

Simulación de Sistemas: TP #2

Autómatas Celulares

Off-Lattice: Bandadas de Agentes Autopropulsados

Alumnos

51274 - Rivas, Leandro Matías

52066 - Soncini, Lucas

52051 - De Lucca, Tomás

Profesores

Parisi, Daniel Ricardo

Patterson, Germán Agustín

Índice

1. Introducción	3
2. Fundamentos Teóricos	4
3. Implementación	5
Archivos de prueba y configuración	5
Algoritmo	6
Archivo de entrada	7
Archivo de salida	7
Ejecución del programa	8
4. Resultados	9
Relación V_a vs. η	9
Relación V_a vs. δ	11
5. Conclusiones	13
6. Bibliografía	14
7. Apéndice	15

1. Introducción

De los ejercicios propuestos en el enunciado para el TP2, se ha elegido el primero: *Autómata Off-Lattice: Bandadas de Agentes Autopropulsados*. Este pide implementar un sistema de simulación de partículas que trató el paper *Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles*. Dicho paper se encuentra en la carpeta */docs*.

Como base para la realización de este trabajo se utilizó el código de *Cell Index Method*, pedido en el TP1.

En este informe se analizará los resultados obtenidos en las diversas pruebas realizadas y se graficarán las mismas.

Además, en las pruebas se utilizarán parámetros similares a los que se muestran en el paper.

2. Fundamentos Teóricos

Un autómata celular es un modelo para un sistema dinámico formado por un conjunto de partículas, las cuales poseen diferentes estados y valores. Estos estados son alterados de un instante a otro en unidades de tiempo discreto. Las partículas evolucionan en el tiempo de acuerdo a expresiones matemáticas. Ellas poseen una función de transición. Esta determina su comportamiento. La transición a un nuevo estado de una partícula se obtiene de acuerdo al estado anterior de dicha partícula y la de sus vecinas (conjunto finito en las cercanías). Esta función se aplica de forma homogénea a todas las partículas, para cada paso discreto de tiempo.

3. Implementación

Archivos de prueba y configuración

Antes de comenzar con la implementación del algoritmo, se tuvieron que crear archivos de prueba (generados aleatoriamente) que contuviesen los agentes. Estos archivos están estructurados con formato *.xyz*. Constan de:

- Cantidad de partículas, en la primera línea
- Dimensión, en la segunda línea
- Radio, posición X y posición Y correspondientes a cada partícula, en las líneas restantes

Posteriormente, los archivos *.xyz* son leídos y los datos de los agentes se guardan en variables del tipo Agent, que hereda de Particle. Agent no sólo contiene el radio y ubicación (x, y) , sino también la velocidad con la que se mueve y el ángulo con el que se desplaza (en radianes).

Por otra parte, se utiliza un archivo **properties** (*config.properties*), para facilitar el ingreso de parámetros. Estos son:

- Iteración: cantidad de veces que los agentes se van a mover
- eta: representa el perturbación random que se le agrega al ángulo de cada agente
- M: la cantidad de celdas en la que se va a dividir el área de trabajo
- Rc: radio de interacción del agente
- L: Unidades de longitud de un lado del área de trabajo
- N: Cantidad de partículas
- delta: Variación entre los parametros de los cálculos. Por ejemplo, $\delta = 1.0$ en la simulación para obtener V_a vs. *Densidad*, significará que se variará la densidad de a intervalos de 1.0.

A continuación se muestra un ejemplo de una posible configuración de *config.properties*:

```
iterations=2000
M=3
Rc=1.0
```

```

eta=0.5
L=3.1
N=40
delta=1.0

```

Los valores de este archivo serán respetados siempre y cuando no se necesiten generar aleatoria o secuencialmente para generar las simulaciones requeridas.

Algoritmo

Por otra parte *SelfDrivenParticles*, que extiende de *CellIndexMethod*, es el encargado de hacer interactuar a los agentes. Para esto, realiza los siguientes 3 pasos:

1. Cada agente posee su ubicación (x, y) , su velocidad y ángulo. Con esto, se puede determinar la próxima ubicación del agente en el eje X e Y .

$$x(t + 1) = x(t) + \sin(\theta)v\Delta t \quad (1)$$

$$y(t + 1) = y(t) + \cos(\theta)v\Delta t \quad (2)$$

El valor Δt tomado es 0.1 para la ecuación (1) y (2). La velocidad v es 0.03 y es la misma para todos los agentes, condición y valores dados en el enunciado de este trabajo.

2. Luego, se procede a actualizar los ángulos de cada agente. Esto requiere conocer los vecinos de cada agente. Para lograrlo, debe utilizarse uno de los métodos que se hereda de *CellIndexMethod*, *neighbours()*, el cual retorna un *Map* con el agente y un *Set* con sus vecinos. *PeriodicBorder* siempre estará activado.

