

Métodos de Simulación Física (Cód: 2020174)

Profesor: José Daniel Muñoz

Programa Calendario

Semestre 2024-I

La simulación numérica es una tercera vía para la comprensión y el modelado de fenómenos de la más diversa índole que conjuga elementos tanto de la teoría como del experimento. En una primera etapa – similar a la teoría – la simulación de un fenómeno comienza por identificar los elementos involucrados que se creen esenciales para reproducir las observaciones y construir con ellos un modelo computacional. En una segunda etapa – similar al experimento – el modelo así construido se corre bajo diferentes valores de los parámetros del sistema o de las condiciones iniciales para establecer si hay elementos innecesarios, para establecer leyes empíricas o para reproducir comportamientos que puedan compararse con predicciones analíticas o datos experimentales. Si la simulación es capaz de reproducir los datos, significa que hemos comprendido el fenómeno, pues hemos identificado correctamente sus elementos esenciales, y podemos proceder entonces a emplearla para diseñar mejores aplicaciones. Las simulaciones numéricas son especialmente útiles allí donde el número de grados de libertad es demasiado alto o las interacciones son demasiado complejas para lograr una predicción teórica, o donde las variables son difíciles de manipular o de medir experimentalmente.

Este curso tiene por objeto brindar al estudiante herramientas básicas para la simulación de sistemas físicos. El curso se centra en dos técnicas de simulación de amplio uso, a saber: *Elementos Discretos* (en mecánica tridimensional, mecánica celeste y medios granulares), y *Autómatas Celulares y Lattice Boltzmann* (incluyendo difusión, fluidos, ondas y campos electromagnéticos). Estas técnicas se ilustran con numerosos ejemplos de aplicación en física. El curso enseña, además, a programar orientado a objetos, a utilizar paquetes gráficos para el análisis de datos en Unix, y da fundamentos para el análisis estadístico de las simulaciones. Pero, principalmente, enseña a modelar un fenómeno utilizando herramientas de simulación.

Competencias: Al final del curso el estudiante debe ser capaz de

- modelar sistemas discretos utilizando dinámica molecular.
- simular fenómenos que involucren difusión, ondas, mecánica de fluidos o electrodinámica utilizando lattice-Boltzmann.
- construir generadores aleatorios con diversas distribuciones y emplearlos para generar condiciones iniciales y estimar variables de interés por Monte Carlo.
- diseñar un protocolo de simulaciones, obtener curvas de datos y proponer a partir de ellos leyes empíricas contrastables con resultados analíticos o experimentales.

Conocimientos: Al final del curso el estudiante debe saber:

- Bases de programación orientada a objetos.
- Solución de ecuaciones diferenciales por Runge-Kutta.
- Elementos Discretos, incluyendo métodos de integración traslacionales y rotacionales, leyes de fuerzas y técnicas de aceleración.
- Autómatas celulares y sus aplicaciones en física
- Modelos de Lattice-Boltzmann: Expansión de Chapman-Enskog, condiciones iniciales y condiciones de frontera, cálculo de variables macroscópicas.
- Programación básica en CUDA

Metodología

Se utiliza una combinación de prácticas hands-on en clase y presentaciones magistrales, tareas en grupo (que se trabajan fuera de clase y se exponen en clase) y el desarrollo de un proyecto a lo largo del curso. Cada tema inicia con una exposición magistral de la técnica y de sus aplicaciones, que se

concreta en clase implementando una simulación a través de un taller dirigido. A continuación, se dejan tareas en grupo, aglutinadas en talleres, que expanden el alcance del programa construido. La habilidad individual de cada estudiante para atacar la simulación de un fenómeno se evalúa con parciales presenciales, y su comprensión parcial de lo aprendido, con quices, que sirven para identificar quiénes necesita refuerzo y cómo reforzar. La capacidad para trabajar en equipo de manera colaborativa y atacar numéricamente la modelación de un fenómeno se construye desarrollando un proyecto por equipo a lo largo del semestre. Se usan C++, Python y CUDA como lenguajes de programación.

