



Sistemas Físicos



Sistemas de Muchas Partículas

- Problema de 1 cuerpo → Integrable. Tiene solución analítica.
- Problema de 2 cuerpos → Integrable. Tiene solución analítica.
- Problema de 3 cuerpos → No Integrable. Sin solución analítica.
Se integra numéricamente.
- Problema de N cuerpos → Se integra numéricamente. Dinámica Molecular.
- Si N es muy grande → Mecánica Estadística - Teoría Cinética



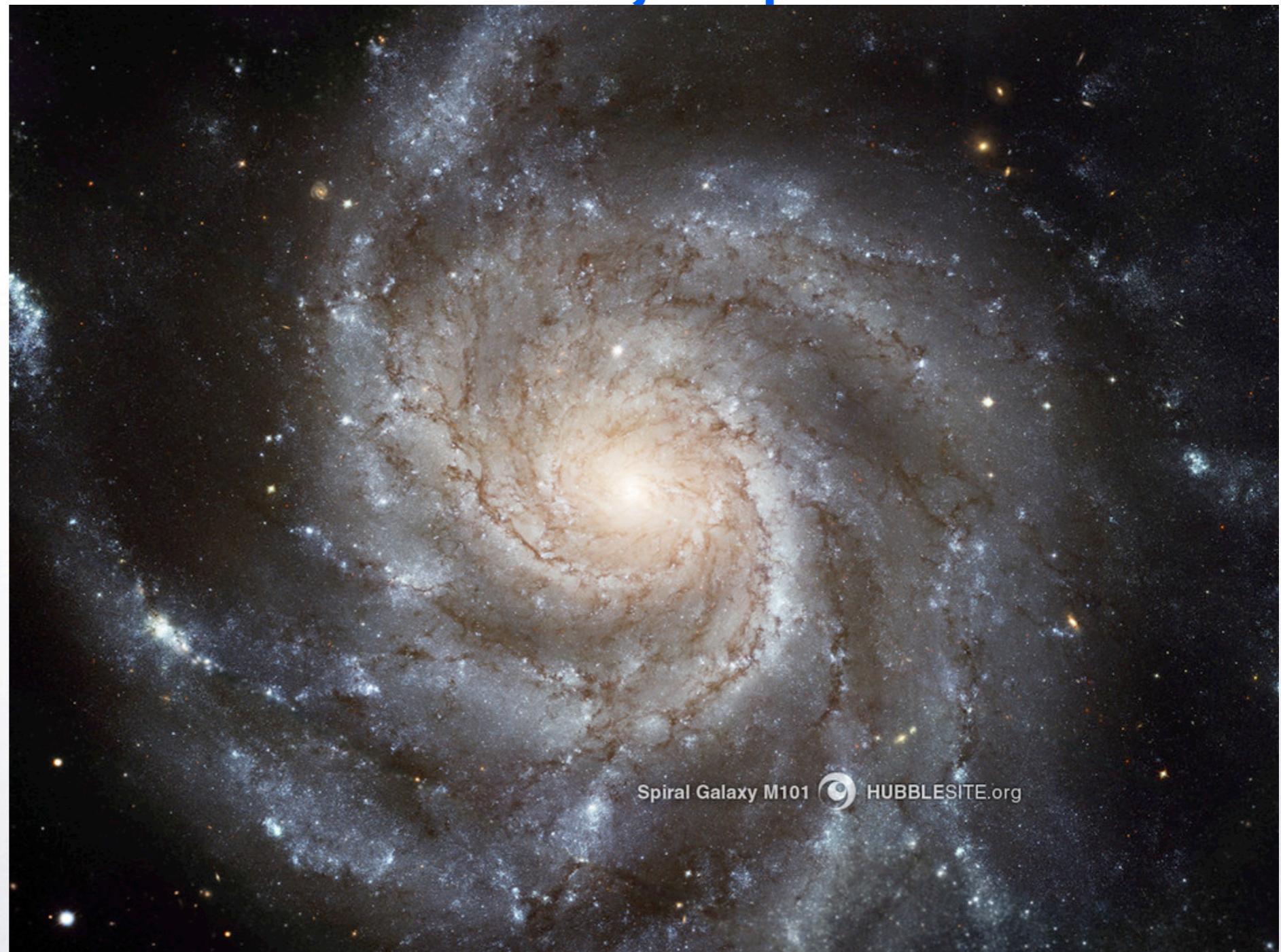
Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Interacción Gravitatoria

Galaxia M101:

170,000 años luz de diámetro.

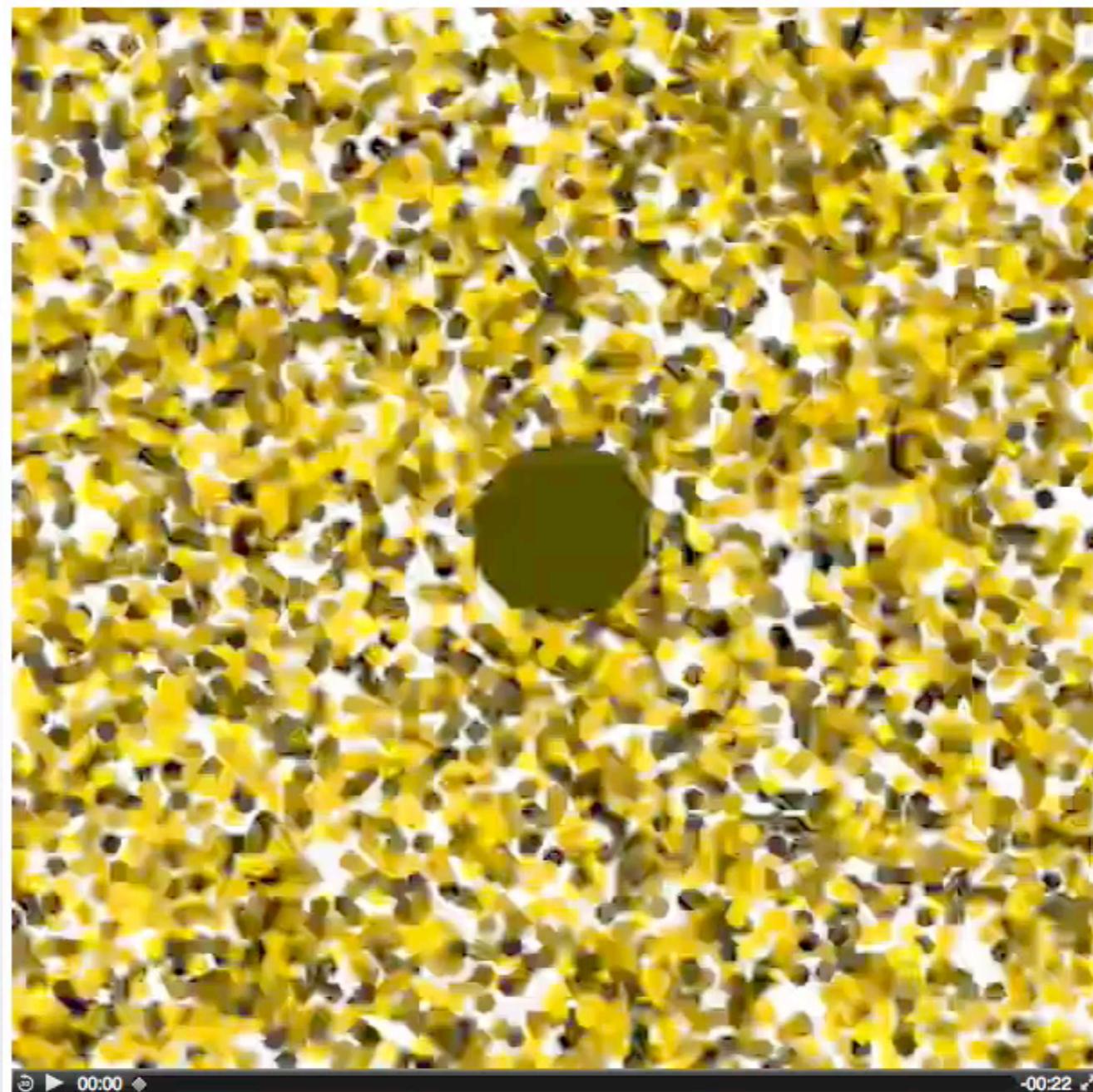
$\sim 10^{12}$ Estrellas.





Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Flujos Granulares:





Sistemas de Muchas Partículas. Ejemplos:

- Flujos Granulares:



Hourglass



Materia Activa. Definición:

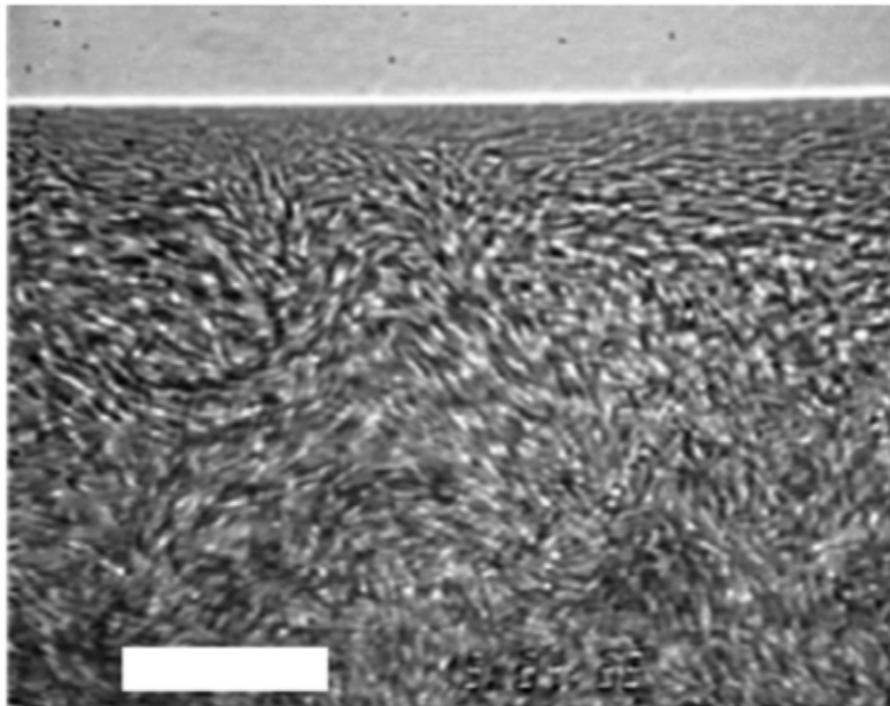
- Está compuesta por unidades **auto-propulsadas**, capaces de convertir energía almacenada o del medioambiente en movimiento sistemático.
- El ingreso de energía al sistema se da en forma local, al nivel de la unidad/partícula/agente y no en forma macroscópica a través de los límites del sistema.
- Propiedades de sistemas fuera del equilibrio:
 - Estructuras emergentes con comportamiento colectivo cualitativamente diferente al de los componentes individuales.
 - Transiciones orden-desorden.
 - Formación de patrones en las escalas mesoscópicos.
 - Etc.



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva

M.C. Marchetti *et al.*: Hydrodynamics of soft active matter



Turbulencia de Bacterias



Cardumen de sardinas



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva : Bandada de Estorninos (Starlings)





Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones Simulados

Social Force Model

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_{GRANULAR} + \mathbf{F}_{SOCIAL} + \mathbf{F}_{DRIVING}$$

- Una ecuación diferencial para cada peatón lleva a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas.
- Métodos de Dinámica Molecular

Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones “Freezing by Heating”