Una vez conocidos los vecinos, se calcula el nuevo ángulo de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\theta(t + 1) = \langle \theta_{(t)} \rangle_r + \Delta\theta \quad (3)$$

donde $\langle \theta_{(t)} \rangle_r$ representa el promedio de los ángulos de todas los agentes dentro de r incluyendo al propio agente:

$$\text{atan2}\left(\frac{\langle \sin(\theta_{(t)}) \rangle_r}{\langle \cos(\theta_{(t)}) \rangle_r}\right) \quad (4)$$

Originalmente, el paper sugiere realizar el promedio de los ángulos con *arctg*, pero por recomendación de la cátedra y para obtener un mejor resultado, se utiliza *atan2* en la ecuación (4).

El valor en (3) de $\Delta\theta$ representa un ruido uniforme comprendido entre $(-\frac{\eta}{2}; \frac{\eta}{2})$ y puede ser configurado por el usuario desde el archivo *config.properties*.

3. En caso de que en el paso 1 al mover los agentes, estos tuvieran una nueva ubicación que esté fuera de $[0, L]$ tanto en el eje X como en el eje Y , se los modifica para que encuentren dentro de ese rango.
4. Se repiten los pasos desde el paso 1 tantas veces como se desee. La cantidad de iteraciones puede ser configuradas por el usuario desde el archivo *config.properties*.

Archivo de entrada

El archivo de entrada que contiene los datos de los agentes está formado de la siguiente manera:

```
número de agentes N
dimensión L
<radio> <posición X> <posición Y>
<radio> <posición X> <posición Y>
...      ...      ...
```

Un posible archivo de entrada:

```
5
3.1
0.38 3.08 0.68
0.31 0.48 1.35
0.0 1.95 1.19
0.57 0.59 1.11
0.01 0.64 0.72
```

La primera línea de este archivo *.xyz* indica el número de agentes que nos permite saber cuantas líneas debemos leer para llevar a memoria los datos de los mismos.

Archivo de salida

El archivo de salida que contiene los datos de los agentes está formado de la siguiente manera:

```

número de agentes N
número de frame
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia> ; ext sup izquierdo
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia> ; ext sup derecho
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia> ; ext inf izquierdo
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia> ; ext inf derecho
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia>
<radio> <posición X> <posición Y> <radian> <transparencia>
...      ...      ...

```

Este archivo *.xyz* contiene todos los frames para realizar la animación con la aplicación **Ovito**. La transparencia se ha agregado para ocultar las 4 partículas de los extremos. Las mismas se colocaron para una mejor visualización de los resultados. No influyen en ningún paso del algoritmo. Un posible archivo de salida:

```

7
0
0.1 0.0 0.0 0 1
0.1 0.0 10.0 0 1
0.1 10.0 0.0 0 1
0.1 10.0 10.0 0 1
0.1 2.3163734512540164 4.429779995705053 0.026612833683723233 0
0.1 7.836767198542794 8.574876918077338 3.0613454129891124 0
0.1 6.79248861503464 0.20727699570181032 0.9264063524178745 0

```

Ejecución del programa

Para ejecutar el programa, hay que llamarlo con dos parámetros. El primero, es el tipo de operación que se quiere realizar: *va_density*, *va_eta* o *simulate*. El segundo parámetro es la cantidad de veces que se desea correr el programa. Esto es un número entero. Por ejemplo:

```
java -jar TP2.jar va_density 5
```

Esto generará una relación entre V_a y la densidad 5 veces.

4. Resultados

Se realizaron distintas experiencias para recaudar información para poder realizar las estadísticas donde se puede apreciar la relación entre V_a y η , y V_a y ρ .

Relación V_a vs. η

Para esta experiencia se trabajo con distintos tamaños de N : 40, 100 y 400. Se realizaron 10 simulaciones distintas con cada valor de N mencionado anteriormente. Se tomó el rango de $0 \leq \eta \leq 5.0$ con η variando cada 0.25. Por lo tanto se obtuvieron 21 valores de V_a por cada simulación. Se respetaron los valores de L mencionados en el paper para cada valor de N . De esta forma se mantuvo la densidad constante. Los resultados de estas experiencias se pueden encontrar en el *apéndice* de este documento. Para tener una visión más general de esta experiencia, se promediaron los valores de V_a de cada simulación, y se obtuvieron los valores graficados a continuación:

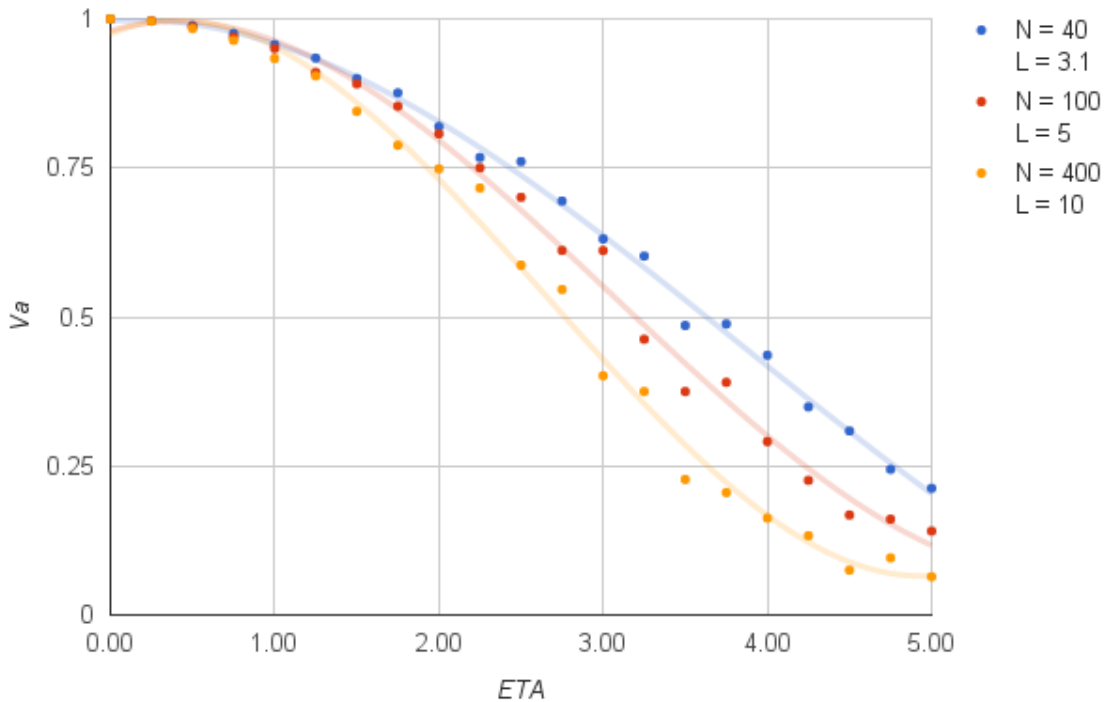


Gráfico 1: V_a en función de η para distintos valores de N (y su correspondiente L).

Se utilizó una línea de tendencia del tipo polinómica para tener una mejor idea de la tendencia de cada una de las curvas. Los resultados son los esperados, ya que a mayores N se obtienen

curvas más precisas y similares a las buscadas. Esto se debe a que el factor de aleatoriedad que se introduce al momento de generar valores aleatorios de posición y ángulos iniciales tiene menos efecto a medida de que se introducen una mayor cantidad de partículas. Al mismo tiempo, al incrementar el η se ve una clara reducción del valor de V_a ya que el ruido del sistema es mayor, y esto hace que las velocidades en promedio sean más aleatorias ya que los agentes tienen una mayor resistencia a alinearse.

A continuación se muestra la tabla que permitió construir el gráfico anterior:

ETA	N = 40 L = 3.1	N = 100 L = 5	N = 400 L = 10
0	1.00000	1.00000	1.00000
0.25	0.99728	0.99666	0.99627
0.5	0.98884	0.98680	0.98371
0.75	0.97558	0.96953	0.96405
1	0.95700	0.95040	0.93360
1.25	0.93428	0.91012	0.90442
1.5	0.90015	0.89097	0.84492
1.75	0.87595	0.85349	0.78796
2	0.81932	0.80728	0.74841
2.25	0.76747	0.75021	0.71633
2.5	0.76069	0.70069	0.58679
2.75	0.69439	0.61157	0.54607
3	0.63087	0.61138	0.40135
3.25	0.60203	0.46263	0.37489
3.5	0.48568	0.37484	0.22737
3.75	0.48824	0.39034	0.20535
4	0.43576	0.29085	0.16252
4.25	0.34914	0.22591	0.13297
4.5	0.30877	0.16766	0.07520
4.75	0.24443	0.16071	0.09582
5	0.21258	0.14075	0.06405

Tabla 1: Valores de V_a en función de η para distintos valores de N (y su correspondiente L).

