Instituto Tecnológico de Buenos Aires



72.25 - Simulación de Sistemas TP2 - Autómatas Celulares

Nicolás Matías Margenat 62028

Juan Burda 62094 Bruno Enzo Baumgart 62161

Profesores

Daniel Parisi Germán Agustín Patterson Lucas Wiebke

1. Introducción

En el presente informe se pretende detallar un modelo simple pero efectivo para investigar el surgimiento de movimiento auto-organizado en sistemas de partículas con interacciones inspiradas en comportamientos biológicos. Dicho comportamiento se basa en la tendencia observada en diversos sistemas naturales donde los individuos ajustan su movimiento en función del comportamiento de sus vecinos [2].

Este modelo proporciona un marco teórico para estudiar fenómenos de movimiento colectivo en una variedad de sistemas, desde el nivel microscópico hasta el macroscópico, y puede ofrecer perspectivas valiosas sobre los mecanismos fundamentales que subyacen a la auto-organización en sistemas de partículas en movimiento [2].

2. Modelo

El modelo matemático que se utilizó actualiza las posiciones de N partículas para cada paso de tiempo de acuerdo a

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t)\Delta t \tag{1}$$

Las velocidades de las partículas se construyen teniendo una misma rapidez v con una dirección dada por el ángulo θ . Este ángulo se actualiza en cada paso de tiempo de acuerdo a

$$\theta(t+1) = \langle \theta(t) \rangle_{rc} + \Delta\theta \tag{2}$$

donde $\langle \theta(t) \rangle_{rc}$ denota la dirección promedio de las velocidades de las partículas (incluida la partícula i) que se encuentran dentro de un círculo de radio rc alrededor de la partícula i. El valor de la dirección promedio de las velocidades se obtiene mediante

$$\langle \theta(t) \rangle_{rc} = \arctan(\langle \sin(\theta(t)) \rangle_{rc} / \langle \cos(\theta(t)) \rangle_{rc})$$
 (3)

El término $\Delta\theta$ de la Ec. (2) es un valor aleatorio que se elige dentro del intervalo $[-\eta/2, \eta/2]$.

3. Implementación

Al momento de implementar el modelo matemático se tuvo que tener en cuenta la eficiencia del cálculo de los vecinos para cada partícula. Con ese fin, se decidió implementar la clase CellIndex-Method.java que guarda la grilla en la que se encuentran las partículas. Una grilla es una matriz de $M \times M$ celdas, que vienen representadas por la clase Cell.java. Entonces, cada celda contiene la lista de partículas que están en ella (ver Fig. 1). Encarar el problema de esta manera permitió acceder de manera sencilla a las distintas posiciones de la matriz para obtener las celdas vecinas como propone el cell index method [1].

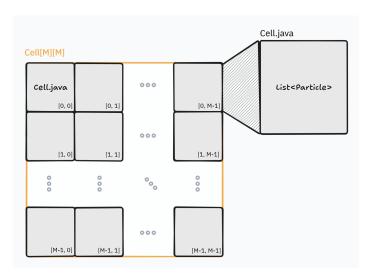


Figura 1: Arquitectura de la grilla para el cálculo de vecinos

Posteriormente, se implementó la clase OffLaticeMethod.java para poder simular las iteraciones del movimiento entre partículas. Esta clase ofrece un método que recibe como parámetros tanto la lista de partículas como una instancia de CellIndexMethod.java y realiza una iteración del algoritmo, calculando primeramente los vecinos de cada partícula (mediante el algoritmo mencionado anteriormente) como también su nueva posición y ángulo (utilizando Ec. (1) y Ec. (2) respectivamente). Adicionalmente, OffLaticeMethod.java ofrece un método estático para calcular la polarización dada la lista de partículas.

En la Fig. 2 se puede ver un diagrama UML de las clases y métodos más importantes, junto con algunas de sus propiedades.



Figura 2: Diagrama UML de algunas de las clases implementadas

4. Simulaciones

Las simulaciones ubican aleatoriamente N partículas puntuales (radio r=0) dentro de un cuadrado de lado L. En todos los casos se tomó un radio de interacción rc=1, así como también $\Delta t=1$ (ver Ec. (1)). Además, se tomó v=0.03 ya que para dicho valor las partículas siempre interactúan con sus vecinos y se mueven lo suficientemente rápido para cambiar la configuración luego de unas pocas actualizaciones de la dirección [2].

