

72.25 Simulación de sistemas

Trabajo Práctico - Off Lattice

Autores:

61008 Banfi, Malena mabanfi@itba.edu.ar

60692 Caeiro, Alejo Francisco acaeiro@itba.edu.ar

61153 Fleischer, Lucas lfleischer@itba.edu.ar

Fecha de entrega: 01 de Septiembre de 2023

Índice

1. Introducción	2
1.1. Fundamentos	2
2. Implementación	3
2.1. Arquitectura	3
2.2. Flujo	4
3. Simulaciones	6
3.1. Especificación de configuraciones	6
4. Resultados	7
4.1. Análisis del Ruido	7
4.2. Análisis de la densidad	11
4.3. Aspectos notables	16
5. Conclusiones	20

1. Introducción

Este informe detalla la implementación y análisis del modelo OffLatice en el estudio de sistemas de partículas autopropulsadas. El modelo OffLatice, inspirado en el comportamiento colectivo de sistemas naturales, ofrece una representación dinámica y realista de las interacciones entre partículas individuales. A través de la simulación de un Autómata Celular Off-Lattice, exploraremos cómo las partículas, al moverse con velocidad constante y reaccionar a sus vecinos, exhiben comportamientos emergentes y transiciones de fase. Este enfoque no solo captura fenómenos naturales complejos, como el movimiento coordinado en bandadas de aves o cardúmenes de peces, sino que también revela patrones y simetrías espontáneas que emergen de reglas locales simples. En este informe, desglosaremos el funcionamiento del modelo, su implementación y el análisis de las propiedades observables, destacando su utilidad como herramienta para comprender y simular sistemas complejos en diversas disciplinas.

1.1. Fundamentos

El sistema se basa en dos ecuaciones principales, las cuales describen la evolución temporal de las partículas.

$$x_i(t+1) = x_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t \quad (1)$$

$$\theta(t+1) = \langle \theta(t)_r \rangle + \Delta\theta \quad (2)$$

En la ec. (1), $x_i(t)$ es la posición de la i -ésima partícula, $v_i(t)$ es la velocidad de la i -ésima partícula y Δt el paso del tiempo.

En la ec. (2), $\theta(t+1)$ es el ángulo de la i -ésima partícula y $\Delta\theta \in [-\frac{\eta}{2}, \frac{\eta}{2}]$ (siendo η la amplitud del ruido) constituye un valor de ruido uniforme. $\langle \theta(t)_r \rangle$ corresponde al promedio de los ángulos de las partículas que se encuentran dentro del radio de interacción r .

$$\langle \theta(t)_r \rangle = \text{arctan2}(\langle \sin(\theta(t)) \rangle_r, \langle \cos(\theta(t)) \rangle_r) \quad (3)$$

2. Implementación

La lógica de las simulaciones de los algoritmos vistos en clase, se realizaron en el lenguaje de programación Java en conjunto con *Maven* para el manejo de las dependencias.

Para realizar el desarrollo, se utilizó el código del algoritmo realizado en el TP1 (*Cell Index Method*). Dicho algoritmo es utilizado por el *OffLatticeMethod*, que es el encargado de realizar las simulaciones correspondientes.

Hablando mas sobre la ejecución del programa, simplemente basta con correr el archivo *App.java* que se encarga de la generación de los archivos correspondientes y luego corre la simulación con los archivos generados anteriormente (*static.txt* y *output.txt*). Luego de la ejecución, se genera un archivo llamado *output.txt*, que es utilizado para la generación de la animación y el análisis de los resultados. Dicha animación y análisis son realizados en *Python*.

2.1. Arquitectura

En la Fig. 1 se presenta el diagrama *UML* que representa la arquitectura seleccionada para guiar el desarrollo de la implementación, como se ilustra en la Fig. 1. Esta estructura visual proporciona una representación gráfica de la planificación arquitectónica elegida para la implementación en cuestión. Es fundamental destacar que este diagrama *UML* ofrece una visión general de cómo se organizarán y relacionarán los diversos componentes del sistema durante el proceso de desarrollo. Esta representación visual facilita la comprensión de la estructura y las interacciones entre los elementos clave, lo que resulta crucial para un avance eficiente y coordinado en el proyecto.

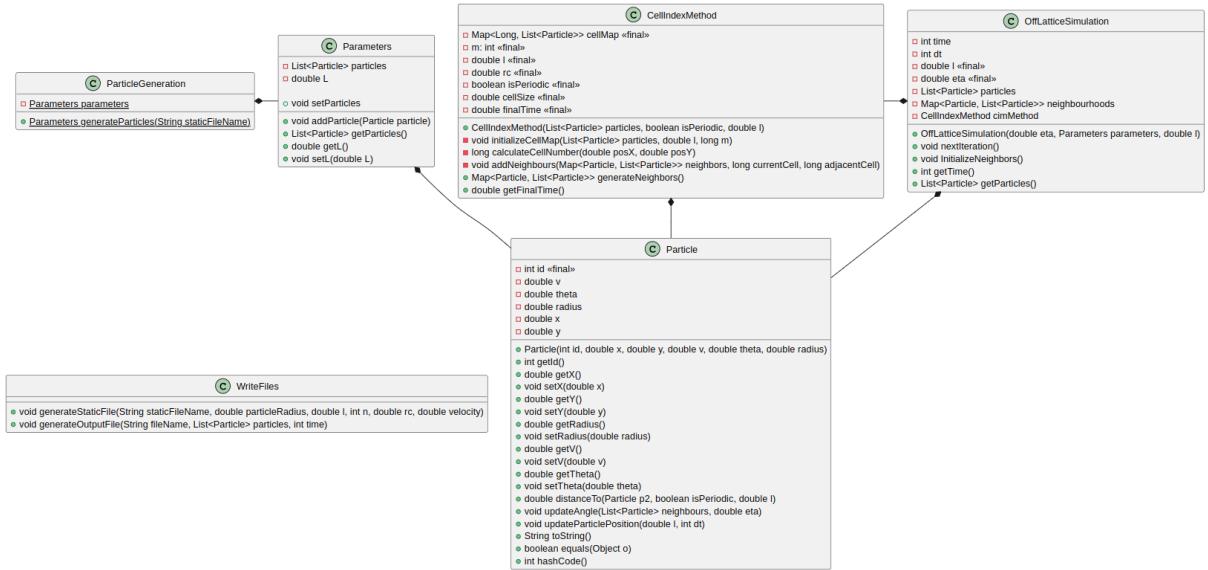


Figura 1: UML de la arquitectura

2.2. Flujo

El flujo principal del programa consiste en la distintos pasos. En primer lugar, se lee la información de configuración proporcionada por el archivo *config.json* y con dicha información, se genera el archivo *static.txt* que contiene la siguiente información de las partículas: el radio, la posición en x, la posición en y, la velocidad y el ángulo y con dicha información se generan las partículas (ver Algoritmo 1).

Una vez generadas las partículas, se cuela por cada iteración, llamando a la próxima iteración y guardando cada valor en el archivo *output.txt* (ver Algoritmo 2). Al llamar a la próxima iteración, se actualiza la posición y el ángulo de cada partícula (ver Algoritmo 3). En el archivo *output.txt* se escribe: *id* de la partícula, la posición en x, la posición en y, la velocidad y el ángulo para cada partícula en cada iteración.

