

## Simulación 2: Colisión de partículas

Profesor: Julián Rincón

Autor: J.R.

**Nota:** Estas notas están basadas en el capítulo ocho de “An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical Systems” de H. Gould, J. Tobochnik, and W. Christian, y en el capítulo seis de “An Introduction to Mechanics” de D. Kleppner and R. Kolenkow.

### 2.1. Introducción

En este laboratorio de simulación estudiaremos el movimiento de  $N$  partículas que chocan de acuerdo con las condiciones de una colisión elástica. Calcularemos cantidades estadísticas como presión, temperatura, camino libre medio, etc. Este laboratorio sirve como un puente para explorar el campo de la mecánica estadística, a partir de nuestros conocimientos en mecánica newtoniana. La mecánica estadística es un campo de la física que relaciona los observables macroscópicos (e.g., energía, temperatura, presión, constante de difusión) con la dinámica microscópica (movimiento de átomos y moléculas individuales).

El método de simulación será *simulación dirigida por eventos*. Este tipo de simulaciones son muy útiles para comprender y predecir las propiedades de los sistemas físicos, de muchas partículas, a nivel de microscópico. Un ejemplo típico lo constituyen las moléculas en un gas, líquido o sólido, y las transiciones de fase asociadas a estos estados de la materia. Esta misma técnica también se aplica a otros dominios incluyendo gráficos por computador, juegos de computador y robótica.

### 2.2. Modelo de discos impenetrables

Consideremos un sistema idealizado de partículas en dos dimensiones. Concretamente consideremos que estas partículas son  $N$  discos impenetrables que están confinados en un contenedor de longitud  $L_x \times L_y$ , con muros impenetrables. El origen del sistema de coordenadas de laboratorio para el siguiente análisis está en la esquina inferior izquierda del contenedor. La interacción, o energía potencial  $U(r)$ , de los discos es infinitamente repulsiva si sus áreas se solapan o cero en caso contrario. Explícitamente, la energía potencial de dos discos  $i$  y  $j$  con radios  $\sigma_i$  y  $\sigma_j$  y masas  $m_i$  y  $m_j$  está dada por

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} +\infty & r_{ij} < \sigma_i + \sigma_j, \\ 0 & r_{ij} \geq \sigma_i + \sigma_j, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde  $r_{ij} := |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  es la distancia entre los dos discos cuando estos se encuentran en las posiciones  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_j$ , respectivamente. En una dimensión esta energía potencial describe la interacción de varillas impenetrables; en tres dimensiones describe la interacción entre esferas impenetrables (bolas de billar).

Una interacción similar existe entre los muros del contenedor y los discos; es decir, los discos no pueden atravesar o mover los muros debido a su carácter impenetrable y masa infinita.

Este modelo supone que las colisiones entre discos, y las colisiones entre discos y muros, son elásticas; el único rol de la interacción es cambiar las velocidades instantáneamente. No hay fuerzas externas actuando sobre el contenedor o las partículas; por lo tanto, los discos se mueven a velocidad constante —es decir con aceleración nula— describiendo una trayectoria en línea recta. Adicionalmente, los discos no rotan.

La descripción de la dinámica de este sistema de partículas se reduce, entonces, a calcular el siguiente tiempo de colisión y el cambio instantáneo de las velocidades del par de objetos (disco-disco o disco-muro)

que colisionan. La dinámica es dirigida por eventos y puede ser calculada de manera exacta, en principio; en la práctica estará limitada por errores de redondeo asociados con la aritmética finita de todo computador.

El principal inconveniente de esta simulación es cómo lidiar con la gran cantidad de posibles eventos de colisión. La dinámica del sistema discos impenetrables puede ser tratada como una sucesión de colisiones elásticas entre dos objetos. La idea es considerar todos los pares de discos  $i$  y  $j$ , y encontrar el tiempo de colisión asociado  $t_{ij}$ , ignorando la presencia de los demás ( $N - 2$  o  $N - 1$ ) discos. En muchos casos los discos tendrán velocidades “opuestas” tales que su tiempo de colisión es infinito. A partir de todos los tiempos de colisión entre todos los pares de objetos calculados, debemos encontrar el tiempo de colisión mínimo. Posteriormente, desplazamos todas las partículas hacia adelante en el tiempo hasta que la colisión tiene lugar y calculamos las velocidades del par asociado después de la colisión, y así sucesivamente.

