

Métodos de Simulación Física (Cód: 2020174)

Profesor: José Daniel Muñoz

Programa Calendario

Semestre 2019-I

La simulación numérica es una tercera vía para la comprensión y el modelado de fenómenos de la más diversa índole que conjuga elementos tanto de la teoría como del experimento. En una primera etapa – similar a la teoría – la simulación de un fenómeno comienza por identificar los elementos involucrados que se creen esenciales para reproducir las observaciones y construir con ellos un modelo computacional. En una segunda etapa – similar al experimento – el modelo así construido se corre bajo diferentes valores de los parámetros del sistema o de las condiciones iniciales para establecer si hay elementos innecesarios, para establecer leyes empíricas y comportamientos cualitativos y cuantitativos que puedan compararse con predicciones analíticas o datos experimentales. Si la simulación es capaz de reproducir los datos, significa que hemos comprendido el fenómeno, pues hemos identificado correctamente sus elementos esenciales. Las simulaciones numéricas son especialmente útiles, allí donde el número de grados de libertad es demasiado alto o las interacciones son demasiado complejas para lograr una predicción teórica, o donde las variables son difíciles de manipular o de medir experimentalmente.

Este curso tiene por objeto brindar al estudiante herramientas básicas para la simulación de sistemas físicos. El curso se centra en dos técnicas de simulación de amplio uso, a saber: *Elementos Discretos* (en mecánica tridimensional, mecánica celeste y medios granulares), y *Autómatas Celulares y lattice Boltzmann* (incluyendo difusión, fluidos, ondas y campos electromagnéticos),. Estas técnicas se ilustran con numerosos ejemplos de aplicación en física. El curso enseña, además, a programar orientado a objetos, a utilizar paquetes gráficos para el análisis de datos en Unix, y da fundamentos para el análisis estadístico de las simulaciones, pero, principalmente, enseña a modelar un fenómeno utilizando herramientas de simulación.

Competencias: Al final del curso el estudiante debe ser capaz de

- modelar sistemas discretos utilizando dinámica molecular.
- simular fenómenos que involucren difusión, ondas, mecánica de fluidos o electrodinámica utilizando lattice-Boltzmann.
- construir generadores aleatorios con diversas distribuciones y emplearlos para generar condiciones iniciales y estimar variables de interés por Monte Carlo.
- diseñar un protocolo de simulaciones, obtener curvas de datos y proponer a partir de ellos leyes empíricas contrastables con resultados analíticos o experimentales.

Conocimientos: Al final del curso el estudiante debe saber:

- Bases de programación orientada a objetos.
- Solución de ecuaciones diferenciales por Runge-Kutta.
- Elementos Discretos, incluyendo métodos de integración translacionales y rotacionales, leyes de fuerzas y técnicas de aceleración.
- Autómatas celulares y sus aplicaciones en física
- Modelos de Lattice-Boltzmann: Expansión de Chapman-Enskog, condiciones iniciales y condiciones de frontera, cálculo de variables macroscópicas.

Metodología

Se utiliza una combinación de clases magistrales, talleres dirigidos en clase, trabajos fuera de clase y el desarrollo de un proyecto a lo largo del curso. Cada tema inicia con una exposición magistral de la técnica y de sus aplicaciones, que se concreta en clase implementando una simulación a través

programa construido en el taller, y que forma parte de la calificación. La habilidad individual de cada estudiante para atacar la simulación de un fenómeno se evalúa con parciales presenciales. La capacidad para trabajar en equipo de manera colaborativa y atacar numéricamente la modelación de un fenómeno se construye desarrollando un proyecto por equipo a lo largo del semestre. Se usa C++ como lenguaje de programación.

Programa Calendario

Programación en C (repaso) y Ecuaciones Ordinarias (2 clases)

- (Abr01) *Mi primer programa en C (repaso)*. Operaciones matemáticas básicas. **Estructuras:** *for* e *if*. Cómo hacer un programa paso a paso. **Funciones:** redireccionamiento y graficando una función: *xmgrace*, *gnuplot*. **Ceros por bisección.**
- (Abr03) *Integración numérica de ecuaciones ordinarias. Integración por Simpson.* Ejemplo: Calcular funciones de Bessel por integración. **Euler y Runge-Kutta para una ecuación de primer orden.** Estudio del error. Ecuación de segundo orden con condiciones iniciales. Problema de Sturm-Liouville y condiciones de frontera. Método de la lanzadera.
[Taller 1, Ejercicio 1: Runge-Kutta: modelo SIR](#)
[Taller 1, Ejercicio 2: Runge-Kutta y Lanzadera: Modos de Oscilación.](#)

Elementos Discretos (DEM) (8 clases)

