

Métodos de Simulación Física (Cód: 2020174)

Profesor: José Daniel Muñoz

Programa Calendario

Semestre I/2016

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 correlaciones, leyes empíricas y comportamientos cualitativos y cuantitativos que pueden 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 presenta cuatro técnicas de simulación de amplio uso, a saber: dinámica molecular, autómatas celulares y lattice Boltzmann (incluyendo difusión y fluidos), la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (elementos finitos y diferencias finitas) y Monte Carlo. 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.

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.
- simular sistemas sencillos de ecuaciones diferenciales parciales lineales utilizando elementos finitos y/o diferencias finitas.
- construir generadores aleatorios con diversas distribuciones y emplearlos para estimar variables de interés por Monte Carlo, incluyendo aplicaciones elementales de Mecánica Estadística.
- 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 de dinámica molecular, incluyendo métodos de integración traslacionales y rotacionales, leyes de fuerzas y técnicas de aceleración.
- Modelos de Lattice-Boltzmann: Expansión de Chapman-Enskog, condiciones iniciales y condiciones de frontera, cálculo de variables macroscópicas.
- Elementos finitos: funciones base y criterios de optimización.
- Diferencias finitas y criterios de estabilidad.
- Métodos de Monte Carlo en mecánica estadística: muestreos de Markov, estimación de tiempos de equilibrio y tiempos de correlación,

Metodología

Se utiliza una combinación de clases magistrales, talleres dirigidos y trabajos fuera de clase. Cada tema inicia con una exposición magistral de la técnica y de sus aplicaciones, que se concreta en clase implementando una simulación a través de un taller dirigido. A continuación se deja un trabajo de tarea que expanda un poco el alcance del programa construido en el taller, y que forma parte de la calificación. Finalmente, la capacidad del estudiante para atacar la simulación de un fenómeno se evalúa con parciales en clase y con trabajos finales de mayor complejidad, escogidos por el estudiante, pero delimitados y asesorados por el profesor. Se usa C++ como lenguaje de programación.

Programa Calendario

Programación en C (repaso) y Ecuaciones Ordinarias (3 clases)

- (Feb02,Feb04) *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*. (Ejemplos: ley potencial). **Integración por Simpson**. Ejemplo: Calcular funciones de Bessel por integración **Ceros por bisección**. Paso por valor y paso por referencia.
- (Feb09,Feb11) *Integración numérica de ecuaciones ordinarias*. 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.

Tarea 1: Runge-Kutta: modelo SIR y Modos de Oscilación (Entrega Feb23).

Dinámica Molecular (8 clases)

- (Feb16) **Introducción**. Clase Cuerpo. Euler. Movimiento parabólico. Animación Gnuplot.
- (Feb18) **Métodos de Integración**: Fuerza Central. Verlet, Leap-Frog, Velocidad Verlet.
- (Feb23) **Vectores y Colisionadores**: Clase Vector 3D. Fuerza central con vectores. Colisionador y dos planetas. El triángulo de Laplace.
- Tarea 2: Planetas Troyanos (Entrega Mar01).
- (Feb25) **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.
- (Mar01) **Granos 2D**. Gas de partículas 2D. Rotación y traslación. Coeficiente de restitución y fuerzas de fricción.
- Tarea 3: Distribución de Maxwell-Boltzmann y compresión edométrica (Entrega Mar10).
- (Mar03) **Rotación 3D**. Ángulos de Euler, ecuaciones de Euler, cuaterniones. Rotación de un trompo pesado. Visualización Povray.
- (Mar08) **Un gol de maravilla! Fuerza de Magnus. Implementación. Simulaciones a Temperatura Constante**. Termostato de Nose-Hoover.
- (Mar10) **Suelos, Fracturas y Medios Granulares : Elementos Discretos (DEM)** : *Elementos*: Discos y esferas, polígonos y poliedros, esferopolígonos y esferopoliedros. *Optimizaciones*: Zonas y listas de Verlet. *Otros Métodos*: event driven, contact dynamics. *Ejemplos de aplicación*.

