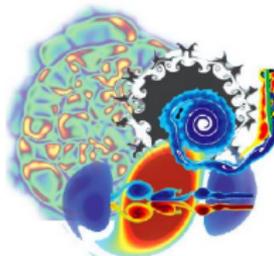


# Simulaciones dinámica molecular de fluidos granulares

Rodrigo Soto, Patricio Cordero, Dino Risso

Departamento de Física, Universidad de Chile  
<http://www.dfi.uchile.cl/rsoto>

SCAT Workshop, Valparaíso, Enero 2007



- **Sistemas granulares**
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

- Sistemas granulares
- El modelo de Esferas Duras Inelásticas (EDI)
- Estrategia ingenua de simulación de esferas duras
- Otros sistemas descritos por modelos de esferas duras
- Estrategia eficiente
- Medición de cantidades globales
- Medición de campos hidrodinámicos

# Sistemas granulares: Introducción

Materia compuesta de granos.

Ejemplo: arena, arroz, azúcar, polvo, rocas, etc.



## Materia compuesta de granos.

Ejemplo: arena, arroz, azúcar, polvo, rocas, etc.



Propiedades:

- Cada constituyente es un objeto **macroscópico**.  
Los granos disipan energía en las colisiones.
- Son duros. Impenetrables. Interacciones “instantáneas”.
- Son irregulares.

Interacciones:

- Fuerzas colisionales
- Fuerzas electrostáticas
- Fluidos (aire, agua)

Interacciones:

- Fuerzas colisionales ✓
- Fuerzas electrostáticas
- Fluidos (aire, agua)

Interacciones:

- Fuerzas colisionales ✓
- Fuerzas electrostáticas ✗
- Fluidos (aire, agua)

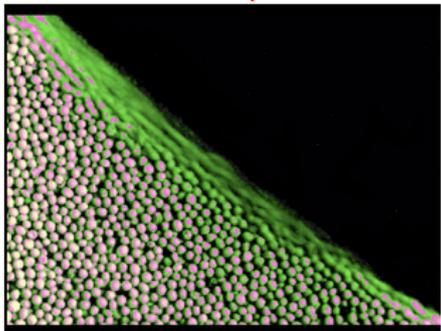
Interacciones:

- Fuerzas colisionales ✓
- Fuerzas electrostáticas ✗
- Fluidos (aire, agua) ✗

Los medios granulares se pueden comportar como:

- Sólidos: caminando sobre en la playa
- Líquidos: haciéndola fluir
- Gases: regimen libre/colisional

Las tres fases pueden existir, por ejemplo en una avalancha.



Se segregan por tamaño o forma.  
Etc, etc,....

Los medios granulares se pueden comportar como:

- Sólidos: caminando sobre en la playa
- Líquidos: haciéndola fluir
- Gases: regimen libre/colisional

Las tres fases pueden existir, por ejemplo en una avalancha.



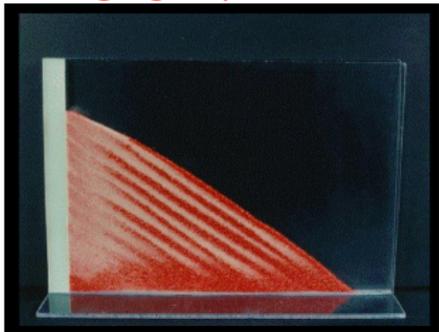
Se segregan por tamaño o forma.  
Etc, etc,....

Los medios granulares se pueden comportar como:

- Sólidos: caminando sobre en la playa
- Líquidos: haciéndola fluir
- Gases: regimen libre/colisional

Las tres fases pueden existir, por ejemplo en una avalancha.

Se segregan por tamaño o forma.



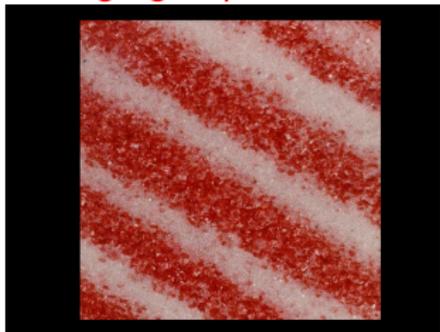
Etc, etc,....

Los medios granulares se pueden comportar como:

- Sólidos: caminando sobre en la playa
- Líquidos: haciéndola fluir
- Gases: regimen libre/colisional

Las tres fases pueden existir, por ejemplo en una avalancha.

Se segregan por tamaño o forma.

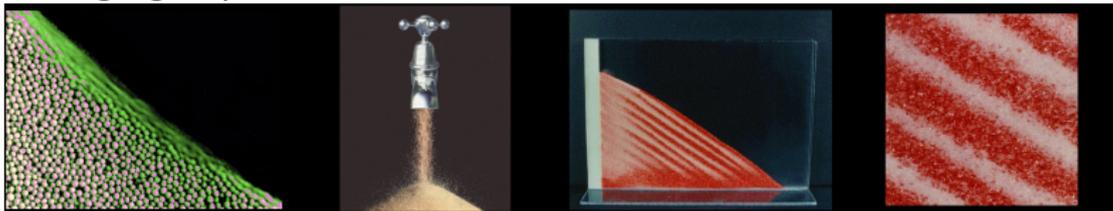


Etc, etc,....

Los medios granulares se pueden comportar como:

- Sólidos: caminando sobre en la playa
- Líquidos: haciéndola fluir
- Gases: regimen libre/colisional

Las tres fases pueden existir, por ejemplo en una avalancha.  
Se segregan por tamaño o forma.



Etc, etc,....



Se modelan los granos como *Esferas Duras Inelásticas* (EDI) (o IHS en inglés):

- Esferas (radios iguales o polidisperso)
- Grados de libertad traslacionales y rotacionales
- Movimiento libre (con  $g$ ) entre colisiones
- Fuerzas colisionales instantáneas
- Colisiones con pérdida de energía y roce

## Versión simple, sin rotación.

- Granos parametrizados por su posición y velocidad:

$$\left\{ \vec{r}_i, \vec{v}_i \right\}_{i=1}^N$$

- Movimiento libre:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t) &= \vec{r}_0 + \vec{v}_0 t + \vec{g} t^2 / 2 \\ \vec{v}(t) &= \vec{v}_0 + \vec{g} t\end{aligned}$$

## Versión simple, sin rotación.

- Granos parametrizados por su posición y velocidad:

$$\left\{ \vec{r}_i, \vec{v}_i \right\}_{i=1}^N$$

- Movimiento libre:

$$\begin{aligned}\vec{r}(t) &= \vec{r}_0 + \vec{v}_0 t + \vec{g} t^2 / 2 \\ \vec{v}(t) &= \vec{v}_0 + \vec{g} t\end{aligned}$$