- (Abr08) **Introducción.** Clase Cuerpo. Euler. Movimiento parabólico. Fuerza Central. Animación Gnuplot.
- (Abr10) **Métodos de Integración:** Leap-Frog, Verlet, Velocidad Verlet.
 (Abr15) **Vectores y Colisionadores:** Clase Vector 3D. Fuerza central con vectores. Colisionador y dos planetas. El triángulo de Laplace.
[Taller 1, Ejercicio 3: Planetas Troyanos.](#)
- (Abr17) **Modelar y Analizar:** La cuna de Newton como ejemplo de modelación: un péndulo (rotación), y colisión por Fuerza de Hertz. Análisis de la colisión (tiempo e intensidad) y leyes de potencias. Comparación con análisis dimensional.
[Taller 1, Ejercicio 4: La Cuna de Newton](#)
- (Abr22) **Granos. Medios granulares:** Discos y esferas, polígonos y poliedros, esferopolígonos y esferopoliedros. Optimizaciones: Zonas y listas de Verlet. Otros Métodos: Event driven, Contact dynamics. **Ejemplo:** Gas de partículas 2D. Rotación y traslación. Coeficiente de restitución y fuerzas de fricción
[Taller 1, Ejercicio 5: Distribución de Maxwell-Boltzmann.](#)
- **(Abr24) PRIMERA ENTREGA DEL PROYECTO: Estado del Arte**
- **(Abr29) Presentación del Taller 1.**
- (May06) **Rotación 3D.** Ángulos de Euler, ecuaciones de Euler, cuaterniones. Rotación de un trompo pesado. Visualización Povray.
- **(May08) ----- PRIMER PARCIAL -----**

Autómatas Celulares y Modelos de Lattice-Boltzmann (3 clases)

- (May13) **Introducción a los Autómatas Celulares**. Definición. Autómatas sencillos: life, reglas de mayoría, Q2R Bucle de Langton. Aplicaciones: Tráfico Vehicular, gases de red. **Introducción a Lattice-Boltzmann**: ecuación de transporte de Boltzmann, expansión de Chapman-Enskog y leyes de conservación. Tensores diagonales (ondas), simétricos (fluidos) y antisimétricos (campos electromagnéticos).
- [Taller 2, Ejercicio 1: Una calle STCA de un carril.](#)
- **(May15) SEGUNDA ENTREGA DEL PROYECTO: La Pregunta de Investigación**
- (May20) **Lattice Gases y Autómatas de Difusión**: Lattice Gases. Difusión 1D Expansión de Chapman-Enskog. Difusión 2D y 3D. Sinapsis por GABA. [Taller 2, Ejercicio 2: Un autómatas de difusión 1D.](#)
- (May22) **Implementación de un BGK para ondas 2D**. Un corcho oscilante en un estanque. [Taller 2, Ejercicio 3: Simulación de una lente por Lattice-Boltzmann.](#)
- (May27) **Lattice-Boltzmann BGK para tensores simétricos**: Tensores simétricos. Ejemplo: Fluidos no viscosos y ecuación de Euler.
- (May29) **Lattice-Boltzmann para fluidos viscosos**: Esfuerzo viscoso. Forzamientos: perfil de Poiseuille. Técnicas para grandes números de Reynolds: GLBK, Entrópico y grillas alternadas. Frontera inmersa. [Taller 2, Ejercicio 4: Las fuerzas sobre un cilindro en régimen de Von Karman.](#)
- (Jun05) **Lattice-Boltzmann para tensores antisimétricos**: Sistemas 3D. Electrodinámica.

Generadores Aleatorios y Dinámica Browniana (1 clase)

- (Jun10) **Generadores**: generadores uniformes. RAN2. Método de la integral inversa. Distribuciones exponencial y gaussiana. Método del rechazo. **Aplicaciones**: Interacción radiación-materia. Cálculos de dosis por Monte Carlo. Modelos de agentes económicos. [Taller 2, Ejercicio 5: Agentes Económicos: El modelo de Chakraborti y Chakrabarti.](#)
- (Jun12) **Dinámica Browniana** Qué es difusión? Primera y segunda leyes de Fick. Random Walk y Difusión. Dinámica Browniana. Algoritmo de Van Gunsteren y Berendsen. Una solución de Sodio. Aplicaciones: canal de Gramicidina-A, rotor de F1-ATPasa.
- [\(Jun17\) Presentación del Taller 2.](#)
- **(Jun19) TERCERA ENTREGA DEL PROYECTO: Benchmarks**
- **(Jun26) ----- SEGUNDO PARCIAL -----**

Lattice-Boltzmann con CUDA y Programación Paralela (3 clases)

- (Jul03) **Implementación con CUDA 1**: Conceptos básicos. Mi primer programa en CUDA. Variables y constantes. Trabajo con matrices 1D. Incrementar y sumar. Trabajo con matrices 2D.