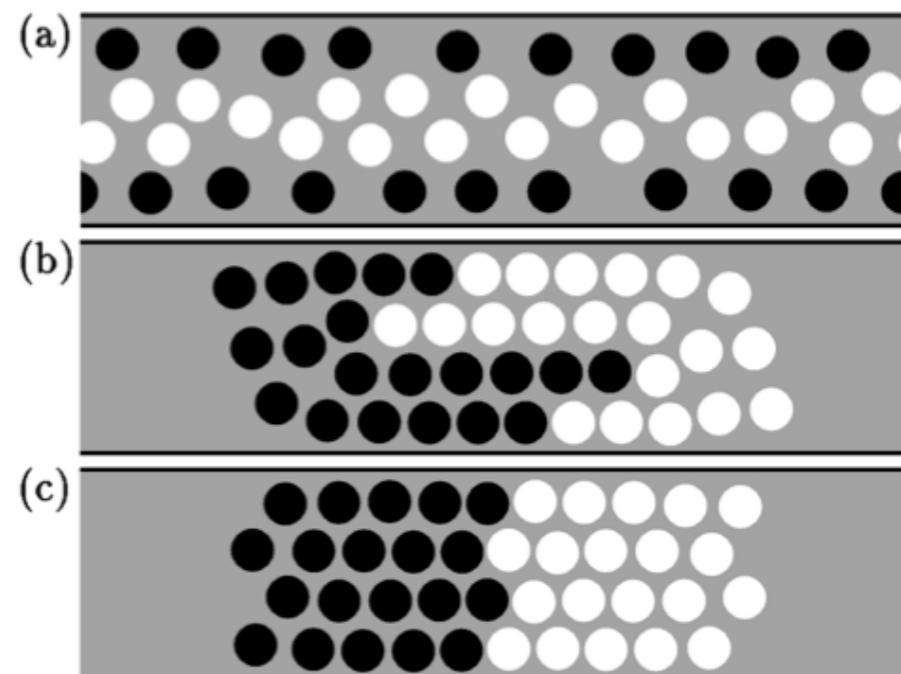


FIG. 1. Simulation of 20 particles moving from left to right (black) which interact with 20 particles moving from right to left (white) on a periodic strip of length $L_x = 20$ and width $L_y = 5$ at different noise intensities. The model parameters are $m = 1$, $D = 1$, $v_0 = 1$, $A = 0.2$, $B = 2$, and $\tau = 0.2$. (a) Lanes of uniform directions of motion forming at small noise intensity ($\theta = 1$). (b) Snapshot of an intermediate jammed state with a rough interface, which is about to form “channels.” (c) Final crystallized state resulting for large noise intensity ($\theta = 1000$).

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_{GRANULAR} + \mathbf{F}_{SOCIAL} + \mathbf{F}_{DRIVING} + \mathbf{F}_{FLUCTUATION}$$

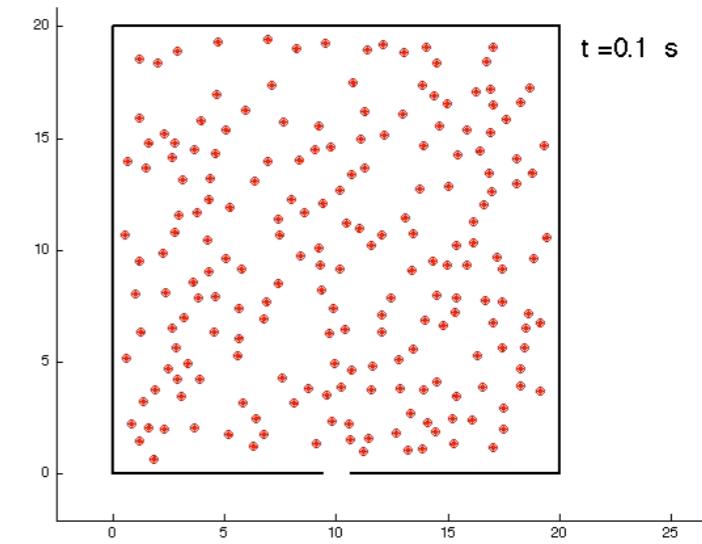
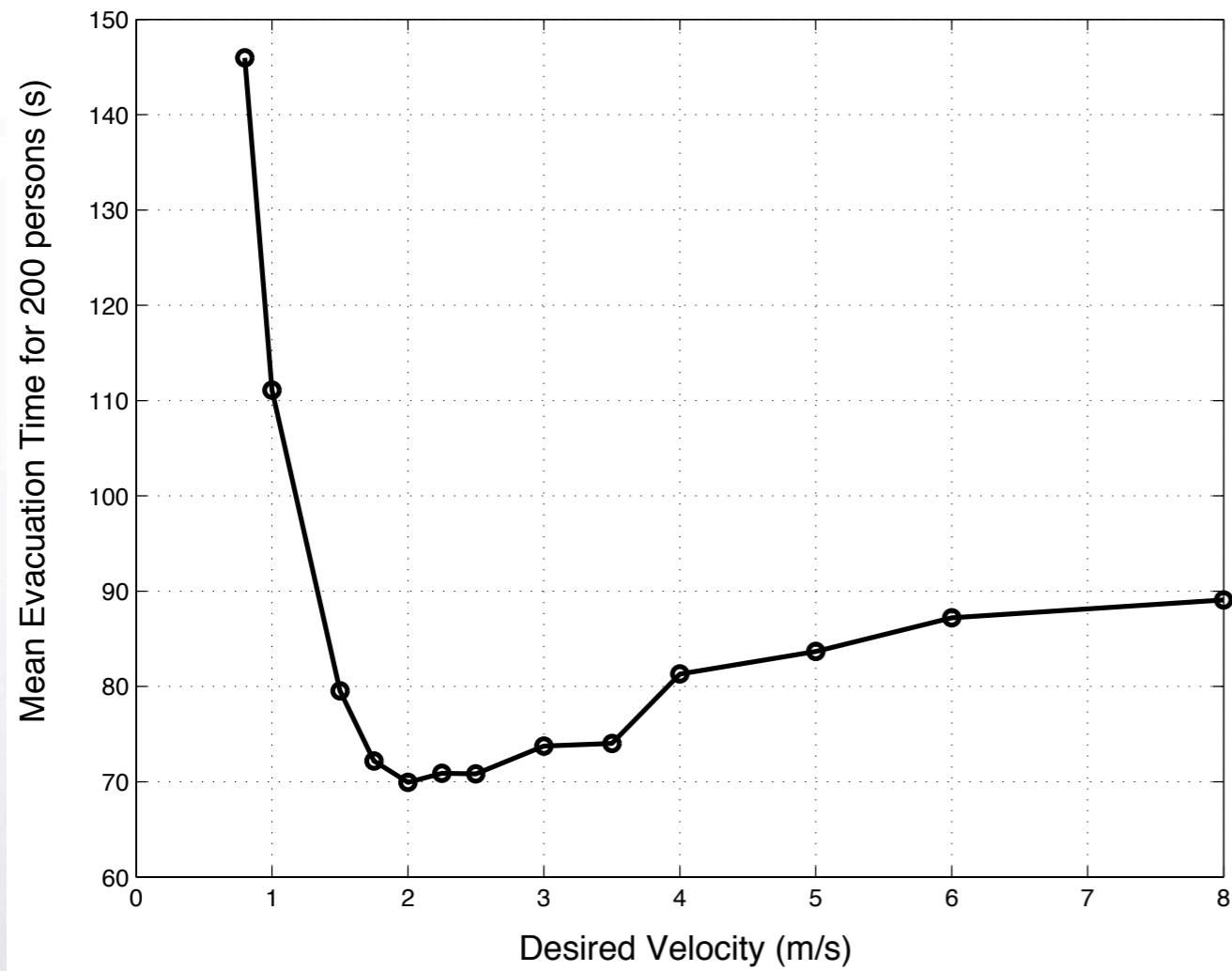
$$\langle \mathbf{F}_{FLUCTUATION} \rangle = 0$$

$$\text{STD} (\mathbf{F}_{FLUCTUATION}) = \theta$$



Materia Activa. Ejemplos:

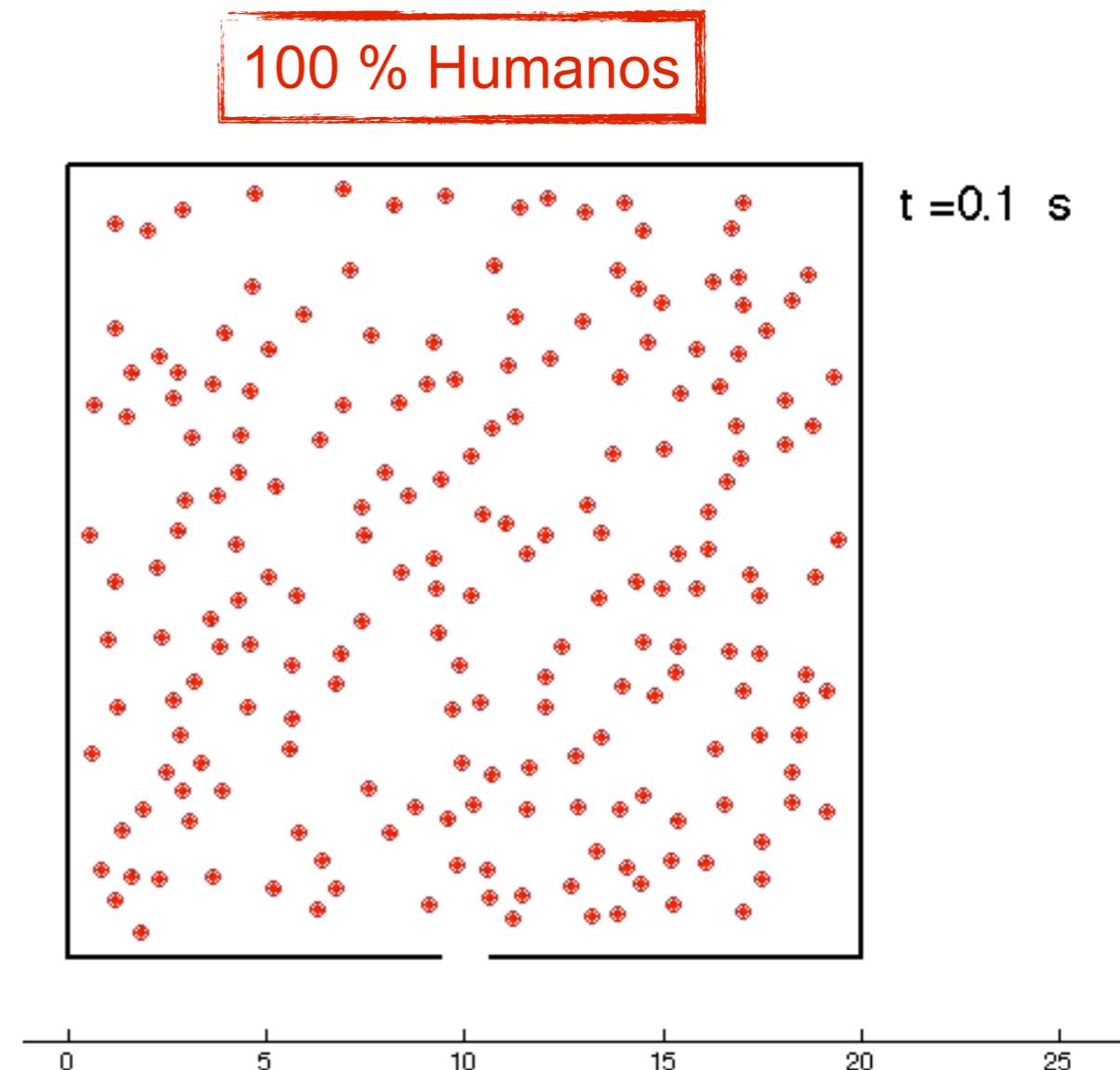
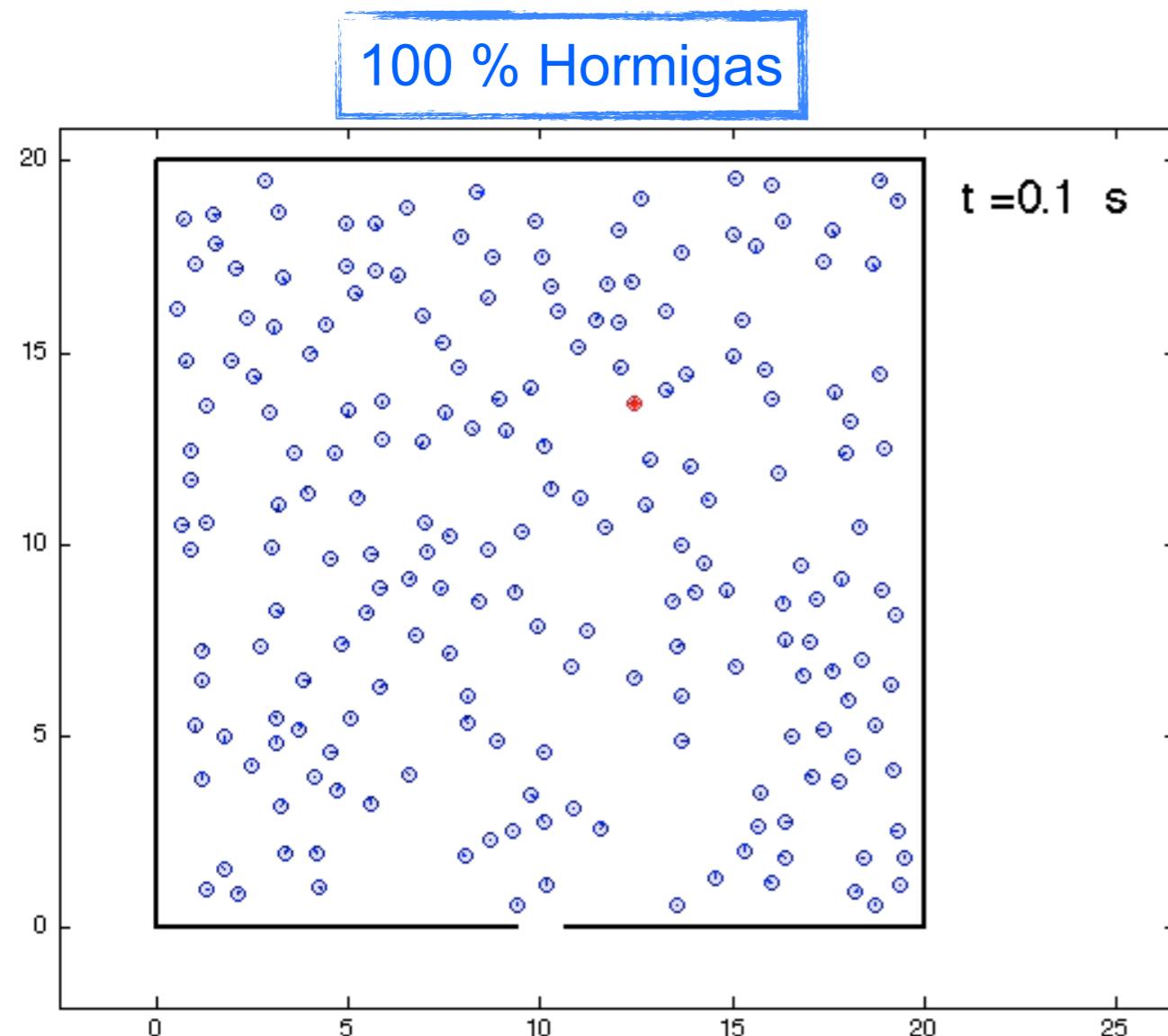
- Materia Viva: Peatones Egoístas “Faster is Slower”





Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Hormigas - Egreso ante Emergencia

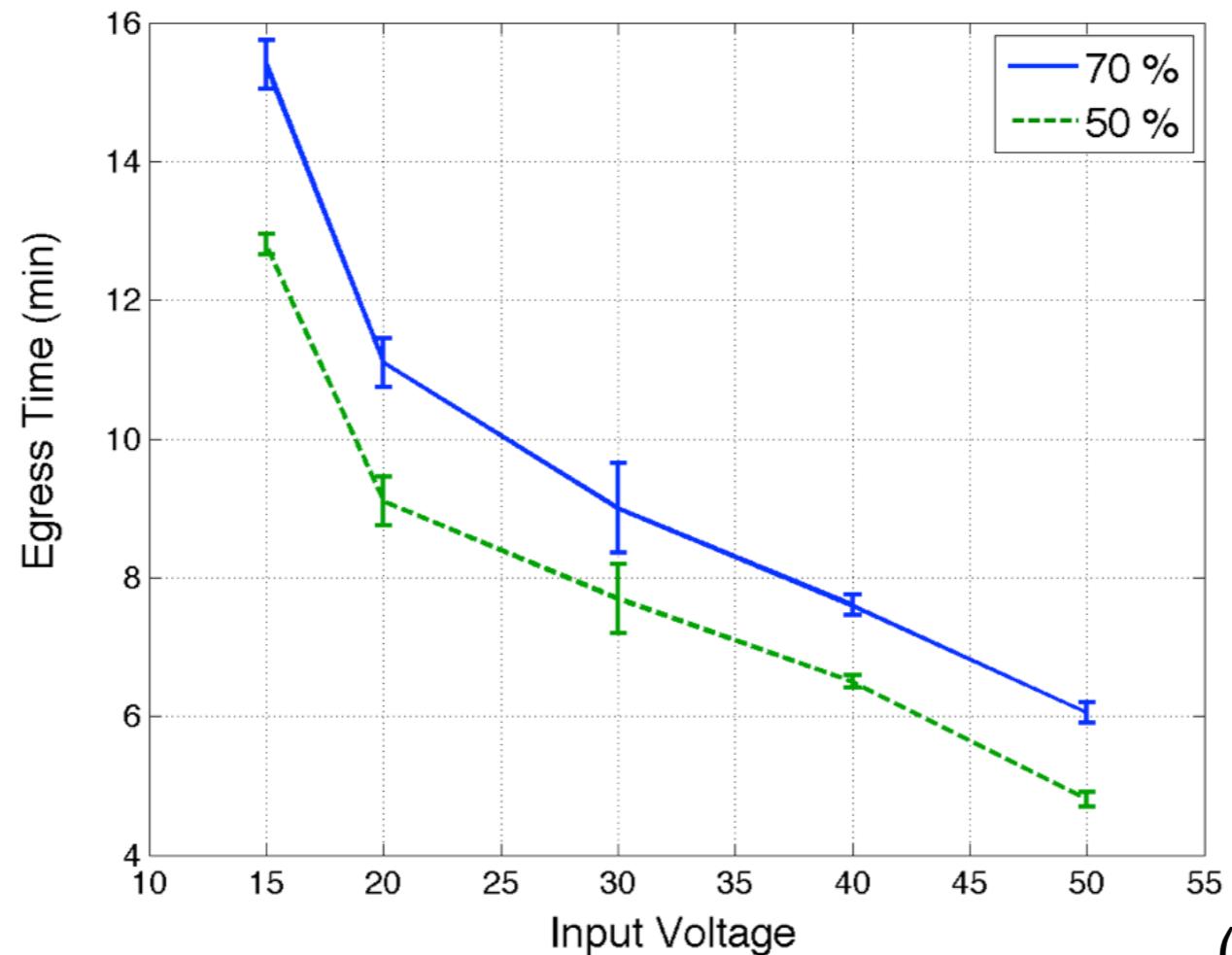




Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Hormigas - Egreso ante Emergencia

Faster is Faster !



(At 60 V, they all die !)



Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Zombies “altruistas” ...





Materia Activa. Ejemplos:

- Materia Viva: Comportamiento Emergente

Agentes “suicidas” cuya prioridad de supervivencia no es el individuo (zombies, hormigas)



Beneficio para el conjunto

Agentes “egoístas” cuya prioridad de supervivencia es el individuo (todos los animales que no sean insectos sociales)



Perjuicio para el conjunto



Materia Viva. Ejemplos:

- Materia Viva: Peatones Simulados

Circle – 1000 Agents

Description

1000 Agents in a Circle attempt to get to antipodal position



Intel Quad Core: ~1,000 FPS

Larrabee Simulator [32 Cores]: ~8,000 FPS



Materia Viva. Ejemplos:

- Aplicaciones en Cine





Muchas Partículas Interactuantes

- Todos los sistemas vistos hasta ahora, consisten en partículas que interactúan entre sí de a pares y en función de las distancias.
- Para interacciones de largo alcance se deben calcular las distancias entre todas las partículas.
- Para interacciones de corto alcance solo son relevantes las distancias a los vecinos cercanos.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method (CIM)”

- Método de Fuerza bruta mide la distancias de todas las partículas con todas las partículas. La complejidad crece $\sim N^2$.
- Usando el CIM la complejidad crece lineal con N .



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method”

Idea General:

Consiste en dividir el espacio en celdas, asignar las partículas a las celdas según su ubicación y calcular distancias solo entre partículas de celdas vecinas.