## Versión simple, sin rotación.

- Granos parametrizados por su posición y velocidad:

$$\left\{ \vec{r}_i, \vec{v}_i \right\}_{i=1}^N$$

- Movimiento libre:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{v}_0 t + \vec{g} t^2 / 2$$

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 + \vec{g} t$$

## Versión simple, sin rotación.

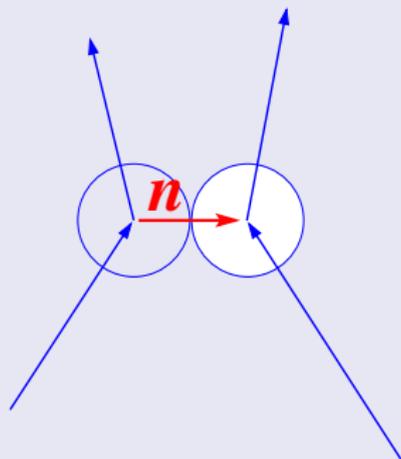
- Colisiones:

$$\vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 = \vec{v}_1 + \vec{v}_2$$

$$v'_{21n} = -\alpha v_{21n}$$

$$v'_{21t} = v_{21t}$$

Coeficiente de restitución  $\alpha$ ,  
 $\alpha \leq 1$ .



## Versión más realista, con rotación.

- Granos parametrizados por su posición, velocidad y velocidad angular:

$$\left\{ \vec{r}_i, \vec{v}_i, \vec{\omega}_i \right\}_{i=1}^N$$

- Colisiones parametrizadas con coeficientes de:
  - restitución normal:  $\alpha_n$  ( $0 \leq \alpha_n \leq 1$ )
  - restitución tangente:  $\alpha_t$  ( $-1 \leq \alpha_t \leq 1$ )
  - roce estático:  $\mu_s$  ( $0 \leq \mu_s$ )
  - roce dinámico:  $\mu_k$  ( $0 \leq \mu_k \leq \mu_s$ )

## Versión más realista, con rotación.

- Granos parametrizados por su posición, velocidad y velocidad angular:

$$\left\{ \vec{r}_i, \vec{v}_i, \vec{\omega}_i \right\}_{i=1}^N$$

- Colisiones parametrizadas con coeficientes de:
  - restitución normal:  $\alpha_n$  ( $0 \leq \alpha_n \leq 1$ )
  - restitución tangente:  $\alpha_t$  ( $-1 \leq \alpha_t \leq 1$ )
  - roce estático:  $\mu_s$  ( $0 \leq \mu_s$ )
  - roce dinámico:  $\mu_k$  ( $0 \leq \mu_k \leq \mu_s$ )

## Versión más realista, con rotación.

- 1 Se intenta colisión estática:

La velocidad relativa en el punto de contacto:

$$\vec{v}_c = (\vec{v}_2 + \omega_2 \times \vec{r}_2) - (\vec{v}_1 + \omega_1 \times \vec{r}_1)$$

$$\vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 = \vec{v}_1 + \vec{v}_2$$

$$(\vec{r}_1 \times \vec{v}'_1 + I\omega'_1) + (\vec{r}_2 \times \vec{v}'_2 + I\omega'_2) = (\vec{r}_1 \times \vec{v}_1 + I\omega_1) + (\vec{r}_2 \times \vec{v}_2 + I\omega_2)$$

$$v'_{cn} = -\alpha_n v_{cn}$$

$$v'_{ct} = \alpha_t v_{ct}$$

La transferencia de momentum normal y tangente deben cumplir la ley de Coulomb.

$$|\Delta v_{ct}| \leq \mu_s |\Delta v_{cn}|$$

- 2 Si no se cumple la ley de Coulomb, se aplica una colisión deslizante:

$$v'_{cn} = -\alpha_n v_{cn}$$
$$\Delta v_{ct} = \mu_d |\Delta v_{cn}|$$

Con o sin rotación, en cada colisión se **disipa energía**.

Se necesita inyectar energía. Hay varios métodos:

- Tambor rotatorio
- Por gravedad en un flujo en una cañería (VIDEO)
- Por paredes vibrantes (VIDEO)

Con o sin rotación, en cada colisión se **disipa energía**.

Se necesita inyectar energía. Hay varios métodos:

- **Tambor rotatorio**
- Por gravedad en un flujo en una cañería (VIDEO)
- Por paredes vibrantes (VIDEO)

Con o sin rotación, en cada colisión se **disipa energía**.

Se necesita inyectar energía. Hay varios métodos:

- Tambor rotatorio
- **Por gravedad en un flujo en una cañería (VIDEO)**
- Por paredes vibrantes (VIDEO)

Con o sin rotación, en cada colisión se **disipa energía**.

Se necesita inyectar energía. Hay varios métodos:

- Tambor rotatorio
- Por gravedad en un flujo en una cañería (VIDEO)
- **Por paredes vibrantes (VIDEO)**

- Suelo sinusoidal

$$z_{\text{suelo}}(t) = A \cos(\omega t)$$

## Simulación

- Suelo sinusoidal en límite de alta frecuencia

$$z_{\text{suelo}}(t) = A \cos(\omega t)$$

$$A \rightarrow 0; \omega \rightarrow \infty; A\omega = V_0 \text{ finito}$$

En este caso, los granos encuentran al suelo siempre en  $z = 0$  y con una velocidad de amplitud  $V_0$  finita obtenida de una fase aleatoria.

- Suelo sinusoidal

$$z_{\text{suelo}}(t) = A \cos(\omega t)$$

Simulación

- Suelo sinusoidal en límite de alta frecuencia

$$z_{\text{suelo}}(t) = A \cos(\omega t)$$

$$A \rightarrow 0; \omega \rightarrow \infty; A\omega = V_0 \quad \text{finito}$$

En este caso, los granos encuentran al suelo siempre en  $z = 0$  y con una velocidad de amplitud  $V_0$  finita obtenida de una fase aleatoria.

- Suelo diente de sierra. Límite de alta frecuencia:  
Los granos encuentran al suelo siempre en  $z = 0$  y con velocidad  $V_0$ .

- **Suelo diente de sierra. Límite de alta frecuencia:**  
Los granos encuentran al suelo siempre en  $z = 0$  y con velocidad  $V_0$ .

En general la regla de choque con la pared:

$$v'_n = 2V_p - v_n$$

Eventualmente hay también una regla de choque tangente.

