Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 5: Medios Granulares y Dinámica Peatonal

(Enunciado publicado en CAMPUS el 17/10/2025)

Elegir entre las dos opciones de problemas detalladas mas abajo para implementar, estudiar y presentar utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal. Para ambas opciones, notar que para una eficiente detección de vecinos se puede utilizar el "cell index method".

Las simulaciones tendrán un *dt* fijo e intrínseco de la simulación, en caso de ser necesario (según sea el modelo elegido, número de partículas, tamaño de archivos de output, etc.) 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.

Los entregables del T.P. son:

a- Presentación oral tipo Powerpoint o similar de 13 minutos de duración con las secciones indicadas en el documento ".../Formato_Presentaciones.pdf".

b- El documento de la presentación en formato *.pdf (sin animaciones embebidas, solo links explícitos a youtube o vimeo, por favor no a google drive).

c- El código fuente implementado en un archivo *.zip.
Solo versión final del motor de simulación (Tamaño del archivo del orden de unos pocos kB). No adjuntar en este archivo código de postprocesamiento, ni historial de versiones, ni output de simulaciones, ni figuras, ni resultados, ni otros documentos.

Fecha y Forma de Entrega:

Las presentaciones orales (a) se realizarán durante la clase del día 3/11/2025.
La presentación en pdf (b) y el código fuente (c) deberán ser presentados a través de campus, antes de las 10:00 hs del mismo día. Los Archivos deben nombrarse de la siguiente manera: "**SdS-TP5-2025Q2GXX_Presentación.pdf**" y "**SdS-TP5-2025Q2GXX_Codigo.zip**", donde XX es el número de grupo.

Problema 1: *Dinámica Peatonal, Caminata al Azar.*

Elegir entre los modelos de dinámica peatonal: SFM [1] pero sin fuerza social o AACPM [2].

Simular N agentes peatonales en un dominio cuadrado de lado L=6 m. En el centro se ubica un agente extra que está fijo, es decir no se debe integrar la ecuación de movimiento para esa partícula de radio r = 0.21 m. Inicialmente, las partículas se pueden generar al azar o sobre una grilla hexagonal. Sus velocidades deseadas serán constantes pero con dirección al azar para cada partícula, todas con módulo v_d = 1.7 m/s. El sistema tiene condiciones periódicas de contorno y se muestra un esquema del mismo en la Fig. 1. Para el SFM usar como radio de las partículas una distribución uniforme: $r \in$ [0.18 m, 0.21 m]. Para AACPM usar r_{min} = 0.10 m, r_{max} = 0.21 m. Guardar el estado del sistema cada $dt2$ y además una lista con los tiempos con la mayor precision posible (dt) en los cuales suceden contactos únicos entre las partículas móviles y la central quieta.

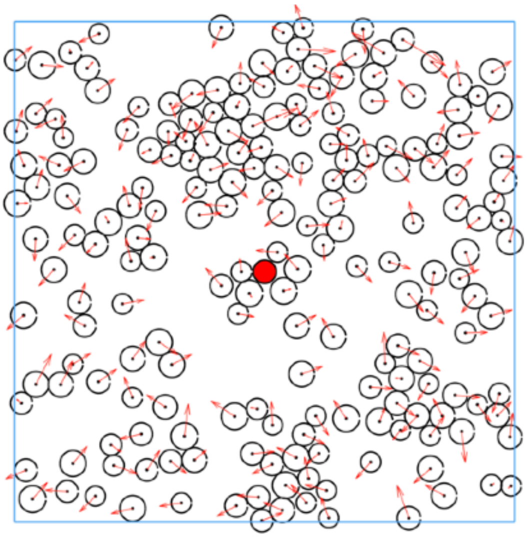

Figura 1: Esquema del sistema a simular en un momento arbitrario.
Las flechas indican los vectores velocidad de cada partícula.

a) Variar como input el número de partículas N desde un sistema diluido hasta uno saturado. Expresar este input como la fracción de área ocupada por partículas:

$$\phi = \frac{\sum_i^N \pi \ r_i^2}{L^2}$$

Estudiar las curvas de contactos únicos de los agentes móviles con el agente fijo en función del tiempo. Para esto las partículas que contactaron con la central una vez no deben ser contadas de nuevo hasta que no salgan por el borde y reingresen al sistema por las condiciones periódicas de contorno. La simulación debe durar lo suficiente hasta llegar a un crecimiento constante de estas curvas. Luego calcular las pendientes de las mismas (*Q: scanning rate*).

