



Sistemas Físicos



Sistemas de Muchas Partículas

- Problema de 1 cuerpo



Se dice que el problema es integrable porque usando $F = ma$ tenemos una ecuación diferencial. Todo lo que se pueda resolver analíticamente se dice que es diferenciable, y su solución se puede escribir como una ecuación.

Integrable. Tiene solución analítica.

- Problema de 2 cuerpos



Integrable. Tiene solución analítica.

A partir de 3 cuerpos ya no hay solución analítica. Tenemos las coordenadas X, Y, Z para 3 partículas, que son 9 incógnitas y las ecuaciones que se pueden plantear son 7. Se pueden obtener soluciones aproximadas a las ecuaciones diferenciales.

- Problema de 3 cuerpos



No Integrable. Sin solución analítica.
Se integra numéricamente.

- Problema de N cuerpos



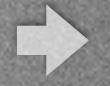
Se integra numéricamente. Dinámica Molecular.

- Si N es muy grande



Mecánica Estadística - Teoría Cinética

Por ejemplo en el caso
de los gases, que hay
 10^{23} partículas por mol



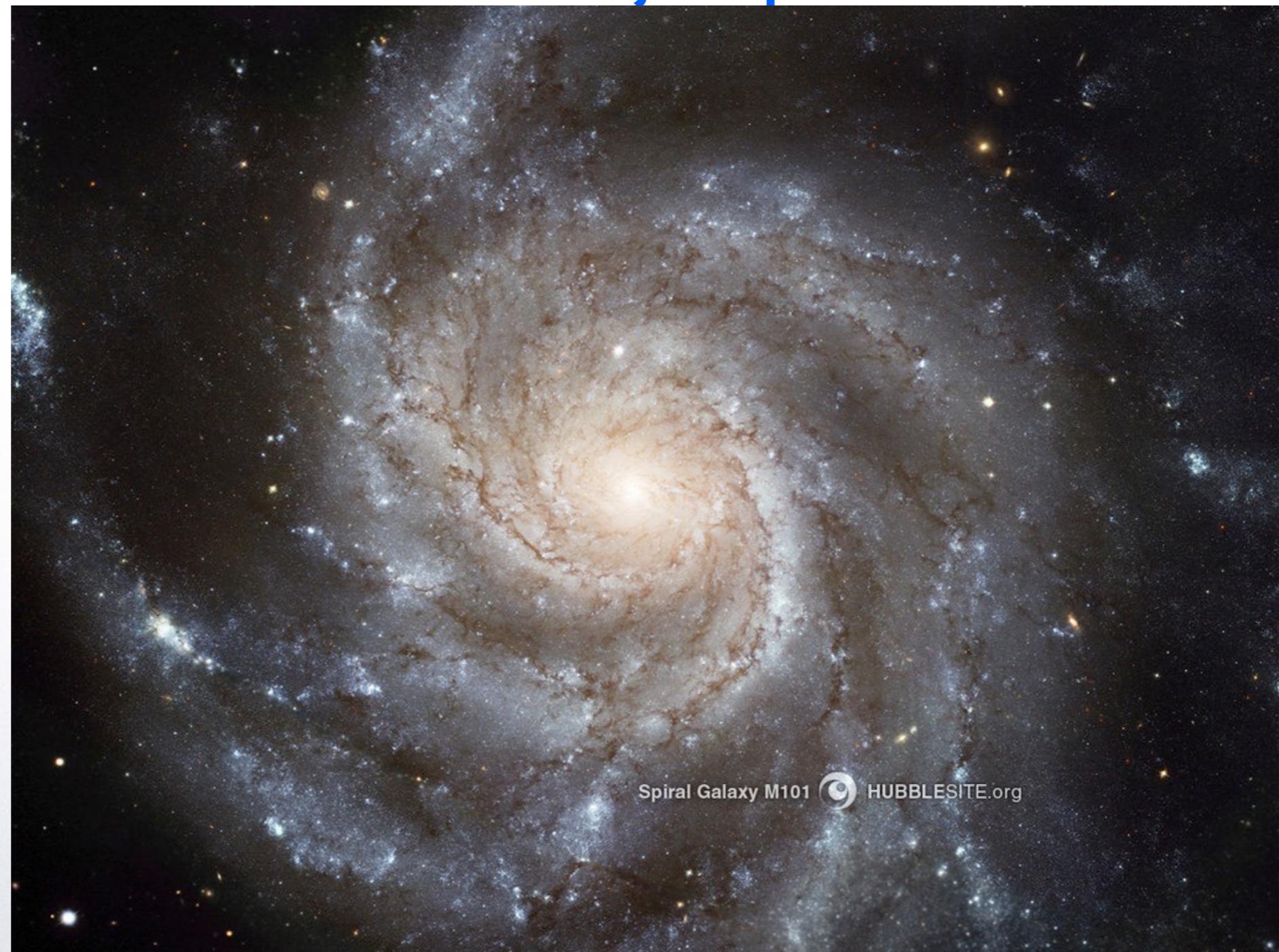
Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Interacción Gravitatoria

Galaxia M101:

170,000 años luz de diámetro.

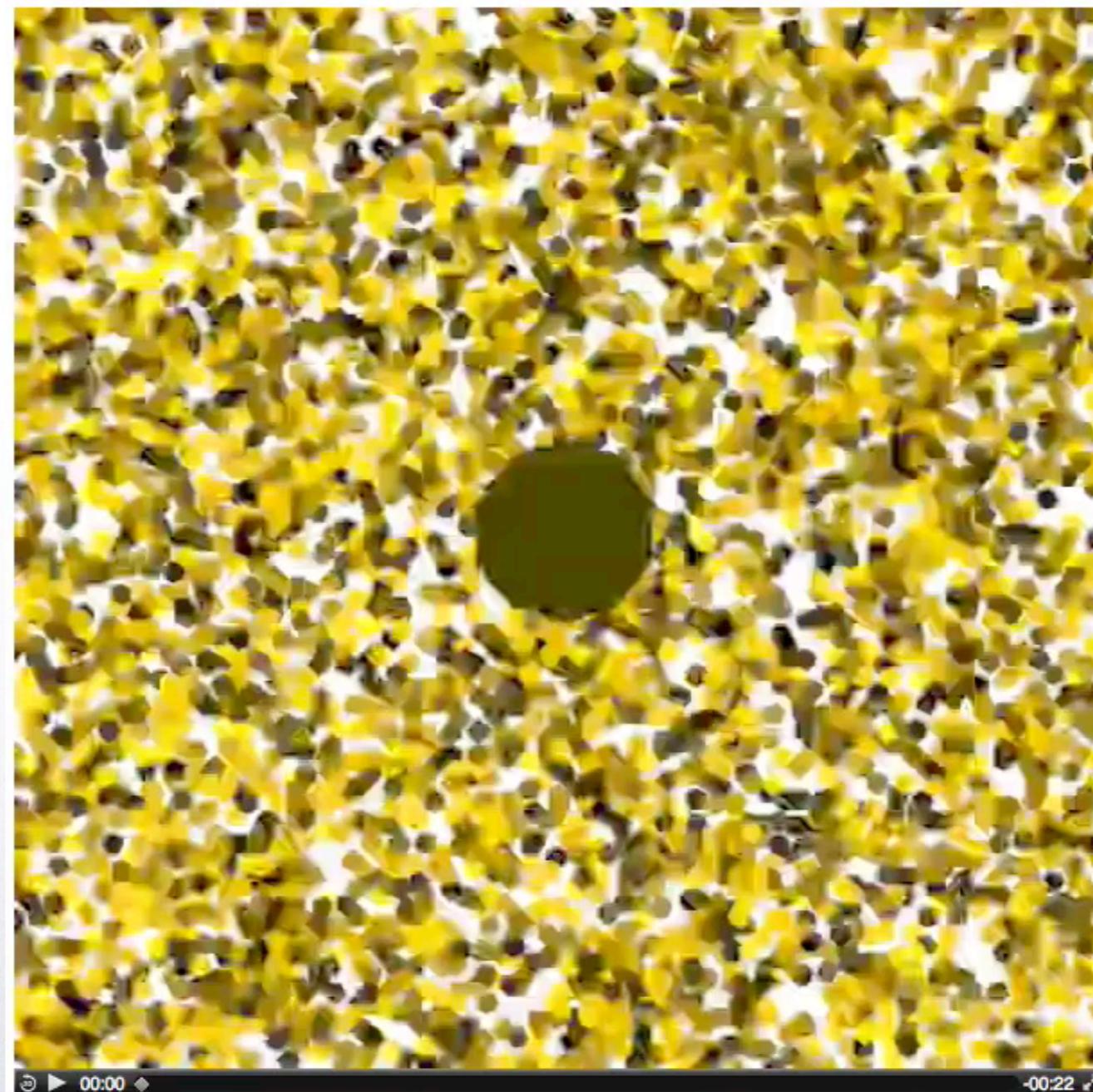
$\sim 10^{12}$ Estrellas.





Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Flujos Granulares:





Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Flujos Granulares:



Hourglass



Materia Activa. Definición:

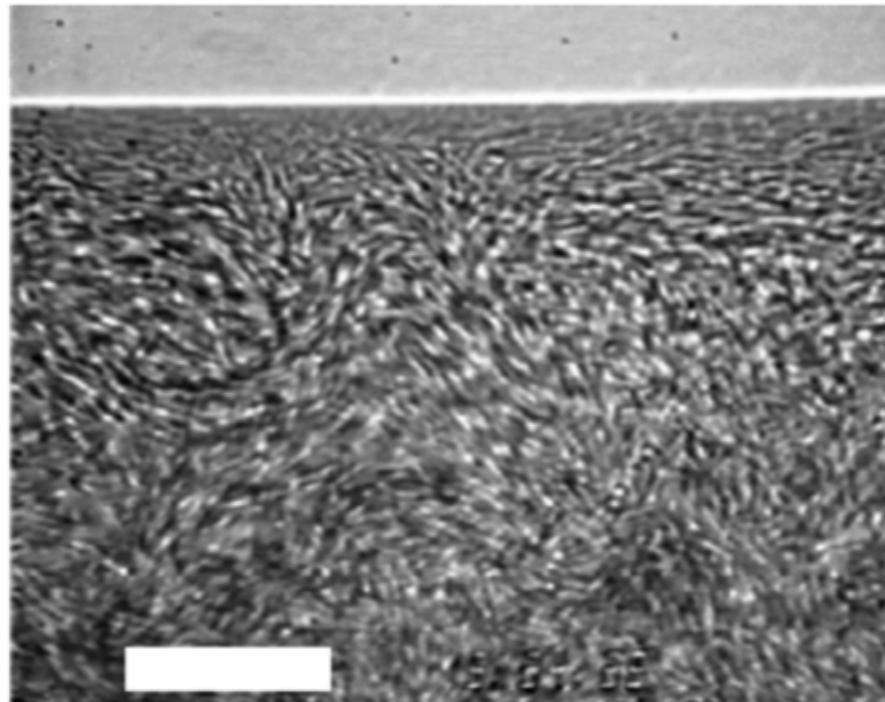
- Está compuesta por unidades **auto-propulsadas**, capaces de convertir energía almacenada o del medioambiente en movimiento sistemático.
- El ingreso de energía al sistema se da en forma local, al nivel de la unidad/partícula/agente y no en forma macroscópica a través de los límites del sistema.
- Propiedades de sistemas fuera del equilibrio:
 - Estructuras emergentes con comportamiento colectivo cualitativamente diferente al de los componentes individuales.
 - Transiciones orden-desorden.
 - Formación de patrones en las escalas mesoscópicos.
 - Etc.



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva

M.C. Marchetti *et al.*: Hydrodynamics of soft active matter



Turbulencia de Bacterias



Cardumen de sardinas



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva : Bandada de Estorninos (Starlings)





Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones Simulados

Social Force Model

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_{GRANULAR} + \mathbf{F}_{SOCIAL} + \mathbf{F}_{DRIVING}$$

El subíndice i es para cada peaton

- Una ecuación diferencial para cada peatón lleva a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas.

- Métodos de Dinámica Molecular

Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones “Freezing by Heating”

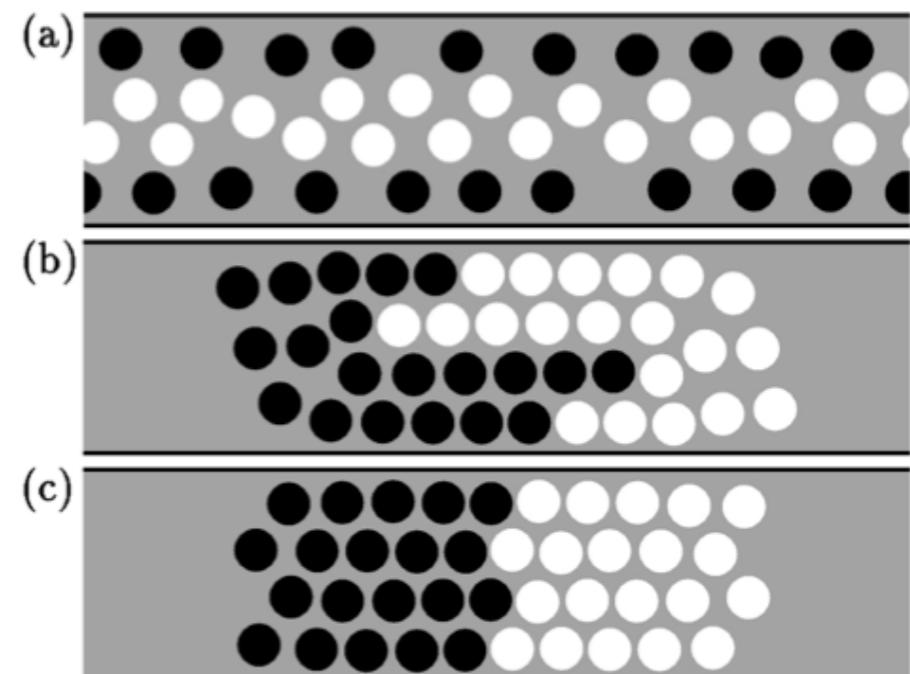
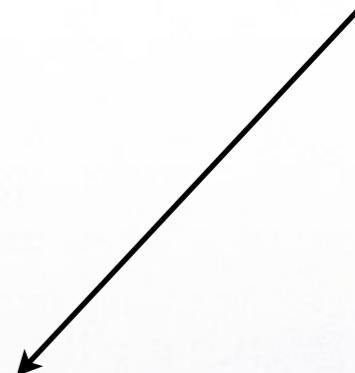


FIG. 1. Simulation of 20 particles moving from left to right (black) which interact with 20 particles moving from right to left (white) on a periodic strip of length $L_x = 20$ and width $L_y = 5$ at different noise intensities. The model parameters are $m = 1$, $D = 1$, $v_0 = 1$, $A = 0.2$, $B = 2$, and $\tau = 0.2$. (a) Lanes of uniform directions of motion forming at small noise intensity ($\theta = 1$). (b) Snapshot of an intermediate jammed state with a rough interface, which is about to form “channels.” (c) Final crystallized state resulting for large noise intensity ($\theta = 1000$).