Programa Calendario

Programación Básica (repaso) y Ec. Dif. Ordinarias (3 clases)

- (Feb07) *Primeros programas y familiarización con los entornos de trabajo. Mi primer programa.* Operaciones matemáticas básicas. **Estructuras:** *for* e *if*. Cómo hacer un programa paso a paso. **Funciones:** redireccionamiento y graficando una función: *xmgrace*, *gnuplot*. **Ceros por bisección.** Implementación en **Python**.
- (Feb09) *Integración numérica de ecuaciones ordinarias. Integración por Simpson.* Ejemplo: Calcular funciones de Bessel por integración. Cuadratura de Gauss.
- [Taller 1, Ejercicio 1: Integral por Cuadratura de Gauss.](#)
- (Feb14) *Euler y Runge-Kutta para una ecuación de primer orden.* Ecuación de segundo orden con condiciones iniciales. Problema de Sturm-Liouville y condiciones de frontera. Método de la lanzadera.
[Taller 1, Ejercicio 2: Runge-Kutta y Lanzadera: Modos de Oscilación.](#)

Elementos Discretos (DEM) (8 clases)

- (Feb16) *Introducción.* Clase Cuerpo. Euler. Movimiento parabólico. Fuerza Central. Animación.
- (Feb21) *Métodos de Integración:* Leap-Frog, Verlet, Forest-Ruth.
- (Feb23) *Vectores y Colisionadores:* Clase Vector 3D. Fuerza central con vectores. Colisionador y dos planetas.
[Taller 1, Ejercicio 3: Planetas troyanos.](#)
- (Feb28) *Modelar y Analizar: Números Adimensionales y el teorema Pi de Buckingham.* La libertad para escoger las unidades de las magnitudes básicas. *La cuna de Newton como ejemplo de modelación:* un péndulo (rotación), y colisión por Fuerza de Hertz. Análisis de la colisión (tiempo e intensidad). Análisis dimensional y leyes de potencias.
[Taller 1, Ejercicio 4: Un gas de Lennard-Jones.](#)
- (Mar01) *Granos. Medios granulares:* Discos y esferas **Ejemplo:** Gas de partículas 2D. Rotación y traslación. Coeficiente de restitución y fuerzas de fricción.
[Taller 1, Ejercicio 5: Una pila de arena 2D.](#)
- (Mar06) *YADE* Instalación, diseño y funcionamiento. Un ejemplo sencillo con esferas. *Optimizaciones:* Zonas y listas de Verlet.
[Taller 1, Ejercicio 6: Segregación con YADE.](#)
- (Mar08) *Rotación 3D.* Ángulos de Euler, ecuaciones de Euler, cuaterniones. Algoritmos: Direct Euler y SPIRAL. Rotación de un trompo pesado.
- (Mar20) *Fracturas.* Fracturas con resortes. Un ejemplo (La guadua). Fuerzas de vigas (Pórticos). Implementación 2D en código propio. Implementación 3D con **YADE**. Criterios de fractura, strain energy field. Polígonos, poliedros y esferopoliedros (**MechSys**) Multiesferas (**YADE** y **MERCURY-DPM**).

(Mar13) **Presentación del Taller 1.**

(Mar16, Sábado) ----- **PRIMER PARCIAL** -----

Generadores Aleatorios (1 clase)

- (Mar22) **Generadores Aleatorios:** generadores uniformes. RAN2. Método de la integral inversa. Distribuciones exponencial y gaussiana. Método del rechazo. **Aplicaciones:** Interacción radiación-materia. Cálculos de dosis por Monte Carlo. Modelos de agentes económicos.
Taller 2, Ejercicio 1: Modelos cinéticos de transacciones comerciales.

Semana Santa (Mar23-31)

- (Abr03) **PRIMERA ENTREGA DEL PROYECTO: Definición del problema, estado del arte, objetivos, metodología.**

Dinámica Browniana (1 clase)

- (Abr05) **Dinámica Browniana** Qué es difusión? Primera y segunda leyes de Fick. Random Walk y Difusión. Dinámica Browniana. Termostato de Van Gunsteren y Berendsen.
Taller 2, Ejercicio 2: Dinámica Browniana: Simulación de un motor de Stirling con una sola partícula.

