

Tutorial: Física Computacional



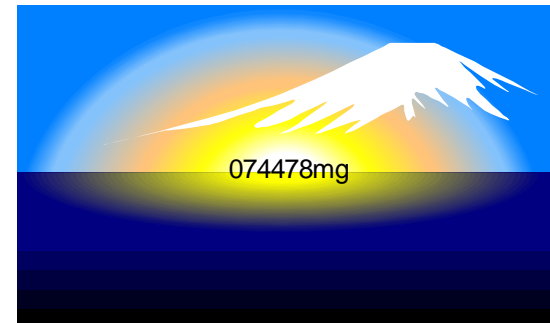
Impartido por

F. Rojas

CCMC-UNAM

frojas@ccmc.unam.mx

**Taller de Ciencia para
Jovenes, 2005**



Física Computacional:

Principios y modelos



Presentado:

Dr. Fernando Rojas Iñiguez
CCMC-UNAM,

Email frojas@ccmc.unam.mx

Taller de Ciencia para Jóvenes

Verano 2005

Ensenada, B. C. Mexico



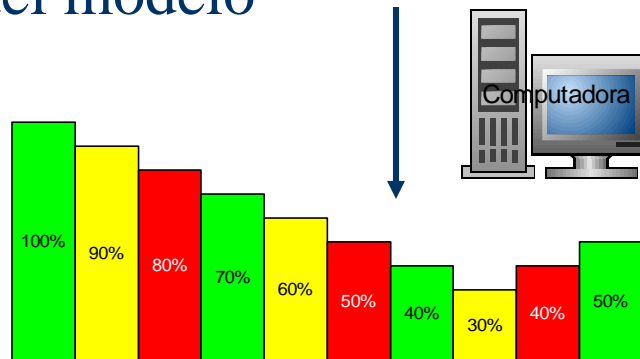
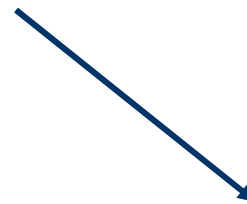
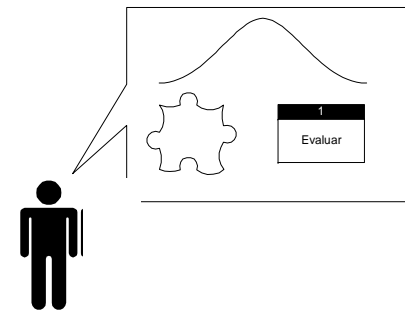
CONTENIDO

- Simulación
- Modelos físicos y simulación
- Marco conceptual de simulación dinámica
- Metodología de simulación
- Herramientas y lenguajes de simulación
- Ithink y Stella
- Ejemplos simples en mecánica clásica y cuántica
- Perspectivas



Simulación

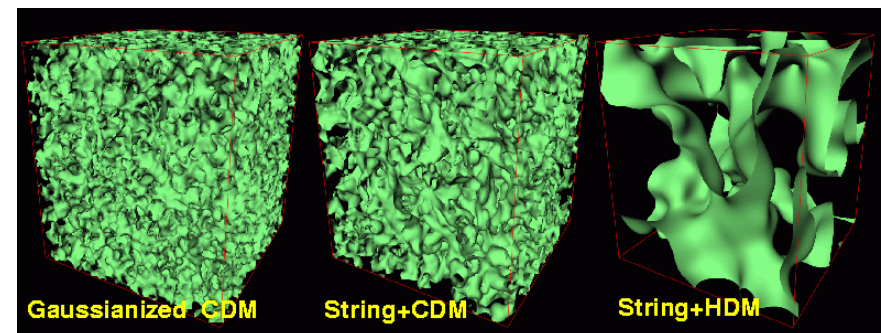
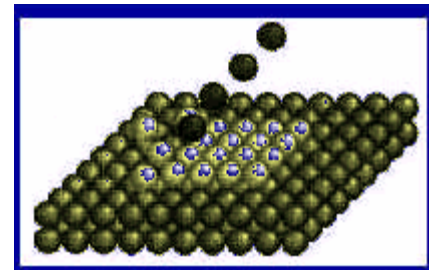
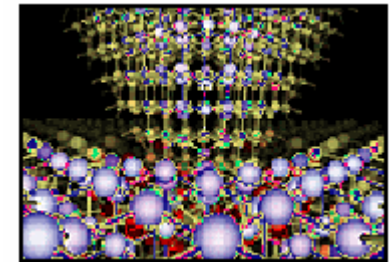
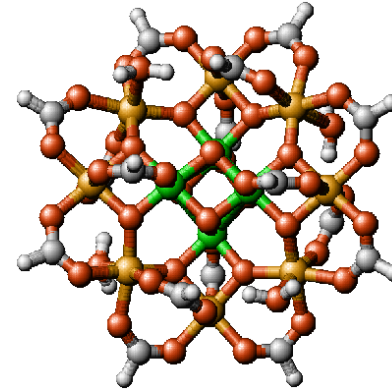
- ◆ Usamos la computadora para evaluar un modelo numéricamente
- ◆ Se obtienen datos para estimar las características del modelo





Simulación

- ◆ Simulación de crecimiento de superficies
- ◆ Dinámicas de cumulos de atomos
- ◆ Determinar de la estructura electrónica de materiales: Magnéticos ferroeléctricos
- ◆ Polimeros y vidrios