Para resolver este problema numéricamente primero debemos considerar el problema de colisiones elásticas en dos dimensiones. Es decir, dados dos discos  $i$  y  $j$  con velocidades  $\mathbf{v}_i$  y  $\mathbf{v}_j$  antes de la colisión, encontrar las velocidades de los discos  $\mathbf{v}'_i$  y  $\mathbf{v}'_j$  después de la colisión. Estas velocidades son encontradas como estudiamos en clase; es decir, usando leyes de conservación de energía mecánica y momentum lineal. Adicionalmente, dadas las velocidades antes de la colisión, es posible calcular el tiempo en el que los discos  $i$  y  $j$  colisionarán.

Con esta información a la mano podremos saber qué colisión ocurrirá primero, y cuándo, y cuáles son las velocidades de los discos después de la colisión.

El problema de la colisión elástica y el tiempo de colisión en dos dimensiones ya fue considerado en otro escrito. A continuación nos enfocamos en describir en detalle la simulación dirigida por eventos y los temas que van a hacer explorados en este laboratorio de simulación.

## 2.3. Simulación dirigida por eventos

En este tipo de simulaciones, nos enfocamos en aquellos momentos en que ocurren eventos interesantes o relevantes. En el problema que nos atañe, los discos viajan a velocidades constantes —en línea recta— entre colisiones. Por lo tanto, nuestro principal desafío es encontrar una sucesión ordenada de tiempos de colisión (disco-disco o disco-muro).

El problema de la sucesión puede ser solucionado usando diferentes tipos de datos abstractos: colas de prioridades, diccionarios, listas, etc. Una solución particularmente eficiente la ofrece la cola de prioridades, donde mantenemos eventos —colisiones— futuros, ordenados por tiempo. En cualquier instante de tiempo, la cola de prioridades contiene todas las colisiones futuras que ocurrirían, suponiendo que cada disco se mueve en una trayectoria en línea recta para siempre.

A medida que las partículas evolucionan en el tiempo, colisionan y cambian instantáneamente de velocidad. Esto implica que algunos de los tiempos de colisión previamente registrados en la cola de prioridades quedan invalidados. Es decir, ya no es posible que ocurran debido a que otros eventos han tenido lugar antes, cambiando así la línea de tiempo de los discos. En otras palabras, estos eventos ya no corresponden a colisiones físicas. Estos eventos inválidos simplemente los dejamos en la cola de prioridades y cuando llegue el momento de lidiar con ellos, simplemente son descartados.

El pseudocódigo de la simulación dirigida por eventos para el problema de colisiones de discos impenetrables en dos dimensiones es mostrado en el Algoritmo (1). Aunque otros algoritmos más sofisticados pueden ser construidos, acá nos concentraremos en la versión más sencilla. Nuestro objetivo es concentrarnos en los fenómenos físicos del problema usando herramientas computacionales.

Note que este problema de colisiones elásticas podría solucionarse usando las técnicas que aprendimos en el primer laboratorio de simulación. Allí discretizamos, de acuerdo un paso de tiempo  $\Delta t$ , las ecuaciones de movimiento derivadas de las leyes de Newton. Sin embargo, para garantizar una simulación razonablemente precisa, debemos elegir un  $\Delta t$  muy pequeño, y esto ralentiza la simulación. Por el contrario, el enfoque basado en eventos resulta en una simulación más robusta, precisa y eficiente, en términos del tiempo de ejecución.