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_{GRANULAR} + \mathbf{F}_{SOCIAL} + \mathbf{F}_{DRIVING} + \mathbf{F}_{FLUCTUATION}$$



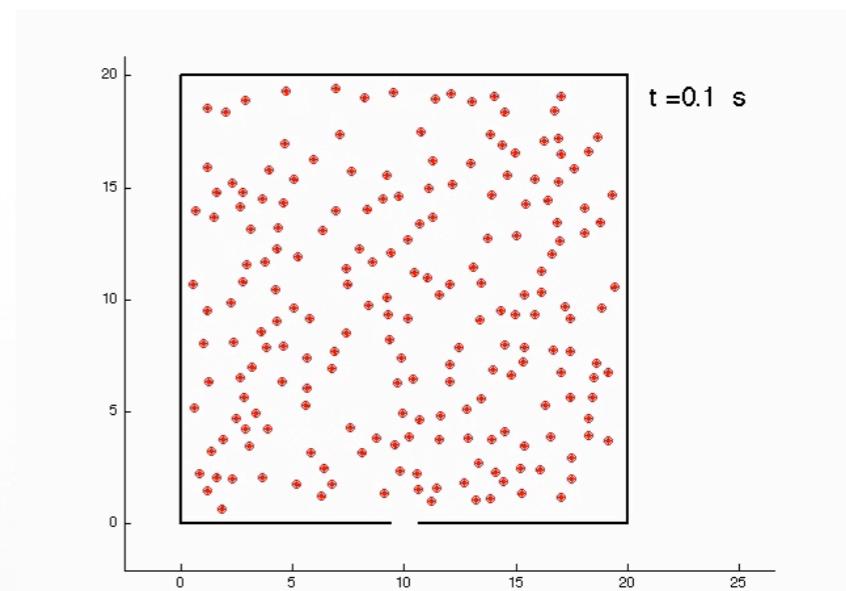
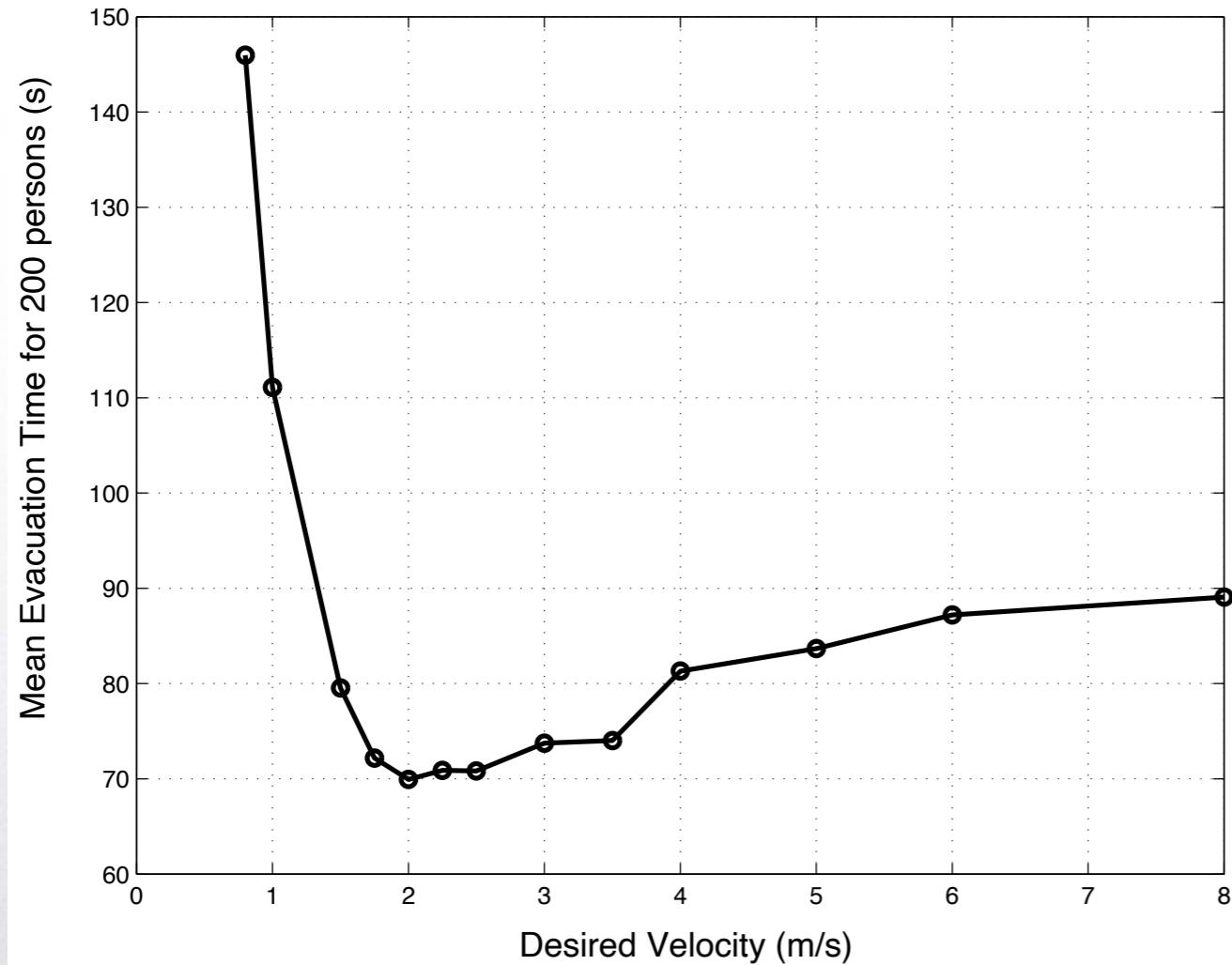
$$\langle \mathbf{F}_{FLUCTUATION} \rangle = 0$$

$$\text{STD} (\mathbf{F}_{FLUCTUATION}) = \theta$$



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones Egoístas “Faster is Slower”



Simulacion de 200 personas que escapan por una puerta muy chica

La conclusion es:

- si las partículas van muy lento hasta la puerta, la evacuación tarda bastante
- a medida que empiezan a ir mas rápido el tiempo disminuye
- cuando van muy rápido, se chocan y el tiempo de evacuación sube