Dadas estas condiciones, las unidades naturales de la simulación son:

- Longitud  $\sigma = 1$
- Masa  $m = 1$
- Velocidad  $V_0 = 1$

De la cual se deducen algunas unidades derivadas:

- Tiempo  $t = (\sigma/V_0)\tilde{t}$
- Energía  $E = (mV_0^2)\tilde{E}$
- Presión  $p = (mV_0^2/\sigma^3)\tilde{p}$

Dadas estas condiciones, las unidades naturales de la simulación son:

- Longitud  $\sigma = 1$
- Masa  $m = 1$
- Velocidad  $V_0 = 1$

De la cual se deducen algunas unidades derivadas:

- Tiempo  $t = (\sigma/V_0)\tilde{t}$
- Energía  $E = (mV_0^2)\tilde{E}$
- Presión  $p = (mV_0^2/\sigma^3)\tilde{p}$

La dinámica de las Esferas Duras Inelásticas está dada por:

- Vuelos libres entre choques (solubles analíticamente)
- Choques binarios entre granos y con las paredes, descritos por *reglas de colisión*.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,pared}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,pared}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,pared}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,pared}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$ 
  - Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
  - Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

Simulación (Dinámica Molecular) Dirigida por Eventos

## Algoritmo v1.0

- Se tienen las posiciones y velocidades de todas las partículas  $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i\}$ .
- Se predicen todos los **eventos futuros**.
  - Tiempos de choque entre granos:  $t_{ik}$ .
  - Tiempos de choque con las paredes:  $t_{i,\text{pared}}$
- Se escoge el mínimo de todos los tiempos (siguiente evento -SE):  $t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}\}$
- Se avanza el sistema hasta  $t_{SE}$
- Se realiza la colisión (entre discos o con la pared).
- Se repite.

**Simulación (Dinámica Molecular) Dirigida por Eventos**

El costo computacional de cada evento es:  $\mathcal{O}(N^2)$

Para el tiempo de choque  $t_{ik}$ . Se debe cumplir:

$$|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_k(t)| = \sigma$$

$$|(\vec{r}_i + \vec{v}_i t + \cancel{\vec{g}t^2/2}) - (\vec{r}_k + \vec{v}_k t + \cancel{\vec{g}t^2/2})|^2 = \sigma^2$$

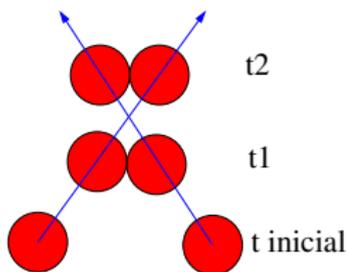
Ecuación cuadrática para  $t$ .

Para el tiempo de choque  $t_{ik}$ . Se debe cumplir:

$$|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_k(t)| = \sigma$$

$$|(\vec{r}_i + \vec{v}_i t + \cancel{\vec{g}t^2/2}) - (\vec{r}_k + \vec{v}_k t + \cancel{\vec{g}t^2/2})|^2 = \sigma^2$$

Ecuación cuadrática para  $t$ .



Para el tiempo de choque  $t_{ik}$ . Se debe cumplir:

$$|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_k(t)| = \sigma$$
$$|(\vec{r}_i + \vec{v}_i t + \cancel{\vec{g}t^2/2}) - (\vec{r}_k + \vec{v}_k t + \cancel{\vec{g}t^2/2})|^2 = \sigma^2$$

Ecuación cuadrática para  $t$ .

- Soluciones complejas. No hay colisión.  $\Rightarrow t_{ik} = \infty$ .
- Soluciones reales  $t_1$  y  $t_2$ .  
Se debe escoger la menor sólo si  $0 < t_{ik}$  (en el futuro).

# Tiempo de colisión entre dos granos

Para el tiempo de choque  $t_{ik}$ . Se debe cumplir:

$$|\vec{r}_i(t) - \vec{r}_k(t)| = \sigma$$

$$|(\vec{r}_i + \vec{v}_i t + \cancel{\vec{g}t^2/2}) - (\vec{r}_k + \vec{v}_k t + \cancel{\vec{g}t^2/2})|^2 = \sigma^2$$

Ecuación cuadrática para  $t$ .

- Soluciones complejas. No hay colisión.  $\Rightarrow t_{ik} = \infty$ .
- Soluciones reales  $t_1$  y  $t_2$ .  
Se debe escoger la menor sólo si  $0 < t_{ik}$  (en el futuro).

## Truco

Si dos granos acaban de chocar, para evitar repredecir nuevamente el mismo evento se pone una condición adicional: los granos se deben acercar  $\vec{v}_{ik} \cdot \vec{r}_{ik} < 0$ . Si no  $t_{ik} = \infty$ .

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

# Tiempo de colisión entre dos granos

- Dados  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2$ .
- Se calcula  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{v}_{12} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$
- Si  $|r_{12}| < \sigma$ , **error, ya están traslapados.**
- Si  $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} > 0$ , se alejan:  $t_{12} = \infty$
- Discriminante de la ecuación cuadrática

$$\Delta = (\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - |v_{12}|^2(|r_{12}|^2 - \sigma^2)$$

Si  $\Delta < 0$ , raíces complejas:  $t_{12} = \infty$

- Chocan:

$$t_{12} = \frac{-(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) - \sqrt{\Delta}}{|v_{12}|^2}$$

Escriba un programa que simule en 2D un sistema  $N$  discos de igual diámetro que chocan elásticamente entre sí ( $\alpha = 1$ ), sin rotación.

El sistema está en una caja cuadrada de lado  $L$  y las paredes son elásticas, de manera que en un choque:  $v'_n = -v_n$ .

Condición inicial:

- Posiciones en una retícula cuadrada, cuidando que inicialmente no hayan traslapes.
- Velocidades, todas de igual módulo  $V_0 = 1$  y ángulo aleatorio.

Simule hasta que hayan ocurrido  $N/2$ ,  $N$ ,  $2N$ ,  $3N$ ,  $10N$  colisiones disco-disco.

Al final de cada simulación haga un histograma de los módulos de las velocidades de las partículas. Vea como el sistema se acerca a la distribución de Maxwell para los módulos de velocidad:

$$f(v) = \left( \frac{2N}{V_0^2} \right) v e^{-v^2/V_0^2}$$

Existen otros sistemas que pueden ser descritos por modelos de esferas duras.

- Fluidos moleculares donde las propiedades están dominadas por las fuerzas repulsivas

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases}$$

Se modela como Esferas Duras Elásticas

- Fluidos moleculares donde además de la repulsión hay un potencial atractivo.  
Se usa el modelo del Pozo Cuadrado.

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & \lambda\sigma < r \end{cases}$$

Se simula de igual manera, agregando los eventos asociados al cruce de potencial en  $r = \lambda\sigma$ . (Simulación)

- Los casos anteriores en mezclas binarias (Simulación)
- El gas de Lorentz para modelar el transporte de cargas
- Movimiento Browniano (Simulación)

- Fluidos moleculares donde además de la repulsión hay un potencial atractivo.

Se usa el modelo del Pozo Cuadrado.

