Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 5: Medios Granulares y Dinámica Peatonal
(Enunciado publicado en CAMPUS el 21/10/2022)

Elegir uno de los dos problemas enunciados más abajo para resolver utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal y presentar.

Las simulaciones tendrán un *dt* fijo e intrínseco de la simulación, además se puede considerar un dt_2 para imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) para luego realizar análisis y animaciones con una velocidad adecuada. Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma la velocidad de la animación no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La entrega del T.P. consiste en:

a- Presentación de 15 minutos de duración (tipo powerpoint) con las secciones y el formato indicados en la guía de presentaciones.

b- Animaciones de sistemas característicos. Colorear a las partículas con una escala continua según alguna variable relevante (presión, velocidad, estado, radio, densidad, etc.).

c- El documento de la presentación en formato pdf que contenga resultados, imágenes, parámetros correspondientes y las respuestas a lo pedido en cada problema. El archivo *.pdf a entregar NO debe contener las animaciones, pero sí algún fotograma representativo de las mismas y un link explícito (a youtube o vimeo) para visualización on-line.

d- El código fuente implementado.

<u>*Fecha y Forma de Entrega:*</u>

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser presentados a través de campus, antes del día 07/11/2022 a las 10:00 hs. Los Archivos deben nombrarse de la siguiente manera:
"**SdS-TP5-2022Q2GXX_Presentación**" y "**SdS-TP52022Q2GXX_Codigo**", donde XX es el número de grupo.
Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 07/11/2022.

Problema* 1*: *Medios Granulares - Descarga de un Silo Vibrado*

Simular un medio granular gravitatorio que fluye desde un silo 2D de forma rectangular, como se muestra en la Fig. 1, de ancho W=20 cm y alto L=70 cm con una apertura de salida de ancho D=3 cm sobre la cara inferior. Considerar condiciones de contorno cuasi-periódicas: una vez que las partículas alcanzan (L/10) cm por debajo de la salida (cara inferior del silo), reinyectarlas en una zona superior del silo (y ε [40,70]) con velocidad cero. El silo está vibrado por un forzado externo, lo que significa que todas sus paredes se mueven en conjunto sinusoidalmente en el eje *y* según la ecuación

$$y_v = A \sin(\omega t) \qquad (1)$$

donde y_v son las coordenadas *y* de los vértices de todas las paredes que conforman el silo, *A* la amplitud y ω la frecuencia del forzado externo. El movimiento de las paredes (verticales y horizontales) del silo será indiferente a las fuerzas ejercidas por las partículas sobre las mismas, lo que significa que no se deben resolver las ecuaciones de movimiento para dichas paredes.

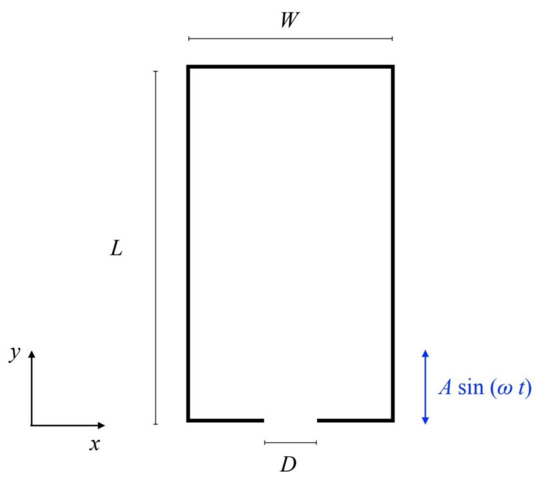

Figura 1: Esquema del silo vibrado.

El medio granular consta de partículas circulares cuyos radios tienen una distribución uniforme en el intervalo r = [0.85 cm, 1.15 cm]. Considerar N=200 partículas, las que deben ser generadas en forma aleatoria sin superponerse dentro del área total del silo, con velocidad inicial cero.
Para el cálculo de las fuerzas entre partículas y de partículas con paredes considerar las expresiones (N.2) y (T.3) de la diapositiva 15 de la Teórica 5. Tomar como constantes k_N = 250 dina/cm; $k_T = 2\ k_N$; y la masa de cada partícula igual a 1 g. (Sistema de unidades CGS.).
Usar como método integrador Beeman para fuerzas que dependen de la velocidad con dt=10^{-3} s.

a) Fijar la amplitud A=0.15 cm y variar la frecuencia para los siguientes valores ω ={5, 10, 15, 20, 30, 50}. Simular T=1000s o los que fueran posible según capacidad de calculo disponible (mas o menos). En una figura mostrar las curvas de descarga (Nro. de partículas que salieron en función del tiempo, las cuales se obtienen del output que guarda sólo los tiempos de salida de cada partícula con la mayor precisión dada por el dt de integración) de todos los casos. A partir de ellas calcular el caudal (Q: nro. de partículas por unidad de tiempo) como la aproximación lineal de las mismas después del transitorio inicial en el que las partículas se amontonan en el fondo del silo. Finalmente, mostrar el observable Q con su error asociado, en función de ω.