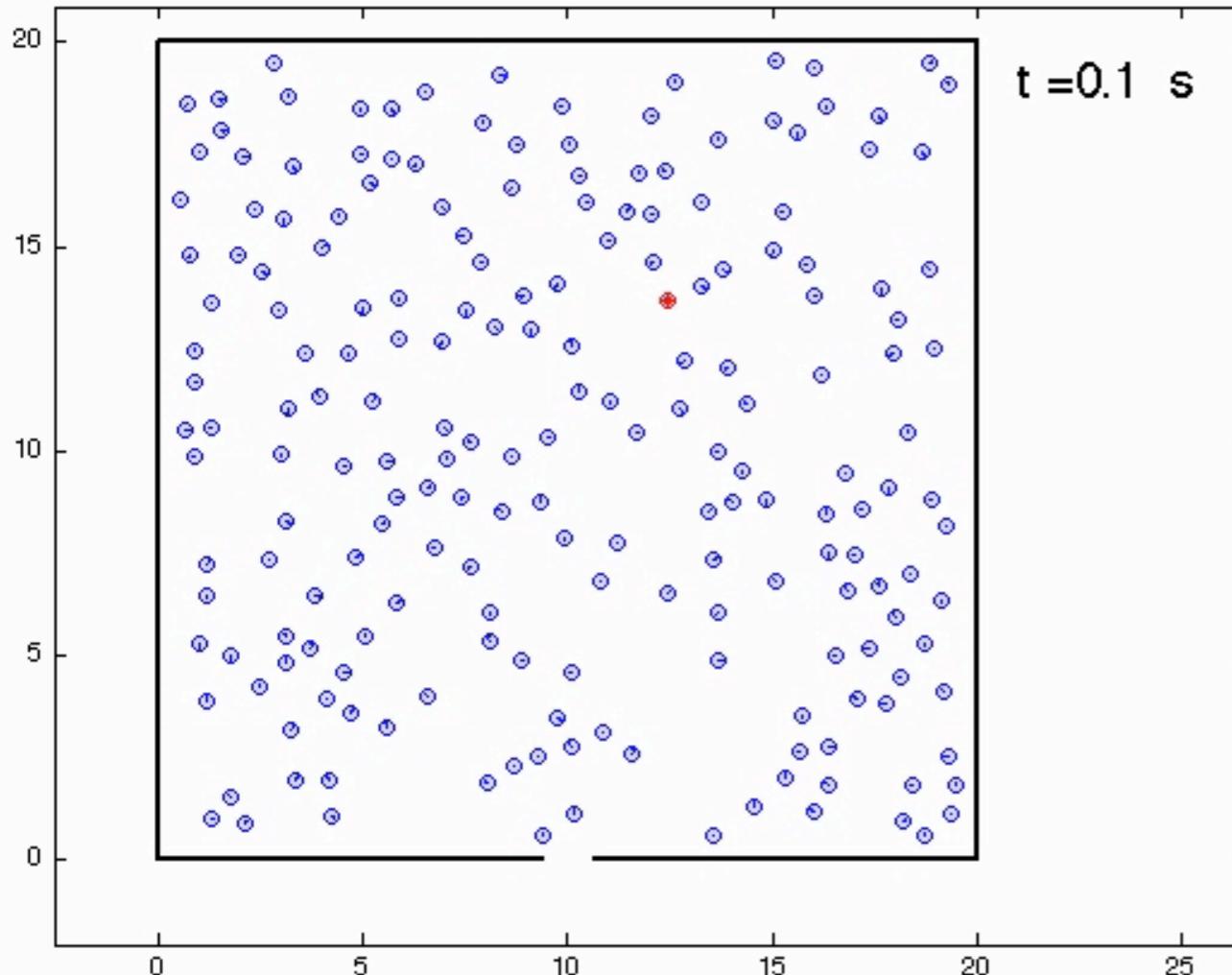


Materia Activa. Ejemplos:

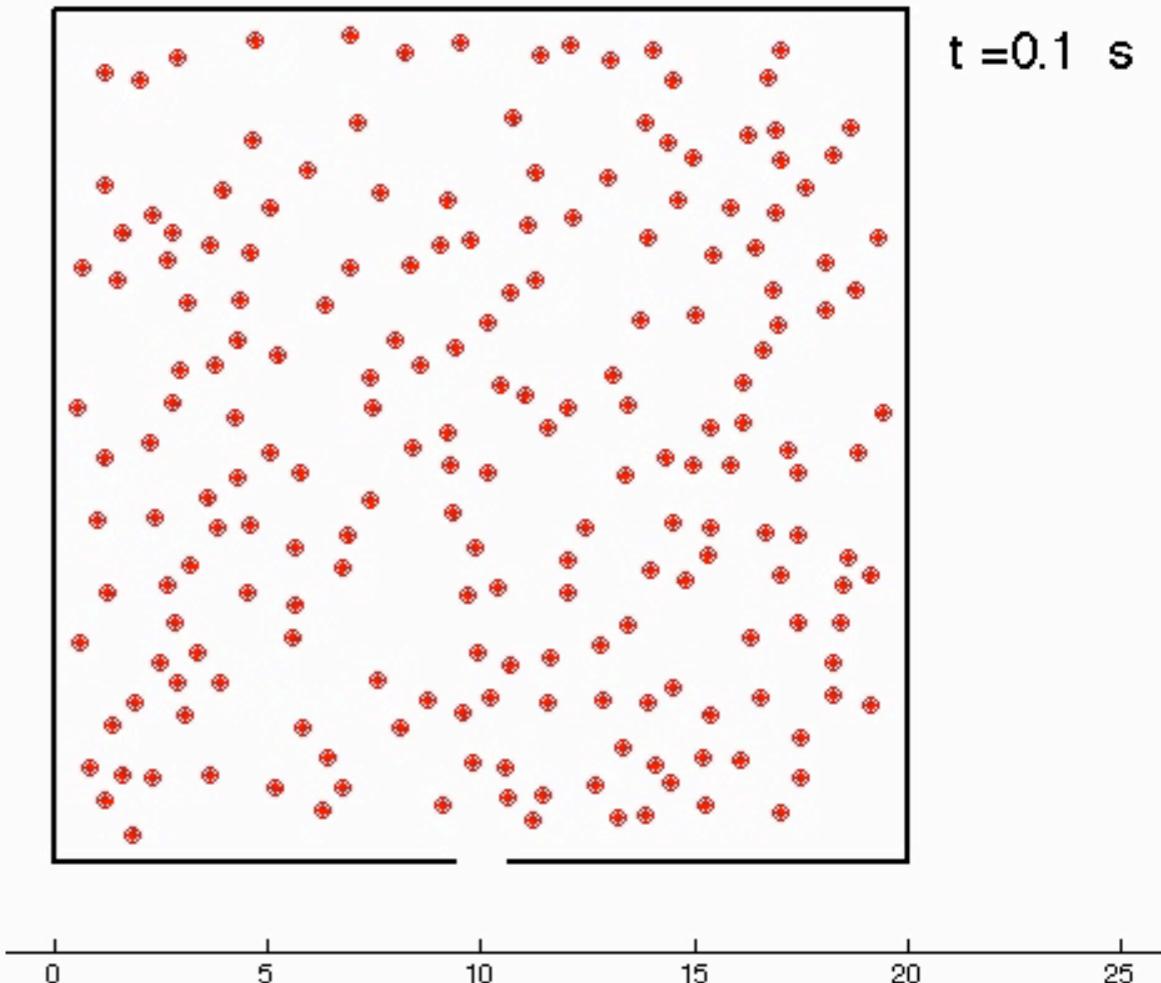
- Materia Viva: Hormigas - Egreso ante Emergencia

En este experimento se concluyo que las hormigas se comportan de manera menos egoista (porque no intentan salir todas al mismo tiempo), y el humano de manera mas individual