Relación V_a vs. δ

Densidad	Promedio
0.1	0.1699481784
0.2	0.1621966208
0.3	0.1477382941
0.4	0.280475663
0.5	0.19257118
0.6	0.2248638159
0.7	0.3113651422
0.8	0.2533034085
0.9	0.3079660729
1	0.2674450393
2	0.5698823978
3	0.5718727595
4	0.676273998
5	0.7036707392
6	0.7356381106
7	0.7663179761
8	0.7707578663
9	0.7503746893
10	0.7601686752

Tabla 2: *Valores de V_a en función de δ .*

En el gráfico 2 se puede ver el resultado del promedio de las sucesivas iteraciones donde se obtenía el valor de V_a en función de la densidad de los agentes. Para conseguir los valores que se encuentran representados se realizaron 5 simulaciones variando la densidad de a intervalos de 0.1 en el espacio comprendido en el $(0;1]$ y a deltas de 1.0 en el intervalo $(1;10]$. De esta forma se calcularon 19 valores de V_a por cada simulación realizada. Posteriormente se realizó el promedio del valor de V_a obtenido en cada una de las 5 simulaciones para cada valor de densidad y se obtuvieron los valores representados en el gráfico 2 y mostrados en la tabla 2.

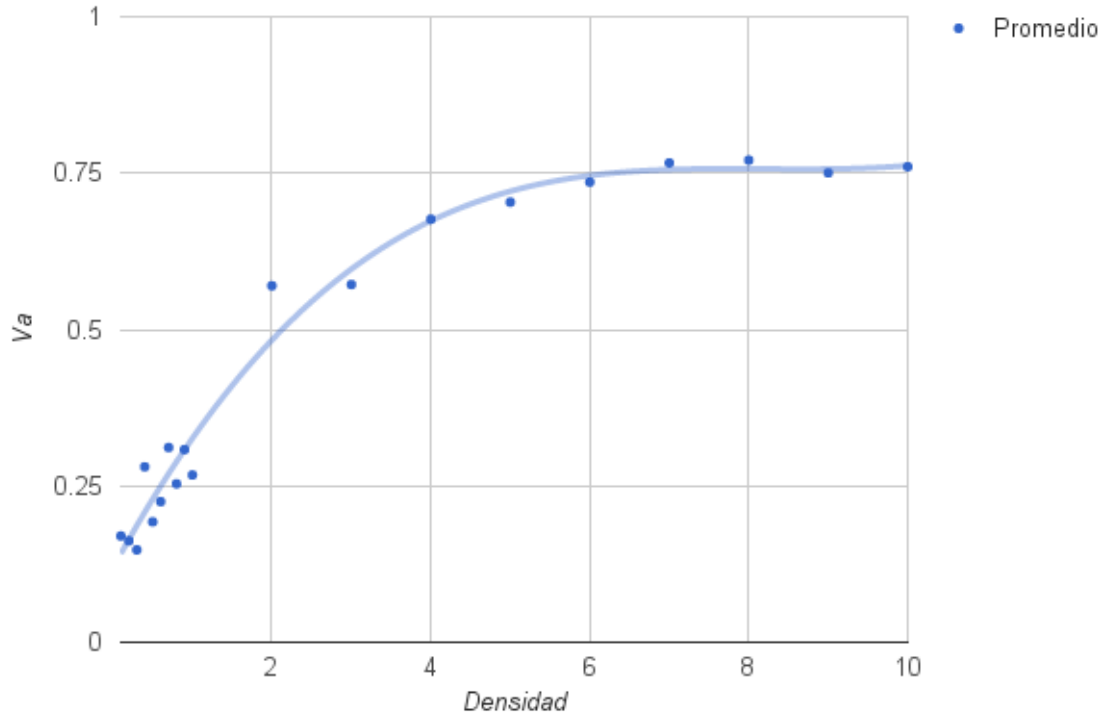


Gráfico 2: V_a en función de δ .

Se dibujó al igual que en el gráfico 1 una línea de tendencia (realizada con una función polinómica) para poder darnos una idea del comportamiento que tiene el valor de V_a a medida de que se varía la densidad.

La densidad se calcula mediante la fórmula $\delta = \frac{N}{L^2}$. Para esta experiencia se decidió mantener el valor de L constante e igual a 20, e ir variando el N mediante la formula $N = \delta L^2$ con los distintos valores de δ . Toda la experiencia se realizó un con un η arbitrario, constante e igual a 2.

5. Conclusiones

En conclusión, se pudo simular el comportamiento de sistemas de partículas en dos dimensiones con un autómata celular *Off-Lattice* detectando el grado de polarización de los mismos para distintos parámetros. Se puede apreciar en las distintas curvas trazadas a lo largo del informe como a mayor nivel de ruido el sistema se encuentra en completo desorden mientras para sistemas que carecen de ruido, o tienen muy poco, se observa cómo las partículas se polarizan eventualmente.

Además, se puede afirmar que resulta determinante también la densidad del sistema, la cual resulta directamente proporcional a la polarización de las partículas. Finalmente, se observa como las tendencias se corresponden en gran medida con las arrojadas en el paper *Novel type of phase transition in a system of self-driven particles*, lo cual resulta acorde a lo esperado.