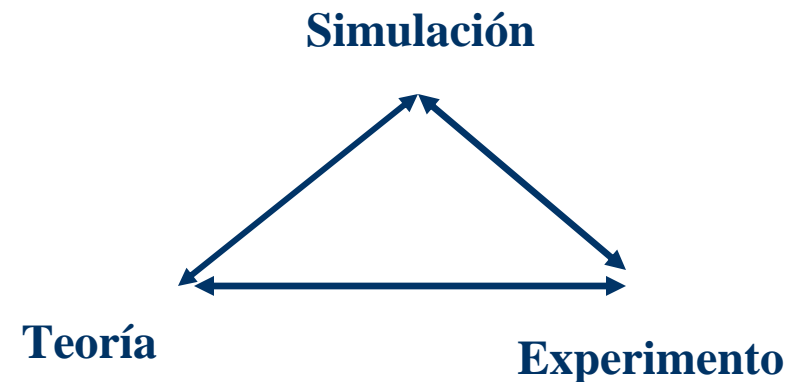




Física Computacional

Un conjunto de herramientas y métodos para describir y desarrollar modelos

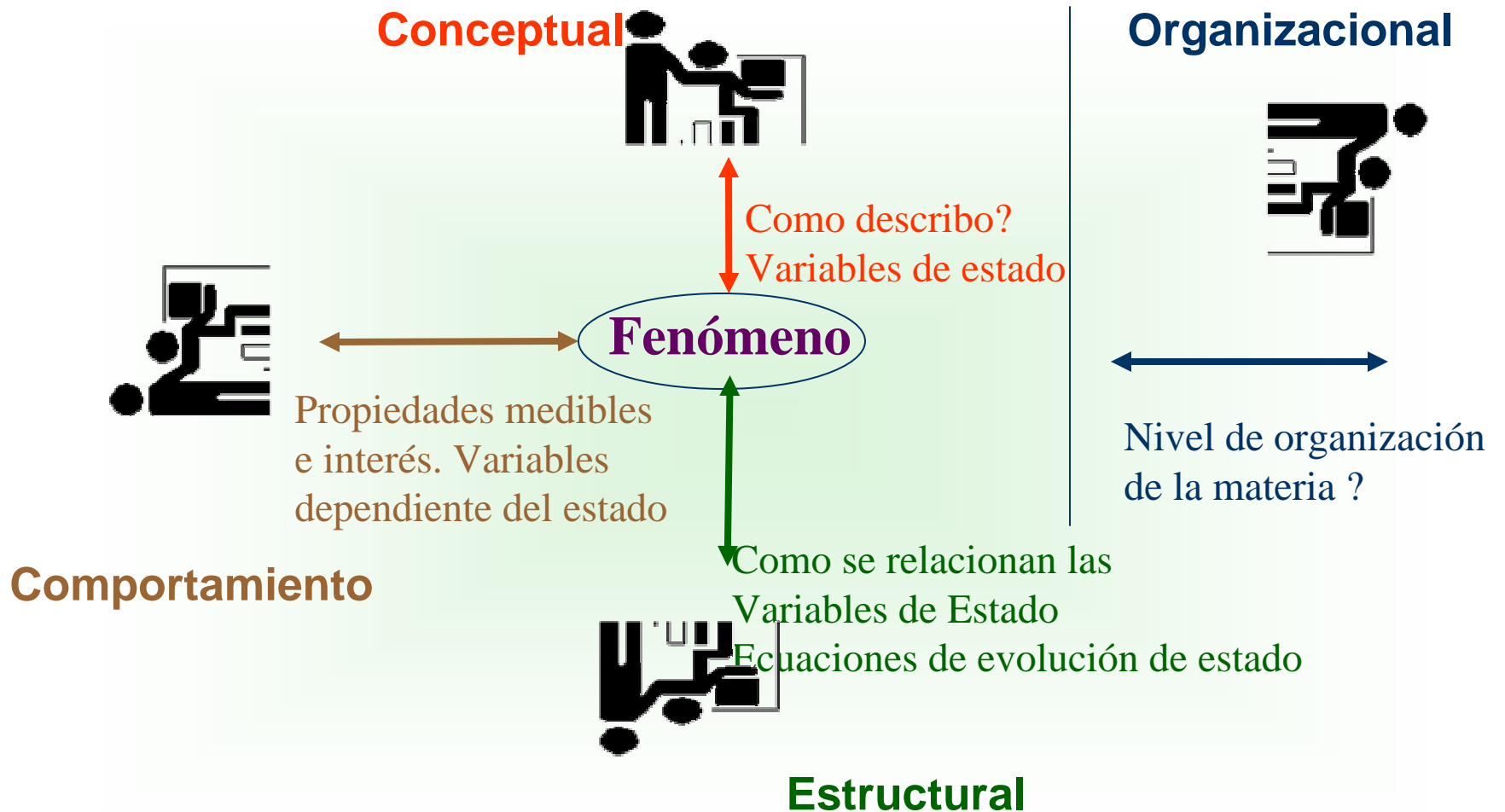
- ◆ Métodos de montecarlo, el uso de números aleatorios : descripción de las propiedades macroscópicas, crecimiento de superficies, sistemas cuánticos.



- ◆ Dinámica molecular: métodos para determinar de las propiedades macroscópicas de cúmulos de partículas interactuantes. Integración de las ecuaciones de movimiento y calculos de promedios en el tiempo



Elementos de un modelo





Elementos (cont...)

◆ Organizacional :

- nivel de trabajo establece los conceptos o niveles de detalle de cómo se caracteriza un sistema (parámetro de orden, difusión)

◆ Conceptual:

- las variables de estados requeridas para caracterizar a un sistema físico

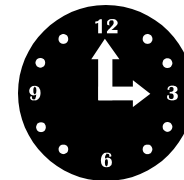
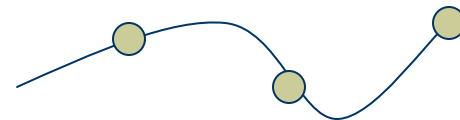
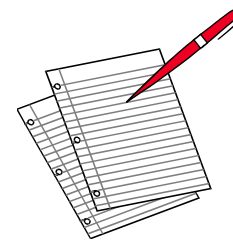
◆ Estructural

- relación causal que hace cambiar o determinar las variables de estado

Están pesadas por parámetros

◆ Comportamiento

- para ciertas condiciones del modelo, el estado produce un valor en una variable relacionada (energía cinética vs temperatura) o derivada





Modelo

- ♦ Describe una parte del sistema real con el uso de una estructura similar pero más simple
- ♦ Reproducir una propiedad (eléctrica, magnética, período)
- ♦ Experimentar con el modelo para Predecir propiedades
- ♦ Modelo debe tener
 - definición y granularidad
 - fronteras o condiciones iniciales
 - parámetros
 - cantidades a medir u observables

Causalidad



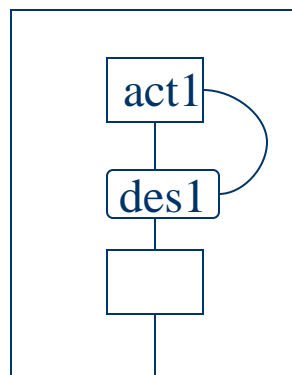


Modelos matematicos.

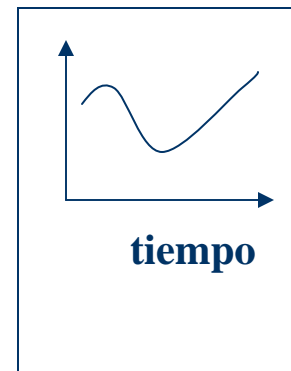
- ◆ Variables independientes(tiempo, etc)
- ◆ Variables dependientes (variables de estado), posición, velocidad, difusión, función de onda, magnetización, energía
- ◆ Ecuaciones de estado
- ◆ Ecuaciones de evolución de estructura (Ec. De newton,ec. de Schrodinger etc.)
- ◆ Parametros (viscosidad, constante de resorte, forma potencial), condiciones iniciales o de frontera



Apoya la conceptualización del systema
Permite experimentar,
Aspectos de evoluciones o comportamiento del sistemas



Modelo



Simulación



Marco Conceptual

SIMULACION: Es el proceso de modelar un sistema propuesto o real, con la finalidad de predecir el comportamiento dinámico a través del estado actual del modelo.

Conceptos:

Sistema: Es definido como una colección de entidades, por ejemplo, gente o máquinas, partículas etc, los cuales actúan e interactúan conjuntamente para lograr un fin común.



... Marco Conceptual

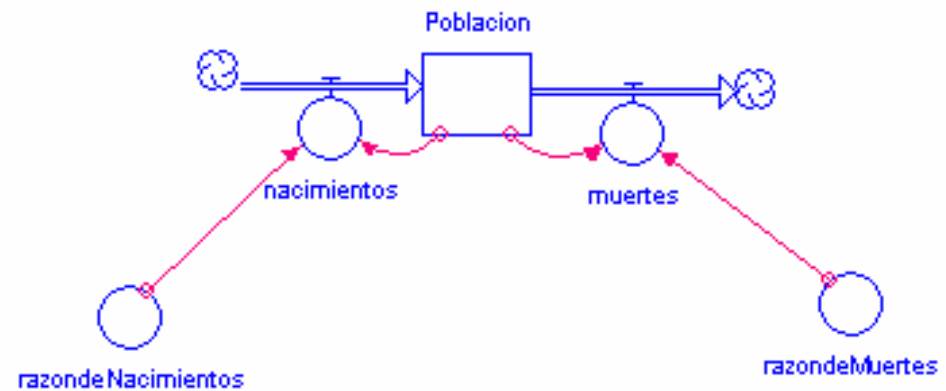
Estado: Definimos el estado de un sistema como la colección de variables necesarias para describir un sistema en un tiempo determinado, específicamente para los objetivos de un estudio.

