Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 5: Medios Granulares y Dinámica Peatonal

(Enunciado publicado en CAMPUS el 21/10/2024)

Elegir uno de los tres problemas enunciados más abajo para resolver utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal y presentar.

Las simulaciones tendrán un *dt* fijo e intrínseco de la simulación, además 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.

La realización del T.P. consiste en:

a- Presentación de 13 minutos de duración (tipo powerpoint) con las secciones y el formato indicados en la guía de presentaciones.

b- Animaciones de sistemas característicos.

c- Documento de la presentación en formato pdf que contenga resultados, imágenes, parámetros correspondientes y las respuestas a lo pedido en el problema elegido. El archivo *.pdf a entregar NO debe contener las animaciones, pero si algún fotograma representativo de las mismas y un link explícito (a youtube o vimeo) para visualización on-line.

d- El código fuente implementado del motor de simulación.

<u>*Fecha y Forma de Entrega:*</u>

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser presentados a través de campus, antes del día 08/11/2024 a las 10:00 hs. Los Archivos deben nombrarse de la siguiente manera:
"**SdS-TP5-2024Q2GXX_Presentación**" y “**SdS-TP52024Q2GXX_Codigo**", donde XX es el número de grupo.
Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 08/11/2024.

Problema* 1*: Medios Granulares - Modelo de Drude

Simular un medio granular que fluye por un canal 2D de forma rectangular, como se muestra en la Fig. 1, de ancho $W = 20$ cm y largo $L = 70$ cm. Considerar condiciones de contorno periódicas en los extremos: las partículas que salen por un extremo, se reingresan por el lado opuesto con la misma velocidad y posición vertical. Dentro del canal hay un número $M = 100$ de obstáculos fijos de radio $R = 1$ cm.

El medio granular consta de partículas circulares de radio $r = 1$ cm. Considerar $N = 100$ partículas, las que deben ser generadas en forma aleatoria sin superponerse (con otras partículas, obstáculos o paredes) dentro del canal con velocidad inicial cero. Las partículas que componen al medio granular están sometidas a una aceleración A_0 constante en la dirección x.

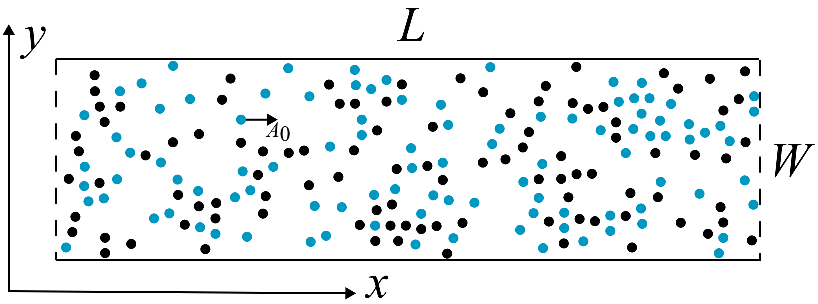

Figura 1: Esquema del sistema propuesto. Las partículas celestes están sometidas a una aceleración constante A_0 en la dirección x. Los obstáculos negros son fijos y están distribuidos inicialmente de forma aleatoria. Hay condiciones de contorno periódicas en la dirección x.

En este trabajo se busca caracterizar la resistencia que ofrecen los obstáculos al flujo del material granular. El modelo de Drude propone que la relación entre caudal de partículas (Q) y fuerza impulsora (F_d) sigue la siguiente relación:

$$Q = F_d / R, \tag{1}$$

donde $F_d = m_p A_0$, R la resistencia del sistema al paso de partículas de masa m_p.

Para el cálculo de las fuerzas entre partículas, partículas con obstáculos y de partículas con paredes considerar las expresiones (N.1) y (T.3) de la diapositiva 15 de la Teórica 5. Tomar como constantes $k_N = 250$ dina/cm; $|k_T| = 2\ |k_N|$; y la masa de cada partícula $m_p = 1$ g. (Sistema de unidades CGS). Usar como método integrador Beeman para fuerzas que dependen de la velocidad.

a) Fijar la aceleración $A_0 = 0.010$ m/s^2 y simular $T = 1000$ s o los que fueran posibles según la capacidad de cálculo disponible (mayor o menor). Repetir la simulación para 5 condiciones iniciales distintas de las posiciones de los obstáculos. 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) de todas las realizaciones. 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 alcanzan el estado estacionario. ¿Son equivalentes los resultados de las distintas realizaciones?

b) Considerar, al menos, 4 valores de A_0 en un rango [0.005 – 0.050] m/s^2. Estudiar la relación Q *vs* A_0. Verificar la validez del modelo dado por la Ec. (1) y obtener el valor de resistencia.

c) Repetir b) cambiando el número de obstáculos. Considerar $M = 80$ y $M = 120$ y estudiar cómo el número de obstáculos afecta la resistencia del sistema.

Problema 2: *Juego de Dinámica Peatonal - Mancha Zombie*
(*Basado en el trabajo* [1])

El objetivo de simular este sistema es estudiar mecanismos de navegación peatonal que evitan colisiones.
Para ello, considerar un juego ficticio constituido por una arena circular de radio Ra=11 m, como se muestra en la Fig. 2. Inicialmente, se coloca un agente zombie (Nz = 1) en el centro de la misma y Nh agentes humanos distribuidos al azar a una distancia mayor a 1 m, tanto desde el zombie como desde las paredes (zona de exclusión rosa en la Fig.2).