6. Bibliográfia

- Vicsek, T., Czirók, A., Ben-Jacob, E., Cohen, I., & Shochet, O. (1995). Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical review letters*, 75(6), 1226.

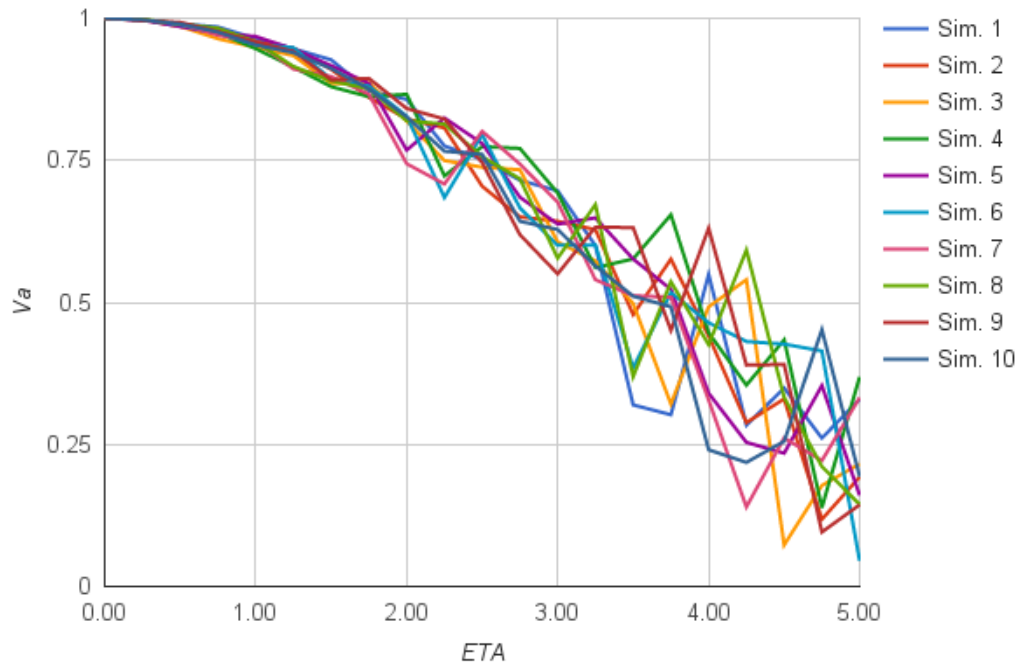
7. Apéndice

Relación V_a vs. η

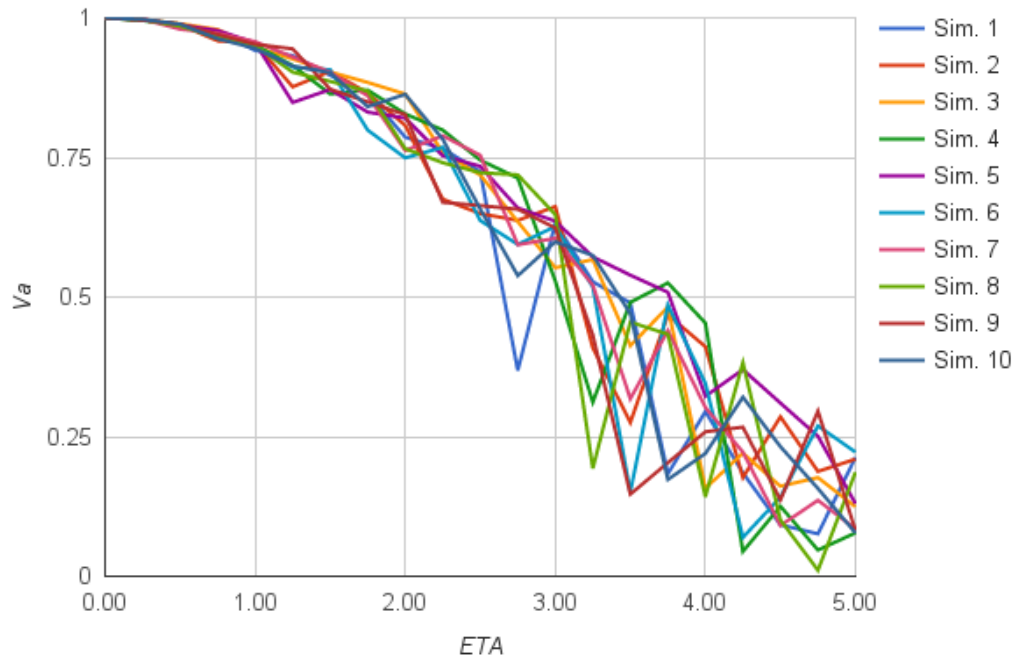
N = 40, L = 3.1

ETA	Sim.1	Sim.2	Sim.3	Sim.4	Sim.5	Sim.6	Sim.7	Sim.8	Sim.9	Sim.10
0	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
0.25	0.997	0.998	0.997	0.997	0.997	0.997	0.997	0.998	0.996	0.997
0.5	0.990	0.986	0.986	0.989	0.985	0.989	0.991	0.990	0.993	0.990
0.75	0.985	0.981	0.964	0.975	0.974	0.973	0.970	0.982	0.977	0.976
1	0.964	0.958	0.949	0.947	0.968	0.954	0.960	0.959	0.958	0.953
1.25	0.946	0.947	0.934	0.914	0.946	0.948	0.911	0.915	0.942	0.939
1.5	0.927	0.910	0.885	0.880	0.917	0.893	0.898	0.890	0.892	0.911
1.75	0.872	0.861	0.887	0.862	0.885	0.881	0.866	0.876	0.894	0.876
2	0.857	0.823	0.819	0.866	0.768	0.828	0.744	0.820	0.841	0.827
2.25	0.775	0.807	0.750	0.723	0.825	0.685	0.708	0.814	0.823	0.766
2.5	0.752	0.704	0.738	0.774	0.780	0.795	0.801	0.756	0.746	0.760
2.75	0.715	0.651	0.733	0.771	0.685	0.666	0.743	0.717	0.619	0.643
3	0.696	0.643	0.606	0.693	0.638	0.600	0.676	0.578	0.550	0.628
3.25	0.600	0.628	0.573	0.561	0.649	0.601	0.540	0.672	0.633	0.564
3.5	0.320	0.479	0.498	0.577	0.576	0.385	0.512	0.369	0.632	0.511
3.75	0.302	0.576	0.321	0.654	0.523	0.517	0.509	0.536	0.451	0.492
4	0.549	0.441	0.492	0.446	0.340	0.464	0.328	0.426	0.630	0.241
4.25	0.284	0.288	0.540	0.354	0.254	0.431	0.140	0.592	0.390	0.218
4.5	0.349	0.330	0.073	0.434	0.235	0.427	0.261	0.333	0.391	0.255