Un sistema lo podemos categorizar como *discreto* o *continuo*.



Elementos de un Sistema de Simulación

- ACUMULADORES O ESTADOS
- FLUJOS
- CONVERTIDORES
- CONECTORES





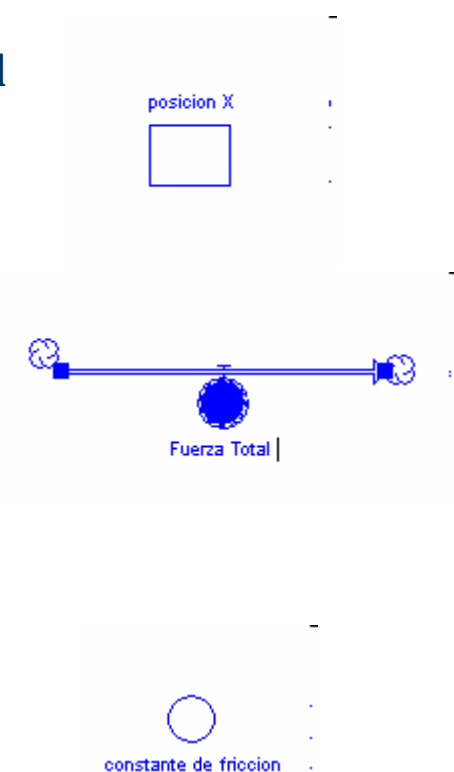
Elementos de Simulación de Sistemas Dinámicos

Acumuladores o niveles:

son un indicador de cómo andan las cosas en un sistema, el estado. Los niveles son las *cosas*. Los flujos son las *acciones* y son inseparables

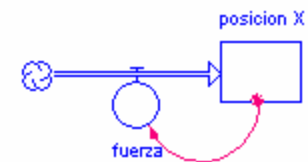
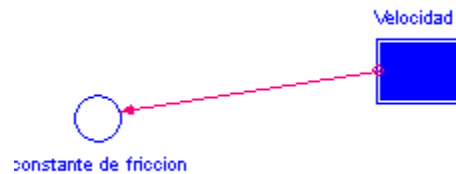
Flujos: Los flujos representan el resultado de una actividad. Son la representación del movimiento, la dinámica y cambio de un sistema

Convertidores: . Se usan para convertir entradas y salidas. Pueden representar cantidades materiales o información. Son utilizados para elaborar el detalle de la estructura de niveles y flujos de los modelos

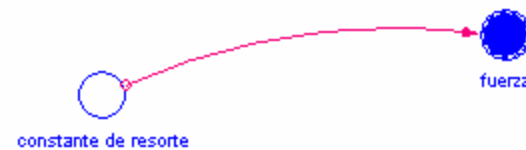




Elementos...

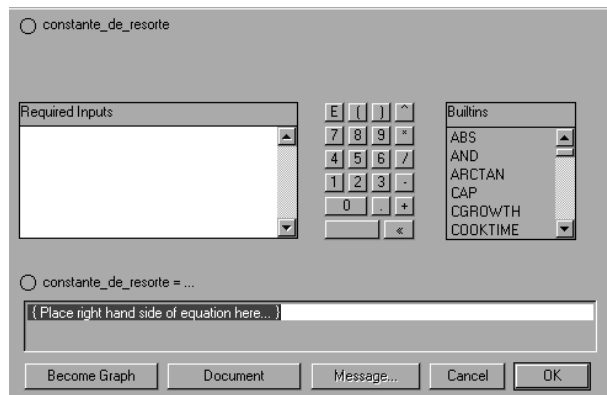


Conexiones: conectan niveles a convertidores, niveles a reguladores de flujo, reguladores de flujo a reguladores de flujo, convertidores a reguladores de flujo y convertidores a otros convertidores.





Otros elementos



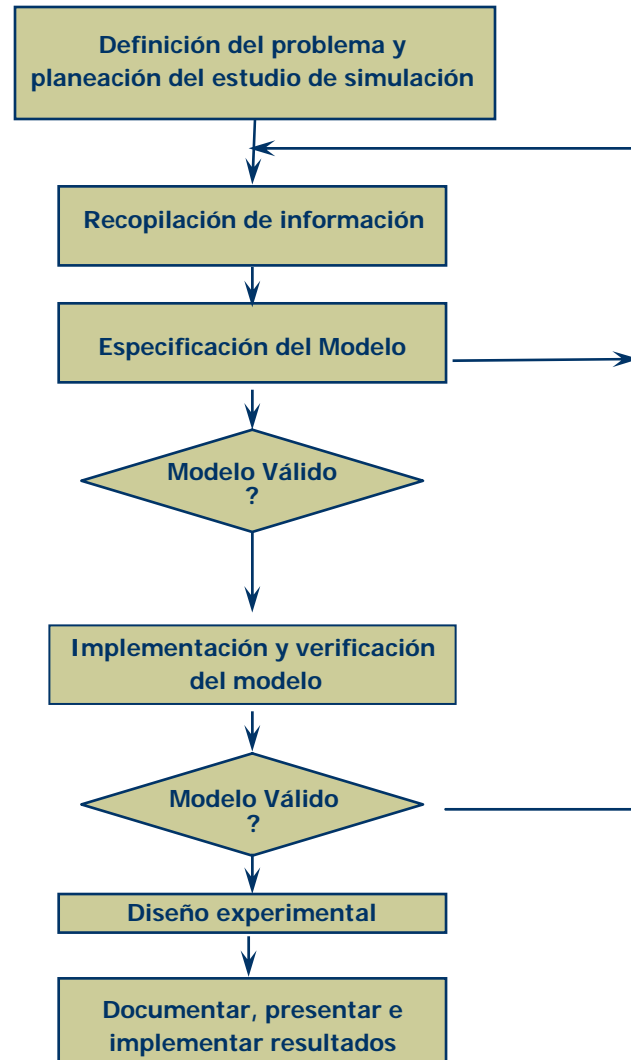
Funciones. Funciones predefinidas para especificar el modelo: raíz cuadrada `sqrt()`

F=-friccionconstante*velocidad
IF () THEN () ELSE

Lógica de relaciones: Definir enunciados lógicos para detallar el comportamiento del modelo

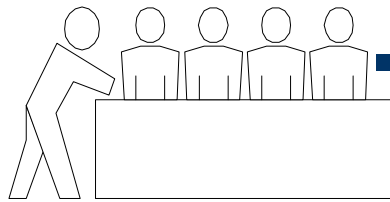


Metodología para el estudio de sistemas con Simulación:

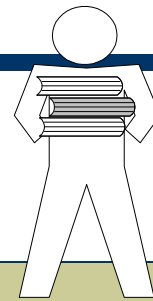




Metodología



Equipo de Simulación

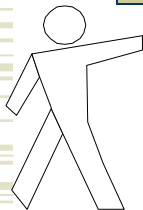


Publicación

Definición del problema y objetivos de la simulación

Recopilación de Información

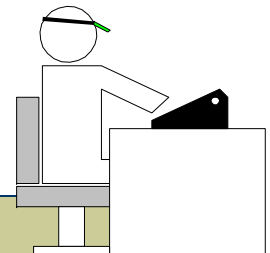
Construcción de modelo



Mejora del proceso

Interpretar los resultados y dar conclusiones

Realizar experimentos



Simulación Guru



Moderador

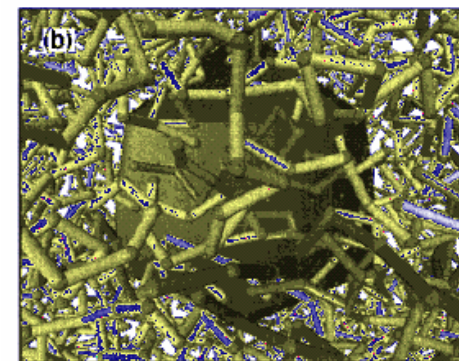
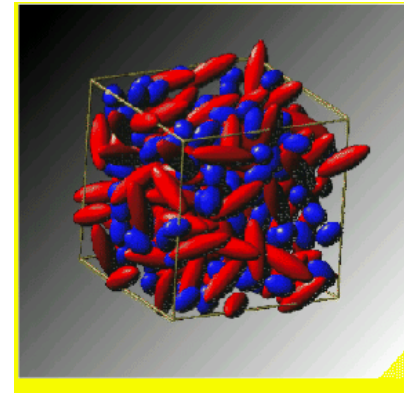
or