Algorithm 1 Configuration process and particle generation

```
1: procedure JSONPARSER(configJson)
2:   json  $\leftarrow$  configJson
3: end procedure

4: procedure WRITESTATICFILES(json)
5:   Generate StaticFile using Json
6: end procedure

7: procedure GENERATEPARTICLES(StaticFile)
8:   particles  $\leftarrow$  generateParticles(StaticFile)
9: end procedure
```

Algorithm 2 Off-Lattice simulation

```
1: procedure OFFLATTICESIMULATION( $\eta$ , particles,  $L$ , iterations)
2:   s  $\leftarrow$  offLatticeSimulation( $\eta$ , particles,  $L$ )
3:   for  $i \leftarrow 0, \text{iterations}$  do
4:     s.nextIteration()
5:     output  $\leftarrow$  generateOutputFile(s.getParticles(), s.getTime())
6:   end for
7: end procedure
```

Algorithm 3 NextIteration method

```
1: procedure NEXTITERATION(particles,  $L$ ,  $dt$ )
2:   cimMethod  $\leftarrow$  cellIndexMethod(particles,  $L$ )
3:   neighbourhoods  $\leftarrow$  cimMethod.generateNeighbors()

4:   for all particle  $\in$  particles do
5:     particle.updateParticlePosition( $L$ ,  $dt$ )
6:     particle.updateAngle()
7:   end for

8:    $t \leftarrow t + dt$ 
9: end procedure
```

3. Simulaciones

Todas las simulación tuvieron como parámetros N (cantidad de partículas), L (largo de la grilla) y amplitud del ruido $\eta \in [0, 2\pi]$.

Cabe destacar que también se utilizara un parámetro adicional, el cual es producto de operar con dos de los parámetros mencionados anteriormente (N y L). Se trata de la densidad (ρ), la cual esta definida en la ec. (4)

$$\rho = \frac{N}{L^2} \quad (4)$$

Estos, según la simulación correspondiente, serán variables o constantes según se requiera. Se definieron además como parámetros fijos $v=0.03$ (velocidad), $r_p=0$ (radio de la partícula), $r_c=1$, cantidad de pasos $frames = 3000$ (así asegurando la llegada a un estado estacionario para distintas combinaciones de parámetros.)

Utilizando estos parámetros, el sistema produce una distribución inicial de partículas de forma aleatoria y luego simula su evolución a lo largo de los pasos. Finalmente, se obtendrá la distribución final del sistema; esta será analizada utilizando el parámetro de orden va . Dicho parámetro se define en la ec. (5)

$$v_a = \frac{1}{N_v} \left| \sum_{i=1}^N v_i \right| \quad (5)$$

donde la misma tendera a 0 cuanto mayor sea el desorden y, por consecuencia, tendera a 1 cuanto mayor sea el orden.

Las barras de error se calculan de acuerdo al desvío estándar de la muestra correspondiente.

3.1. Especificación de configuraciones

A continuación se especifican las configuraciones utilizadas para las simulaciones:

- Para analizar el parámetro de orden en función del ruido se decidió tomar $L=10$, $N=400$ y η variable.
- Para analizar el parámetro de orden en función de la densidad se decidió tomar $L=20$, $\eta=2$ y ρ variable.

4. Resultados

4.1. Análisis del Ruido

En primera instancia, se realizaron simulaciones con las configuraciones especificadas en 3.1 para analizar el ruido. A continuación se mostrarán los resultados obtenidos.

Para comenzar se analizó un ruido bajo, manteniendo la densidad constante. Gracias a la Fig. 2, se puede observar que a medida que el sistema evoluciona, las partículas se mueven en una misma dirección. Podemos decir que las partículas están altamente polarizadas.

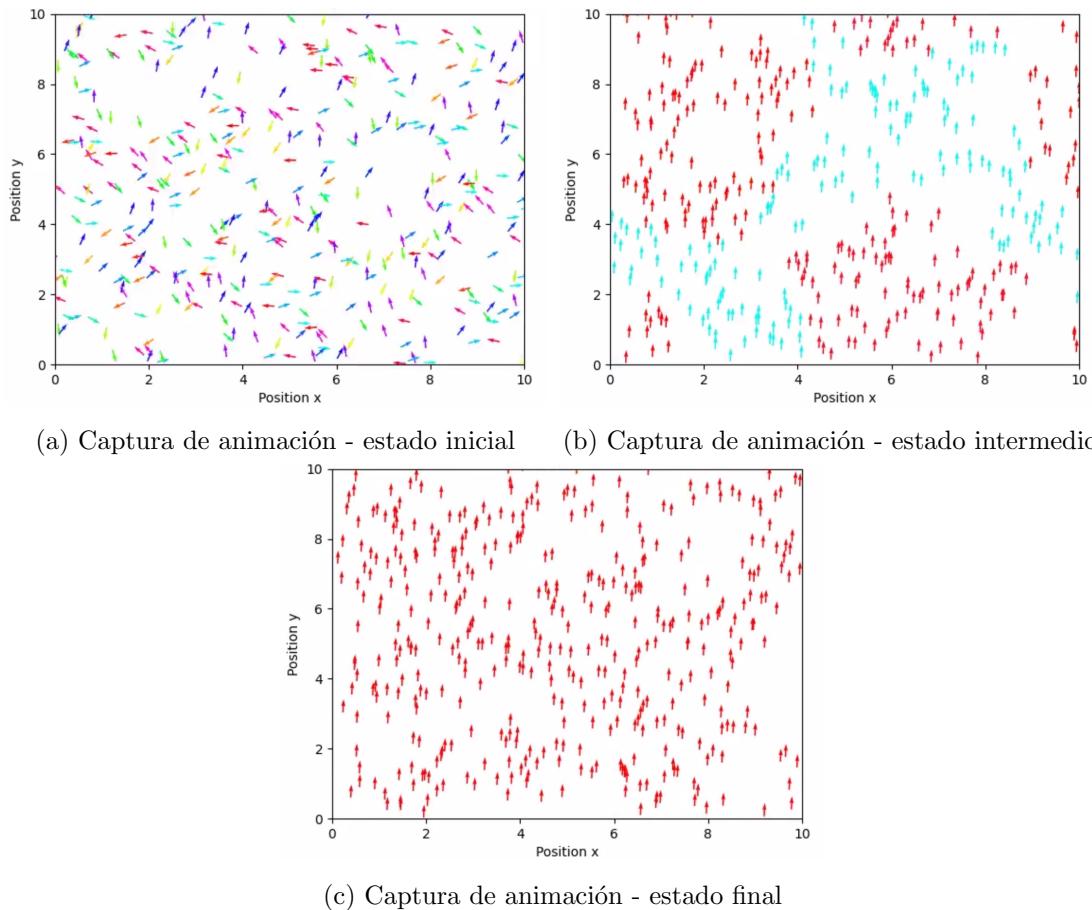


Figura 2: Capturas de las animaciones con $\eta=0$, $N=400$, $L=10$. [Animación](#)

En cuanto a la Fig. 3, al haber aumentado el ruido, se puede ver como las partículas luego de algunos pasos, también evolucionan tendiendo a una misma dirección, pero no tan claramente como en el caso anterior.