Autómatas Celulares y Modelos de Lattice-Boltzmann (7 clases)

- (Abr10) **Introducción a los Autómatas Celulares.** Definición. Autómatas sencillos: LIFE, reglas de mayoría, Bucle de Langton. Ejemplos de aplicaciones: Tráfico Vehicular.
- (Abr12) **Lattice Gases y Autómatas de Difusión:** Lattice Gases. Difusión 1D Expansión de Chapman-Enskog. Difusión 2D y 3D. Sinapsis por GABA.
Taller 2, Ejercicio 3: Un autómata de difusión 1D.
- (Abr17) **Introducción a Lattice-Boltzmann:** ecuación de transporte de Boltzmann, expansión de Chapman-Enskog y leyes de conservación. Tensores diagonales (ondas), simétricos (fluidos) y antisimétricos (campos electromagnéticos).
- (Abr19) **Implementación de un BGK para ondas 2D.** Un corcho oscilante en un estanque.
Taller 2, Ejercicio 4: Simulación de una lente y un espejo por Lattice-Boltzmann.
- (Abr24) **Lattice-Boltzmann BGK para tensores simétricos:** Tensores simétricos. Ejemplo: Fluidos no viscosos y ecuación de Euler.
- (Abr26) **Lattice-Boltzmann para fluidos viscosos:** Esfuerzo viscoso. Forzamientos: perfil de Poiseuille. Técnicas para grandes números de Reynolds: GLBK, Entrópico y grillas alternadas. Frontera inmersa.
Taller 2, Ejercicio 5: Las fuerzas sobre un cilindro en régimen de Von Karman.
- (May03) **Lattice-Boltzmann para tensores antisimétricos:** Sistemas 3D. Electrodinámica.
- Taller 2, Ejercicio 6: Simulación del efecto skin por Lattice-Boltzmann.
- (May08) **SEGUNDA ENTREGA DEL PROYECTO: Resultados Parciales**

– (May15) **Presentación del Taller 2.**

– (May18) ----- **SEGUNDO PARCIAL** -----

Lattice-Boltzmann con CUDA y Programación Paralela (4 clases)

- (May10) **Conceptos básicos de CUDA:** Conceptos básicos. Mi primer programa en CUDA: Sumar dos vectores.
- (May17) **LB para ondas en CUDA:** Lattice-Boltzmann 2D para ondas en CUDA.
- (May22) **Fluidos en CUDA:** Otros elementos de CUDA: memoria compartida, sincronización. Algoritmos de computación en paralelo: Scan, Compact.
- (May24) **Campos EM en CUDA:** Otros elementos de CUDA: memoria compartida, sincronización. Algoritmos de computación en paralelo: Scan, Compact.
- (May29) **Otros elementos en CUDA:** memoria compartida, sincronización. Algoritmos de computación en paralelo: Scan, Compact.
- (May31) **Otros Modelos de Lattice-Boltzmann:** Lattice-Boltzmann como cuadraturas de Gauss. LBM para Capilaridad, Ondas y difusión sobre superficies curvas.
- (Jun03 y Jun05) **ENTREGA FINAL DEL PROYECTO: Presentación de Resultados y Conclusiones**

Calificación

Evaluación	Fecha entrega	Porcentaje
<i>Taller 1:</i> Runge-Kutta y Elementos Discretos	Mar13	14%
<i>Taller 2:</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann	May15	14%
<i>Primer Parcial:</i> Elementos Discretos	Mar16	22%
<i>Segundo Parcial:</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann	May18	22%
<i>Proyecto Final</i> <ul style="list-style-type: none">• Planteamiento del Problema• Resultados Parciales• Entrega Final	Abr03 May08 Jun03 y 05	4% 4% 14%
<i>Quices</i>		6%
TOTAL		100%

Observaciones:

- **El horario de atención** es los miércoles y viernes de 18:00-19:00 a continuación de la clase.
- **Los parciales son individuales.** Al inicio se da un problema, y al finalizar las tres horas deben hacer un primer envío, que corresponde al 80% de la nota. Antes de la medianoche del día siguiente (es decir, antes de las 11:59pm) se puede realizar un segundo envío, que corresponde al 20% restante. Sin este segundo envío, el primero corresponde a la totalidad de la nota.
- **Los parciales se realizarán en la fecha acordada.** Si un estudiante no puede presentar el parcial, el supletorio se realizará el miércoles de la siguiente semana en el horario de atención. Si el estudiante presenta excusa, la calificación será sobre 5.0. De lo contrario,

será sobre 4.0. Luego de eso, ya no habrá posibilidad de presentar supletorio.