Usos de Simulación

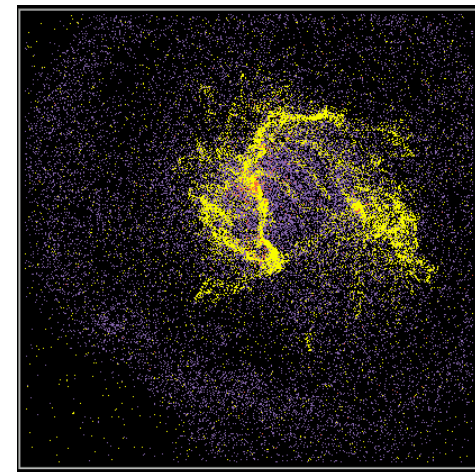
- ◆ Simulación de las propiedades de ordenamiento de cristales líquidos
- ◆ Dinámica molecular de polimeros Tubulares rodeando una nanopartícula



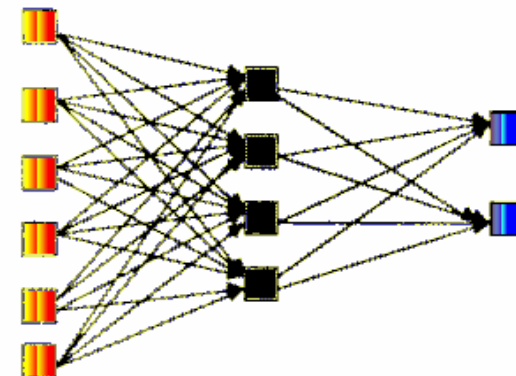


Usos..

- ◆ Formación de galaxias a partir de partículas de estrella, gas y materia oscura



- ◆ Redes Neuronales, para clasificación de patrones. Determinación de espectros infrarrojo: relaciones de estructura con espectros



Simuladores Visuales



Herramientas con facilidad en el desarrollo de modelos de Simulación

Algunas Características deseables

Fácil de usar y aprender (los modelos de simulación fáciles de construir)

Representación visual de los elementos de simulación y los resultados (animación)

Flexibilidad de describir las trayectorias o flujos de las entidades a través del sistema

Análisis automatizado de la estadísticas y reporte personalizado

Generador de distribuciones de probabilidad y números aleatorios



Herramientas y lenguajes de simulación



- ◆ Stella
- ◆ Ithink



Stella y/o Think

Empresa: High Performance Systems

Página: <http://www.hps-inc.com/>

Es una herramienta de simulación de sistemas dinámicos para el enfoque pensamiento de sistemas. HPS es el líder mundial e innovador en productos de software basado en pensamiento de sistemas. Combina la representación gráfica de los elementos básicos para representar cualquier sistema dinámico. La combinación de cadenas causales y variables de estado hace posible construir modelos dinámicos de gran complejidad.



Ventajas de las Herramientas de Simulación

- Evitar correcciones a decisiones equivocadas
- Evaluar diferentes alternativas de solución
- Reducir el riesgo asociado a proyectos de rediseño
- Disminución del tiempo de desarrollo del programa

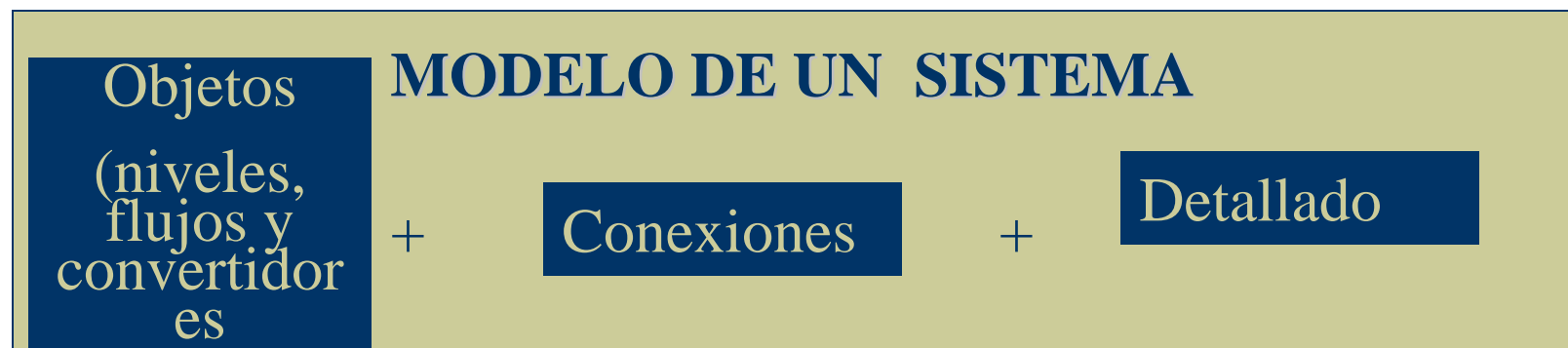


ITHINK y/o STELLA

www.processmodel.com

Es una herramienta de sistemas dinámicos (IP) mediante la cual se puede definir, *visualizar, analizar y modelar sistemas a través de la simulación.*

- Combina la tecnología del modelado de sistemas con simulación para dar vida a los modelos de de simulación mediante su evolución dinámica .
- Elementos de IThink:





Ithink/ Stella

- Simulador interactivo visual para sistemas dinámicos

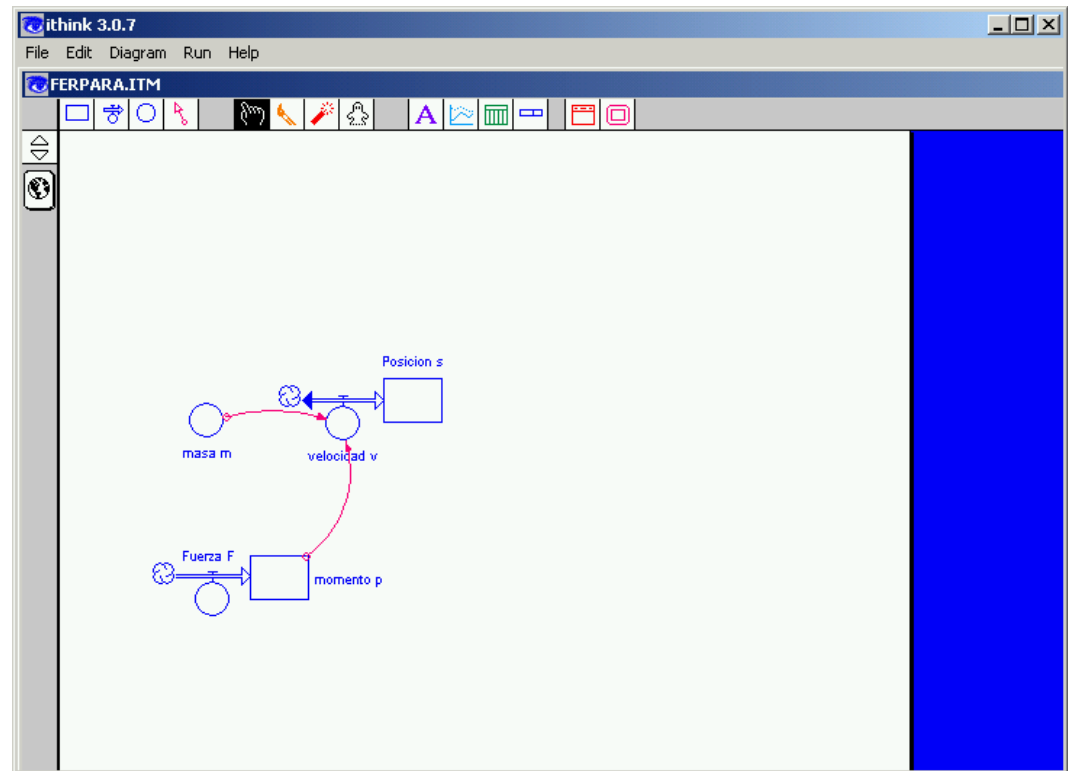
- Un modelo se construye en 3 pasos:

 - definir los elementos, visualizarlos y detallarlos

 - elementos predefinidos (acumuladores, flujos, convertidores y conexiones),

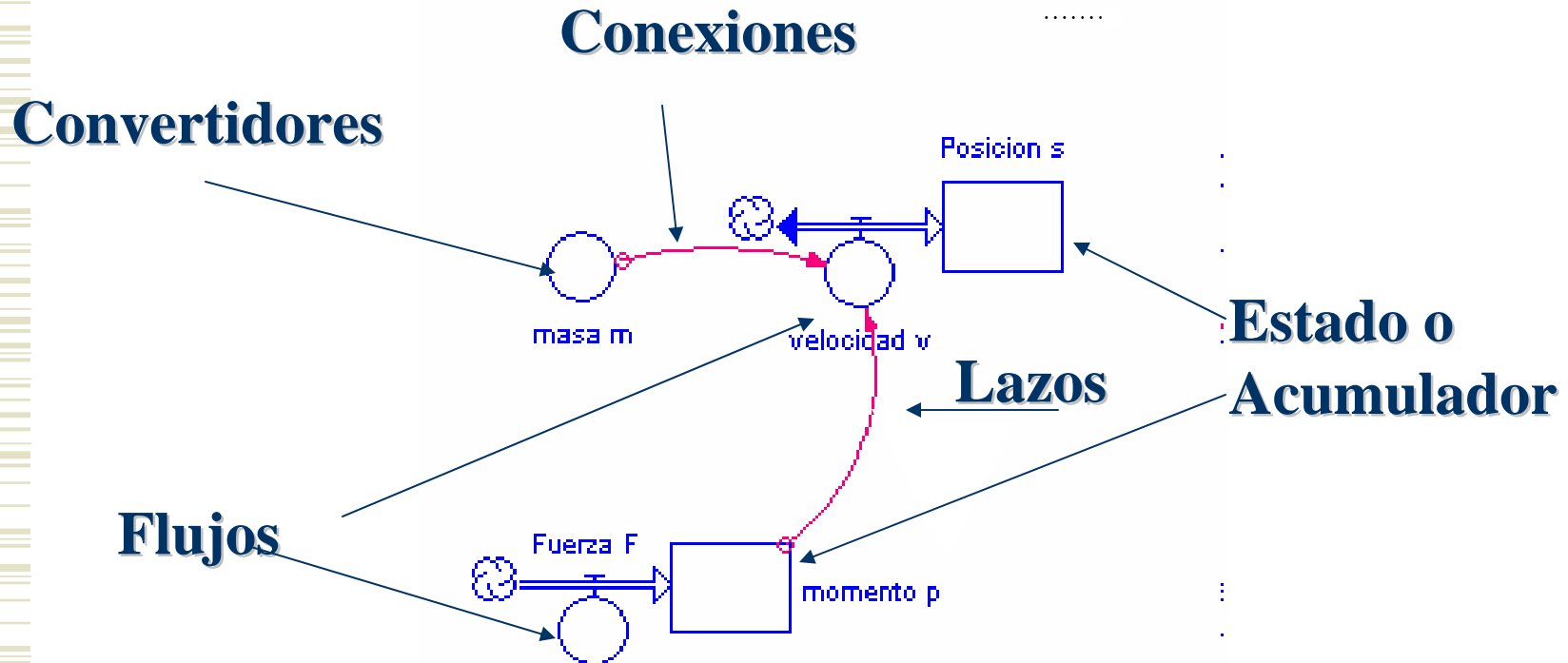
 - definición de lógica de relaciones entre elementos, Relaciones causales etc.

- Presentación de resultados





I think y/o Stella





Mecánica Clásica

- ◆ Estructura básica de fuerza y modelos de movimiento en mecánica
- ◆ La fuerza neta F , ejercida sobre un objeto, causa el cambio de momento p
- ◆ La velocidad del objeto es
- ◆ La velocidad actúa como razón de cambio de la posición

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = F$$

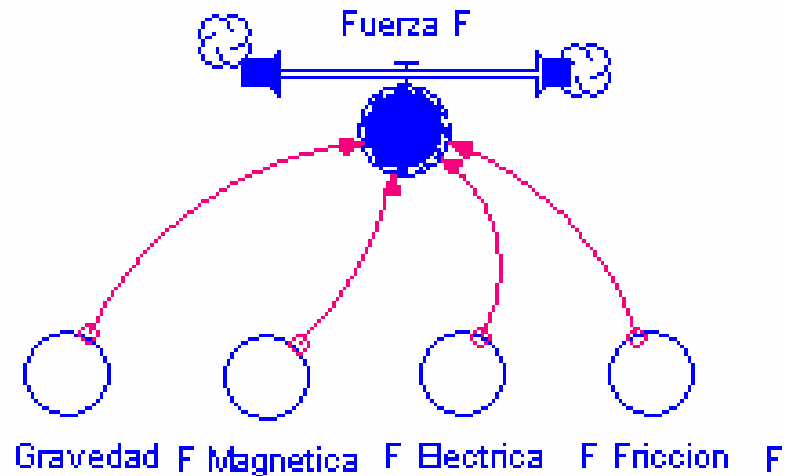
$$v = \frac{p}{m}$$

$$\frac{\Delta s}{\Delta t} = v$$



Problema

- ◆ La principal pregunta en la construcción de modelos de mecánica clásica es que fuerzas están actuando sobre el objeto y sumadas para obtener la fuerza total



Ejecución del modelo

Definición de parámetros

Condiciones iniciales



Ejemplo en I think

Modelo de simulación para radioactividad

Núcleo es inestable, por ejemplo el isótopo ^{235}U el cual tiene una probabilidad de decaer en dos núcleos de aproximadamente la mitad de su tamaño junto con protones, neutrones, electrones y partículas alfa.