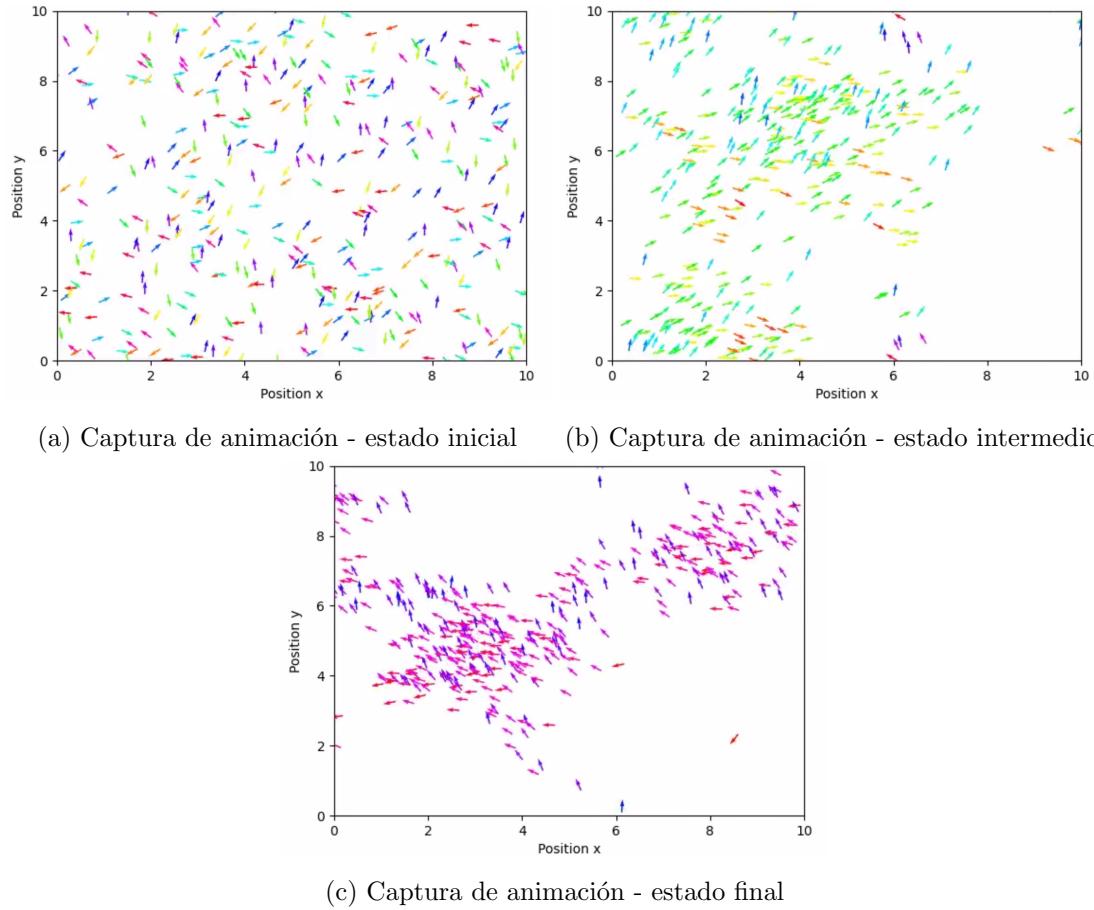


Figura 3: Capturas de las animaciones con $\eta=1.5$, $N=400$, $L=10$ [Animación](#)

Al aumentar el ruido, se muestran los resultados en la Fig. 4, donde vemos que las partículas no llegan a tender a una misma dirección. Las mismas están dispersas y poco polarizadas. No vemos un solo color como en la Fig. 2c, ni grupos de colores representativos de las direcciones de las mismas.

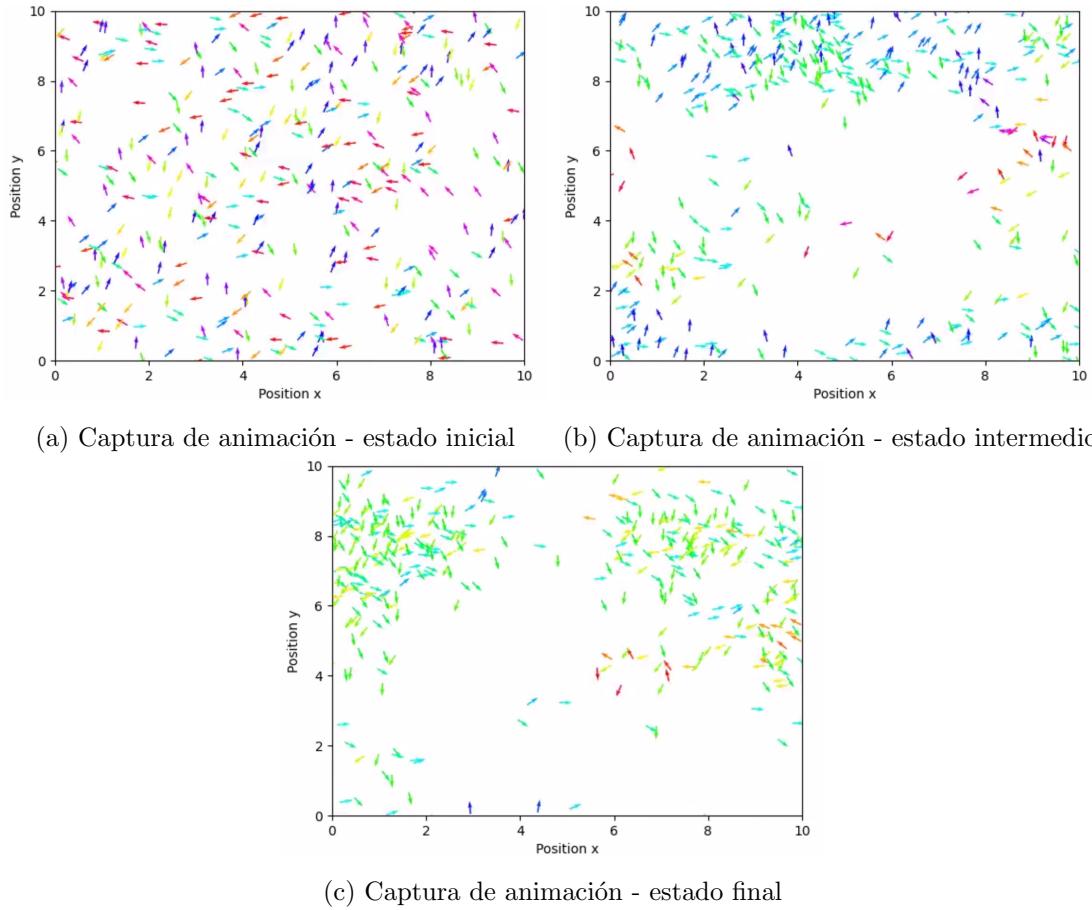


Figura 4: Capturas de las animaciones con $\eta=3.5$, $N=400$, $L=10$ [Animación](#)

Por consiguiente, resulta evidente que a medida que el nivel de ruido disminuye, las partículas tienden a alinearse en una única dirección. No obstante, al mantener constante la cantidad de partículas y su densidad, pero incrementando el ruido, se puede observar cómo las partículas empiezan a dispersarse. En otras palabras, *a medida que el ruido aumenta, la polarización de las partículas disminuye*.

En cuanto al análisis de la evolución del factor de orden en función de las iteraciones, podemos ver en la Fig. 5 los mismos resultados obtenido anteriormente tomando un valor estacionario de 500 iteraciones. Se ve claramente que con el correr de las iteraciones para distintos valores de ruidos, se tiende a una polarización constante.