4.75	0.261	0.118	0.178	0.139	0.354	0.414	0.222	0.211	0.096	0.452
5	0.329	0.193	0.216	0.369	0.160	0.045	0.332	0.144	0.144	0.193

Tabla 3: Valores de V_a en función de η para $N = 40$ y $L = 3.1$.



$N = 100, L = 5$



ETA	Sim.1	Sim.2	Sim.3	Sim.4	Sim.5	Sim.6	Sim.7	Sim.8	Sim.9	Sim.10
0.00	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
0.25	0.996	0.997	0.996	0.997	0.996	0.996	0.997	0.996	0.996	0.997
0.50	0.986	0.985	0.978	0.984	0.988	0.986	0.984	0.978	0.987	0.982
0.75	0.965	0.955	0.955	0.967	0.967	0.971	0.968	0.962	0.969	0.962
1.00	0.942	0.926	0.936	0.924	0.924	0.929	0.946	0.932	0.928	0.949
1.25	0.888	0.904	0.898	0.918	0.912	0.888	0.918	0.886	0.909	0.923
1.50	0.895	0.877	0.868	0.857	0.883	0.845	0.737	0.844	0.854	0.790
1.75	0.664	0.789	0.814	0.824	0.836	0.851	0.788	0.663	0.813	0.838
2.00	0.681	0.694	0.793	0.766	0.801	0.775	0.701	0.785	0.724	0.764
2.25	0.644	0.678	0.733	0.729	0.752	0.739	0.753	0.693	0.751	0.692
2.50	0.547	0.663	0.618	0.626	0.595	0.456	0.575	0.696	0.608	0.484
2.75	0.408	0.647	0.636	0.633	0.525	0.520	0.406	0.631	0.651	0.405
3.00	0.524	0.495	0.245	0.545	0.532	0.311	0.380	0.332	0.413	0.237
3.25	0.468	0.486	0.368	0.260	0.384	0.275	0.172	0.500	0.417	0.419
3.50	0.275	0.215	0.090	0.161	0.259	0.330	0.229	0.164	0.371	0.178
3.75	0.276	0.301	0.141	0.332	0.111	0.132	0.149	0.100	0.327	0.185
4.00	0.061	0.039	0.045	0.306	0.158	0.209	0.199	0.227	0.146	0.236
4.25	0.103	0.071	0.092	0.268	0.201	0.034	0.206	0.094	0.186	0.075
4.50	0.017	0.060	0.118	0.026	0.063	0.119	0.133	0.126	0.014	0.076
4.75	0.041	0.178	0.078	0.103	0.080	0.165	0.023	0.110	0.089	0.091
5.00	0.012	0.046	0.055	0.072	0.073	0.043	0.092	0.108	0.083	0.057