(a)

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

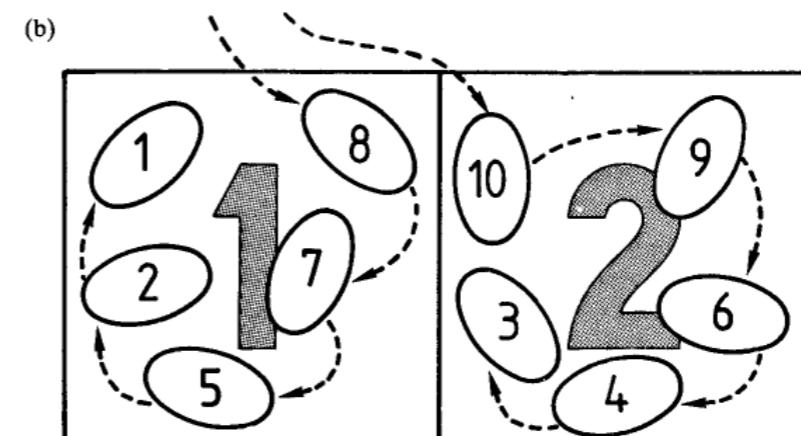


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method”

Si el dominio tiene lados de longitud L y $M \times M$ celdas, entonces:

$L / M > r_c$ (radio de interacción partículas).

(El r_c puede estar bien definidos en casos de cálculos de fuerzas que dependen de las distancias. Pero en otros casos se tendría que considerar la velocidad de las partículas para estimarlo.)

(a)

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

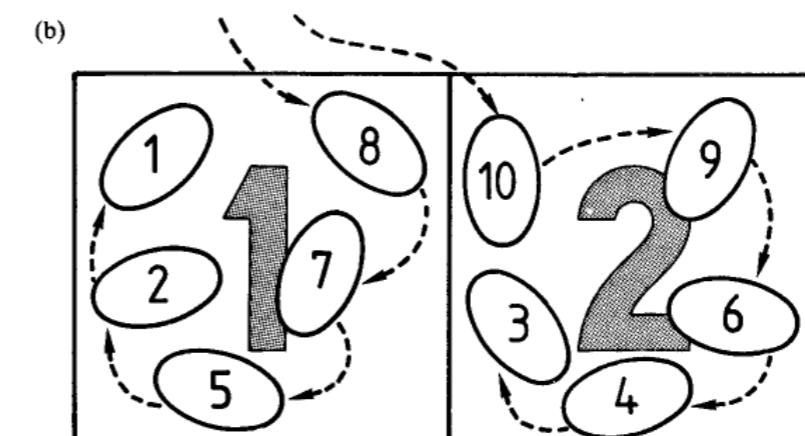


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method”

Identificar a que celdas pertenecen todas las moléculas es rápido y se podría hacer en todos los pasos temporales.

(a)

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

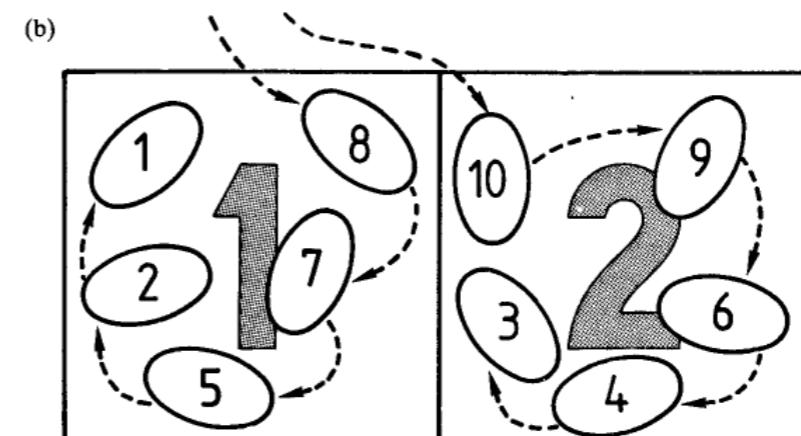


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method”

Sugerencia, crear dos arrays:

- HEADS: 1 part. que identifica la celda (x ej. la 8 en la celda 1).

- LIST: Dada la partícula “Head” tiene la lista de las demás partículas en esa celda.

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

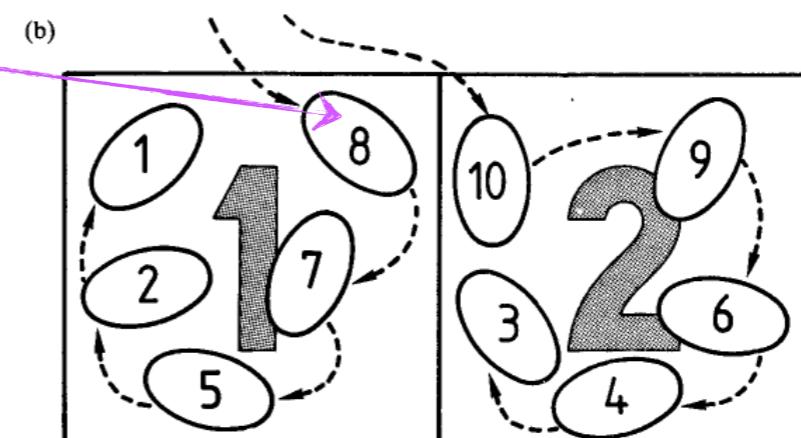


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

“Cell Index Method”

Para cada celda (por ejemplo la 13) mirar solo las 4 celdas vecinas (9,14,19 y 18). Dado que las distancias entre partículas es simétrica, esto reduce a la mitad el tiempo de cálculo. ($d_{ij} = d_{ji}$).

(a)

21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5

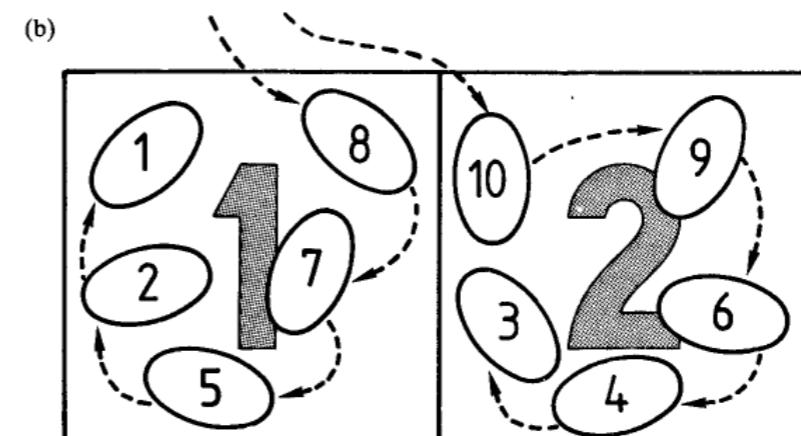


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Detección de vecinos

Lista de Vecinos (" Computer Simulation of Liquids ")