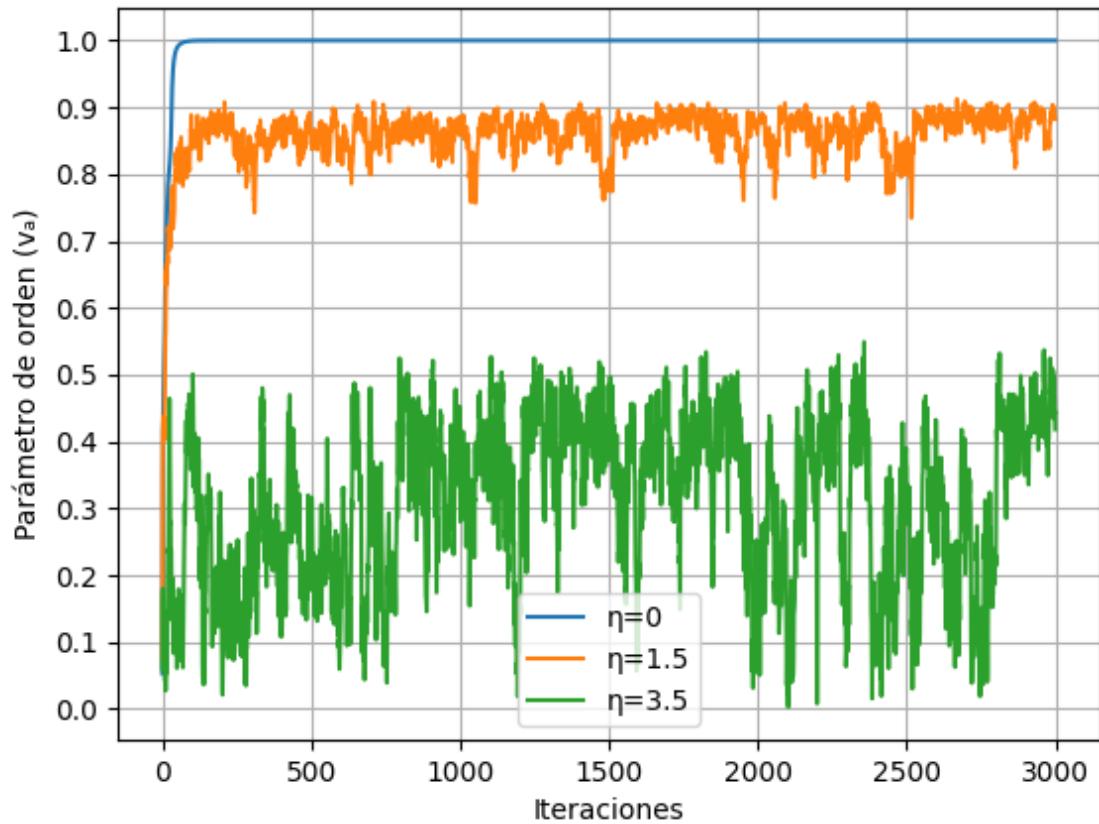


Figura 5: Evolución de Parámetro de orden (Va) en función de las iteraciones.
 $N=400$, $L=10$

Finalmente, en la Fig. 6 se ilustra cómo varía la polarización para diferentes valores de partículas y niveles de ruido. Se observa que a menor cantidad de partículas, mayor es la polarización.

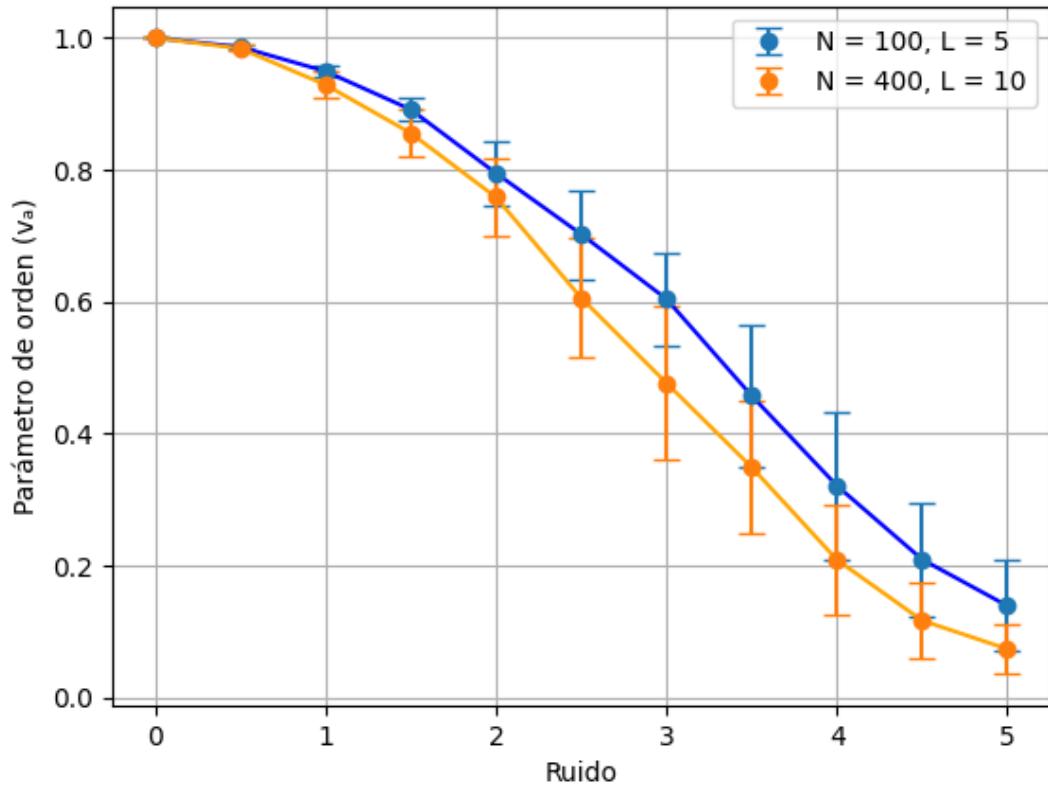


Figura 6: Evolución de Parámetro de orden (V_a) en función del ruido para múltiples valores de N con $\rho=4$.

4.2. Análisis de la densidad

Luego de hacer las simulaciones para analizar la densidad con la configuración especificada en 3.1 obtuvimos los resultados que se mostrarán a continuación.

Para una densidad baja, como se muestra en la Fig. 7, se nota que a medida que las partículas evolucionan, no muestran una tendencia uniforme hacia una única dirección. En cambio, se agrupan en subconjuntos con orientaciones similares.