Se realizó un estudio de la polarización de las partículas mediante

$$v_a = \frac{1}{Nv} \left| \sum_{i=1}^{N} v_i \right| \tag{4}$$

La Ec. (4) toma valores cercanos a 0 para sistemas aleatorios y cercanos a 1 para sistemas ordenados [2].

Se realizó un primer estudio para ver cómo varía v_a en función del tiempo con distintos valores de η . El objetivo del estudio fue determinar el tiempo que tarda el sistema en llegar a un estado estacionario. Entonces, se tomaron distintos valores de N y L manteniendo siempre la misma densidad de partículas ($\rho = N/L^2$). Se utilizaron las siguientes combinaciones de valores: N = 40 y L = 3,1, y N = 400 y L = 10 (nótese que $\rho \approx 4$ en ambos casos). Se analizaron los valores de $\eta \in \{0, 2, 4\}$.

El segundo estudio realizado estudia cómo varía v_a en función del η . Para ello se utilizaron los resultados obtenidos del estudio previo, pues los v_a deben ser tomados a partir del momento en el que el sistema se encuentra en estado estacionario (llamaremos a este tiempo t_e). Además, se definió un tiempo T=1500 (arbitrario) en el que se tomaron valores de v_a para luego ser promediados y obtener el desvío estándar. En otras palabras, se tomaron los valores de v_a en el intervalo $[t_e, t_e + T)$ y se promediaron para estudiar la variación de v_a en función de η . A su vez, las mediciones de η se midieron en incrementos de 0,2 con $\eta \in [0,4]$.

El tercer estudio realizado busca estudiar cómo varía v_a en función del tiempo cuando se toman distintos valores de ρ . Para ello se decidió fijar $\eta=2$, y se utilizó L=10 y L=31,6. Para L=10 se tomó $\rho\in\{0,5;\,2,5;\,5;\,10\}$, mientras que para L=31,6 se tomó $\rho\in\{0,5;\,2,5;\,5\}$. Con esto se buscó determinar el valor aproximado de t_e para poder realizar el estudio de v_a en función de ρ .

El cuarto estudió realizado busca estudiar cómo varía v_a en función de ρ , para un η dado. Para ello se decidió utilizar $\eta=2$, y se realizaron las simulaciones con L=10 y L=31,6. En este punto, se evaluaron los valores de $\rho\in\{0,25;\,0,5;\,...;\,9,75;\,10\}$ para L=10. Para el caso de L=31,6 se utilizó $\rho\in\{0,5;\,1;\,...;\,9,5;\,10\}$. En ambos casos se promediaron los valores de v_a cuando $t\in[t_e,\,t_e+T)$ donde t_e es el obtenido del estudio anterior, y T=1500.

El último estudio es un análisis cualitativo de las simulaciones. El objetivo es mostrar el estado estacionario en distintas configuraciones, clasificando los comportamientos observados.

5. Resultados

5.1. v_a vs. Tiempo con variación de η

Se estudió la evolución de v_a (ver Ec. (4)) con respecto al tiempo, y utilizando distintos valores para η . En este punto se buscó determinar el valor aproximado al que el sistema llega al estado estacionario.

En la Fig. 3 se puede observar como, para $\eta=0$, hay una convergencia casi inmediata al estado estacionario con $v_a\approx 1$. Esto indica un alineamiento prácticamente perfecto de todas las partículas, lo que es esperado en ausencia de ruido. Para los valores $\eta\in\{2,4\}$ se observa una convergencia rápida seguida de fluctuaciones alrededor de un valor estacionario. Notablemente, el valor estacionario de v_a disminuye al aumentar η , lo cual sugiere que un mayor ruido dificulta el alineamiento global.

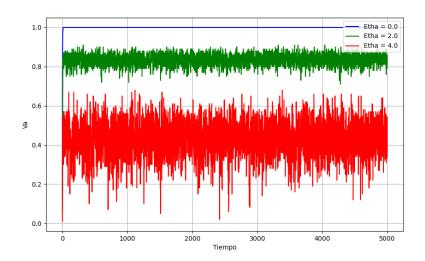


Figura 3: v_a vs. Tiempo para $N=40,\,L=3,1$ y distintos valores de η

En la Fig. 4 se aumentó la cantidad de partículas y el lado L del cuadrado, manteniendo la densidad ρ . Para esta Figura, puede observarse una convergencia más lenta al estado estacionario, lo cual se puede atribuir al mayor número de partículas que deben coordinarse. De todos modos, el comportamiento cualitativo respecto a η se mantiene: mayor η resulta en menor v_a en el estado estacionario.