"Cell Index Method"

Considerar:

Condiciones de contorno periódicas

Por Ej. La partícula en celda 10 es vecina de la que está en la celda 6 y su distancia es del orden de L / M

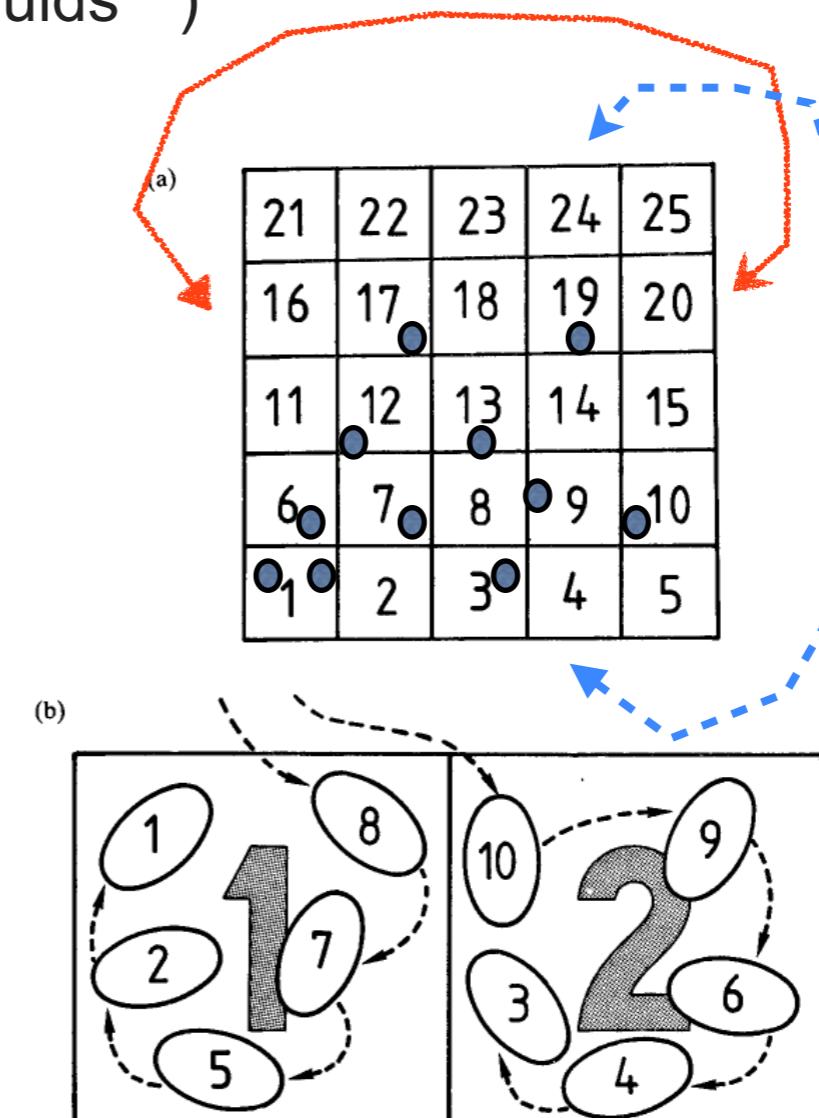


Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.



Trabajo Práctico

Listado de Vecinos

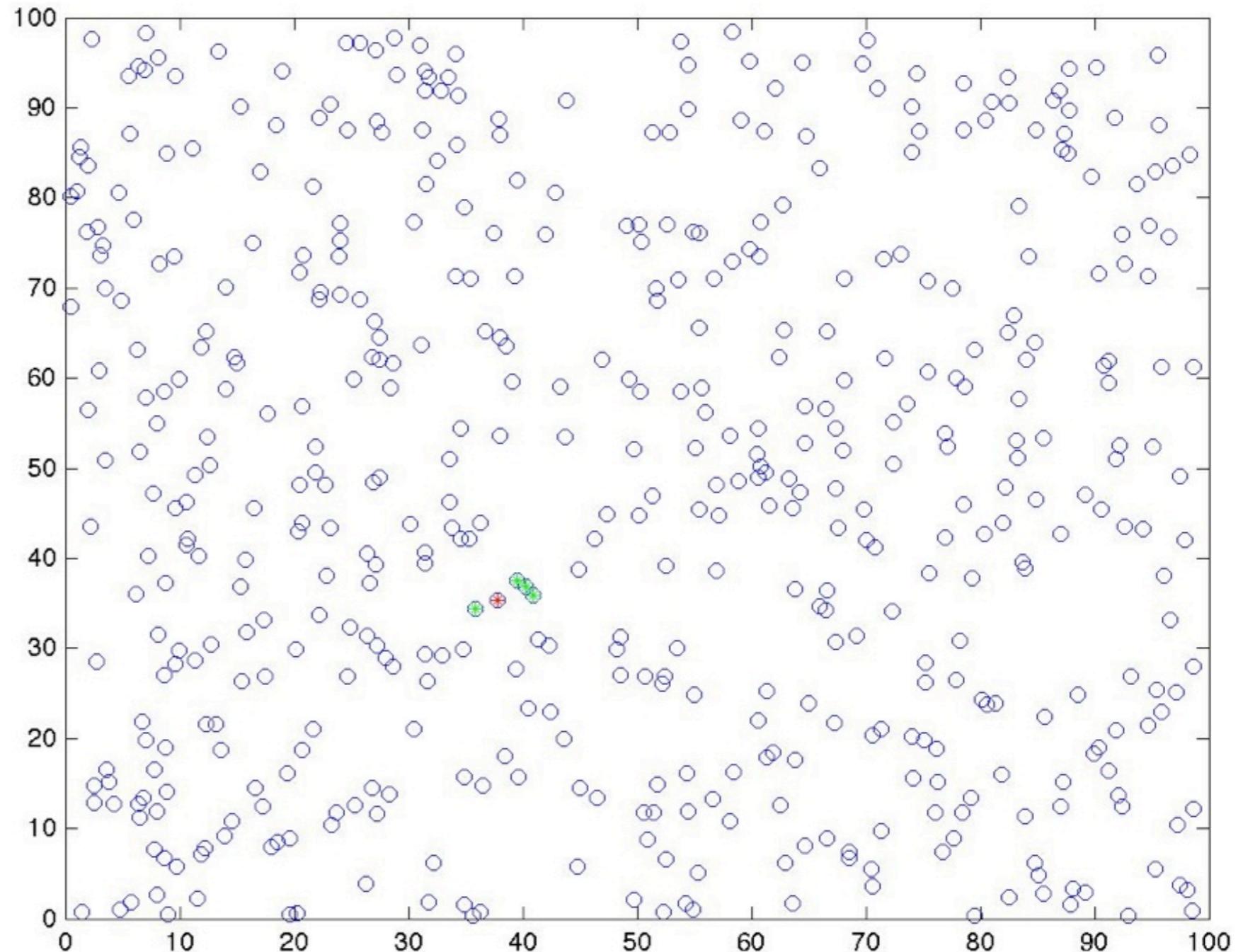
- Implementar el “Cell Index Method”
- Estudiar eficiencia del algoritmo en función del tamaño de las celdas de la grilla.
- Pensar un criterio para definir cantidad y tamaño de celdas en función del área y la densidad de las partículas.
- Para testear se dará 2 archivos con las posiciones de las partículas en distintos tiempos y los parámetros necesarios.
Se deberá poder determinar los vecinos que disten menos de r_c para L y M
(dados estos 3 parámetros como inputs).
Comparar con el método de fuerza bruta (que mide para cada partícula la distancia a todas las demás partículas.)