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & \lambda\sigma < r \end{cases}$$

Se simula de igual manera, agregando los eventos asociados al cruce de potencial en  $r = \lambda\sigma$ . (Simulación)

- Los casos anteriores en mezclas binarias (Simulación)
- El gas de Lorentz para modelar el transporte de cargas
- Movimiento Browniano (Simulación)

- Fluidos moleculares donde además de la repulsión hay un potencial atractivo.  
Se usa el modelo del Pozo Cuadrado.

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & \lambda\sigma < r \end{cases}$$

Se simula de igual manera, agregando los eventos asociados al cruce de potencial en  $r = \lambda\sigma$ . (Simulación)

- Los casos anteriores en mezclas binarias (Simulación)
- El gas de Lorentz para modelar el transporte de cargas
- Movimiento Browniano (Simulación)

- Fluidos moleculares donde además de la repulsión hay un potencial atractivo.  
Se usa el modelo del Pozo Cuadrado.

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma \\ 0 & \lambda\sigma < r \end{cases}$$

Se simula de igual manera, agregando los eventos asociados al cruce de potencial en  $r = \lambda\sigma$ . (Simulación)

- Los casos anteriores en mezclas binarias (Simulación)
- El gas de Lorentz para modelar el transporte de cargas
- Movimiento Browniano (Simulación)

El algoritmo ingenuo tiene un costo de  $\mathcal{O}(N^2)$  por cada evento.

Se puede mejorar considerando que:

- Es poco probable que dos partículas lejanas choquen
- Cuando dos discos chocan, sólo se invalidan los eventos predichos para ellos. No es necesario recalcular todo.

El algoritmo ingenuo tiene un costo de  $\mathcal{O}(N^2)$  por cada evento.

Se puede mejorar considerando que:

- Es poco probable que dos partículas lejanas choquen
- Cuando dos discos chocan, sólo se invalidan los eventos predichos para ellos. No es necesario recalcular todo.

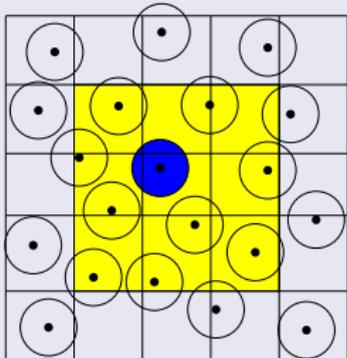
El algoritmo ingenuo tiene un costo de  $\mathcal{O}(N^2)$  por cada evento.

Se puede mejorar considerando que:

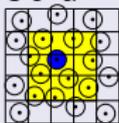
- Es poco probable que dos partículas lejanas choquen
- Cuando dos discos chocan, sólo se invalidan los eventos predichos para ellos. No es necesario recalcular todo.

- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .

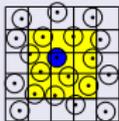
- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .



- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .

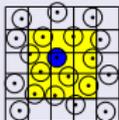


- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .



- Para cada partícula se predicen eventos de colisión sólo con partículas en las celdas vecinas (9 en 2D y 27 en 3D).

- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .



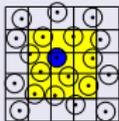
- Para cada partícula se predicen eventos de colisión sólo con partículas en las celdas vecinas (9 en 2D y 27 en 3D).
- Se deben incluir nuevos tipos de eventos: **Cruce de Pared Virtual**.

Indican cuándo una partícula cambia de celda.

Se predice de igual manera que los Choques con Paredes

Duras  $t_{i,\text{virtual}}$

- Se divide el sistema en celdas de lado  $\Delta > \sigma$ .



- Para cada partícula se predicen eventos de colisión sólo con partículas en las celdas vecinas (9 en 2D y 27 en 3D).
- Se deben incluir nuevos tipos de eventos: **Cruce de Pared Virtual**.

Indican cuándo una partícula cambia de celda.

Se predice de igual manera que los Choques con Paredes

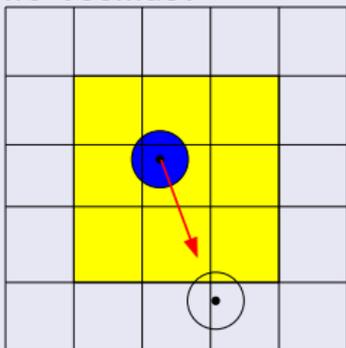
Duras  $t_{i,\text{virtual}}$

- Siguiente Evento:**

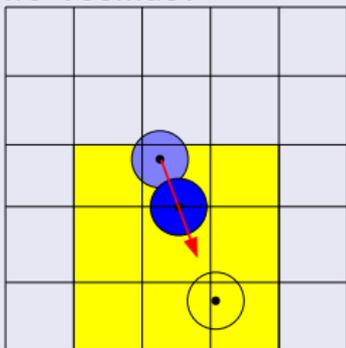
$$t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}; t_{i,\text{virtual}}\}$$

- ¿Qué pasa si el proximo evento es un choque entre partículas *no vecinas*?

- ¿Qué pasa si el proximo evento es un choque entre partículas *no vecinas*?



- ¿Qué pasa si el proximo evento es un choque entre partículas *no vecinas*?



- Antes debe haber cruzado una pared virtual. En ese instante predice el choque con la otra partícula

## Resumen de Eventos

CPP	Choque Partícula-Partícula
CPD	Choque Pared Dura
CPV	Cruce Pared Virtual

## Subclasificación de eventos CPP

Interno	Ambas partículas pertenecen a la misma celda
Externo	Las partículas pertenecen a celdas distintas

## Resumen de Eventos

CPP	Choque Partícula-Partícula
CPD	Choque Pared Dura
CPV	Cruce Pared Virtual

## Subclasificación de eventos CPP

Interno	Ambas partículas pertenecen a la misma celda
Externo	Las partículas pertenecen a celdas distintas

## Idea!

- No es necesario recalcular todos los tiempos de choque después de cada evento.
- Sólo los tiempos relacionados con las partículas que acaban de chocar se deben recalcular.

## Idea!

- No es necesario recalcular todos los tiempos de choque después de cada evento.
- Sólo los tiempos relacionados con las partículas que acaban de chocar se deben recalcular.