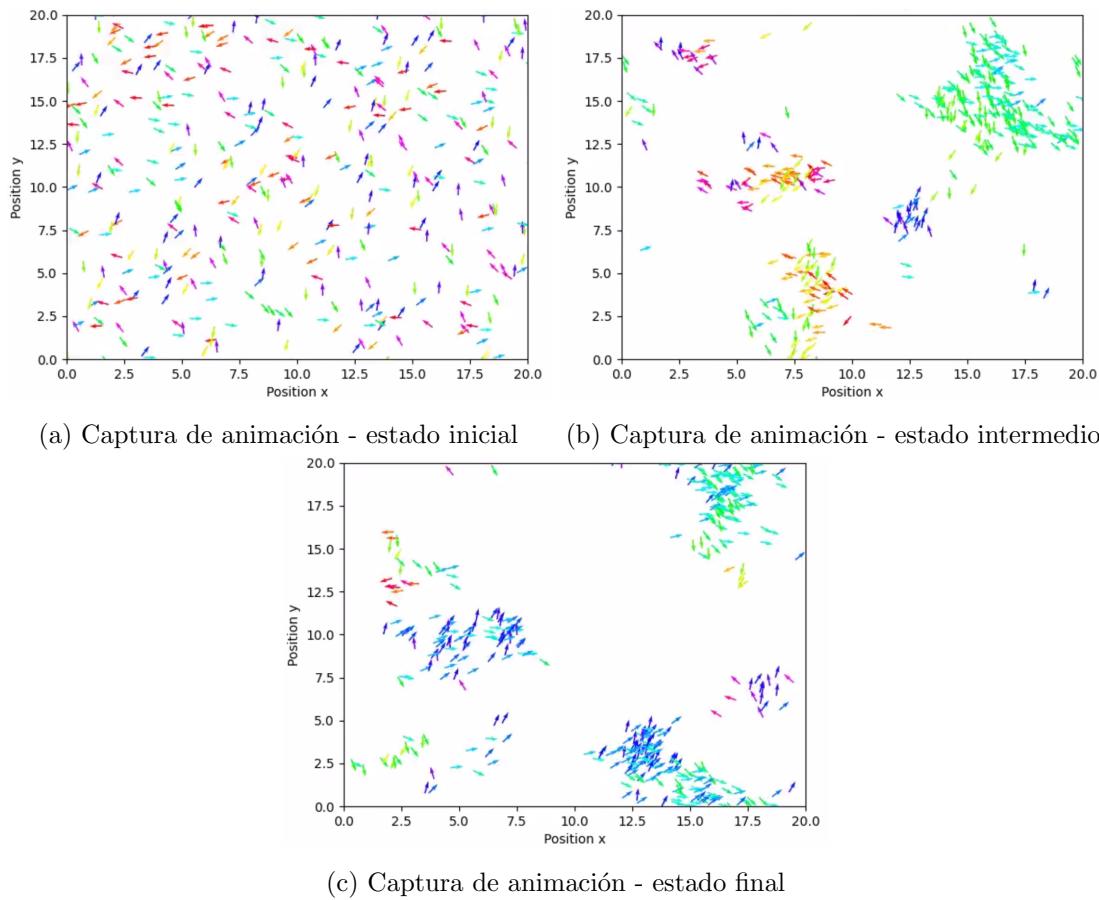


Figura 7: Capturas de las animaciones con $\rho=0.5$, $\eta=2$, $L=20$ [Animación](#)

En el caso de una densidad intermedia, se observa que en el estado intermedio las partículas tienden a formar subgrupos con direcciones específicas al evolucionar. Sin embargo, a medida que transcurren las iteraciones, se aprecia cómo estas partículas terminan moviéndose hacia una misma dirección.

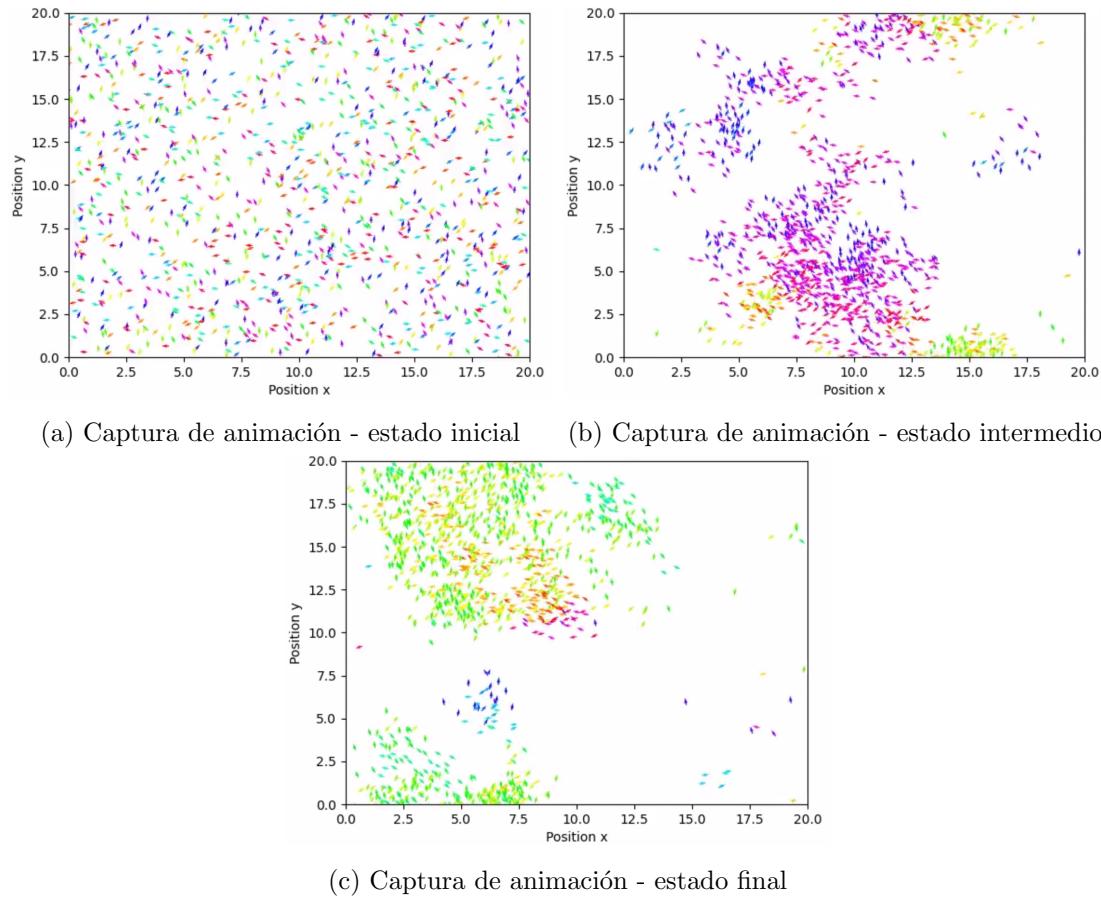


Figura 8: Capturas de las animaciones con $\rho=4$, $\eta=2$, $L=20$ [Animación](#)

Como último caso, analizando una densidad alta, podemos ver como rápidamente las partículas se agrupan y se dirigen todas en una misma dirección. Tomando una única tonalidad de colores cálidos, principalmente rosados, como se puede apreciar en la Fig. 9c.