---

**Algoritmo 1:** Simulación dirigida por eventos de colisiones elásticas de partículas.

---

**Entrada:** Arreglo de  $N$  discos; dimensiones  $L_x$  y  $L_y$ ; cola de prioridades; tiempo de simulación.

**Salida:** Trayectorias de discos; observables termodinámicos.

---

```

1 repita
2   Eliminar de la cola de prioridades el siguiente evento; es decir, el que tiene la prioridad mínima,  $t_{ij}$ .
3   si el evento es una colisión inválida entonces
4     Descártelo. (Un evento es inválido si uno de los discos ha colisionado desde que el evento se
      insertó en la cola de prioridades.)
5   si no, si el evento corresponde a una colisión física entre discos  $i$  y  $j$  entonces
6     Avance todos los discos al tiempo  $t_{ij}$  siguiendo una trayectoria en línea recta.
7     CALCULE LOS OBSERVABLES DE INTERÉS Y ACUMULE LOS DATOS.
8     Actualice las velocidades de los discos en colisión de acuerdo con una colisión elástica.
9     Determine todas las colisiones futuras que ocurrirían con  $i$  y  $j$ , suponiendo que todos los discos
      siguen trayectorias en línea recta desde el tiempo  $t_{ij}$  en adelante.
10    Inserte estos nuevos eventos en la cola de prioridades.
11  si no, si el evento corresponde a una colisión física entre el disco  $i$  y un muro entonces
12    Haga el procedimiento correspondiente para el disco  $i$ .
13  fin
14 hasta que no haya más eventos o se alcance el tiempo de simulación;

```

---

## 2.4. Propiedades estadísticas de discos impenetrables

En esta sección describimos los puntos que van hacer explorados en este laboratorio de simulación. Se recomienda que los puntos sean estudiados en el orden en que son expuestos, dado que están en orden de menor a mayor complejidad.

### 2.4.1. Depuración de la implementación

Antes de proceder a los cálculos importantes de este laboratorio de simulación, debemos probar el estado del programa implementado. Es muy importante verificar que no hay errores en el programa porque esto probablemente resultaría —eventualmente— en una situación sin sentido físico.

Para esto, implemente una función o método `check_overlap` que calcule la distancia entre los centros de todos los pares de discos. Si la distancia entre un par de discos  $(i, j)$  es menor que la suma de los radios  $\sigma_i$  y  $\sigma_j$ , entonces hay un error grave en el programa y debe ser corregido. Use esta función para verificar el correcto funcionamiento de su código para un sistema de partículas con  $N = 2, 10, 20, 50, 100$ . Note que usted tiene la libertad de escoger las dimensiones del contenedor, y los radios y las masas de los discos.

Es importante también monitorear la energía mecánica y el momento lineal totales del sistema como una función del tiempo. Más adelante veremos que la energía total está relacionada con la temperatura. Nos queda entonces registrar el momentum lineal total,

$$\mathbf{P}_{\text{tot}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i(t), \quad (2.2)$$

en intervalos regulares de tiempo. Implemente, entonces, un método que verifique la conservación del momentum como una función del tiempo. Es decir, este método debe calcular el momento lineal total del sistema de discos. Construya una sola gráfica de esta cantidad como una función del tiempo para los parámetros de simulación usados en el ítem anterior.

### 2.4.2. Densidad de discos

La densidad,  $n$ , del sistema de  $N$  discos impenetrables se define como la cantidad de discos en un volumen fijo, en este caso el contenedor de dimensiones  $L_x \times L_y$ . Es decir,

$$n = \frac{N}{L_x L_y}. \quad (2.3)$$

Dada una densidad fija, las posiciones iniciales de los discos son importantes para alcanzar el equilibrio. Una manera fácil de obtener una densidad de discos deseada es ubicándolos en una red regular (rectangular, triangular, hexagonal, etc.). Implemente un método que ubica las partículas usando este criterio —de red rectangular— y con una distancia entre partículas que es más o menos uniforme. Este método debe tener como parámetros el número de discos por fila y por columna, para el caso rectangular.

Si todos los discos tienen el mismo radio  $\sigma_k$  y el contenedor tiene una dimensión  $L_x \times L_y$ , ¿cuál es la máxima densidad posible si los discos son ubicados sobre una red cuadrada? De esta forma cada partícula tiene cuatro vecinos cercanos. Suponga los siguientes parámetros de simulación:  $N = 100$  y  $L_x = L_y = 11$ . ¿Cómo se ve la distribución de los discos después de varios cientos de colisiones? ¿La mayoría de los discos tiene aún cuatro vecinos cercanos o existen regiones donde la mayoría de los discos tienen más o menos que cuatro vecinos cercanos?