100 % Hormigas



100 % Humanos

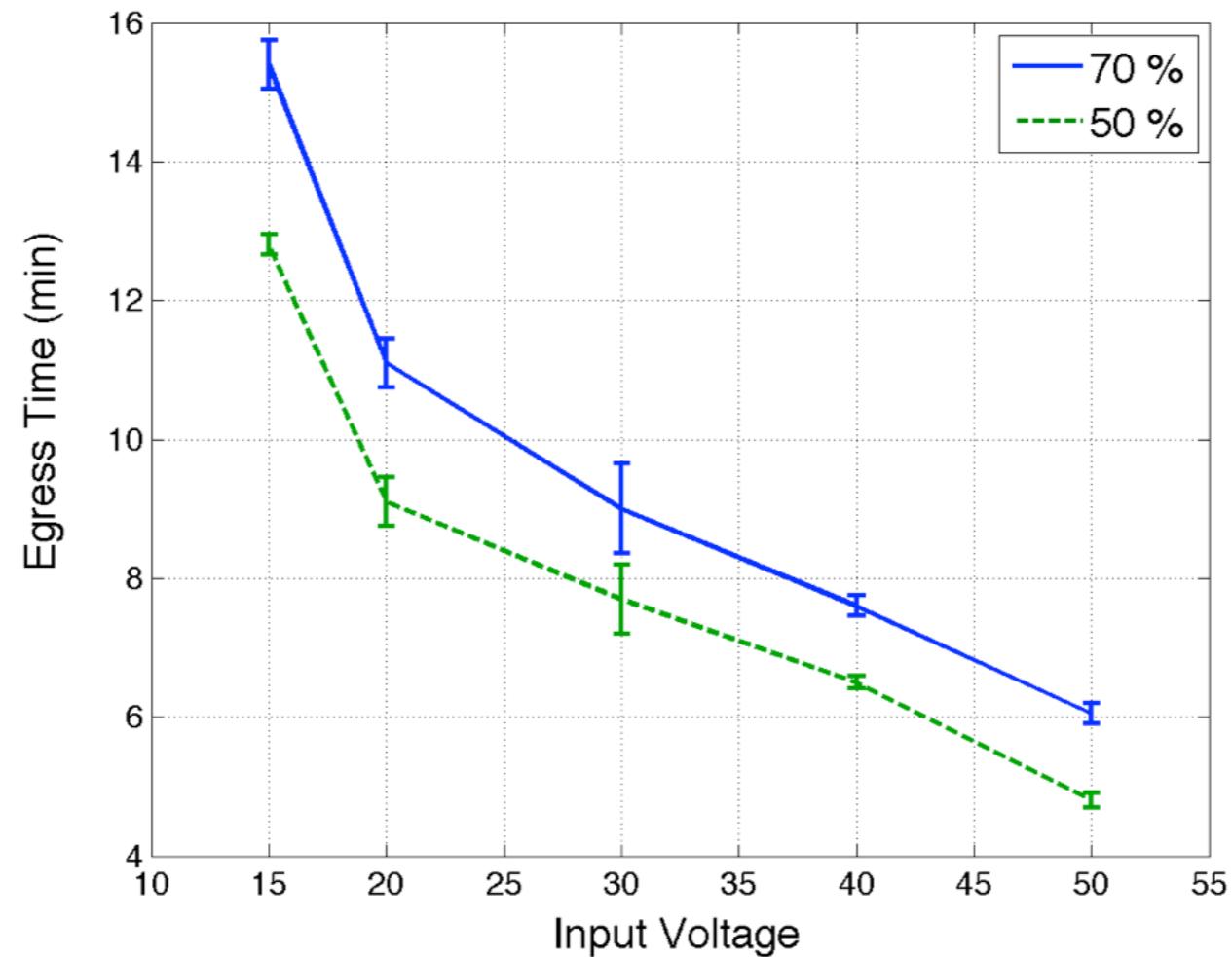




Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Hormigas - Egreso ante Emergencia

Faster is Faster !

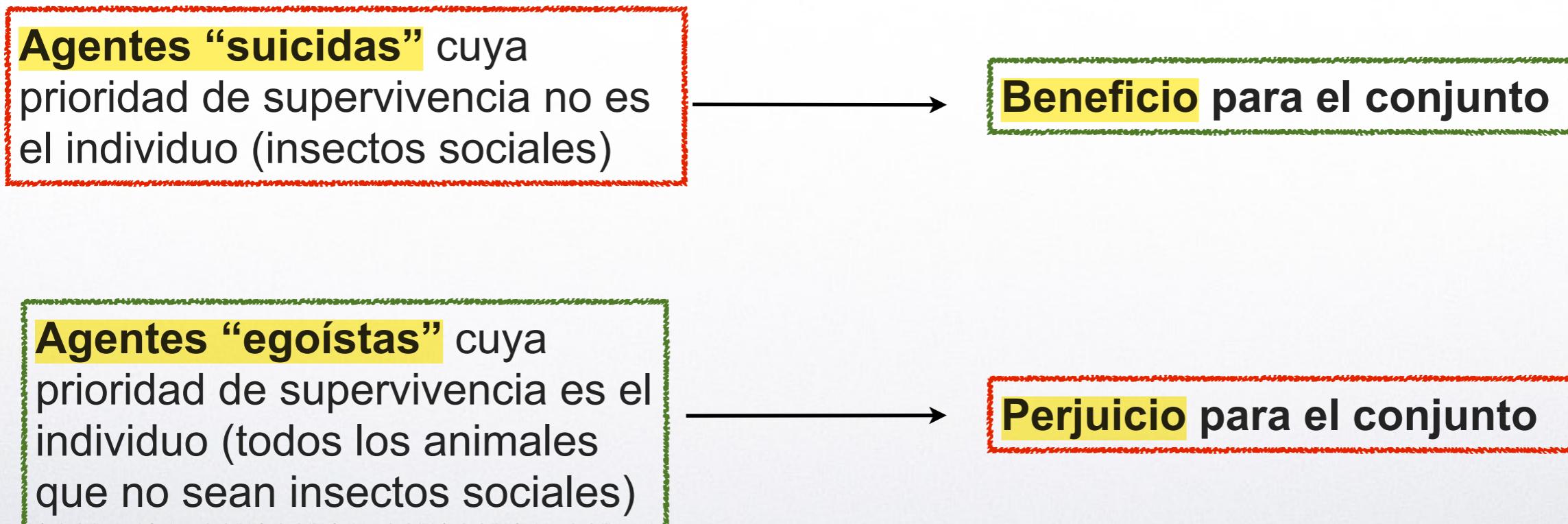


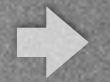


Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Comportamiento Emergente

Caso: egreso por puerta angosta





Concepto de Comportamiento Emergente :

- Muchos agentes simples,
- Interacciones sencillas



- Emergen espontáneamente patrones o comportamientos complejos.
- La escala espacial característica de los mismos son mayores que la escala de 1 agente.

(Ej.: Materia activa, Insectos sociales, Sistema nervioso, etc.)