b) A partir de los tiempos de contactos, estudiar la distribución de tiempos entre contactos:
$\tau_i = t_{i+1} - t_i$, donde t_i son los tiempos en los cuales ocurrieron los contactos únicos. Determinar si estos tiempos siguen una distribución tipo ley de potencias usando el método de la Ref. [3]. Paquetes y funciones que implementan este método se pueden obtener desde:
https://aaronclauset.github.io/powerlaws/
https://github.com/jeffalstott/powerlaw/
Usando la función "plfit" obtener el exponente α y usando "plvar" obtener su incerteza para las barras de error. Graficar α como función de ϕ.

c) Opcional 1: Repetir el estudio anterior (a y b) con una velocidad deseada mayor.

d) Opcional 2: Repetir el estudio anterior (a y b) con un *L* mayor.

Referencias:

[1] Helbing, D., Farkas, I., & Vicsek, T. (2000). Simulating dynamical features of escape panic. Nature, 407(6803), 487-490.

[2] Martin, R. F., & Parisi, D. R. (2024). Anisotropic contractile particle model with avoidance for simulating pedestrian navigation in dilute and dense systems. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 633, 129414.

[3] Clauset, A., Shalizi, C. R., & Newman, M. E. J. (2009). *Power-law distributions in empirical data*. SIAM Review, 51(4), 661–703. doi:10.1137/070710111

Problema 2: *Descarga de Silo Vibrado*

Simular un medio granular gravitatorio que fluye desde un silo 2D de forma rectangular, como se muestra en la Fig. 2, 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), reinsertarlas en una zona superior del silo (y ε [40,70]) con velocidad cero. El piso del silo está vibrado por un forzado externo, lo que significa que solo el piso se mueve sinusoidalmente en el eje y según la ecuación

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

donde y_s es la coordenada y del suelo del silo, A la amplitud y ω la frecuencia angular del forzado externo. El movimiento del suelo 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 el mismo.

El medio granular consta de partículas circulares cuyos radios tienen una distribución uniforme en el intervalo r = [0.9 cm, 1.1 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.1) y (T.1 o T.2) de la diapositiva 15 de la Teórica 5. Tomar como constantes k_N = 250 N/m; $|k_T| = 2\,|k_N|$; la masa de cada partícula es igual a 1 g; y la amplitud A=0.15 cm.

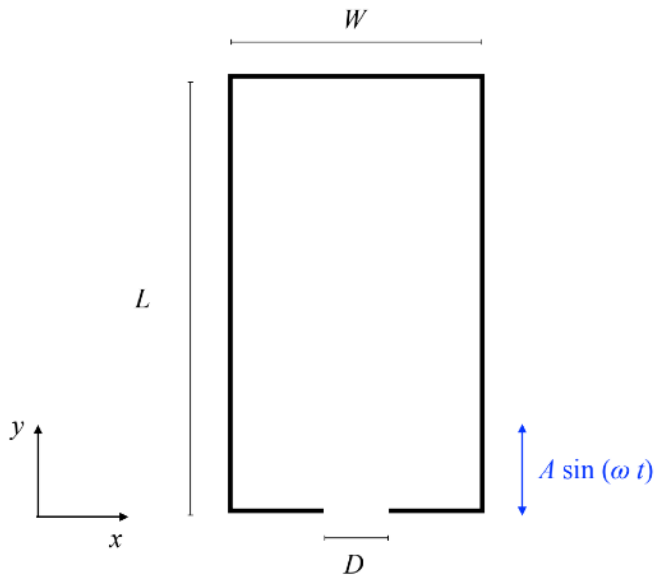

Figura 2: Esquema del silo vibrado.

Usar como método integrador Gear PC o Beeman , ambos para fuerzas que dependen de la velocidad con dt =10^{-4} s.

a) Variar la frecuencia en el rango ω =[400, 600] s^{-1} intentando hallar un máximo del caudal. Simular T=1000s o los que fueran posible según capacidad de calculo disponible (mayor o menor). 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). 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.