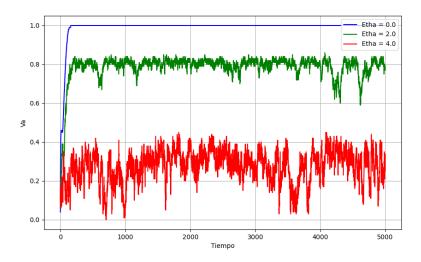


Figura 4: v_a vs. Tiempo para $N=400,\,L=10$ y distintos valores de η

Por todo lo dicho anteriormente, se tomará un valor aproximado para el cual se considerará al sistema en estado estacionario que será $t_e = 1500$ (esto será importante en la sección 5.2). Además,

se concluye que un menor valor de η lleva a un mayor valor de v_a en estado estacionario.

5.2. v_a vs. η

Se estudió el valor de v_a (ver Ec. (4)) con respecto a distintos valores de η , donde $\eta \in [0, 4]$. En la Fig. 5 se puede observar que el valor de v_a decrece gradualmente a medida que aumenta η .

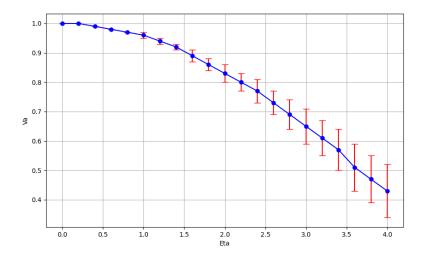


Figura 5: v_a vs. η para N=40, L=3,1

En la Fig. 6 se aumentó la cantidad de partículas y el lado L del cuadrado manteniendo la densidad ρ , análogo a los gráficos de v_a vs. Tiempo. Nuevamente, se puede observar el mismo comportamiento que en la Fig. 5, con la particularidad de que η parece decrecer más rápidamente que en dicha Figura.

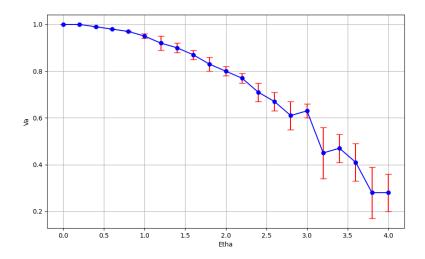


Figura 6: v_a vs. η para N=400, L=10

Para ambas densidades, se puede concluir que un mayor valor de η lleva a un menor valor de v_a .

5.3. v_a vs. Tiempo con variación de ρ

Se estudió la evolución de v_a (ver Ec. (4)) con respecto al tiempo utilizando distintos valores de ρ . En este punto se buscó determinar el valor aproximado al que el sistema llega al estado estacionario con el objetivo de realizar un análisis riguroso en la siguiente sección.

En la Fig. 7 se puede observar que, para $\rho=0.5$, el sistema muestra grandes fluctuaciones en v_a y no se puede establecer claramente un tiempo para el cual se puede asegurar que el sistema haya alcanzado un estado estacionario. Esto sugiere que a bajas densidades, las interacciones entre partículas son demasiado infrecuentes para establecer un orden global estable. Por otro lado, para $\rho \geq 2.5$ se observa una convergencia más rápida hacia un estado estacionario, con menores fluctuaciones en v_a . Esto indica que a mayores densidades, las interacciones más frecuentes entre partículas facilitan la formación y mantenimiento de un orden colectivo.

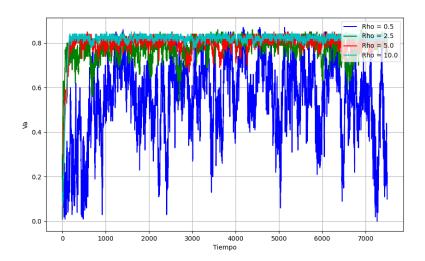


Figura 7: v_a vs. Tiempo para $L=10,\,\eta=2$ y distintos valores de ρ

En la Fig. 8, triplicando el tamaño del sistema, se observaron tendencias similares. La convergencia al estado estacionario es generalmente más rápida para mayores valores de ρ . Además, las fluctuaciones en v_a disminuyen notablemente con el aumento de ρ , lo que sugiere una mayor estabilidad del orden colectivo a altas densidades.