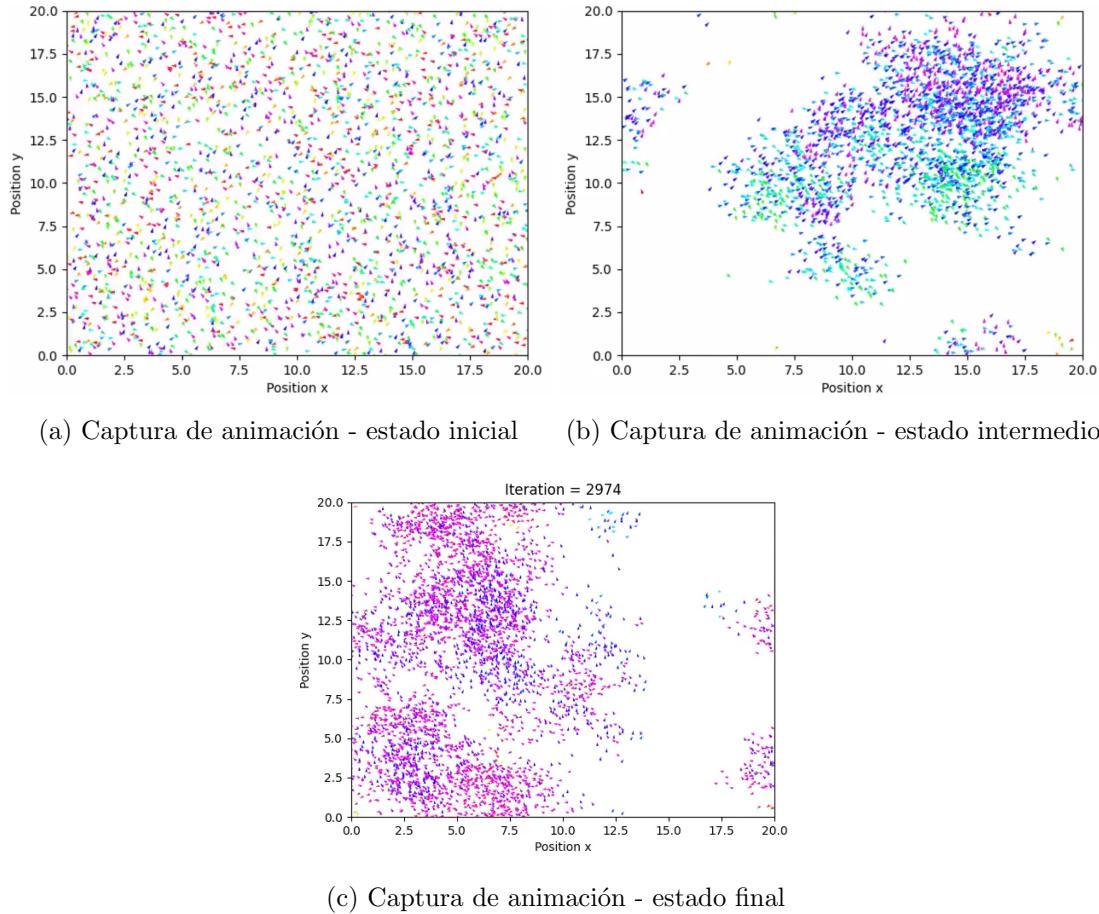


Figura 9: Capturas de las animaciones con $\rho=9$, $\eta=2$, $L=20$ [Animación](#)

Gracias a las Figs. 7, 8, 9, se puede ver que al aumentar la densidad de las partículas en las animaciones, estas tienden a moverse mas ordenadamente. Si se mantiene la cantidad de partículas y el ruido constante, cuanto mayor sea la densidad, la polarización aumenta.

En cuanto al análisis de la evolución del factor de orden en función de las iteraciones, podemos ver como para distintas densidades ($\rho=0.5$, $\rho=4$ y $\rho=9$) al ir incrementándolas, aumenta la polarización. Podemos observar este resultado en la Fig. 10, obteniendo el mismo resultado analizado anteriormente con las animaciones *al aumentar la densidad, la polarización incrementa*.

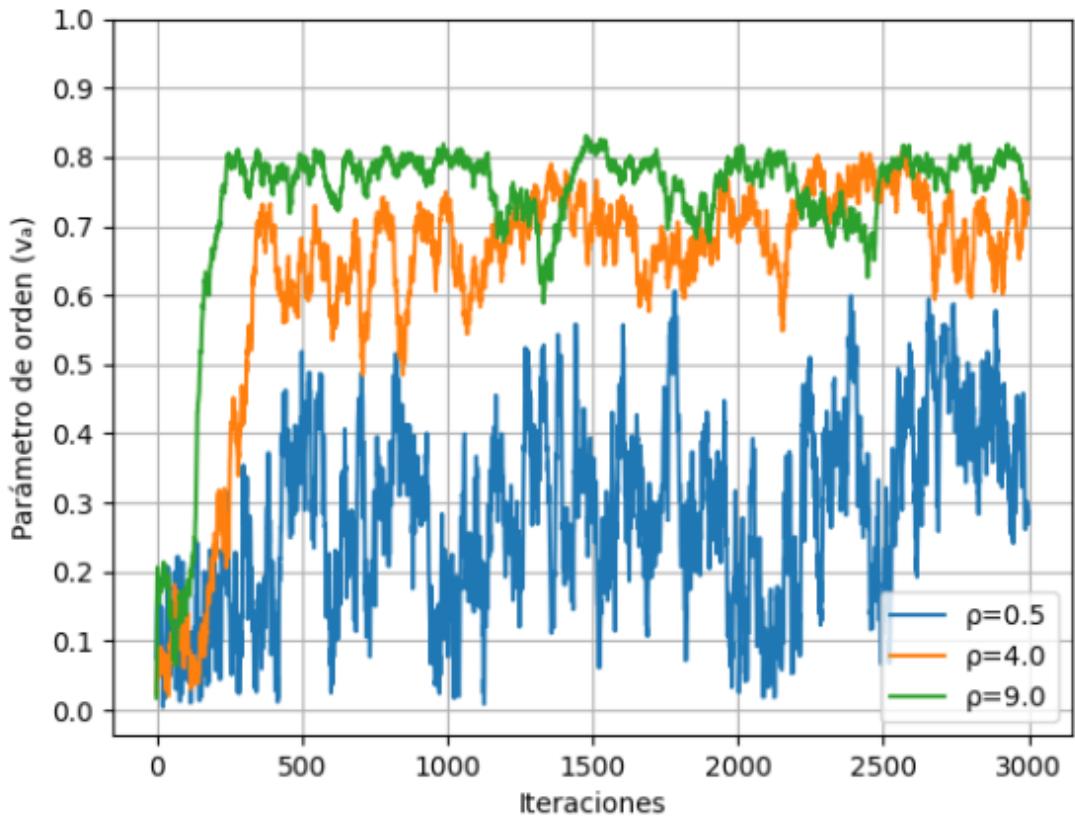


Figura 10: Evolución del Parámetro de orden (V_a) en función de las iteraciones.
 $\eta=2$, $L=20$

A continuación se analiza la evolución del factor de orden en función de la densidad tomando como valor estacionario 500 iteraciones. Este resultado se puede observar en la Fig. 11. Gracias a este gráfico podemos reafirmar los resultados anteriores, diciendo que a menor densidad, menos polarización. Asimismo se pueden observar los tres puntos analizados en la Fig. 10, y como los mismos respetan los valores representados en la Fig. 11. Vemos como el valor $\rho=0.5$ varía aproximadamente entre 0.1 a 0.4, $\rho=4$ entre 0.6 a 0.75 mayormente y finalmente $\rho=9$ se encuentra entre 0.75 y 0.8. También se observa que *a mayor densidad hay menos variación del parámetro de orden*.