Tabla 4: *Valores de V_a en función de η para $N = 100$ y $L = 5$.*

N = 400, L = 10

ETA	Sim.1	Sim.2	Sim.3	Sim.4	Sim.5	Sim.6	Sim.7	Sim.8	Sim.9	Sim.10
0.00	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
0.25	0.996	0.997	0.996	0.997	0.996	0.996	0.997	0.996	0.996	0.997
0.50	0.986	0.985	0.978	0.984	0.988	0.986	0.984	0.978	0.987	0.982
0.75	0.965	0.955	0.955	0.967	0.967	0.971	0.968	0.962	0.969	0.962
1.00	0.942	0.926	0.936	0.924	0.924	0.929	0.946	0.932	0.928	0.949
1.25	0.888	0.904	0.898	0.918	0.912	0.888	0.918	0.886	0.909	0.923
1.50	0.895	0.877	0.868	0.857	0.883	0.845	0.737	0.844	0.854	0.790
1.75	0.664	0.789	0.814	0.824	0.836	0.851	0.788	0.663	0.813	0.838
2.00	0.681	0.694	0.793	0.766	0.801	0.775	0.701	0.785	0.724	0.764
2.25	0.644	0.678	0.733	0.729	0.752	0.739	0.753	0.693	0.751	0.692
2.50	0.547	0.663	0.618	0.626	0.595	0.456	0.575	0.696	0.608	0.484
2.75	0.408	0.647	0.636	0.633	0.525	0.520	0.406	0.631	0.651	0.405
3.00	0.524	0.495	0.245	0.545	0.532	0.311	0.380	0.332	0.413	0.237
3.25	0.468	0.486	0.368	0.260	0.384	0.275	0.172	0.500	0.417	0.419
3.50	0.275	0.215	0.090	0.161	0.259	0.330	0.229	0.164	0.371	0.178
3.75	0.276	0.301	0.141	0.332	0.111	0.132	0.149	0.100	0.327	0.185
4.00	0.061	0.039	0.045	0.306	0.158	0.209	0.199	0.227	0.146	0.236
4.25	0.103	0.071	0.092	0.268	0.201	0.034	0.206	0.094	0.186	0.075
4.50	0.017	0.060	0.118	0.026	0.063	0.119	0.133	0.126	0.014	0.076
4.75	0.041	0.178	0.078	0.103	0.080	0.165	0.023	0.110	0.089	0.091
5.00	0.012	0.046	0.055	0.072	0.073	0.043	0.092	0.108	0.083	0.057

Tabla 5: *Valores de V_a en función de η para $N = 400$ y $L = 10$.*

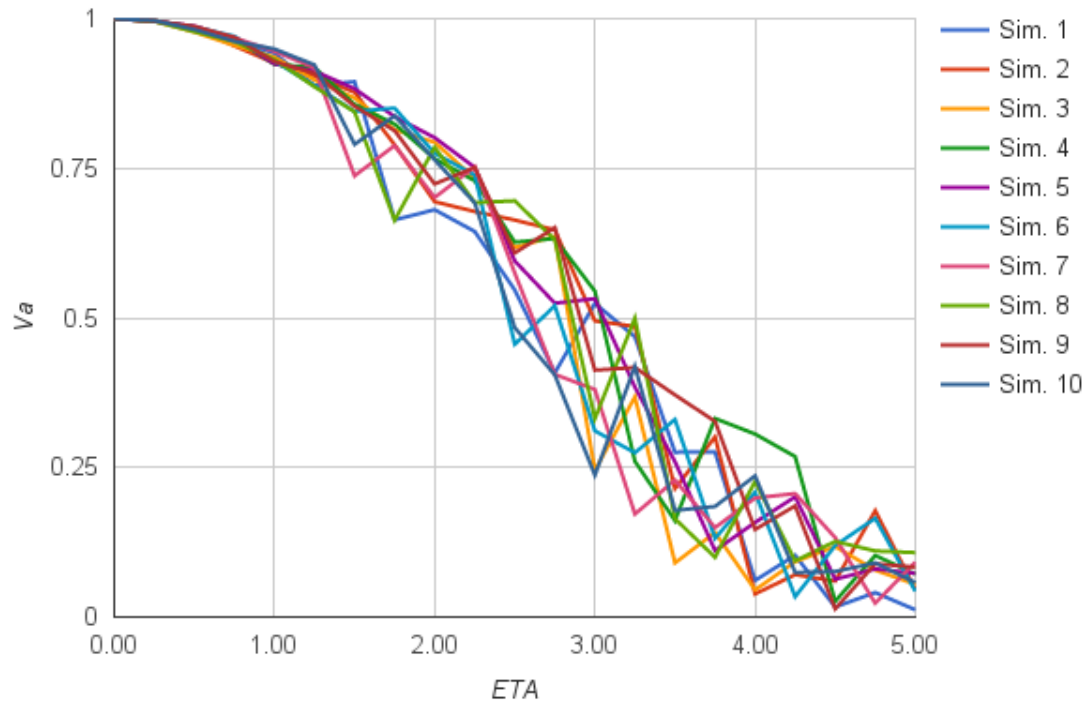


Gráfico 5: Valores de V_a en función de η para $N = 400$ y $L = 10$.

