones iniciales  $u^{(0)}$ , y con diferentes parámetros de velocidad  $K$ . Discuta y muestre evidencia (*snapshots* u otras gráficas) de lo siguiente:
  - Para un mismo tamaño  $M \times N$  de grid, y un misma distribución inicial  $u^{(0)}$ , ¿cómo cambian la difusión al variar  $K$ ?
  - Para una misma región  $R$ , y parámetro  $K$ , ¿cómo cambian la difusión al variar la distribución inicial?