- Un acumulador:
Num. Nucleo de U
- Una flujo: **decaimiento**
- Un convertidor:
constante de decaimiento



Detallando elementos

El numero de núcleos de Uranio al tiempo $t + \Delta t$ esta dado por

$$N_u(t + \Delta t) \approx N_u(t) - \frac{N_u(t)}{\tau} \Delta t$$

Donde $N_u(t)$ es el numero de nucleo de uranio al tiempo t y τ es la constante de decaimiento

Num Nucleo de U



Decaimiento

constante de decaimiento

El decaimiento es proporcional a - número de núcleos de uranio/constante de decaimiento



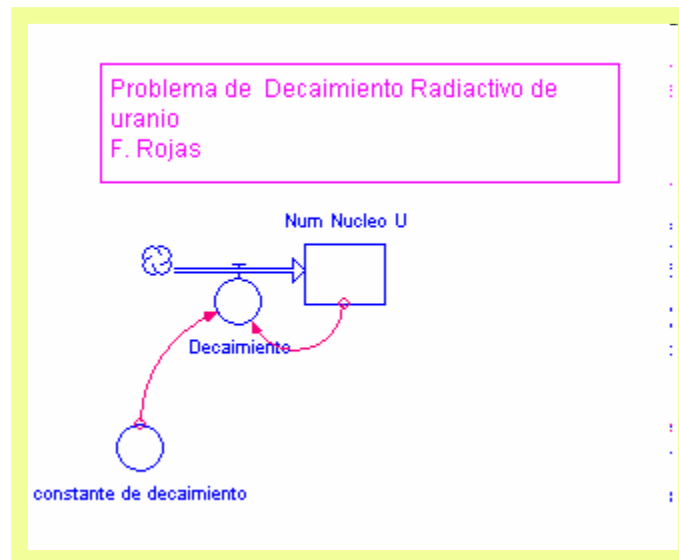
Definiendo y detallando relaciones causales



**Barra de
elementos**

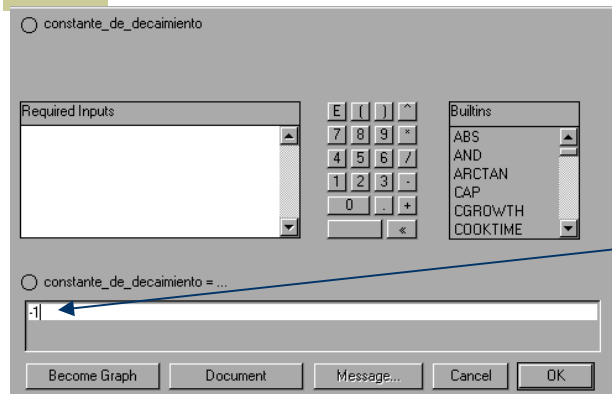
**Barra de
ayuda**

**Barra de presentación
y documentación de
Modelo**



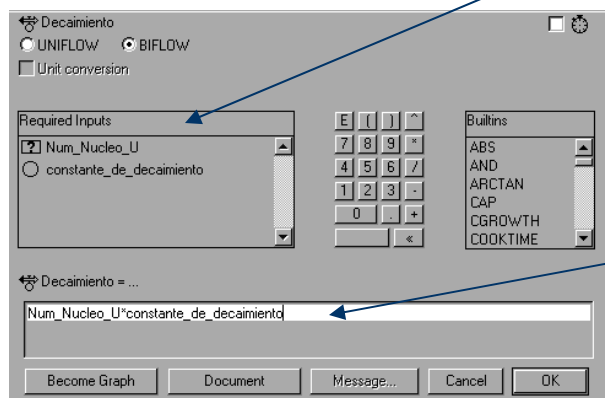


Detallando elementos



constante de decaimiento = 0.1

En cada elemento se establecen las relaciones, y se construyen a partir de la entradas requeridas de acuerdo a las conexiones establecidas



Flujo Decaimiento = -
constante de decaimiento *
Num. Nucleo U



Cond. Inicial

Condicion Inicial de
100 nucleos de uranio

Num_Nucleo_U

Reservoir Conveyor Queue Oven

Non-negative

Allowable Inputs

- Decaimiento
- constante_de_decaimiento

INITIAL(Num_Nucleo_U) = ...

100.0

Document Message... Cancel OK

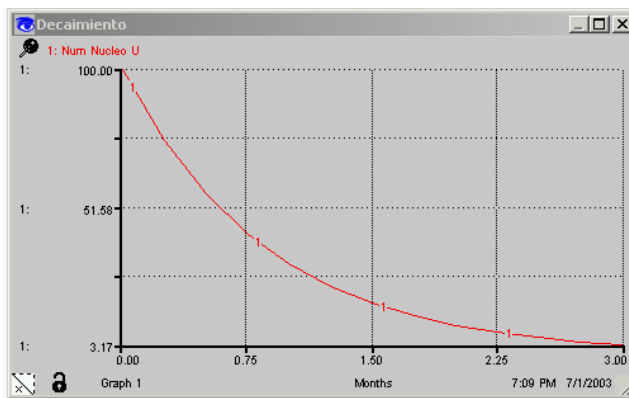
Ejecución → File Edit Diagram Run Help

Seleccionar la opción
Run



Reportes de experimentos

Barra de Resultados: Seleccionas las variables a graficar o tabular



Gráficas

Tablas

Months	Num Nucleo
Initial	100.00
0: .25	75.00
0: .50	56.25
0: .75	42.19
0: end	31.64
1: .25	23.73
1: .50	17.80
1: .75	13.35
1: end	10.01
2: .25	7.51
2: .50	5.63
2: .75	4.22
2: end	3.17

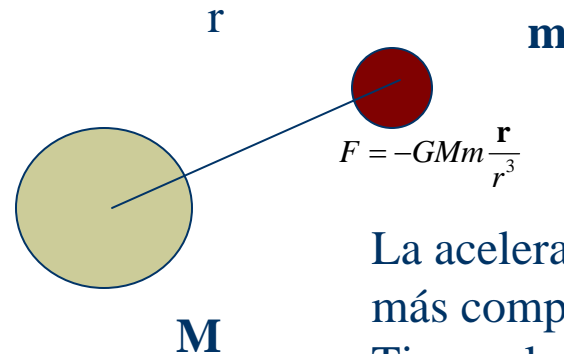
Información en grafica o tabla del:

Numero de nucleos de uranio como función del tiempo



Modelo de movimiento de satélites

la fuerza de gravedad, \mathbf{F} , actúa sobre el satélite o proyectil. $F = -GMm \frac{\mathbf{r}}{r^3}$
La fuerza está dirigida hacia el centro del planeta.



La segunda ley $F = ma$, la fuerza es igual a la masa por la aceleración.

La aceleración de proyectiles o satélites es más compleja que para el caso de suponer la Tierra plana. Teniendo estas ecuaciones podemos emplear un estado o nivel para cada variable, con un total de cuatro (x, y, v_x, v_y)..



Dinámica

En dos dimensiones, podemos escribir las componentes de la velocidad y aceleración del cuerpo con el siguiente conjunto de ecuaciones, haciendo $GM=1$, por simplicidad

Teniendo estas ecuaciones podemos emplear un estado o nivel para cada variable, con un total de cuatro.

$$(x, y, v_x, v_y)$$

$$\frac{dx}{dt} = v_x$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y$$

$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{x}{r^3}$$

$$\frac{dv_y}{dt} = -\frac{y}{r^3}$$

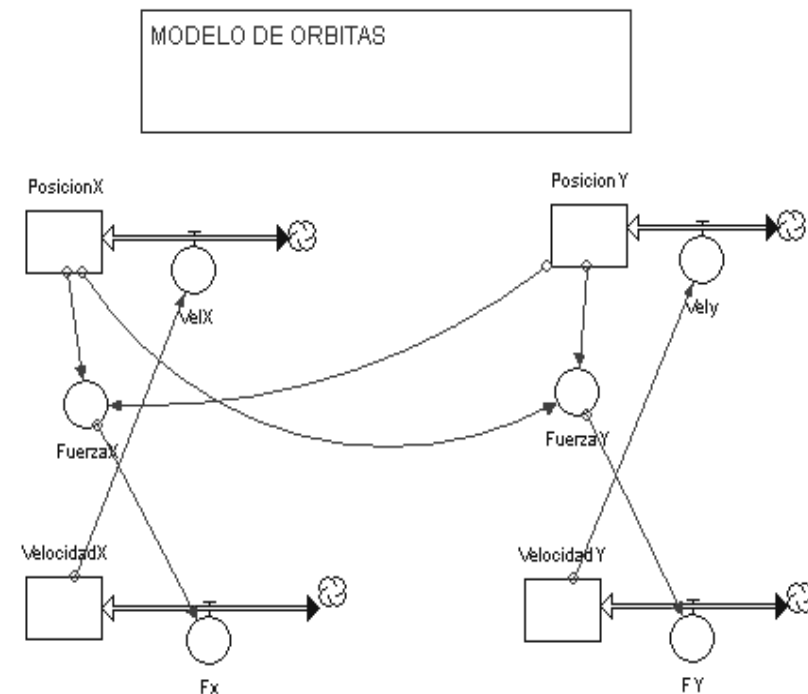
$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$