## Solución

- Se deben **guardar** los tiempos ya calculados
- Después de cada evento se calculan eventos **sólo** para las partículas relevantes

## Cómo reutilizar los eventos ya predichos?

- Cada partícula tiene una variable adicional:
  - $\tau_i$  Tiempo de la última colisión que sufrió
  - $\vec{r}_i, \vec{v}_i$  Posición y velocidad justo después de esa colisión
- De esta manera

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i + \vec{v}_i(t - \tau_i) + \vec{g}(t - \tau_i)^2/2$$

$$\vec{v}_i(t) = \vec{v}_i + \vec{g}(t - \tau_i)$$

- Sólo después de un evento que cambie su estado (CPP y CPD) se actualiza el estado de la partícula ( $\tau_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$ )

## Cómo reutilizar los eventos ya predichos?

- Cada partícula tiene una variable adicional:
  - $\tau_i$  Tiempo de la última colisión que sufrió
  - $\vec{r}_i, \vec{v}_i$  Posición y velocidad justo después de esa colisión
- De esta manera

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i + \vec{v}_i(t - \tau_i) + \vec{g}(t - \tau_i)^2 / 2$$

$$\vec{v}_i(t) = \vec{v}_i + \vec{g}(t - \tau_i)$$

- Sólo después de un evento que cambie su estado (CPP y CPD) se actualiza el estado de la partícula ( $\tau_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$ )

## Cómo reutilizar los eventos ya predichos?

- Cada partícula tiene una variable adicional:
  - $\tau_i$  Tiempo de la última colisión que sufrió
  - $\vec{r}_i, \vec{v}_i$  Posición y velocidad justo después de esa colisión
- De esta manera

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i + \vec{v}_i(t - \tau_i) + \vec{g}(t - \tau_i)^2/2$$

$$\vec{v}_i(t) = \vec{v}_i + \vec{g}(t - \tau_i)$$

- Sólo después de un evento que cambie su estado (CPP y CPD) se actualiza el estado de la partícula ( $\tau_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$ )

## Cómo reutilizar los eventos ya predichos?

- Cada partícula tiene una variable adicional:
  - $\tau_i$  Tiempo de la última colisión que sufrió
  - $\vec{r}_i, \vec{v}_i$  Posición y velocidad justo después de esa colisión
- De esta manera

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i + \vec{v}_i(t - \tau_i) + \vec{g}(t - \tau_i)^2/2$$

$$\vec{v}_i(t) = \vec{v}_i + \vec{g}(t - \tau_i)$$

- Sólo después de un evento que cambie su estado (CPP y CPD) se actualiza el estado de la partícula ( $\tau_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$ )

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un dueño y un partner
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un dueño y un partner
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un dueño y un partner
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

# Almacenamiento de los eventos predichos

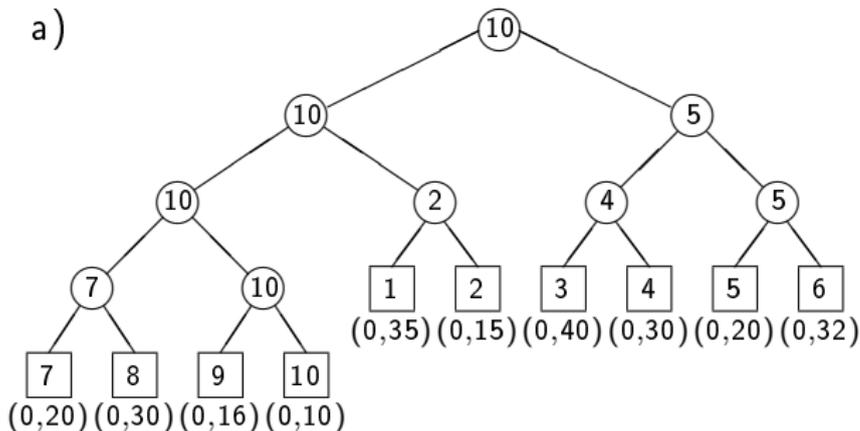
- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

## Se guardan en un árbol binario completo

- Cada evento predicho tiene un **dueño** y un **partner**
- Cada hoja del árbol representa una partícula.
- De cada hoja cuelga una lista enlazada con los eventos de los que la partícula es dueña
- En cada hoja del árbol se tiene el evento de menor tiempo dentro de su lista.
- Cuando se predicen eventos, éstos se agregan a la lista
- Cuando ocurre un evento. Este se elimina de la lista. Si el evento cambia el estado, se borra toda la lista.

La estructura es de un árbol binario completo (CBT).

- El siguiente evento corresponde a la partícula 10 con  $t = 0,10$ .
- Luego de ejecutarlo, el siguiente evento para la partícula 10 tiene  $t = 0,18$ .





¿Qué pasa si se tiene la secuencia temporal?

- Se predice un choque entre  $p_1$  y  $p_2$ , donde  $p_1$  es el dueño.
- $p_2$  sufre un evento CPP o CPD
- Corresponde realizar el evento predicho.

## Solución

- A cada partícula se le agrega una variable adicional  $N_i^{col}$ , que indica el número de eventos que ha sufrido con cambio de estado
- Cuando se predice un estado, se guarda en el árbol el valor de  $N^{col}$  del partner.
- Al momento de realizar el evento, se compara el valor de  $N^{col}$  guardado en el árbol, con el valor actual que tiene el partner. Si coinciden, el evento es válido. Si no se anula.

¿Qué pasa si se tiene la secuencia temporal?

- Se predice un choque entre  $p_1$  y  $p_2$ , donde  $p_1$  es el dueño.
- $p_2$  sufre un evento CPP o CPD
- Corresponde realizar el evento predicho.

## Solución

- A cada partícula se le agrega una variable adicional  $N_i^{col}$ , que indica el número de eventos que ha sufrido con cambio de estado
- Cuando se predice un estado, se guarda en el árbol el valor de  $N^{col}$  del **partner**.
- Al momento de realizar el evento, se compara el valor de  $N^{col}$  guardado en el árbol, con el valor actual que tiene el partner. Si coinciden, el evento **es válido**. Si no **se anula**.

¿Qué pasa si se tiene la secuencia temporal?

- Se predice un choque entre  $p_1$  y  $p_2$ , donde  $p_1$  es el dueño.
- $p_2$  sufre un evento CPP o CPD
- Corresponde realizar el evento predicho.

## Solución

- A cada partícula se le agrega una variable adicional  $N_i^{col}$ , que indica el número de eventos que ha sufrido con cambio de estado
- Cuando se predice un estado, se guarda en el arbol el valor de  $N^{col}$  del **partner**.
- Al momento de realizar el evento, se compara el valor de  $N^{col}$  guardado en el arbol, con el valor actual que tiene el partner. Si coinciden, el evento **es válido**. Si no **se anula**.

¿Qué pasa si se tiene la secuencia temporal?

- Se predice un choque entre  $p_1$  y  $p_2$ , donde  $p_1$  es el dueño.
- $p_2$  sufre un evento CPP o CPD
- Corresponde realizar el evento predicho.

## Solución

- A cada partícula se le agrega una variable adicional  $N_i^{col}$ , que indica el número de eventos que ha sufrido con cambio de estado
- Cuando se predice un estado, se guarda en el arbol el valor de  $N^{col}$  del **partner**.
- Al momento de realizar el evento, se compara el valor de  $N^{col}$  guardado en el arbol, con el valor actual que tiene el partner. Si coinciden, el evento **es válido**. Si no **se anula**.