b) Para el ω que maximice el caudal, simular otras 3 aperturas D = {4, 5, 6}cm y graficar el caudal con su error asociado vs. el ancho de la apertura para los cuatro valores de D (incluyendo el del punto (a)).

c) Ajustar el parámetro libre de la ley de Beverloo que mejor aproxima los datos obtenidos en el punto (b). Para esto usar los "Conceptos de Regresiones" dados en la Teórica 0.

Problema 2: *Dinámica Peatonal - Targets que evolucionan en el tiempo*

Con la finalidad de implementar métodos de elusión de colisiones en partículas autopropulsadas se propone estudiar un problema ficticio del mundo cinematográfico: "Epidemia de zombies".

Ambos tipo de agentes se encuentran confinados en una sala circular de radio R = 11 m y sin salidas como se muestra en la Fig. 2.

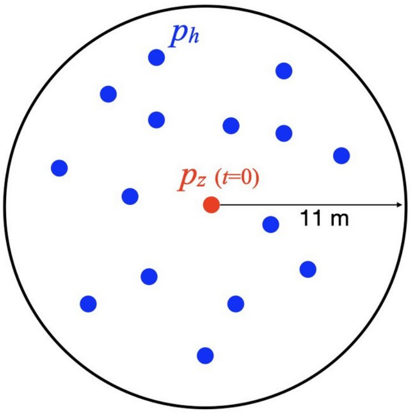

Figura 2: Dominio de simulación de "Epidemia zombie".

Inicialmente se sitúa una p_z en el centro de la sala circular y N_h partículas p_h distribuidas uniformemente (pero sin tocar a otras partículas y a más de 1 m borde a bode de la p_z inicial).

El comportamiento de las p_h es escapar de las p_z eludiendo ademas el contacto con otras p_h y con las paredes. La velocidad deseada de las p_h es v_{dh} = 4 m/s. Si alguna p_{hi} fuera contactada por una p_{zj} entonces, p_{hi} se convierte en p_{zi} luego de 7 s.

El comportamiento de las p_z es como sigue. Las p_z tienen un campo de visión de 4 m, mientras no visualizan a ningún p_h, (distan más de 4 m de cualquier p_h) deambulan hacia objetivos random con velocidad baja ($v_z^{inactivo}$ = 0.3 m/s). Si tienen una o varias partículas p_h a menos de 4 m, entonces se dirige hacia la mas cercana con velocidad v_{dz} (su objetivo o *target* es la posición de la p_h mas cercana) hasta que la contacta o aparezca otra p_h mas cercana. Si la contacta, ambas partículas quedan con velocidad cero durante los 7 s que tarda la p_h en convertirse en p_z.

a) Elegir uno de los modelos operativos vistos en la Teórica 6 (CPM o SFM) y basándose en los modelos de elusión vistos en la Teórica 7 y la bibliografía, proponer una heurística que permita ajustar dinámicamente el ángulo del versor de la velocidad deseada en función de las posiciones de las otras partículas según el tipo de partícula (i.e.: según se quiera ir hacia ellas o escapar de ellas). En el caso de las p_h se deberá considerar que la prioridad es escapar de los p_z pero a la vez se debe eludir colisiones con otras p_h y con la pared circular.

b) Variando N_h = {2, 10, 40, 80, 140, 200, 260, 320, ...} (tomar el N_h máximo según velocidad de cómputo) y fijar v_{dz} = 3 m/s. Definir dos observables que caractericen la evolución temporal y el proceso como por ejemplo la velocidad de contagio o la fracción p_z al final de la simulación ($F_z = np_z / N_h$). Para cada N_h repetir las simulaciones y obtener valores medios y desvío estándar de estos observables y graficar estos puntos con barras de error.

c) Fijando N_h = 140 o 200, variar v_{dz} = {1; 1.5; 2; 2.5; 3; 3.5; 4; 4.5 y 5} m/s. Para cada v_{dz} repetir las simulaciones y obtener valores medios y desvío estándar de los observables definidos en (b) y graficar estos puntos con barras de error.

d) (Opcional) Proponer alguna variación al problema y repetir alguno de los estudios (b) o (c). Ejemplos de variación podrían ser variar otros parámetros o incluir nuevos comportamientos como que las p_h puedan atacar y neutralizar a las p_z con alguna probabilidad (de atacar o no y en caso de atacar, con otra probabilidad de éxito).