

# Simulación de Sistemas

## Trabajo Práctico Nro. 1: Búsqueda Eficiente de Partículas Vecinas

Sea un área cuadrada de lado  $L$  que contiene  $N$  partículas con radios distintos de cero y con un radio de interacción ( $r_c$ ).

1- Implementar el algoritmo "Cell Index Method" que tome como input: las posiciones y radios de  $N$  partículas y los parámetros  $N$ ,  $L$ ,  $M$  y  $r_c$  (ver punto 5). Las  $N$  partículas deben ser generadas en forma aleatoria dentro del área de lado  $L$ .

Y como output:

- Una lista tal que para cada partícula indique cuales son las vecinas que distan menos de  $r_c$ .
- El tiempo de ejecución.
- Además se debe generar una figura que muestre las posiciones de todas las partículas, y que identifique una de ellas (pasada como input) de un color y sus vecinos correspondientes de otro color.

Las distancias entre partículas deben medirse borde a borde, es decir, considerando el radio ( $r$ ) además del centro de masa de las mismas. Cómo se modifica el criterio  $L/M > r_c$  cuando la partícula no es puntual, es decir tiene un radio ( $r > 0$ ) ? (podría suceder que el centro esté en una celda no vecina pero el borde sí esté en la vecina...?).

Como parámetro adicional considerar dos versiones del algoritmo:

- a- Sin condiciones periódicas de contorno (considerando distancia a los bordes del área: paredes).
- b- Con condiciones periódicas de contorno.

2- Para distintos inputs estudiar la eficiencia del algoritmo (medida en tiempo de cálculo) en función de  $N$  y del número de celdas ( $M \times M$ ). Comparar con el método de fuerza bruta que mide las distancias entre todos los pares posibles de partículas. Considerar  $L=20$ ,  $r_c=1$  y  $r=0.25$ .

3- Hallar un criterio para determinar el óptimo número de celdas ( $M \times M$ ) teniendo en cuenta la densidad ( $N/L^2$ ) de un sistema. Considerar  $L=20$ ,  $r_c=1$  y  $r=0.25$ .

4- Demostración en vivo.

Se realizarán en clase, a medida que los grupos vayan finalizando el T.P. dentro de las fechas estipuladas (ver 7).

Se deberán generar nuevas partículas y grilla según los parámetros ( $N$ ,  $L$ ,  $M$  y  $r_c$ ) para verificar el funcionamiento del algoritmo usando el criterio hallado en 3. También se variará  $M$  para verificar que el hallado automáticamente sea el óptimo. Para la demostración se usarán los outputs descriptos en el punto 1.

5. Formato tentativo de los archivos:

- Input:

En general para una simulación, el sistema se puede describir con 2 archivos de texto: el estático y el dinámico (consideraremos a estos archivos como el Input para el CIM).

Estático:

- $N$  (Heading con el Nro. total de Partículas)
- $L$  (Longitud del lado del área de simulación)
- $r_1$   $pr_1$  (radio y propiedad de la partícula 1)
- $r_2$   $pr_2$  (radio y propiedad de la partícula 2)

....  
 $r_N$   $pr_N$  (radio y propiedad de la partícula N)

Dinámico:

$t_0$  (tiempo)  
 $x_1$   $y_1$   $vx_1$   $vy_1$  (partícula 1)  
 $x_2$   $y_2$   $vx_2$   $vy_2$  (partícula 2)  
....  
 $x_N$   $y_N$   $vx_N$   $vy_N$  (partícula N)  
 $t_1$  (tiempo)  
 $x_1$   $y_1$   $vx_1$   $vy_1$  (partícula 1)  
 $x_2$   $y_2$   $vx_2$   $vy_2$  (partícula 2)  
....  
 $x_N$   $y_N$   $vx_N$   $vy_N$  (partícula N)

Otra forma de imprimir archivos dinámicos, puede ser generando un archivo por cada tiempo, el cual deberá ser nombrado con las cifras numéricas del tiempo correspondiente (por ejemplo: 1.txt; 5.txt; 10.txt; 15.txt; ...., si se guardan datos cada 5 unidades de tiempo).

A los fines del presente trabajo se considera un único tiempo ( $t_0$ ) ya que el método de detección de vecinos se aplica en un determinado estado del sistema en un dado instante.

- Output:

[id de la partícula "i" id's de las partículas cuya distancia borde-borde es menos de  $r_c$ ].

...

6- Para visualizar las partículas coloreadas se recomienda usar alguna herramienta existente que puede ser independiente del código implementado, como por ejemplo: Ovito ([www.ovito.org](http://www.ovito.org)), Matlab, Octave, Origin, Python, etc.

7- Fecha de Entrega:

Las fechas para la demostración en vivo descrita en el punto 4 se realizará durante las clases de los días 08/08/2022 y 12/08/2022.