Relación V_a vs. δ

Density	Sim. 1	Sim. 2	Sim. 3	Sim. 4	Sim. 5
0.1	0.181950041	0.030139433	0.387293669	0.193629479	0.056728270
0.2	0.282396460	0.115506502	0.262092326	0.041430668	0.109557147
0.3	0.063011080	0.142105128	0.260831742	0.101035376	0.171708144
0.4	0.409575185	0.345157850	0.236616839	0.256612536	0.154415904
0.5	0.238470208	0.192198686	0.303071770	0.050685986	0.178429250
0.6	0.055335642	0.257348092	0.264167409	0.443098471	0.104369464
0.7	0.274114515	0.335347329	0.574734977	0.176996950	0.195631940
0.8	0.377527744	0.323144768	0.022362050	0.307900680	0.235581801
0.9	0.200973128	0.338737964	0.341626111	0.402262086	0.256231076
1	0.250067911	0.424904820	0.134706630	0.412533285	0.115012551
2	0.474166987	0.539383437	0.522030604	0.659288832	0.654542129
3	0.645006721	0.518861024	0.640920867	0.506603876	0.547971309
4	0.765019704	0.637824931	0.642275774	0.682561031	0.653688549
5	0.686520981	0.713752079	0.734209194	0.654869112	0.729002330
6	0.684104163	0.724584810	0.787151367	0.739543440	0.742806773
7	0.793266251	0.743768655	0.772564165	0.735474131	0.786516678
8	0.776624261	0.779053524	0.765776812	0.771844781	0.760489954
9	0.772699626	0.736245360	0.778650660	0.748045081	0.716232719
10	0.766365682	0.780323214	0.756441784	0.776681849	0.721030847

Tabla 6: *Valores de V_a en función de δ .*

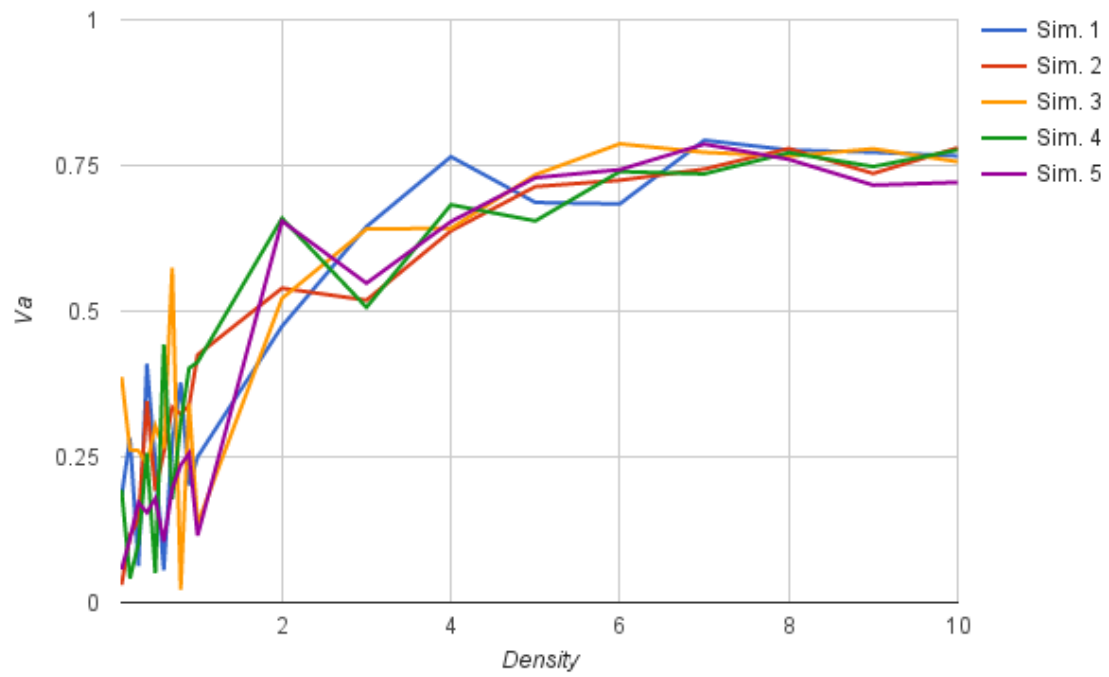


Gráfico 6: Valores de V_a en función de δ .