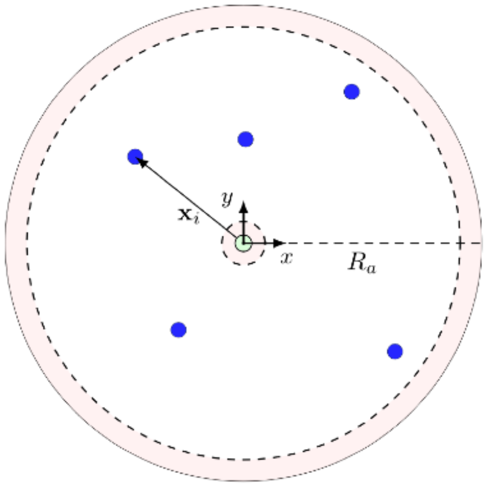

Figura 2: Ilustración del escenario inicial juego mancha zombie.

El comportamiento de ambos estará dado por una heurística que posiciona en forma dinámica el target temporario al cual se dirigen los agentes. En el caso del zombie es simple, se dirigen hacia el humano más cercano en cada momento. En el caso de los humanos, deben escapar del zombie, evitar colisiones con otros humanos y paredes dado que que esto podría disminuir su velocidad y ser alcanzados. Para determinar esta heurística, se puede tomar la utilizada en la Ref. [1], alguna de las vistas en las clases teóricas, otra bibliografía o proponer una nueva.
El modelo operativo podrá ser el "social force model" o el "contractile particle model".
Una vez que un zombie alcanza a un humano (sus radios tienen superposición) ambos se permanecen quietos en el lugar durante 3 s. Luego del cual el humano se convierte en zombie y ambos comienzan a perseguir a nuevos humanos mas cercanos.

Estudiar el comportamiento del sistema en función de $Nh \in (10,100)$. Para ellos considerar los observables <v> (velocidad media del sistema, promediando para todos los agentes, para todas las realizaciones y luego para los tiempos apropiados) y la fracción de zombies $\phi z = Nz / (Nh+1)$, promediando primero para todas las realizaciones y luego todos los tiempos. En ambos casos mostrar ejemplos de series temporales promedio antes de mostrar el correspondiente observable versus input (en este caso Nh).

Realizar simulaciones de por lo menos 300 s y tantas repeticiones como sea posible y razonable sin llegar a exigir las computadoras. Considerar las velocidades deseadas de ambos agentes iguales: $vz^{max} = vh^{max}$ =4 m/s.

Referencia:

[1] *Oriana et al., Physical Review E 110.2 (2024): 024611.*

Problema 3: *Juego de Dinámica Peatonal - Try Maradoniano*

El objetivo de simular este sistema es estudiar mecanismos de navegación peatonal que evitan colisiones.
Para ello, considerar un juego ficticio constituido por una cancha de rugby en la que se distribuyen aleatoriamente Nj jugadores del equipo azul como se muestra en la Fig. 3. En punto medio del el *in-goal* derecho se coloca inicialmente un corredor del equipo rojo que intentará realizar un try eludiendo a los Nj jugadores azules.

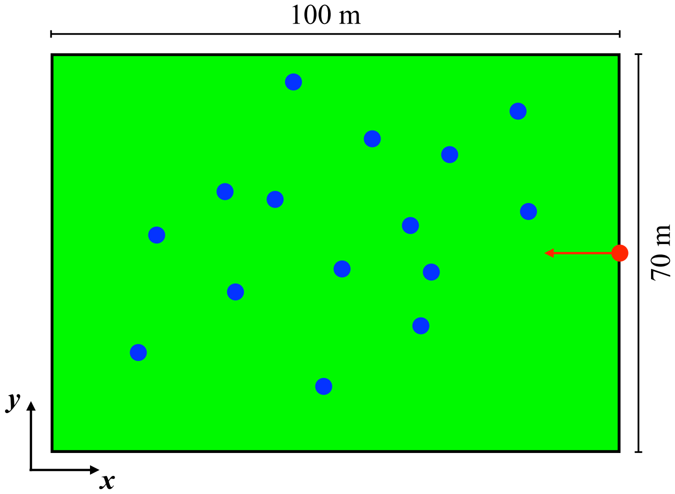

Figura 3: Configuración juego Try Maradoniano.

El comportamiento de todos los jugadores estará dado por una heurística que posiciona en forma dinámica el target temporario al cual se dirigen los agentes. En el caso de los jugadores azules es simple, se dirigen hacia el jugador rojo. En el caso del jugador rojo tiene que llegar al *in-goal* izquierdo eludiendo a los jugadores azules y a las lineas laterales como si fueran paredes.
Para determinar esta heurística, se puede tomar alguna de las vistas en las clases teóricas, la bibliografía o proponer una nueva.
El modelo operativo podrá ser el "social force model" o el "contractile particle model".
Una vez que el jugador rojo es alcanzado por alguno de los azules (sus radios tienen superposición) se finaliza la simulación. Esto producirá simulaciones cortas, por lo que se podrán ejecutar gran numero de realizaciones dentro de lo razonable sin llegar a exigir las computadoras.

Estudiar el comportamiento del sistema al variar algún parámetro relevante de la heurística. Para ellos considerar Nj=15 e intentar maximizar los observables: $< |x\text{-}100| >$ (distancia máxima recorrida en la dirección x, promediada para todas las realizaciones con cada valor de dicho parámetro) y la fracción de try logrados $\phi t = Nt\ /\ Nr$ (donde Nt es el número de try's logrados y Nr es el número de realizaciones).

Para el mejor parámetro de la heurística de elusión hallado, estudiar el comportamiento de los mismos observables en función de $Nj \in [15,100]$.

En todos los casos considerar las siguientes velocidades deseadas: $v_{azul}{}^{max}$ = 3.8 m/s, $v_{rojo}{}^{max}$ = 4 m/s y los siguientes valores de la constante de reacción: τ_{azul} = 0.5 s y τ_{rojo} = 0.3 s.