En cada evento, los costos asociados a cada paso son:

- Regla de choque  $\mathcal{O}(1)$  [Dinámica local]
- Predicción de nuevos eventos asociados a las partículas que sufrieron el evento  $\mathcal{O}(1)$  [Celdas]
- Almacenamiento en las listas enlazadas y búsqueda del mínimo local  $\mathcal{O}(1)$  [Listas por hoja]
- Búsqueda del mínimo global  $\mathcal{O}(\log N)$  [Arbol binario]

En cada evento, los costos asociados a cada paso son:

- Regla de choque  $\mathcal{O}(1)$  [Dinámica local]
- Predicción de nuevos eventos asociados a las partículas que sufrieron el evento  $\mathcal{O}(1)$  [Celdas]
- Almacenamiento en las listas enlazadas y búsqueda del mínimo local  $\mathcal{O}(1)$  [Listas por hoja]
- Búsqueda del mínimo global  $\mathcal{O}(\log N)$  [Arbol binario]

En cada evento, los costos asociados a cada paso son:

- Regla de choque  $\mathcal{O}(1)$  [Dinámica local]
- Predicción de nuevos eventos asociados a las partículas que sufrieron el evento  $\mathcal{O}(1)$  [Celdas]
- Almacenamiento en las listas enlazadas y búsqueda del mínimo local  $\mathcal{O}(1)$  [Listas por hoja]
- Búsqueda del mínimo global  $\mathcal{O}(\log N)$  [Arbol binario]

En cada evento, los costos asociados a cada paso son:

- Regla de choque  $\mathcal{O}(1)$  [Dinámica local]
- Predicción de nuevos eventos asociados a las partículas que sufrieron el evento  $\mathcal{O}(1)$  [Celdas]
- Almacenamiento en las listas enlazadas y búsqueda del mínimo local  $\mathcal{O}(1)$  [Listas por hoja]
- Búsqueda del mínimo global  $\mathcal{O}(\log N)$  [Arbol binario]

En cada evento, los costos asociados a cada paso son:

- Regla de choque  $\mathcal{O}(1)$  [Dinámica local]
- Predicción de nuevos eventos asociados a las partículas que sufrieron el evento  $\mathcal{O}(1)$  [Celdas]
- Almacenamiento en las listas enlazadas y búsqueda del mínimo local  $\mathcal{O}(1)$  [Listas por hoja]
- Búsqueda del mínimo global  $\mathcal{O}(\log N)$  [Arbol binario]

Costo total por evento:  $\mathcal{O}(\log N)$

Se buscan mediciones que:

- Sean precisas
- No degraden la eficiencia del simulador

Hay soluciones dependiendo del tipo de **observable**

- Observables que dependen del estado
- Observables que dependen de los eventos
- Campos hidrodinámicos

Se buscan mediciones que:

- Sean precisas
- No degraden la eficiencia del simulador

Hay soluciones dependiendo del tipo de **observable**

- Observables que dependen del estado
- Observables que dependen de los eventos
- Campos hidrodinámicos

Se buscan mediciones que:

- Sean precisas
- No degraden la eficiencia del simulador

Hay soluciones dependiendo del tipo de **observable**

- Observables que dependen del estado
- Observables que dependen de los eventos
- Campos hidrodinámicos

Se buscan mediciones que:

- Sean precisas
- No degraden la eficiencia del simulador

Hay soluciones dependiendo del tipo de **observable**

- Observables que dependen del estado
- Observables que dependen de los eventos
- Campos hidrodinámicos

# Observables que dependen del estado

Hay observables que dependen del estado del sistema:

- Posición del centro de masa

$$\vec{R} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{r}_i$$

- Energía cinética

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- Transformada de Fourier de la densidad

$$n(\vec{k}) = \sum_i m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

- Energía potencial en modelo de Pozo Cuadrado

$$U = - \sum_{i,k} \epsilon \times I(r_{ik} < \lambda\sigma)$$

# Observables que dependen del estado

Hay observables que dependen del estado del sistema:

- Posición del centro de masa

$$\vec{R} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{r}_i$$

- Energía cinética

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- Transformada de Fourier de la densidad

$$n(\vec{k}) = \sum_i m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

- Energía potencial en modelo de Pozo Cuadrado

$$U = - \sum_{i,k} \epsilon \times I(r_{ik} < \lambda\sigma)$$

# Observables que dependen del estado

Hay observables que dependen del estado del sistema:

- Posición del centro de masa

$$\vec{R} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{r}_i$$

- Energía cinética

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- Transformada de Fourier de la densidad

$$n(\vec{k}) = \sum_i m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

- Energía potencial en modelo de Pozo Cuadrado

$$U = - \sum_{i,k} \epsilon \times I(r_{ik} < \lambda\sigma)$$

# Observables que dependen del estado

Hay observables que dependen del estado del sistema:

- Posición del centro de masa

$$\vec{R} = \frac{1}{N} \sum_i \vec{r}_i$$

- Energía cinética

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- Transformada de Fourier de la densidad

$$n(\vec{k}) = \sum_i m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$$

- Energía potencial en modelo de Pozo Cuadrado

$$U = - \sum_{i,k} \epsilon \times I(r_{ik} < \lambda\sigma)$$

## Solución 1: Promedios por *fotos*

- Si la función que define el observable es compleja, se pueden programar **Eventos de Medición** cada  $\Delta t$ .
- En cada Evento de Medición (alias fotos) se mide el observable deseado.
- Al final de la simulación se promedian todas las mediciones obtenidas.

## Solución 1: Promedios por *fotos*

- Si la función que define el observable es compleja, se pueden programar **Eventos de Medición** cada  $\Delta t$ .
- En cada Evento de Medición (alias fotos) se mide el observable deseado.
- Al final de la simulación se promedian todas las mediciones obtenidas.

## Aplicable a:

- Transformada Fourier de la Densidad
- Tamaño de clusters
- Forma de la superficie libre en avalancha

## Solución 2: Promedios “exactos”

- Consideremos el ejemplo de la energía cinética  $K$ .

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- $K$  sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques,  $K$  es constante

## Solución 2: Promedios “exactos”

- Consideremos el ejemplo de la energía cinética  $K$ .

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

- $K$  sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques,  $K$  es constante

## Solución 2: Promedios “exactos”

- Consideremos el ejemplo de la energía cinética  $K$ .

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

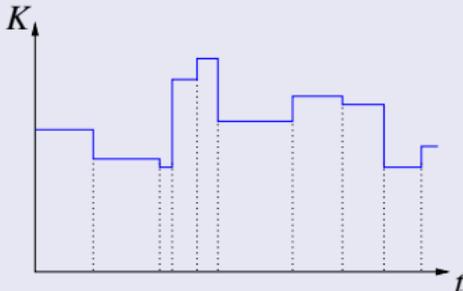
- $K$  sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques,  $K$  es constante

## Solución 2: Promedios “exactos”

- Consideremos el ejemplo de la energía cinética  $K$ .