Trabajo Práctico

Lista de Vecinos

- Para Testear:
Visualizador de Vecinos





Reglas Generales Trabajos Prácticos



Reglas Generales Trabajos Prácticos

- Herramienta para visualizar animaciones basadas en las simulaciones (puntos, discos, vectores, estelas, colores...)
- Simulación SEPARADA de Visualización:
 - *El simulador genera como outputs archivos con posiciones y velocidades.*
 - *Luego el visualizador levanta esos datos y genera la animación.*
(Exportar a un avi.)

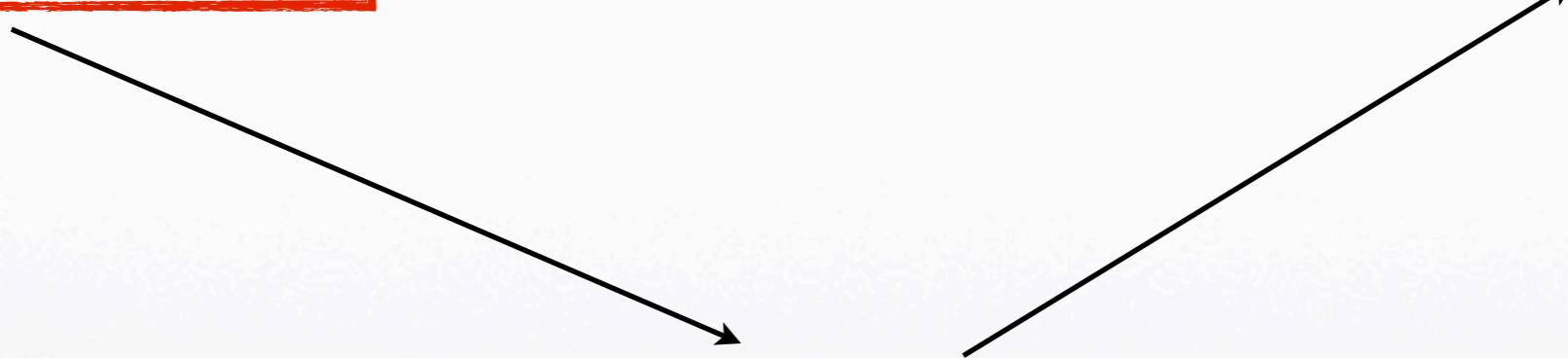


Reglas Generales Trabajos Prácticos

Herramienta de
SIMULACIÓN

Herramienta de
ANIMACIÓN

Archivos con
posiciones en
función del tiempo





Reglas Generales Trabajos Prácticos

Formato de archivos para guardar simulaciones y su posterior visualización:

Info Dinámica. (El nro. de fila es la identidad de la partícula 1,2,...N)

t1

x1 y1 vx1 vy1 (partícula 1)

x2 y2 vx2 vy2 (partícula 2)

....

xN yN vxN vyN (partícula N)

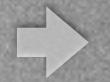
t2

x1 y1 vx1 vy1 (partícula 1)

x2 y2 vx2 vy2 (partícula 2)

....

xN yN vxN vyN (partícula N)



Reglas Generales Trabajos Prácticos

Formato de archivos para guardar simulaciones y su posterior visualización:

Info Estática = constante en el tiempo.

(El nro. de fila es la identidad de la partícula 1,2,...N)

N (Heading con el Nro. total de Partículas)

L (Longitud del lado del área de simulación)

r1 c1 (radio y color de la partícula 1)

r2 c2 (radio y color de la partícula 2)

....

rN cN (radio y color de la partícula N)



Visualizador: Matlab, Ovito, otro,

Se recomienda:

www.ovito.org

(admite formatos de archivo similares a los descritos arriba)



Reglas Generales Trabajos Prácticos

Entregables

- Código Fuente de las simulaciones implementadas.
- Archivos *.avi que permitan visualizar el sistema simulado.
- Presentación Oral / Informe.



Presentaciones

Formato



Presentaciones

- Descripción Sistema (< 8 min).
- Implementación (<8 min).
- Resultados (<14 min).
 - Animaciones.
 - Estudio paramétrico/estadístico.
 - "Live demo".



Presentaciones

Algunos Consejos ...

James C. Garland, "ADVICE TO BEGINNING PHYSICS SPEAKERS"
Physics Today (1999)



Presentaciones

Algunos Consejos...

Cumplir con el tiempo establecido.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Usar un mínimo de ecuaciones.

No escribir mucho texto.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Practicar la charla



*Practice your speech in front
of spouse, friends —*



Presentaciones

Algunos Consejos...

Vestirse apropiadamente ...



Presentaciones

Algunos Consejos...

Interactuar con la audiencia:

- Hablar alto.
- Mirar a los ojos a personas en distintos sectores de la sala.
- No mirar el piso como un zombie....



Presentaciones

Algunos Consejos...

Al final, las preguntas de la audiencia.

- Permitir que quien pregunta termine la pregunta.
- Repetir la pregunta en voz alta para que todos la oigan.
- Respuestas breves, no hablar de otros temas relacionados.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Al final, las preguntas de la audiencia.

- No entrar en discusión.
- Decir "Parece que tenemos diferentes opiniones, dejemos esta discusión para el "coffe-break".



*Control
your feelings: never
argue with an aggressive questioner*



Presentaciones

Algunos Consejos...

Chistes

Uno o dos chistes pueden amenizar la charla, pero cuidado con los chistes...pueden no funcionar como uno esperaba.



Presentaciones

Algunos Consejos...

Varios expositores

- Cada uno tiene un tiempo definido.
- No superponerse.
- Responder preguntas por orden.



Sistemas Físicos

FIN