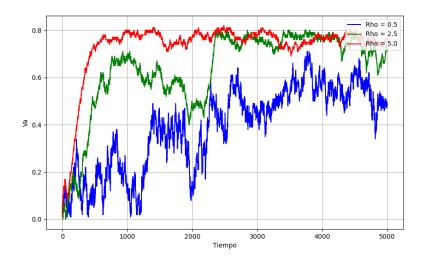


Figura 8: v_a vs. Tiempo para $L=31,\!6,\,\eta=2$ y distintos valores de ρ

Consecuentemente, se decidió establecer $t_e = 3000$ (utilizado en la sección 5.4) para asegurar que en todos los casos se haya alcanzado el estado estacionario. Asimismo, se concluyó que un mayor valor

de ρ aumenta el valor de v_a en el estado estacionario, así como también disminuye las fluctuaciones de dicho parámetro. En otras palabras, mayores densidades favorecen el orden colectivo.

5.4. v_a vs. ρ

Se estudió la evolución de v_a con respecto a la densidad ρ en un sistema de partículas en movimiento. El objetivo principal fue analizar cómo varía el valor promedio de v_a al incrementar la densidad, para determinar la influencia de ρ en el comportamiento colectivo del sistema.

En la Fig. 9 se observa que v_a experimenta una transición significativa en función de ρ . Para valores bajos de ρ , la variabilidad en v_a es considerable, con un comportamiento inestable. Sin embargo, a medida que aumenta la densidad, el sistema muestra una rápida convergencia hacia un valor estacionario. En particular, se nota que para $\rho > 2$, va se estabiliza en torno a un valor constante, con una disminución notable en la desviación estándar, lo que indica un comportamiento más ordenado.

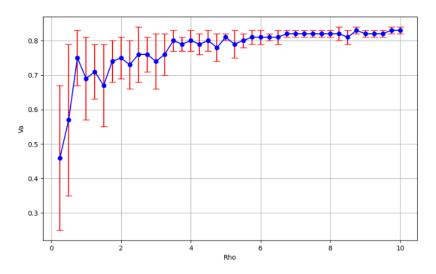


Figura 9: v_a vs. ρ para $L=10, \eta=2$ y distintos valores de ρ

En la Fig. 10 se puede observar que para valores bajos de ρ , v_a presenta una variabilidad significativa con una alta desviación estándar, lo que indica un comportamiento inestable y desordenado en el sistema. Esta inestabilidad podría deberse a la falta de interacción suficiente entre las partículas a bajas densidades, lo que genera un movimiento más aleatorio y menos coordinado.

A medida que ρ aumenta, se observa una tendencia clara hacia la estabilización de v_a . A partir de $\rho > 3$, v_a comienza a estabilizarse alrededor de un valor cercano a 0,8, con una disminución notable en la desviación estándar. Este comportamiento sugiere que, con densidades mayores, las interacciones entre partículas favorecen un estado más ordenado y colectivo, reduciendo el ruido en el sistema.

Es interesante notar que, aunque v_a converge hacia un valor estacionario para $\rho \geq 5$, la figura muestra algunas fluctuaciones menores que podrían deberse a la naturaleza estocástica del sistema o a la influencia de parámetros específicos del modelo como η o la velocidad. No obstante, el sistema

parece alcanzar un régimen estacionario donde va permanece casi constante para ρ altos, lo cual es indicativo de un comportamiento colectivo más organizado.

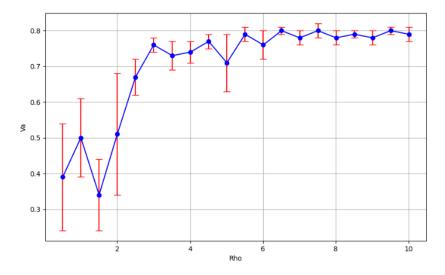


Figura 10: v_a vs. ρ para $L=31,6,\,\eta=2$ y distintos valores de ρ

Estos comportamientos sugieren que, al incrementar ρ , las interacciones entre las partículas favorecen un estado colectivo más organizado, lo que se refleja en la reducción del ruido en el sistema. Para densidades altas, los sistemas parecen alcanzar un régimen estacionario donde permanecen casi constantes.

5.5. Análisis cualitativo para distintos grupos de parámetros

Las Fig. 11-12 corresponden a configuraciones con una alta densidad en estado estacionario. En la Fig. 11 se observa un movimiento altamente coordinado con todas las partículas moviéndose en la misma dirección. Este comportamiento es consistente con los altos valores de v_a observados en la Fig. 3 para bajo ruido. La alta densidad facilita la propagación rápida de la información de orientación entre partículas, mientras que el bajo ruido permite mantener esta alineación. Este estado representa el máximo orden posible en el sistema.

