

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 1: Búsqueda Eficiente de Partículas Vecinas

Sea un área cuadrada de lado L que contiene N partículas con radios distintos de cero y con un radio de interacción (r_c).

1- Implementar el algoritmo "Cell Index Method" que tome como inputs: las posiciones y radios de las N partículas y los parámetros N , L , M y r_c (ver punto 5), y cuyos outputs sean:

- Una lista tal que para cada partícula indique cuales son las vecinas que distan menos de r_c .

- El tiempo de ejecución.

- Además se debe generar una figura que muestre las posiciones de todas las partículas, y que identifique una de ellas (pasada como input) de un color y sus vecinos correspondientes de otro color.

Las distancias entre partículas deben medirse borde a borde, es decir, considerando el radio (r) además del centro de masa de las mismas. Cómo se modifica el criterio $L/M > r_c$ cuando la partícula no es puntual, es decir tiene un radio (r) ? (podría suceder que el centro esté en una celda no vecina pero el borde sí esté en la vecina).

Como parámetro adicional considerar dos versiones del algoritmo:

- a- Sin condiciones periódicas de contorno (considerando distancia a los bordes del área: paredes).

- b- Con condiciones periódicas de contorno.

2- Generar distintos inputs de manera random y estudiar la eficiencia del algoritmo (medida en tiempo de cálculo) en función de N y del número de celdas ($M \times M$). Comparar con el método de fuerza bruta que mide las distancias entre todos los pares posibles de partículas. Considerar $L=20$, $r_c=1$ y $r=0.25$.

3- Hallar un criterio para determinar el óptimo número de celdas ($M \times M$) teniendo en cuenta la densidad (N/L^2) de un sistema. Considerar $L=20$, $r_c=1$ y $r=0.25$.

4- Demostración en vivo.

Los docentes pasarán por las estaciones de trabajo. Se deberán mostrar tablas y/o gráficos que demuestren lo hallado en los puntos 2 y 3.

Se deberán generar nuevas partículas según los parámetros (N , L , M y r_c) para verificar el funcionamiento del algoritmo usando el criterio hallado en 3. También se variará M para verificar que el hallado automáticamente sea el óptimo. Para la demostración se usarán los outputs descriptos en el punto 1.

5. Formato tentativo de los archivos:

- Input:

En general para una simulación, el sistema se puede describir con 2 archivos de texto: el estático y el dinámico (consideraremos a estos archivos como el Input para el CIM).

Estático:

N (Heading con el Nro. total de Partículas)

L (Longitud del lado del área de simulación)

r_1 pr_1 (radio y propiedad de la partícula 1)

r_2 pr_2 (radio y propiedad de la partícula 2)

....

r_N pr_N (radio y propiedad de la partícula N)

Dinámico:

t_0 (tiempo)
 $x_1 y_1 vx_1 vy_1$ (partícula 1)
 $x_2 y_2 vx_2 vy_2$ (partícula 2)
....
 $x_N y_N vx_N vy_N$ (partícula N)
 t_1 (tiempo)
 $x_1 y_1 vx_1 vy_1$ (partícula 1)
 $x_2 y_2 vx_2 vy_2$ (partícula 2)
....
 $x_N y_N vx_N vy_N$ (partícula N)

A los fines del presente trabajo se considera un único tiempo (t_0) ya que el método de detección de vecinos se aplica en un determinado estado del sistema en un dado instante.

- Output:

[id de la partícula "i" id's de las partículas cuya distancia borde-borde es menos de r_c].

...

6- Para visualizar las partículas coloreadas se recomienda usar alguna herramienta existente que puede ser independiente del código implementado, como por ejemplo: ovito (www.ovito.org), matlab, octave, origin, etc.

7- Fecha de Entrega

La fecha para la demostración en vivo descripta en el punto 4 se realizará durante los días martes 12/03/2019 y viernes 15/03/2019.