- Los talleres se realizan en grupos de siete (7) integrantes, y la calificación incluye dos partes: 50% una entrega escrita y 50% una presentación oral.
 - La parte oral corresponde a la exposición de uno de los problemas. Para ello, cada grupo cuenta con 12min, y debe preparar las diapositivas correspondientes (en PowerPoint, Keynote, Latex, o similares). La exposición se realiza de la siguiente manera: El día de la exposición, cada grupo selecciona con una balota al azar el problema que expone. También al azar se selecciona el integrante del grupo que lo expondrá. La nota que obtenga en la exposición ese integrante será la nota de todo el grupo.
 - La parte escrita debe entregarse una por grupo, en formato .pdf, y puede corresponder al .pdf de la exposición que realizarán. Sólo se podrán enviar desde el correo institucional de uno de los miembros del grupo al correo electrónico jdmunozcsimulacion@gmail.com hasta las 4:00pm de la fecha límite establecida para su entrega. Todo taller que se envíe en fecha posterior, o desde otro correo que no sea el institucional del estudiante, o a otro correo que no sea el señalado arriba, o en formato diferente al .pdf NO SE GARANTIZA QUE SEA CALIFICADO. Además, enviar el trabajo al correo señalado arriba y conjuntamente a otro correo del profesor (incluido su correo institucional y su correo personal) generará un posible descuento de 0.4/5.0 en la nota del taller.
 - Si un estudiante no asiste a la sesión de exposiciones, tendrá que presentar los ejercicios a mano él solo en la semana siguiente en horario de atención, escogiendo al azar uno de los problemas, y exponiéndolo en la oficina del profesor.
 - Si un grupo desea mejorar su nota de exposición, lo puede hacer la semana siguiente en el horario de atención a estudiantes, pero su calificación será sobre 4.2.
- El proyecto final se realiza por grupos, al igual que los talleres, y consiste en aplicar lo aprendido para modelar una situación real de elasticidad o fluidos (utilizando desarrollos analíticos, experimentos y/o simulaciones numéricas) y comprobando las predicciones de su modelo. El proyecto se puede escoger de la lista que el profesor brinda, o propuesto por el mismo grupo, luego de discutirlo con el profesor. Cada entrega se califica 100% de la presentación oral— que también deberán enviar como .pdf —, y se regirá por las mismas reglas de entrega y exposición que los talleres.
 - En la primera entrega (cuya presentación oral será de 12min por grupo), cada grupo presenta el tema, su justificación y los antecedentes, y define qué va a hacer y cómo lo va a hacer. Para ello, cuentan con el apoyo parcial del material que el profesor les ha brindado bajo demanda en las horas de atención.
 - En la segunda entrega (cuya presentación oral será de 12min por grupo), cada grupo presenta avances y resultados parciales, se brinda asesoría y se corrigen o modifican los objetivos, si es necesario.
 - En la entrega final (cuya presentación oral será de 20min por grupo), cada grupo presentará el problema, su desarrollo y los resultados obtenidos.

El objetivo del proyecto es ser capaces de modelar y estudiar un fenómeno real utilizando las técnicas de Elementos Discretos y/o Autómatas Celulares y Modelos de Lattice-Boltzmann, pero también el desarrollar trabajo colaborativo, aprender a trabajar en grupo y lograr que todos en el grupo de trabajo aporten en igual medida a la ejecución de proyecto.

Bibliografía

1. D.C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd Ed. (Cambridge, Cambridge University Press, 2004).
2. M.P. Allen y D.J. Tidesley, *Computer Simulations of Liquids*, (Oxford University Press, 1987).

3. W.H. Press, S.A. Teulosky, W.T. Vetterling y B.P. Flannery, *Numerical Recipes. The art of scientific computing*, 3rd. Ed. (New York, Cambridge University Press, 2007).
4. T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. Magnus Viggen, *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*, (Springer, Graduate Texts in Physics, 2017).
5. S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond (Numerical Mathematics and Scientific Computation)*. (Oxford, Claredon Press, 2001).
6. B. Chopard y M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, (Cambridge, Cambridge University Press, 1998).
7. Udacity. *Introduction to Parallel Programming with CUDA*. <https://www.udacity.com/course/intro-to-parallel-programming--cs344>
8. YADE documentation: <https://yade-dem.org/doc/> .
9. H. Gould y J. Tobochnik. *Computer Simulation Methods*. Partes 1 y 2. (Addisson-Wesley, New-York, 1988).