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2$$

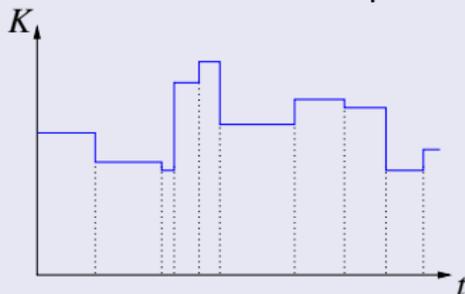
- $K$  sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques,  $K$  es constante



- El promedio se puede calcular como

$$\langle K \rangle = \tau^{-1} \int_0^\tau K(t) dt = \tau^{-1} \sum_n \Delta t_n K_n$$

donde  $\Delta t_n$  es el tiempo en que la energía duró valiendo  $K_n$ .



- Se mantienen las variables  $K_{\text{acum}}$  y  $K_{\text{actual}}$  con los valores acumulados y actual de  $K$  y  $t_{\text{ultimo}}$  con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD

- El promedio se puede calcular como

$$\langle K \rangle = \tau^{-1} \int_0^\tau K(t) dt = \tau^{-1} \sum_n \Delta t_n K_n$$

donde  $\Delta t_n$  es el tiempo en que la energía duró valiendo  $K_n$ .

- Se mantienen las variables  $K_{\text{acum}}$  y  $K_{\text{actual}}$  con los valores acumulados y actual de  $K$  y  $t_{\text{ultimo}}$  con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
  - Se actualiza  $K_{\text{acum}}$ :  $K_{\text{acum}} += K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
  - Se actualizan  $K_{\text{actual}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$

$$\begin{aligned} K_{\text{actual}} & += K_{\text{nuevas}} - K_{\text{viejas}} \\ t_{\text{ultimo}} & = t \end{aligned}$$

- El promedio se puede calcular como

$$\langle K \rangle = \tau^{-1} \int_0^\tau K(t) dt = \tau^{-1} \sum_n \Delta t_n K_n$$

donde  $\Delta t_n$  es el tiempo en que la energía duró valiendo  $K_n$ .

- Se mantienen las variables  $K_{\text{acum}}$  y  $K_{\text{actual}}$  con los valores acumulados y actual de  $K$  y  $t_{\text{ultimo}}$  con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
  - Se actualiza  $K_{\text{acum}}$ :  $K_{\text{acum}+} = K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
  - Se actualizan  $K_{\text{actual}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$

$$\begin{aligned} K_{\text{actual}} &+ = K_{\text{nuevas}} - K_{\text{viejas}} \\ t_{\text{ultimo}} &= t \end{aligned}$$

- El promedio se puede calcular como

$$\langle K \rangle = \tau^{-1} \int_0^\tau K(t) dt = \tau^{-1} \sum_n \Delta t_n K_n$$

donde  $\Delta t_n$  es el tiempo en que la energía duró valiendo  $K_n$ .

- Se mantienen las variables  $K_{\text{acum}}$  y  $K_{\text{actual}}$  con los valores acumulados y actual de  $K$  y  $t_{\text{ultimo}}$  con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
  - Se actualiza  $K_{\text{acum}}$ :  $K_{\text{acum}+} = K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
  - Se actualizan  $K_{\text{actual}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$

$$\begin{aligned} K_{\text{actual}} &+ = K_{\text{nuevas}} - K_{\text{viejas}} \\ t_{\text{ultimo}} &= t \end{aligned}$$

- El promedio se puede calcular como

$$\langle K \rangle = \tau^{-1} \int_0^\tau K(t) dt = \tau^{-1} \sum_n \Delta t_n K_n$$

donde  $\Delta t_n$  es el tiempo en que la energía duró valiendo  $K_n$ .

- Se mantienen las variables  $K_{\text{acum}}$  y  $K_{\text{actual}}$  con los valores acumulados y actual de  $K$  y  $t_{\text{ultimo}}$  con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
  - Se actualiza  $K_{\text{acum}}$ :  $K_{\text{acum}+} = K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
  - Se actualizan  $K_{\text{actual}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$

$$\begin{aligned} K_{\text{actual}} &+ = K_{\text{nuevas}} - K_{\text{viejas}} \\ t_{\text{ultimo}} &= t \end{aligned}$$

- Al final de la simulación
  - Se actualizan  $K_{\text{acum}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$
  - Se calcula el promedio

$$\langle K \rangle = K_{\text{acum}} / (t - t_{\text{inicio}})$$

También puede ser usado este método para observables que son posibles de integrar analíticamente entre eventos. Por ejemplo, la energía potencial gravitacional

- Al final de la simulación
  - Se actualizan  $K_{\text{acum}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$
  - Se calcula el promedio

$$\langle K \rangle = K_{\text{acum}} / (t - t_{\text{inicio}})$$

También puede ser usado este método para observables que son posibles de integrar analíticamente entre eventos. Por ejemplo, la energía potencial gravitacional

- Al final de la simulación
  - Se actualizan  $K_{\text{acum}}$  y  $t_{\text{ultimo}}$
  - Se calcula el promedio

$$\langle K \rangle = K_{\text{acum}} / (t - t_{\text{inicio}})$$

También puede ser usado este método para observables que son posibles de integrar analíticamente entre eventos. Por ejemplo, la energía potencial gravitacional

## Tarea

Encontrar la expresión que permite calcular el promedio de la energía potencial gravitacional total.

## Ejemplo: Presión sobre una pared

- La presión sobre una pared de área  $A$  se calcula como la fuerza que las partículas le ejercen.
- Pero sólo ejercen fuerza cuando chocan. Y los choques duran un tiempo nulo.
- Se usa la definición de fuerza como momentum transferido por unidad de tiempo.
- Si la pared está a la derecha (según  $x$ )

$$\langle p \rangle = -\frac{1}{A\tau} \sum_{CPD} (mv_x^{\text{despues}} - mv_x^{\text{antes}})$$

Signo menos por acción y reacción

## Ejemplo: Presión sobre una pared

- La presión sobre una pared de área  $A$  se calcula como la fuerza que las partículas le ejercen.
- Pero sólo ejercen fuerza cuando chocan. Y los choques duran un tiempo nulo.
- Se usa la definición de fuerza como momentum transferido por unidad de tiempo.
- Si la pared está a la derecha (según  $x$ )

$$\langle p \rangle = -\frac{1}{A\tau} \sum_{CPD} (mv_x^{\text{despues}} - mv_x^{\text{antes}})$$