----- **Primer parcial (Jueves Marzo 31)** -----

Monte Carlo Básico (2 clases)

- (Mar15) **Generadores**: generadores uniformes. RAN2. Método de la integral inversa. Distribuciones exponencial y gaussiana. Método del rechazo. **Simulaciones de Física Médica**: Interacción radiación-materia. Cálculos de dosis por Monte Carlo. Principio general para simular showers. Softwares GEANT-4 y EGC-NRC.
- (Mar17). **Simulaciones con Monte Carlo Básico**: Ejemplo: simulación por agentes de un sistema económico.

Simulaciones en Biofísica (1 clase)

- (Mar 29) **Simulaciones en Biofísica: Dinámica Molecular y Dinámica Browniana** Qué es difusión? Primera y segunda leyes de Fick. Ecuación de Nerst-Planck. Dinámica Browniana. Algoritmo de Van Gunsteren y Berendsen. Una solución de Sodio. Aplicaciones: canal de Gramicidina-A, rotor de F1-ATPasa.
[Tarea 4: Conducción iónica por dinámica browniana \(Entrega Abr12\).](#)

Primer Trabajo (Dinámica Molecular): Propuesta (marzo 15), Artículo (marzo 29)

Autómatas Celulares(2 clases)

- (Abr05) **Historia de los Autómatas Celulares**. Definición. Autómatas sencillos: life, reglas de mayoría, Q2R Bucle de Langton. Aplicaciones con reglas heurísticas: Tráfico Vehicular.
- (Abr07) **Lattice Gases y Autómatas de Difusión**: Lattice Gases. Qué es difusión. Primera y segunda leyes de Fick. Modelo 1D. Expansión de Chapman-Enskog. Difusión 2D y 3D. Sinapsis por GABA.
[Tarea 5: Difusión de mosquitos por autómatas celular \(Entrega Abr19\).](#)

Lattice Boltzmann (7 clases)

- (Abr12) **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)
- (Abr14) **Implementación de un BGK para ondas 2D**. Propagación, lentes y espejos
[Tarea 6: Simulación de una lente por Lattice-Boltzmann \(Entrega Abr26\).](#)
- (Abr19) **Lattice-Boltzmann BGK para tensores simétricos**: Tensores simétricos. Ejemplo: Fluidos no viscosos y ecuación de Euler.
- (Abr21) **Lattice-Boltzmann para fluidos viscosos**: Esfuerzo viscoso. Forzamientos: perfil de Poiseuille. Técnicas para grandes números de Reynolds: GLBK y Entrópico. Combinación de grillas de resolución creciente.
- (Abr23) **Lattice-Boltzmann para tensores antisimétricos**: Sistemas 3D. Electrodinámica.
- (Abr26) **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.
- (Abr28) **Implementación con CUDA 2**: Implementación de un lattice-Boltzmann para ondas 2D usado CUDA.
- (May03) **Implementación con CUDA 3**: Otros elementos de CUDA: memoria compartida, sincronización. Algoritmos de computación en paralelo: Scan,

----- **Segundo parcial (Jueves Mayo 12)** -----

Elementos Finitos (2 clases)

- (May05) **Definición:** Funciones base, residuo y error. Galerkin. Matriz de rigidez. Condiciones de frontera. Ilustración con ecuación de grado 2.
- (May10) **Ejemplo: La viga.** Introducción a la Elástica: stress y strain, coeficientes de Lamé. Deformación de una barra. Funciones de Hermite.

Diferencias Finitas (2 clases)

- (May17) **Soluciones estáticas:** Definición. Operadores en diferencias finitas. ecuación de Laplace: exacto, Jacobi y Gauss-Seidel. Métodos de descomposición.
- (May19) **Problemas dinámicos:** Estabilidad: ingenuo, Lax y Lax-Wendroff. Esquemas implícito y explícito, Crank-Nicholson, ADI. **Ejemplo de aplicación:** la cuerda de una guitarra.