Elementos

- ◆ 4 acumuladores
PosicionX, PosicionY
VelocidadX, VelocidadY
- ◆ 4 flujos
velX, Vely
- Fxm Fy
- ◆ 2 acumuladores que determinan las componentes de la fuerza en cada dirección

Existen lazos como se observa en las ecuaciones.
A continuación presentamos el diagrama de flujos que representa este sistema





Modelo Dinamico

- ◆ Las ecuaciones que se obtienen en *Stella* son

- $PosicionX(t) = PosicionX(t - dt) + (VelX) * dt$
INIT PosicionX = 25.0
INFLOWS:
☞ VelX = VelocidadX
- $PosicionY(t) = PosicionY(t - dt) + (Vely) * dt$
INIT PosicionY = 0.0
INFLOWS:
☞ Vely = VelocidadY
- $VelocidadX(t) = VelocidadX(t - dt) + (Fx) * dt$
INIT VelocidadX = 0.0
INFLOWS:
☞ Fx = FuerzaX
- $VelocidadY(t) = VelocidadY(t - dt) + (FY) * dt$
INIT VelocidadY = .1
INFLOWS:
☞ FY = FuerzaY
- $FuerzaX = -PosicionX / (PosicionX^2 + PosicionY^2)^{1.5}$
- $FuerzaY = -PosicionY / (PosicionX^2 + PosicionY^2)^{1.50}$

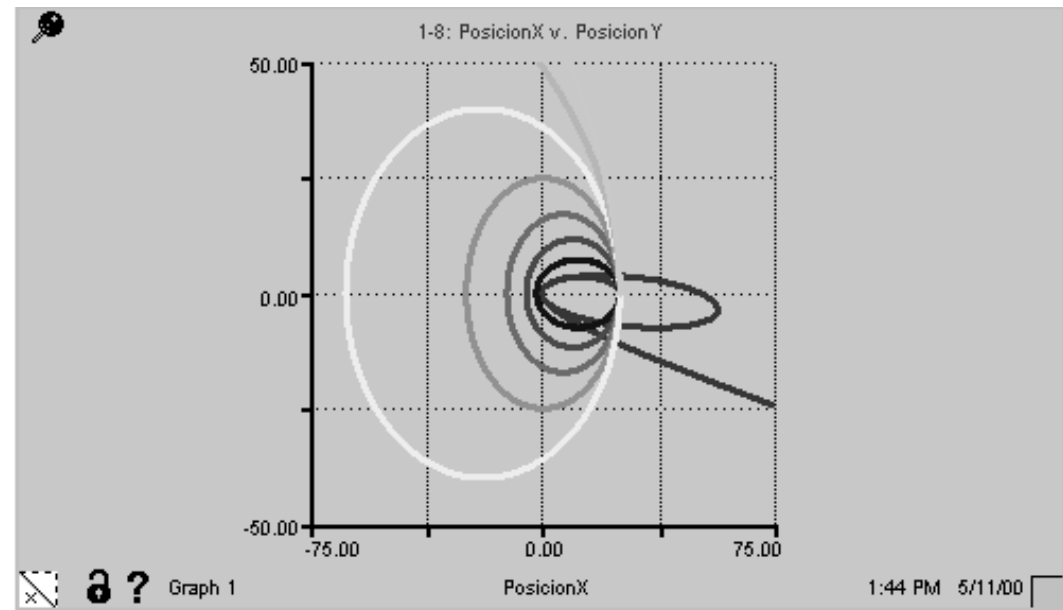


Cual es el la forma
de la trayectoria
para diferentes
condiciones iniciales
de vx?



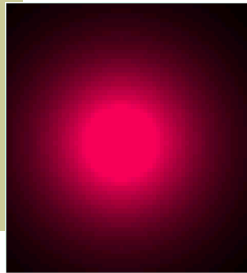
Modela

Condiciones iniciales:
posición $x=25$, $y=0$, $v_x=0$
y v_y variando de 0.04 a
0.32 en pasos de 0.04.





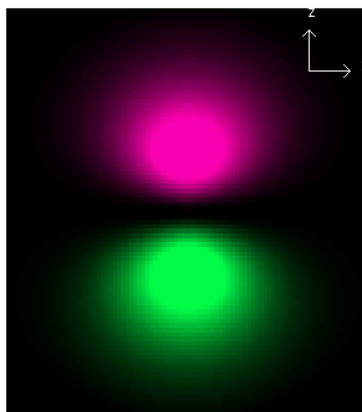
Mecanica Ondulatoria



n=1, l=0, orbital s

- Estado u orbital: la función de onda $\varphi(\mathbf{x})$ es la amplitud de probabilidad de encontrar al electron en una región

$$P(\mathbf{x}) = |\varphi(\mathbf{x})|^2 \Delta x$$

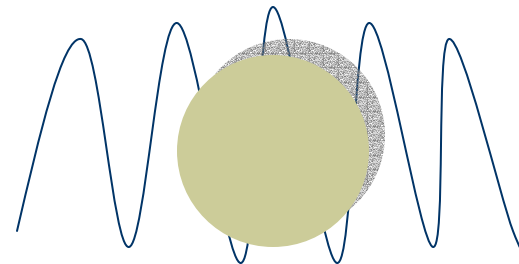


Energia

n=2, l=1, orbital p

$$E = h\nu$$

Dualidad Onda-Particula



$$\lambda = h / m\nu \quad \text{Longitud de onda}$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

Constante de Planck

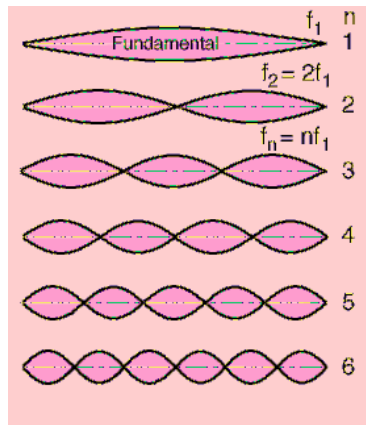
ν

Frecuencia



Analogía con ondas estacionarias

Estado n



Cuerda Vibrante

Cuerda	Atomo
Ondas estacionarias	Distribucion electrónica
Numero n	Numero atómico n
Frecuencia f_n	Energía E_n
Función de amplitud $y(x)$	Amplitud de probabilidad
Condiciones de frontera: nodos	Condiciones de frontera $\varphi(\mathbf{x}) \rightarrow 0$
Cuerda Inhomogenea $m'(x)=f(x)$	Potencial variante $V(x)$
$\frac{d^2 y_n}{dx^2}(x) \sim f_n^2 m(x) y_n(x)$	$\frac{d^2 \varphi_n}{dx^2}(x) \sim [E_n - V(x)] \varphi_n(x)$



Objetivos

Cual es la forma de los orbitales para el caso de una partícula microscópica sometida a un potencial de oscilador armónico ?.