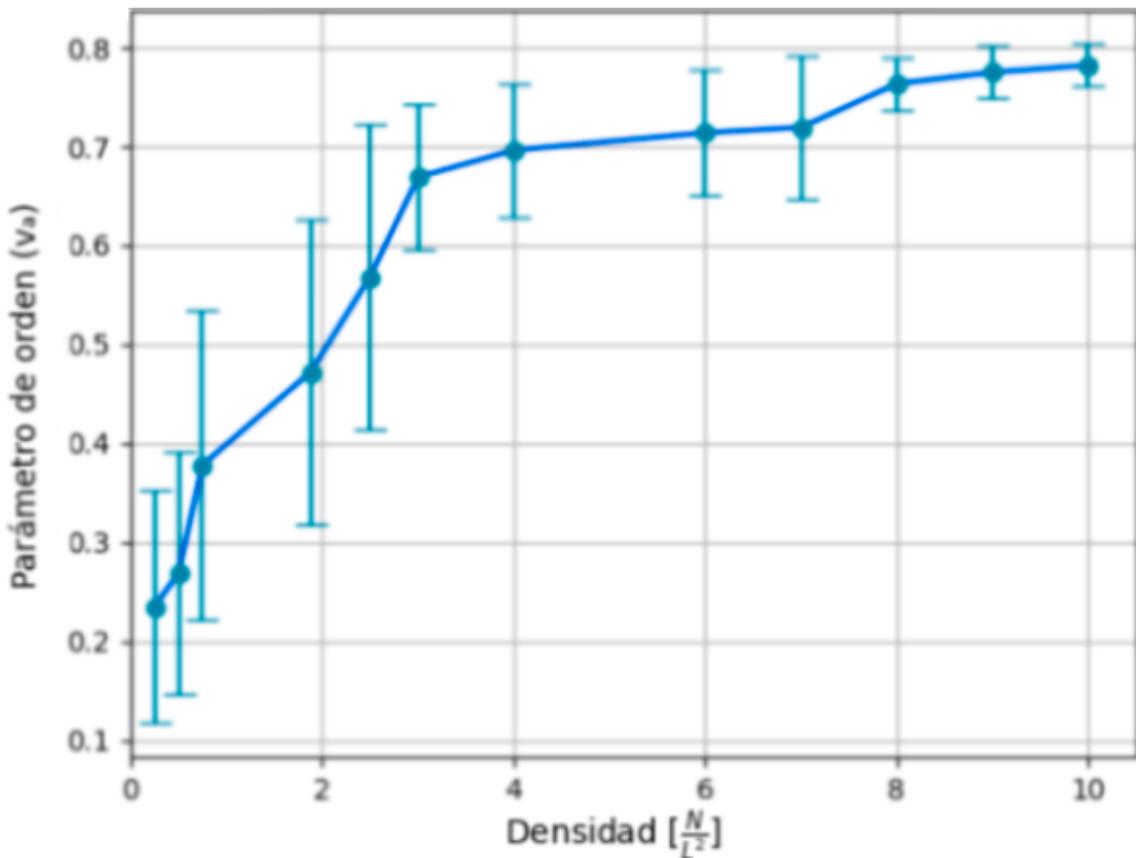


Figura 11: Evolución de Parámetro de orden (v_a) en función de la densidad $\eta=2$, $L=20$

4.3. Aspectos notables

Se llevaron a cabo pruebas utilizando diversas configuraciones recomendadas en la referencia bibliográfica [1], con el propósito de examinar una variedad de aspectos notables en el funcionamiento del sistema.

En primer lugar se analizó un sistema de partículas con parámetros de densidad y ruido bajos. Podemos observar en la Fig. 12 como los subgrupos de partículas exhiben movimientos individuales en direcciones diversas, mientras que dentro de cada subgrupo, todas las partículas se desplazan en una misma dirección coherente.

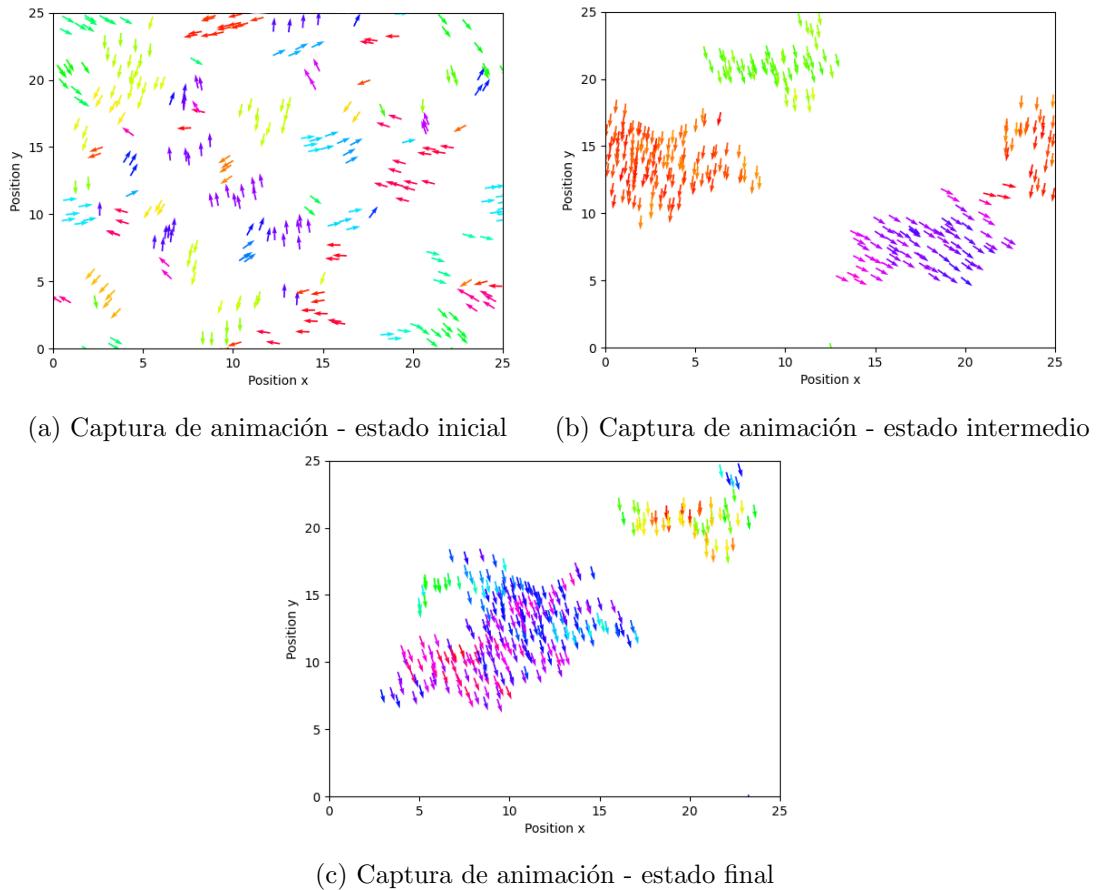


Figura 12: Capturas de las animaciones con $\eta=0.1$, $L=25$, $N=300$ ($\rho=0.48$)
[Animación](#)

Luego, se llevó a cabo un análisis de un sistema en el que tanto la densidad como el ruido eran altos. Gracias a la Fig. 13 vemos como las partículas exhiben movimientos aleatorios manteniendo una correlación entre sí en sus trayectorias.