Materia Viva. Ejemplos:

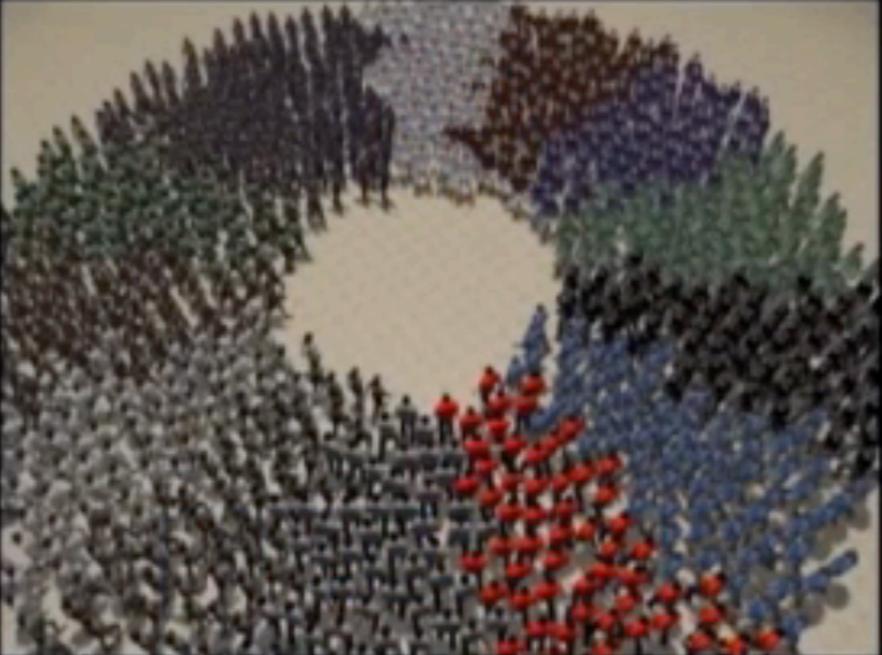
Este modelo es de movimiento 2D, aunque despues se le puede agregar una simulacion 3D

- Materia Viva: Peatones Simulados

Circle – 1000 Agents

Description

1000 Agents in a Circle attempt to get to antipodal position



Intel Quad Core: ~1,000 FPS
Larrabee Simulator [32 Cores]: ~8,000 FPS



Materia Viva. Ejemplos:

- Aplicaciones en Cine





Muchas Partículas Interactuantes

- Todos los sistemas vistos hasta ahora, consisten en partículas que interactúan entre sí de a pares y en función de las distancias.
- Para interacciones de largo alcance se deben calcular las distancias entre todas las partículas.
- Para interacciones de corto alcance solo son relevantes las distancias a los vecinos cercanos.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method (CIM)”

(“Computer simulation of liquids”, Allen & Tildesley, 1987).

Este metodo puede servir por ejemplo para calcular la fuerza entre todas las partículas de un sistema

- Método de Fuerza bruta mide la distancias de todas las partículas con todas las partículas. La complejidad crece $\sim N^2$.

La complejidad es N^2 porque aunque solo me interesan las partículas que están cerca, necesito calcular en primer lugar la distancia entre todas

- Usando el CIM la complejidad crece lineal con N .

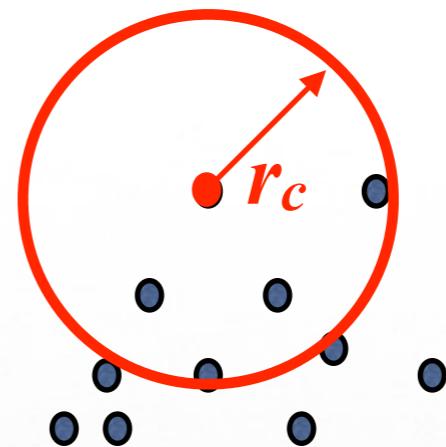


Detección de vecinos

Lista de Vecinos

Qué se quiere averiguar?

La identidad de las partículas que están
a distancia menor a r_c





Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

Idea General:

Consiste en dividir el espacio en celdas, asignar las partículas a las celdas según su ubicación y calcular distancias solo entre partículas de celdas vecinas, y la propia.

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5



Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

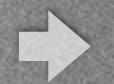
Si el dominio tiene lados de longitud L y $M \times M$ celdas, entonces:

L / M es la longitud del lado de cada celda

(Este M seria incorrecto para el radio r_c) ¿Por qué?

El M es incorrecto porque el algoritmo solo sirve para buscar entre las 8 celdas vecinas





Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

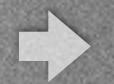
Si disminuyo M :

$L / M > r_c$ (radio de interacción partículas).

Me conviene agarrar el mínimo M tal que se cumpla esa inecuación

(Este M sería correcto para el radio r_c)





Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

Identificar a qué celdas pertenecen todas las moléculas es rápido y se podría hacer en todos los pasos temporales.

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5



Detección de vecinos

Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

Simetría ($d_{ij} = d_{ji}$).

Para cada celda (por ejemplo la 13) mirar solo las 4 celdas vecinas (9,14,19 y 18).

Esto reduce a la mitad el tiempo de cálculo.

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5



Detección de vecinos

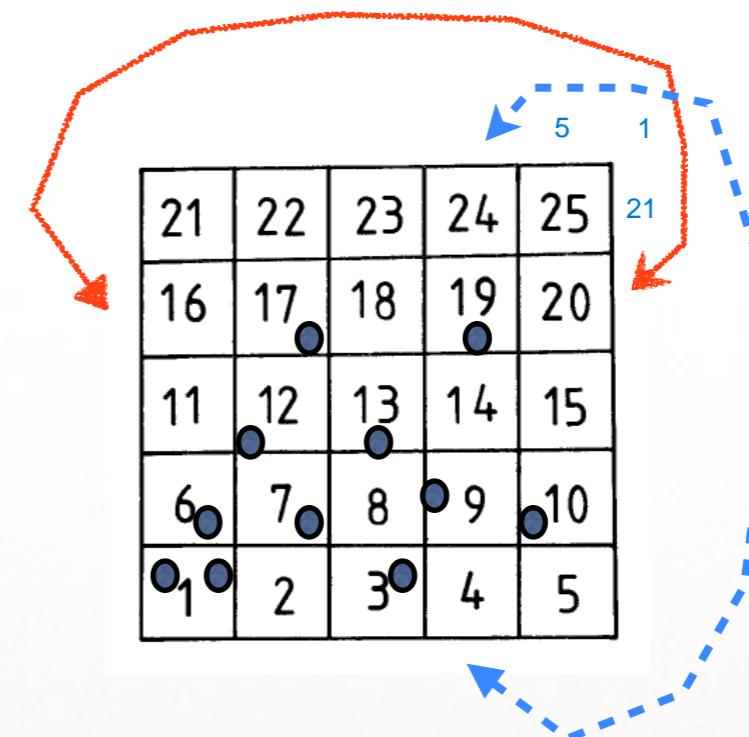
Lista de Vecinos

“Cell Index Method”

Condiciones de Periódicas de Contorno

Por Ej. La partícula en celda 10 es vecina de la que está en la celda 6 y su distancia es del orden de L / M

Topologicamente se puede pensar como plegar el plano sobre una esfera



Me conviene agregar una fila en la parte de arriba y una columna en la parte de la derecha



Detección de vecinos

Lista de Vecinos: *Ejemplo*

[id de la particula “ i ”] [ids de las partículas cuyas distancias son menores que r_c]

1	5, 17, 32
2	-
3	8, 12
4	-
5	1, 6, 25, 104, 67
.....



