104 Reunión de la Asociación Física Argentina
Noacco Rosende, Santiago. J. [1,*]
Grigera, Tomás [1,2]

Ejemplo motivador de una simulación para un sistema complejo en la Mecánica estadística

Contraste de dinámicas vectorial vs angular, para sistemas con movimiento colectivo de partículas autopropulsadas.

RESUMEN

En el marco de la asignatura ”Simulaciones Computacionales“ se realizó como trabajo final la reproducción del modelo de Vicsek et al. en 2D implementando dos dinámicas distintas: con ruido angular y con ruido vectorial. El primer objetivo del trabajo es detallar el proceso de creación de la simulación, aportando pautas ´útiles para su reproducción en clase; y vincularla con herramientas típicas de la Mecánica Estadística. En segundo lugar se profundiza en los resultados del análisis; en concreto se contrastan ambos modelos viendo en particular la dependencia del parámetro de orden como función del ruido. Así mismo, en el marco del estudio de la transición de fase, se analiza el comportamiento de la susceptibilidad y el cumulante de Binder (asociados al parámetro de orden) para ambas dinámicas. Finalmente se estiman (de manera conservadora) los valores de los ruidos críticos. Obteniendo 0,35 para la dinámica angular y 0,5 para la dinámica vectorial.

Preguntas que buscamos responder

¿Por qué es interesante estudiar sistemas fuera de equilibrio?

¿Cómo hicimos la simulación?

¿Cuál es el rol de las Condiciones de Contorno?

¿De qué orden es la transición que observamos?¿Por qué es difícil dar un veredicto?

¿Qué herramientas computacionales utilizaron?
Monte Carlo,
Fortran/C++/Python

Conceptos de Mecánica Estadística vistos:
- Parámetro de orden
- Valores de Expectación
- Limite Termodinámico
- Transiciones de fase
- Puntos críticos
- Escaleo tamaño finito
- Universalidad

Conceptos de Informática:
- Objetos
- Monte Carlo
- Estimación de errores

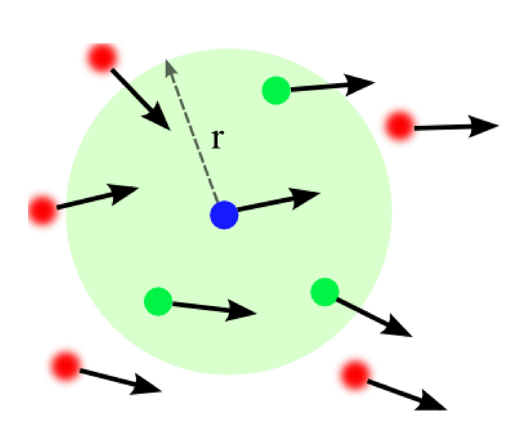
Método

- La medida del observable permite reproducir la evolución temporal de $|\phi(t)|$. Δt un paso MonteCarlo.
- Realizamos estudio de autocorrelación temporal para estimar el tiempo de equilibración de la muestra. Pedimos autoconsistencia entre t_{Eq} y τ_{eq}. Utilizamos el τ_{eq} para promediar medidas independientes.
- Calculamos promedios temporales de $|\phi(t)|$, σ^2, U_4. κ es la kurtosis de Fisher.

Para más información y acceso al Software completo

El sistema

- N partículas autopropulsadas cuyo $|v| = v_0$, contenidas en un plano de LxL.
- Fuera de equilibrio porque disipan energía para trasladarse y K es constante $(\frac{1}{2}\sum_i m v_0^2)$.
- Ruptura espontánea de simetría continua, la simetría polar.
- Paralelismo con sistemas en equilibrio.
- Sistema caracterizado por $\rho = N/L^2$, η y v_0.



$$\begin{cases} \boldsymbol{r}_j^{t+\Delta t} = \boldsymbol{r}_j^t + \Delta t\, \boldsymbol{v}_j^{t+\Delta t} \\ \boldsymbol{v}_j^{t+\Delta t} = (v_{xj}^{t+\Delta t}, v_{yj}^{t+\Delta t}) \end{cases} \qquad \boldsymbol{s}_j^t = \left(\sum_k n_{jk}^t v_{xk}^t, \sum_k n_{jk}^t v_{yk}^t\right) \qquad n_{jk}^t = \begin{cases} 1\ si\ \left\|r_j^t - r_k^t\right\| < R_0 \\ 0\ si\ \left\|r_j^t - r_k^t\right\| > R_0 \end{cases}$$

Angular

$$\begin{cases} v_{xj}^{t+\Delta t} = v_0 cos\theta_j^{t+\Delta t} \\ v_{yj}^{t+\Delta t} = v_0 sin\theta_j^{t+\Delta t} \end{cases}$$

$$\theta_j^{t+\Delta t} = Atan\left(\frac{v_{yj}^t - s_{yj}^t}{v_{xj}^t - s_{xj}^t}\right) + \eta\xi_j^t$$

Vectorial

$$\begin{cases} v_{xj}^{t+\Delta t} = \dfrac{s_{xj}^{t+\Delta t}}{||s_j^{t+\Delta t}||} \\ v_{yj}^{t+\Delta t} = \dfrac{s_{yj}^{t+\Delta t}}{||s_j^{t+\Delta t}||} \end{cases} \qquad \begin{cases} s_{xj}^{t+\Delta t} = \dfrac{s_{xj}^t}{v_0} + m_j \eta cos\xi^t \\ s_{yj}^{t+\Delta t} = \dfrac{s_{yj}^t}{v_0} + m_j \eta sin\xi^t \end{cases}$$

$$|\phi(t)| = \frac{1}{N}\left\|\sum_j^N \boldsymbol{v}_j^t\right\| \qquad \sigma^2 = \langle|\phi(t)|^2\rangle - \langle|\phi(t)|\rangle^2 \qquad U_4 = 1 - \frac{\kappa}{3}$$

Conclusiones

- Observamos, mediante el parámetro de orden, que el sistema se ordena.
- El τ_{eq} obtenido a partir de $C(t)_c$ garantiza que promediamos en equilibrio.
- Para el caso vectorial, la transición es de 1er orden. Se observa que U_4 presenta un mínimo.
- Para el caso angular, los resultados no son concluyentes, aunque parece que la transición sería de 2do orden. Habría que explorar tamaños mayores.

[1] Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Física.
[2] Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos. (IFLySiB)
*En el marco de la beca de la Fundación YPF.

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, 1995.
2. Francesco Ginelli. The physics of the vicsek model. The European Physical Journal Special Topics, 225(11-12):2099-2117,2016.
3. [3] Volker Schaller, Christoph Weber, Christine Semmrich, Erwin Frey, and Andreas R Bausch. Polar patterns of driven filaments. Nature, 467(7311):73, 2010.
4. Hugues Chate, Francesco Ginelli, Guillaume Gregoire, Fernando Peruani, and Franck Raynaud. Modeling collective motion: variations on the vicsek model. The European Physical Journal B, 64(3-4):451-456, 2008.
5. M Newman and G Barkema. Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4. Oxford University Press: New York, USA,1999.