Signo menos por acción y reacción

## Ejemplo: Presión sobre una pared

- La presión sobre una pared de área  $A$  se calcula como la fuerza que las partículas le ejercen.
- Pero sólo ejercen fuerza cuando chocan. Y los choques duran un tiempo nulo.
- Se usa la definición de fuerza como momentum transferido por unidad de tiempo.
- Si la pared está a la derecha (según  $x$ )

$$\langle p \rangle = -\frac{1}{A\tau} \sum_{CPD} (mv_x^{\text{despues}} - mv_x^{\text{antes}})$$

Signo menos por acción y reacción

## Ejemplo: Presión sobre una pared

- La presión sobre una pared de área  $A$  se calcula como la fuerza que las partículas le ejercen.
- Pero sólo ejercen fuerza cuando chocan. Y los choques duran un tiempo nulo.
- Se usa la definición de fuerza como momentum transferido por unidad de tiempo.
- Si la pared está a la derecha (según  $x$ )

$$\langle p \rangle = -\frac{1}{A\tau} \sum_{CPD} (mv_x^{\text{despues}} - mv_x^{\text{antes}})$$

Signo menos por acción y reacción

## Otros ejemplos

- Tasa de disipación de energía
- Frecuencia de colisiones

## Otros ejemplos

- Tasa de disipación de energía
- Frecuencia de colisiones

Usando el programa con el algoritmo v1.0 **mida la presión** sobre las paredes de un sistema de discos duros elásticos.

- 1 Considere una caja cuadrada de largo  $L$  y ponga un número variable de partículas  $N$ , todas inicializadas de igual forma que en la primera tarea con  $V_0 = 1$ .  
Esperando el tiempo necesario para que el sistema haya alcanzado la distribución de Maxwell, mida la presión sobre cualquiera de las paredes en función de la densidad  $n = N/L^2$ . Muestre que si  $n \ll 1$  se cumple la ley de gases ideales  $p \propto n$ , y se observan desviaciones para mayores densidades.
- 2 Repita lo mismo pero ahora mantenga fijo  $N$  y varíe  $V_0$ . Vea que la presión varía como  $p \propto V_0^2$ , lo cual indica que la temperatura es proporcional al cuadrado de la velocidad.

Se quiere medir, en función del espacio y el tiempo, los campos hidrodinámicos usuales

- Densidad de partículas o de masa
- Velocidad hidrodinámica
- Temperatura
- Flujo de calor
- Tensor de esfuerzos o de presiones

Se quiere medir, en función del espacio y el tiempo, los campos hidrodinámicos usuales

- Densidad de partículas o de masa
- Velocidad hidrodinámica
- Temperatura
- Flujo de calor
- Tensor de esfuerzos o de presiones

Se quiere medir, en función del espacio y el tiempo, los campos hidrodinámicos usuales

- Densidad de partículas o de masa
- Velocidad hidrodinámica
- Temperatura
- Flujo de calor
- Tensor de esfuerzos o de presiones

Se quiere medir, en función del espacio y el tiempo, los campos hidrodinámicos usuales

- Densidad de partículas o de masa
- Velocidad hidrodinámica
- Temperatura
- Flujo de calor
- Tensor de esfuerzos o de presiones

Se quiere medir, en función del espacio y el tiempo, los campos hidrodinámicos usuales

- Densidad de partículas o de masa
- Velocidad hidrodinámica
- Temperatura
- Flujo de calor
- Tensor de esfuerzos o de presiones

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- **Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:**  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Ejemplo: densidad de partículas

- Se divide el sistema en celdas
- La densidad es el número de partículas en cada celda, dividido por el volumen de ésta
- El número de partículas cambia sólo en eventos CPV
- Se escogen las celdas de medición iguales a las de algoritmo
- **Se aplica un método similar al de la Energía Cinética:**  
Variables  $N_{\text{acum}}$ ,  $N_{\text{actual}}$ ,  $t_{\text{ultimo}}$  para cada celda.

## Método válido para:

Campo	Eventos relevantes
Velocidad	CPV, CPD, CPP externo
Temperatura	CPV, CPD, CPP externo y CPP interno si $\alpha < 1$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- Se aplica un método similar al de la Presión:
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- Se aplica un método similar al de la Presión:
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- Se aplica un método similar al de la Presión:
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- **Se aplica un método similar al de la Presión:**
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- **Se aplica un método similar al de la Presión:**
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- **Se aplica un método similar al de la Presión:**
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

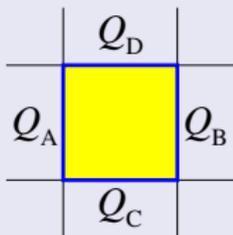
## Ejemplo: flujo de calor

- Se divide el sistema en celdas
- La energía fluye a través de las paredes de las celdas
- Hay flujo por las paredes cuando una partícula cruza (CPV) o cuando se transfiere energía a través de la pared en un CPP externo
- **Se aplica un método similar al de la Presión:**
  - En cada evento relevante se suma la cantidad de energía transferida a lo largo de la pared.
  - Se usa una convención de signo: positivo si atravieza en una dirección y negativo en la contraria
  - Al final, el flujo de calor promedio en la dirección de la pared

$$Q_{\text{pared}} = \sum_{\text{eventos}} \Delta E / (\tau S); \quad S \text{ superficie de la pared de la celda}$$

## Ejemplo: flujo de calor

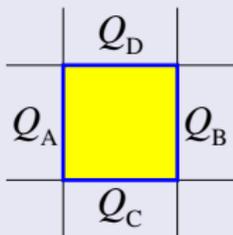
- Para construir el vector flujo se toman las paredes que rodean una celda, cada una define una componente.



$$\vec{Q}_{\text{celda}} = (Q_A + Q_B)/2\hat{x} + (Q_C + Q_D)/2\hat{y}$$

## Ejemplo: flujo de calor

- Para construir el vector flujo se toman las paredes que rodean una celda, cada una define una componente.



$$\vec{Q}_{\text{celda}} = (Q_A + Q_B)/2\hat{x} + (Q_C + Q_D)/2\hat{y}$$

## Método válido para:

Campo	Eventos relevantes
Presión	CPV, CPP externo
Tensor de presiones	CPV, CPP externo
Tasa local de disipación de energía	CPP interno y externo

- P. Cordero and D. Risso, *Microscopic Computer Simulation of Fluids*. En *Fourth Granada Lectures in Computational Physics*, P.L. Garrido and J. Marro (Eds.). Lecture Notes in Physics, Springer, (1996).
- M. Marín, D. Risso y P. Cordero, *J. Comp. Phys.* **103**, 306 (1993).
- M. Marín y P. Cordero, *Compt. Phys. Comm.* **92**, 214 (1995).
- D. Risso, Tesis doctoral. Universidad de Chile (1994).

# Simulaciones dinámica molecular de fluidos granulares

Rodrigo Soto, Patricio Cordero, Dino Risso

Departamento de Física, Universidad de Chile  
<http://www.dfi.uchile.cl/rsoto>

SCAT Workshop, Valparaíso, Enero 2007