Como se determinan las energías?

Qué forma tiene la función de Onda para un oscilador armónico ?

Cuales son los valores permitidos de la energía E_n ?





Relaciones Causales

Ecuación de Schrodinger

$$\frac{d\varphi}{dx} = \varphi_x$$

Potencial

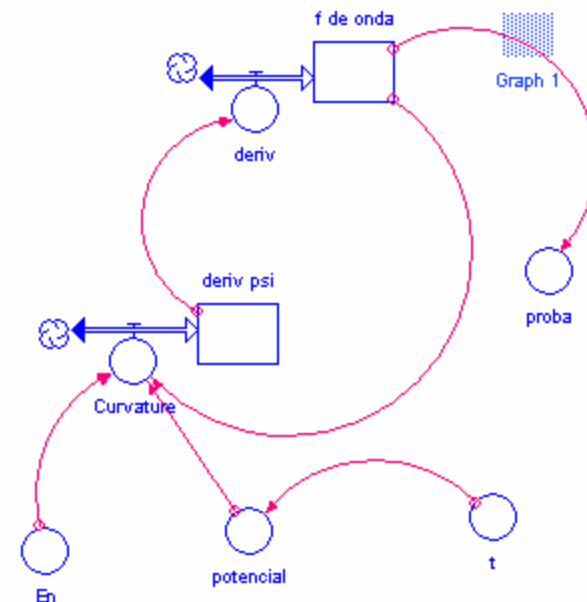
$$\frac{d\varphi_x}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E_n) \varphi$$

Energia Permitida

Curvatura

$V(x)$ es el potencial en el que esta la partícula
 E_n es la energía, la cual está cuantizada

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

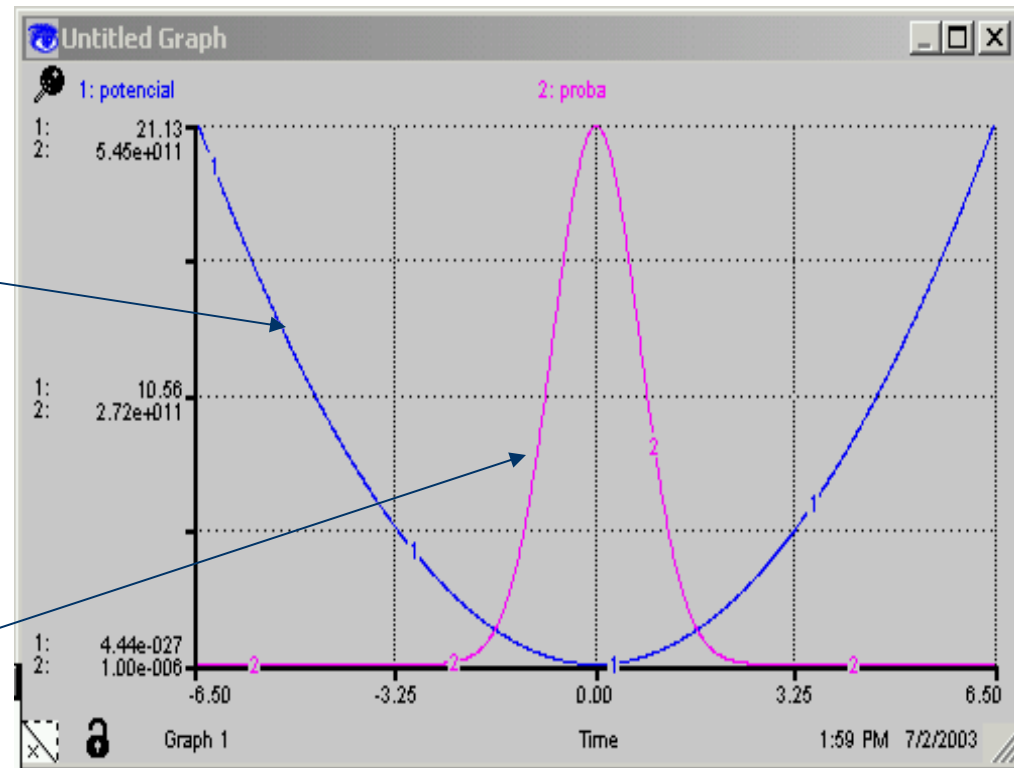




Funciones de estado

Potencial de oscilador armónico

Función de onda



Energías permitidas $E_n = (n + 1/2) \quad n = 0, 1, 2, \dots$



Perspectivas

- ◆ El enfoque de sistemas dinámicos proporciona una forma particular y muy poderosa de modelar. No concentramos en las relaciones causales que caracterizan a diferentes sistemas dinámicos.
- ◆ Una transición que sustituye una orientación dinámica en vez de estática. Es decir, de un pensamiento lineal a uno de causalidad de lazos cerrados.
- ◆ Acentúa los conceptos físicos(la dinámica del cambio) y deja a la computadora que resuelva las ecuaciones
- ◆ Cambia la de instrucción de cálculos *cuantitativos* discusiones de hipótesis mas *cualitativas* y *semi-cuantitativos* .
- ◆ El estudiante puede explorar sus propias ideas acerca al conceptualizar algunos problemas y la forma de resolverlos.



Referencias

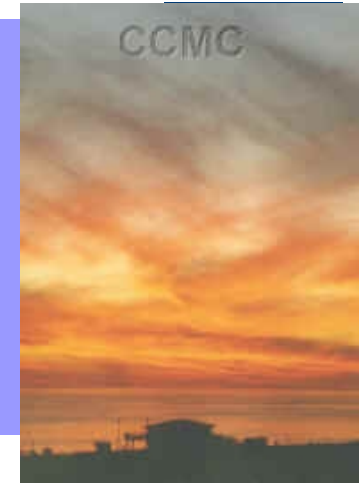
- Fernando Rojas “ Simulation and Enactment in Process Modeling”, MC thesis. The university of Manchester 1998.
- Neelamkavil F. Computer simulation and simulation, John Wiley and Sons, 1997
- TEACHING QUANTUM ATOMIC PHYSICS IN COLLEGE AND RESEARCH RESULTS ABOUT A LEARNING PATHWAY
Hans Niedderer, Proceedings of the International Conference on Undergraduate Physics Education (ICUPE)
University of Maryland, College Park, USA, July 31 - August 3, 1996
- Marvin L. De Jong, Introduction to Computational Physics, Addison-Wesley (1991).
- Nicholas Giordano, Computational Physics, Prentice Hall (1997).
- MODELING PHYSICS SYSTEM DYNAMICS IN PHYSICS EDUCATION,
Horst P. Schecker,
Creative Learning Exchange“ Newsletter. Spring 1996



Referencias

- Law Averill M., Kelton David W. "Simulation Modeling & Analysis" Segunda Edicion, 1991 Editorial McGraw-Hill. Y sus referencias.
- G. Gordon Simulacion de sistemas "Diana", 1989
- Gladwin Bruce, Tumay Kerim "Modeling Business Processes with Simulation Tools" Corporation PROMODEL. 1994.
- An introduction to Systemes Thinking, High Performance Inc., <http://www.hps-inc.com>
- DR. Simon Mochon, Modelos Matemáticos para todos los niveles, cuadernos didacticso, vol. 9, Grupo Editorial Iberoamericana

Fernando Rojas
email: frojas@ccmc.unam.mx
Ensenada B. C.



Propuestas de asesorías, cursos cortos,
estancias de investigación, tesis, Posdoc,
etc. bienvenidas !!!