Trabajo Práctico

Lista de Vecinos

- Implementar el “Cell Index Method”
- Estudiar eficiencia del algoritmo en función del tamaño de las celdas de la grilla.
- Pensar un criterio para definir cantidad y tamaño de celdas en función del área y la densidad de las partículas.
- Para testear :
 - *) generar N partículas con radio en forma random con distribución uniforme dentro del área cuadrada de lado L.
 - *) Se deberá poder determinar los vecinos cuya distancia borde-a-borde sea menos de r_c para L y M dados (N y estos últimos 3 parámetros como inputs).
 - *) Comparar con el método de fuerza bruta (que mide para cada partícula la distancia a todas las demás partículas.)

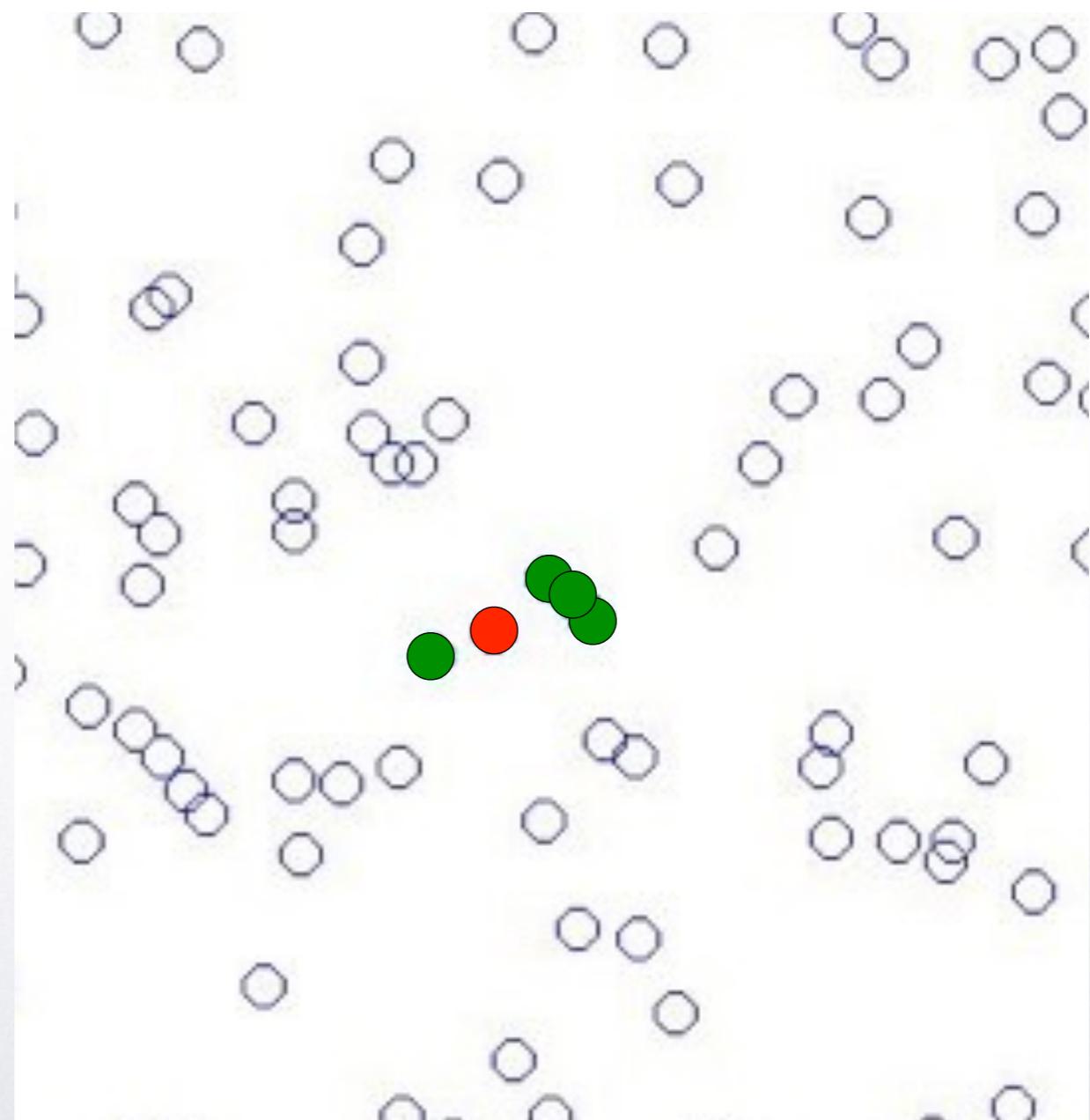


Trabajo Práctico

Lista de Vecinos

- Para Testear:
Visualizador de Vecinos

No es obligatorio pero estaria bueno
poder elegir una particula y que nos
muestre cuales son vecinos





FIN de “Cell Index Method”

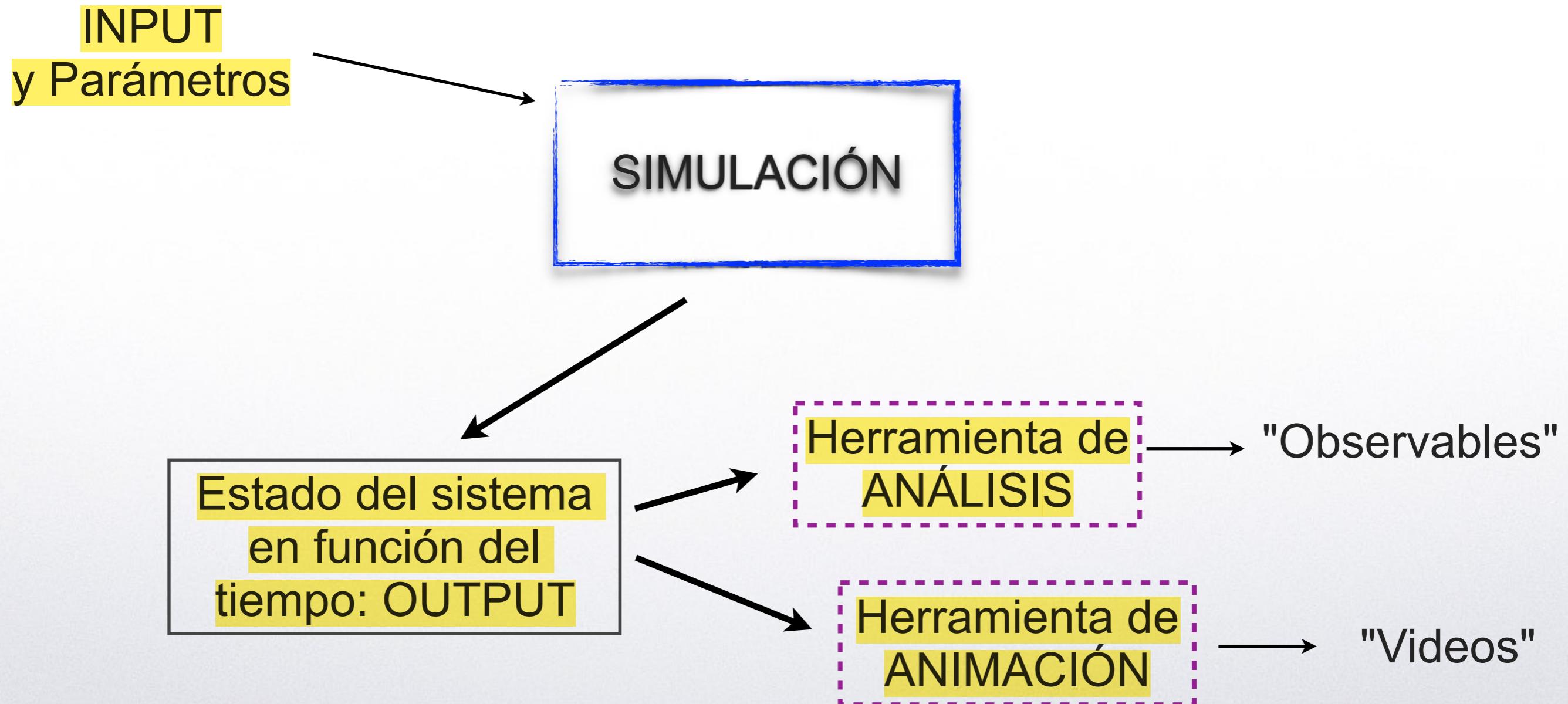


Reglas Generales de Simulaciones



Reglas Generales de Simulaciones

IMPORTANTE . . .