- (Jul08) **Implementación con CUDA 2:** Implementación de un lattice-Boltzmann para ondas 2D usando CUDA.
- (Jul10) **Implementación con CUDA 3:** Otros elementos de CUDA: memoria compartida, sincronización. Algoritmos de computación en paralelo: Scan, Compact.
- **(Jul15,17) CUARTA ENTREGA DEL PROYECTO: Presentación de Resultados y Conclusiones**

Calificación

Evaluación	Fecha entrega	Porcentaje
<i>Taller 1:</i> Runge-Kutta y Elementos Discretos	Abr29	15%
<i>Taller 2:</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann	Jun17	15%
<i>Primer Parcial:</i> Elementos Discretos	May08	16%
<i>Segundo Parcial:</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann	Jun17	16%
<i>Proyecto Final</i>		
• Estado del Arte	Abr24	6%
• La pregunta de investigación	May15	6%
• Benchmarks	Jun19	6%
• Resultados y Conclusiones	Jul 15,17	20%
TOTAL		100%

Observaciones:

- **Los talleres** se envían por correo electrónico uno por grupo como presentación exportada a formato .pdf. El archivo sólo se podrán enviar **desde el correo institucional del estudiante y al correo electrónico jdmunozcsimulacion@gmail.com hasta las 10:59am de la fecha límite** establecida para su entrega. Todo envío que se realice en fecha posterior o desde otro correo que no sea el institucional del estudiante, o a otro correo que no sea el señalado arriba **NO SE GARANTIZA QUE SERÁ CALIFICADO**. Además, hacer el envío al correo señalado arriba y conjuntamente a otro correo del profesor (incluido su correo institucional y su correo personal) podrá generar un descuento de 0.4/5.0 en la nota. **La calificación es de esta manera:** 50% de la calificación de la tarea corresponde a ese archivo. El otro 50% corresponde a la exposición del grupo, que se realiza de la siguiente manera: cada grupo expone al azar un problema, y el integrante del grupo que expone se escoge también al azar. La nota de su exposición es la nota de exposición del grupo.
- **Los parciales** son individuales en la sala de cómputo. Al inicio se da un problema, y al finalizar las dos horas deben hacer un primer envío, que corresponde al 80% de la nota. Al final del día del examen (es decir, antes de las 11:59pm) se puede realizar un segundo envío, que corresponde al 20% restante. Sin este segundo envío, el primero corresponde a la totalidad de la nota.
- **El proyecto** consta de tres entregas parciales y una entrega final. Cada entrega se califica exactamente como los talleres. El objetivo del proyecto es ser capaces de modelar y estudiar un fenómeno real utilizando las técnicas de Elementos Discretos y/o Autómatas Celulares y Modelos de Lattice-Boltzmann, pero también el desarrollar trabajo colaborativo y aprender a trabajar en grupo y lograr que todos en el grupo de trabajo aporten en igual medida a la ejecución de proyecto.

Algunos temas posibles del proyecto (entre muchos otros)

- Una mesa de billar.
- El movimiento del Rattleback
- La distribución de contaminantes particulados en una zona urbana.
- La salinidad en la Ciénaga Grande de Santa Marta.
- El efecto de los satélites pastores sobre un anillo planetario.
- La fractura por contracción de un tejido de masas y resortes.
- Dados esferocuadrados sujetos a corte simple
- Un accidente automovilístico.
- La fuerza de sustentación sobre un perfil de ala.
- La acústica de un auditorio.
- La simulación de una sinapsis nerviosa.
- ¿Manejar conservando iguales distancias adelante y atrás mejora el tráfico?
- Un gas de Lennard-Jones

Bibliografía

1. H. Gould y J. Tobochnik. *Computer Simulation Methods*. Partes 1 y 2. (Addison-Wesley, New-York, 1988).
2. D.C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd Ed. (Cambridge, Cambridge University Press, 2004).
3. M.P. Allen y D.J. Tidesley, *Computer Simulations of Liquids*, (Oxford University Press, 1987).
4. W.H. Press, S.A. Teulosky, W.T. Vetterling y B.P. Flannery, *Numerical Recipes. The art of scientific computing*, 3rd. Ed. (New York, Cambridge University Press, 2007).
5. T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. Magnus Viggen, *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*, (Springer, Graduate Texts in Physics, 2017).
6. S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond (Numerical Mathematics and Scientific Computation)*. (Oxford, Claredon Press, 2001).
7. B. Chopard y M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, (Cambridge, Cambridge University Press, 1998).
8. Udacity. *Introduction to Parallel Programming with CUDA*.
<https://www.udacity.com/course/intro-to-parallel-programming--cs344>