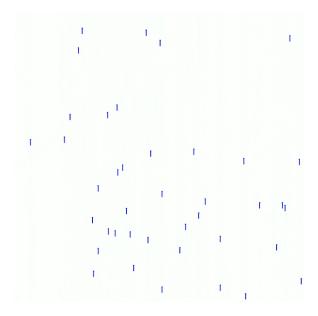


Figura 11: Estado estacionario para $L=3,\!1,\,\eta=0,\!25$ y $\rho=4$

Al subir el ruido considerablemente ($\eta=4$), pero manteniendo la misma densidad de partículas, puede observarse como en la Fig. 12 las partículas alcanzan un estado estacionario aleatorio, pero que mantiene un movimiento con algún tipo de correlación. Se puede observar esto mismo en la Fig. 3 mirando la línea roja.



Figura 12: Estado estacionario para $L=3,\!1,\,\eta=4$ y $\rho=4$

En la Fig. 13 el sistema alcanza un estado estacionario caracterizado por la formación de múltiples

agrupaciones de partículas. Este comportamiento es particularmente interesante ya que revela el surgimiento de estructuras locales en un sistema que globalmente no está completamente ordenado. Corresponde a los valores intermedios de v_a observados en la Fig. 10 para densidades medias.

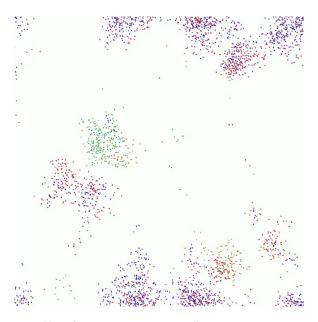


Figura 13: Estado estacionario para $L=31,6,\,\eta=2$ y $\rho=2,5$

En la Fig. 14 el sistema alcanza un estado estacionario estable con un comportamiento colectivo bien definido a pesar de la baja densidad. El bajo nivel de ruido ($\eta=0,1$) permite que incluso interacciones infrecuentes entre partículas mantengan un alto grado de alineación. Este estado corresponde a los altos valores de v_a observados en la Fig. 10 para bajas densidades y bajo ruido. Demuestra cómo, en ausencia de perturbaciones significativas, el sistema puede alcanzar y mantener un estado altamente ordenado incluso con interacciones limitadas.

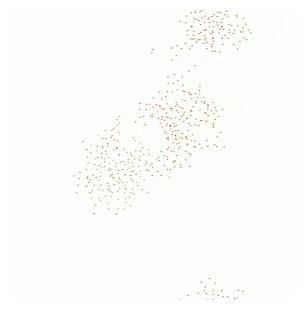


Figura 14: Estado estacionario para $L=31,6,\,\eta=0,1$ y $\rho=0,5$

Estas observaciones cualitativas proporcionan una valiosa intuición sobre los mecanismos subyacentes que generan los comportamientos cuantitativos observados en las secciones anteriores. Demuestran visualmente cómo la interacción entre la densidad de partículas y el nivel de ruido da lugar a diferentes regímenes de comportamiento colectivo, desde el orden global hasta la formación de estructuras locales y estados más desordenados.

6. Conclusiones

En conclusión, este estudio ha revelado aspectos fundamentales del comportamiento colectivo en sistemas de partículas autopropulsadas, mostrando una clara dependencia de la polarización v_a con respecto al ruido η y la densidad ρ .

El análisis temporal mostró que el tiempo necesario para alcanzar el estado estacionario depende de ρ y η , siendo generalmente más rápido para sistemas más densos o con menor ruido.

Se observó que un mayor η lleva a sistemas más desordenados, reflejado en la disminución del valor de v_a . Esto se debe a que un mayor ruido implica una mayor dificultad de las partículas de mantener el orden colectivo, lo que resulta en comportamientos más inestables y, por lo tanto, en sistemas con una menor polarización.

Se evidenció que una mayor densidad lleva a sistemas más ordenados. Dado que un mayor número de partículas se encontrarán en el radio de interacción, cada partícula tendrá más probabilidad de influenciar a otras, lo cual hace que aumente la polarización del sistema. Es decir, se facilita la formación y mantenimiento de un orden colectivo debido a la alta cantidad de interacciones entre partículas.

El estudio cualitativo complementó estos hallazgos cuantitativos, visualizando cómo emergen diferentes patrones de comportamiento colectivo, desde el alineamiento global hasta la formación de clusters locales.

Referencias

- [1] Michael P Allen, Dominic J Tildesley et al. "Computer simulation of liquids". En: Clarendon: Oxford (1987), pág. 146.
- [2] Tamás Vicsek et al. "Novel type of phase transition in a system of self-driven particles". En: *Physical review letters* 75.6 (1995), pág. 1226.