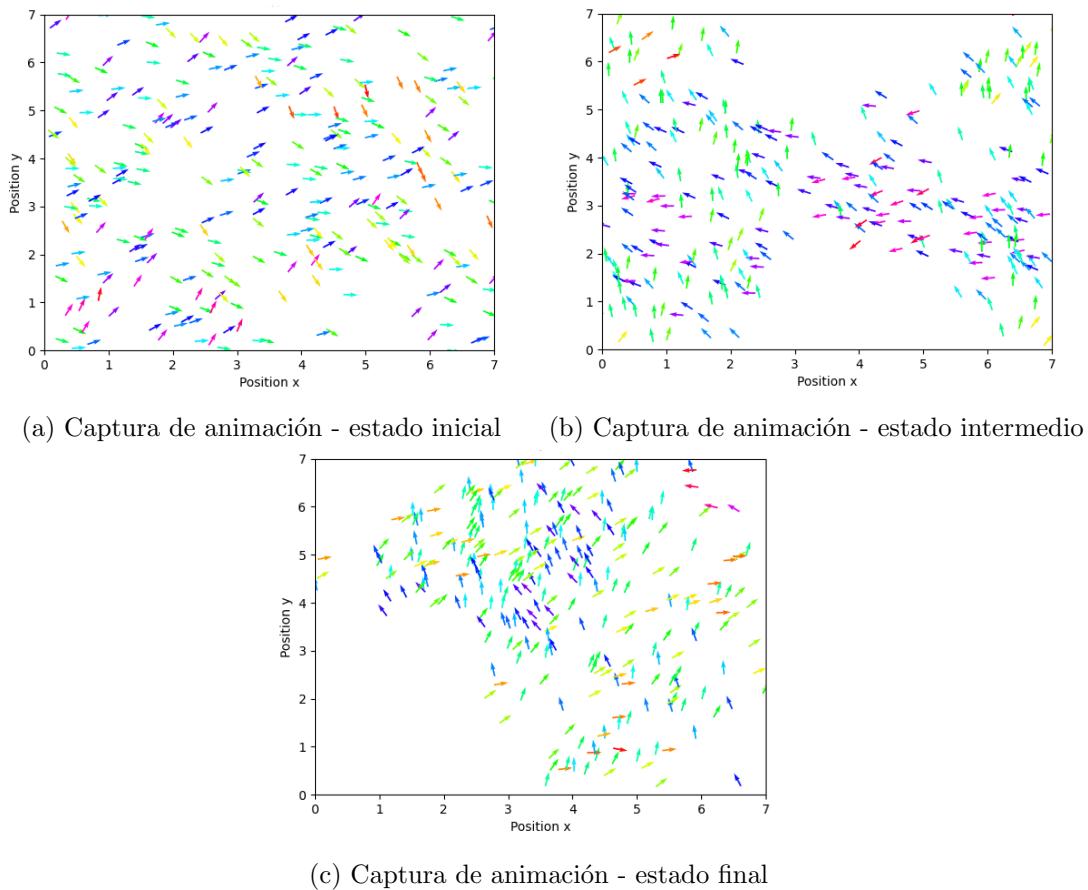


Figura 13: Capturas de las animaciones con $\eta=2$, $L=7$, $N=300$ ($\rho=6.12$) [Animación](#)

Por último se analizó el caso con densidad alta y ruido bajo. En la Fig. 14 podemos ver como hay un movimiento ordenado para todas las partículas.

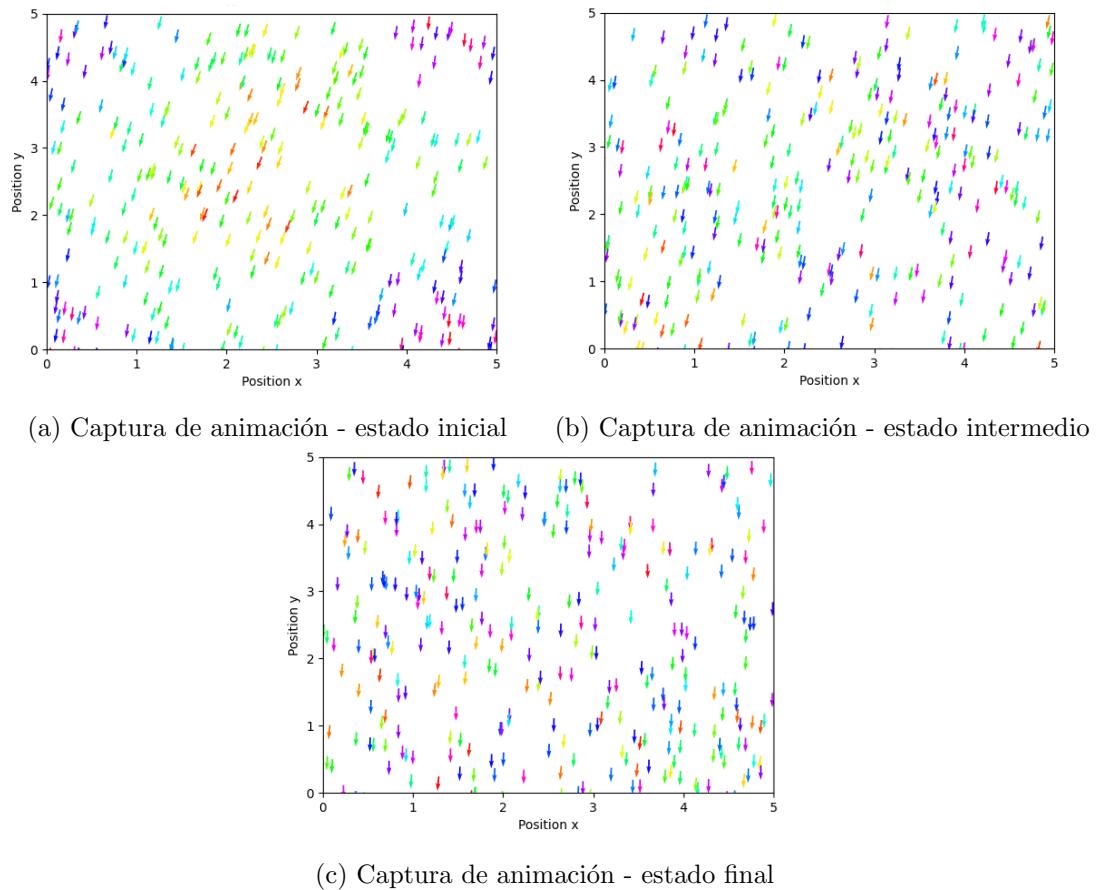


Figura 14: Capturas de las animaciones con $\eta=0.1$, $L=5$, $N=300$ ($\rho=12$) [Animación](#)

5. Conclusiones

Considerando los resultados derivados de las simulaciones y los hallazgos previamente presentados, se han obtenido conclusiones fundamentales sobre el comportamiento de las partículas en el sistema Off-Lattice al analizar el observable bajo diversas combinaciones de parámetros.

Un nivel de ruido alto resulta en una polarización reducida en el estado estacionario, ya que si el ruido varia en un intervalo más estrecho, su influencia en los cálculos de los ángulos de trayectoria de las partículas se ve disminuida (recordemos ec. 2), lo que facilita la formación del efecto 'bandada' ya que permite que las partículas influyan más en sus vecinos.

Al mantener constantes la cantidad de partículas y la densidad, un aumento en el ruido provoca una disminución de la polarización. Es decir, el orden es inversamente proporcional al ruido.

Al mantener constantes la cantidad de partículas y el ruido, un aumento en la densidad provoca un aumento en la polarización. Es decir, el orden es proporcional a la densidad. A mayor densidad se alcanza un estado estacionario más rápidamente y la variación del parámetro de orden disminuye.

A mayor densidad, se promueve el efecto 'bandada' ya que las partículas tienen más influencia entre sí, conduciendo a una polarización uniforme en el estado estacionario. En contraste, densidades más bajas pueden dar lugar a grupos de partículas influyendo localmente y mostrando polarización hasta que sus trayectorias se crucen con otros grupos.

Cuanto menor sea la cantidad de partículas en el sistema, se observa un aumento en la polarización en presencia de una densidad constante. Esta observación sugiere que la interacción entre menos individuos conlleva a una mayor alineación en el movimiento colectivo.

Adicionalmente, se concluye que los comportamientos presentados por el sistema variarán según los distintos parámetros elegidos.

Referencias

- [1] Tamas Vicsek, Andras Czirok, Eshel Ben-Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical Review Letters*, 75(6):1226–1229, 1995.