Segundo Trabajo (Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann):

Propuesta (mayo 5), Exposiciones: Mayo 24 y 26

Calificación

Evaluación	Fecha entrega	Porcentaje
<i>Tarea1:</i> Runge-Kutta: modelo SIR y Modos de Oscilación	Feb23	5%
<i>Tarea2:</i> Planetas Troyanos	Mar01	5%
<i>Tarea3:</i> Distribución de Maxwell-Boltzmann y compresión oedométrica	Mar10	5%
<i>Primer Trabajo (Artículo)</i> Dinámica Molecular <ul style="list-style-type: none"> • Envío de la propuesta: • Entrega del artículo: 	Mar15 Mar29	
<i>Primer Parcial:</i> Dinámica Molecular	Mar31	15%
<i>Tarea4:</i> Conducción iónica por dinámica browniana	Abr12	5%
<i>Tarea5:</i> Difusión de mosquitos por autómatas celular	Abr19	5%
<i>Tarea6:</i> Simulación de una lente por Lattice-Boltzmann	Abr26	5%
<i>Segundo Parcial:</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann	May12	15%
<i>Segundo Trabajo (exposición)</i> Autómatas Celulares y Lattice-Boltzmann <ul style="list-style-type: none"> • Envío de la propuesta • Presentación de las exposiciones 	May5 May26,28	20%
TOTAL		100%

Observaciones:

- **El envío** de las tareas, las propuestas del primer y segundo trabajos y el artículo del primer trabajo sólo se podrán enviar **desde el correo institucional del estudiante y al correo electrónico jdmunozcsimulacion@gmail.com hasta las 11:59 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 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.
- **Las tareas** deben entregarse de manera **individual, con figuras en formato .pdf**. El plagio será castigado con CERO PUNTO CERO en la tarea, y será reportado a la Facultad de Ciencias.
- **Los trabajos** se pueden realizar en parejas. El primer trabajo, *Dinámica Molecular*, se entrega como un artículo científico, y el segundo, *Autómatas Celulares y Lattice Boltzmann*; como una exposición. Una propuesta del trabajo, que describa lo que se desea hacer, debe ser enviada al correo jdmunozcsimulacion@gmail.com antes de la fecha indicada, a las 11:59pm. No hacerlo, genera una sanción de 0.8/5.0 en la nota del trabajo.
- **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.

Algunos temas posibles de primer trabajo final (entre muchos otros)

- Bolas de billar.
- Simulación 2D de un pistón.
- El movimiento de un Bumerán.
- Una moneda que gira sobre un plano.
- El resorte + péndulo de torsión.
- El efecto de Júpiter sobre el cometa Halley.
- La rotación de la F1-ATPasa.
- La caída de una tostada desde la mesa.
- Un cohete de agua.

Algunos temas posibles de segundo trabajo final (entre muchos otros)

- Un Lattice-Boltzmann que simule la celda de Bérnard.
- Un lattice-Boltzmann para aguas someras.
- La fuerza de frenado sobre una esfera.
- La fuerza de sustentación sobre un perfil de ala.
- Lentes y espejos 2D. Acústica 3D.
- Difracción de Fresnel y el punto de Poisson.
- Distribución de dosis en el agua por efecto Compton.
- Distribución de riqueza en una población cerrada y en una población exportadora.
- El efecto Skin.
- La simulación Monte Carlo de la percolación.
- La criticalidad autoorganizada y el modelo BTW.

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. M.J.E. Newman y G.T. Bakema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Claredon Press, Oxford, 1999).
6. Christensen, K. y Moloney, R.N., *Complexity and Criticality* (Imperial College Press, 2005).
7. S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond (Numerical Mathematics and Scientific Computation)*. (Oxford, Claredon Press, 2001).
8. D. Stauffer y A Aharony, *An introduction to percolation*. (The MIT Press, 1987).
9. B. Chopard y M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, (Cambridge, Cambridge University Press, 1998).
10. O.C. Zienkiewicz. *El Método de los Elementos Finitos*. (Reverté, Barcelona, 1982).
11. Udacity. *Introduction to Parallel Programming with CUDA*.
<https://www.udacity.com/course/intro-to-parallel-programming--cs344>