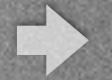




Reglas Generales de Simulaciones

Animaciones

- La animación es un resultado (postproceso) separado de la Simulación
 - *El simulador genera como outputs archivos con posiciones y velocidades.*
 - *Luego el visualizador levanta esos datos y genera la animación (Exportar a un avi.)*



Reglas Generales de Simulaciones

Animaciones

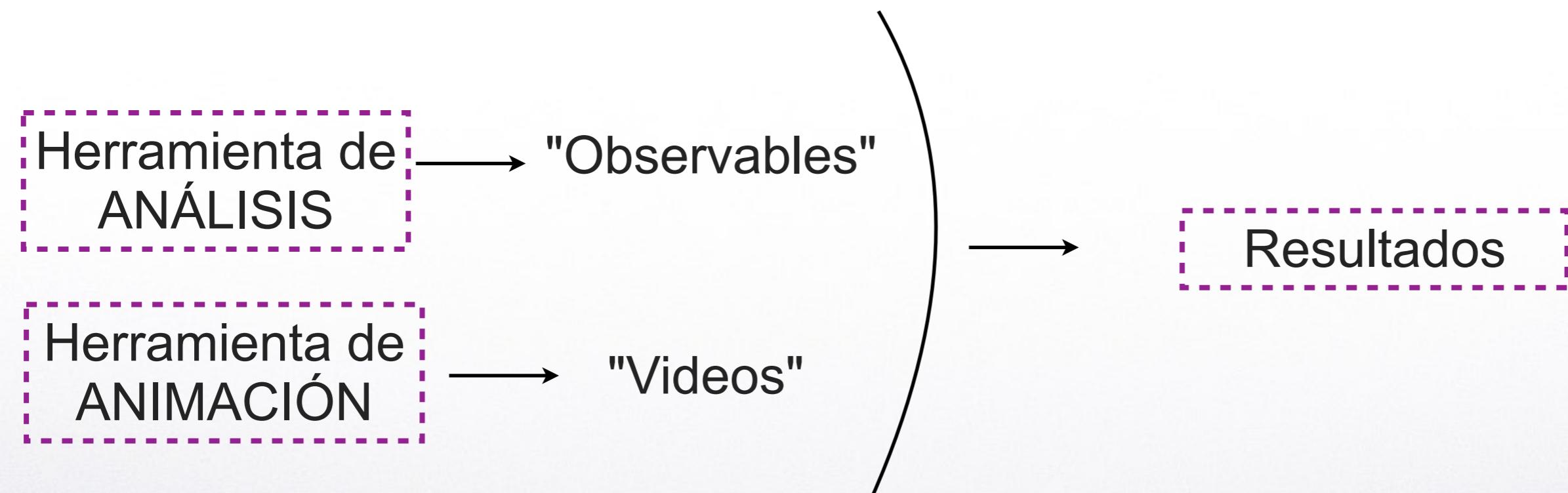
Visualizadores recomendados:

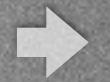
- Matlab / Octave
- Matplotlib (Phyton)
- Ovito (www.ovito.org). (open visualization tool, nos lo recomienda)
Admite formatos de archivo similares a los descriptos.
- Otro



Reglas Generales de Simulaciones

IMPORTANTE . . .





Reglas Generales de Simulaciones

Formato de archivos para guardar simulaciones y su posterior visualización:

Info Dinámica. (El nro. de fila es la identidad de la partícula 1,2,...N)

t1

x1 y1 vx1 vy1

(partícula 1)

En este caso para cada timestamp se esta guardando la posicion y velocidad vectorial de cada particula

x2 y2 vx2 vy2

(partícula 2)

....

xN yN vxN vyN (partícula N)

t2

x1 y1 vx1 vy1

(partícula 1)

x2 y2 vx2 vy2

(partícula 2)

....

xN yN vxN vyN (partícula N)

Para la simulacion va a haber dos archivos. El primero tiene informacion dinamica (como posiciones, velocidades, etc) y su formato puede ser dinamico. El segundo archivo tiene informacion estatica.



Reglas Generales de Simulaciones

Formato de archivos para guardar simulaciones y su posterior visualización:

Info Estática = constante en el tiempo.

(El nro. de fila es la identidad de la partícula 1,2,...N)

N (Heading con el Nro. total de Partículas)

L (Longitud del lado del área de simulación)

r1 c1 (radio y color de la partícula 1)

r2 c2 (radio y color de la partícula 2)

....

rN cN (radio y color de la partícula N)



Reglas Generales Trabajos Prácticos

Entregables

(Para TP2 en adelante)

- Código Fuente de las simulaciones implementadas.
- Soporte de la Presentación Oral en formato *.PDF (solo con imagen ilustrativa de las animaciones y un link visible).
- Las Animaciones solo se muestran durante la presentación oral, pero no deben ser entregadas ni como archivo independiente, ni insertadas en el *PDF.



Presentaciones

(Para TP2 en adelante)

Formato



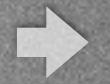
Presentaciones

Tiempo \leq 15 minutos

3 personas —> 3 partes

.... Random !!!

- Intro (< 1 min). Descripción Sistema y Modelo Matemático.
- Implementación (~ 3 min). Arquitectura, UML, pseudocódigo.
- Simulaciones (~ 2 min). Configuración del sistema particular a simular, parámetros fijos y variables, definición de outputs y observables.
- Resultados (~ 8 min).
 - Animaciones.
 - Estudio paramétrico/estadístico.
- Conclusiones (< 1 min).



Presentaciones

Formato

- Numerar las Diapositivas
- Usar Carátulas/Separadores para cada Sección
- Estructurar de forma coherente Títulos y Subtítulos



Presentaciones

Algunos Consejos...

James C. Garland, "ADVICE TO BEGINNING PHYSICS SPEAKERS"
Physics Today (1999)

Cumplir con el tiempo establecido.

Usar un mínimo de ecuaciones.

No escribir mucho texto.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Practicar la charla



*Practice your speech in front
of spouse, friends —*



Presentaciones

Algunos Consejos...

Interactuar con la audiencia:

- Hablar alto.
- Mirar a los ojos a personas en distintos sectores de la sala.
- No mirar el piso o las paredes



Presentaciones

Algunos Consejos...

Al final, las preguntas de la audiencia:

- Permitir que quien pregunta termine la pregunta.
- Repetir la pregunta en vos alta para que todos la oigan.
- Respuestas breves, no hablar de otros temas relacionados.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Varios expositores

- Cada uno tiene un tiempo definido.
- No superponerse.
- Responder preguntas por orden.



Sistemas Físicos

FIN