### 2.4.3. Temperatura

De acuerdo al teorema de la equipartición, la energía cinética media de un disco es  $k_B T/2$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura (cinética). La temperatura del sistema de discos impenetrables, en un instante de tiempo  $t$ , es constante y puede ser definida de la siguiente manera

$$k_B T(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(t), \quad (2.4)$$

donde  $\mathbf{v}_i(t)$  es velocidad del disco  $i$  con masa  $m_i$ , en el tiempo  $t$ , y  $N$  es el número total de discos.

Esta ecuación puede ser usada para escoger las velocidades iniciales de tal forma que el sistema tenga una temperatura fija. Implemente un método que le da una velocidad aleatoria a los discos, hace que el momentum lineal total del sistema sea cero:  $\mathbf{P}_{\text{tot}}(t) = 0$ , y luego modifica las velocidades por un factor constante tal que la temperatura deseada es alcanzada.

Para un sistema de discos que interactúan con una energía potencial discontinua, la temperatura no fluctúa. En otras palabras, que la temperatura sea constante puede ser usada como otra manera de comprobar la correctitud de la implementación. Implemente un método que calcula la temperatura del sistema para un conjunto de velocidades dadas. Use esta función para verificar el correcto funcionamiento de su código para las cantidades de partículas mencionadas en la sección anterior. Genere una gráfica que muestre la temperatura del sistema como función del tiempo. ¿Cuál es el efecto sobre la temperatura de aumentar todas las velocidades por un factor constante?

### 2.4.4. Presión

La presión  $P = P(t)$  está relacionada a la fuerza por unidad de área normal a una superficie imaginaria sobre el sistema de discos. Usando el momentum lineal calculado y la segunda ley de Newton, en principio podemos encontrar la presión; sin embargo, en su lugar, usaremos la fórmula del virial. Esta fórmula muestra que la presión en el instante de tiempo  $t$  está dada por

$$P(t) = \frac{N k_B T(t)}{V} + \frac{1}{V} \frac{1}{t} \sum_{c_{ij}} \frac{m_i}{2} \Delta \mathbf{v}_{ij}(t) \cdot \mathbf{r}_{ij}(t), \quad (2.5)$$

donde  $V$  es el volumen del contenedor y la suma es sobre todas las colisiones entre los discos  $i$  y  $j$  en el intervalo de tiempo  $t$ ;  $\mathbf{r}_{ij}$  es el vector entre los centros de los discos en el instante de la colisión tal que la magnitud de  $\mathbf{r}_{ij}$  es  $\sigma_i + \sigma_j$ . Finalmente, tenemos que  $\Delta \mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}_i - (\mathbf{v}'_j - \mathbf{v}_j)$ .

Modifique su programa para poder calcular la presión sobre los muros del contenedor usando la fórmula del virial. Implemente esta fórmula como un método o función y calcule la presión media debido a las fluctuaciones estadísticas de los discos que hay en el contenedor.

La dependencia de la presión media con la densidad de discos es una cantidad de interés. Obtenga datos de presión media como función de la densidad y realice la gráfica correspondiente. ¿Es la presión una función monótona creciente continua de la densidad? La respuesta a esta pregunta no es fácil de responder para un sistema con  $N = 64$ . Probablemente tenga que llegar a  $N = 150$ . Para encontrar la dependencia de la presión con la densidad, empiece a bajas densidades y aumentela paulatinamente. Para aumentar la densidad, multiplique todas las posiciones de los discos y el tamaño del contenedor por un factor tal que la distancia mínima disco-disco se reduce en un factor de dos. Repita este procedimiento hasta alcanzar la densidad deseada. Recuerde que debe equilibrar el sistema entre las distintas reducciones de distancia y cambios de dimensión del contenedor.

### 2.4.5. Tiempo y camino libre medios

*Cálculo del tiempo libre medio.* El tiempo libre medio,  $t_c$ , es el tiempo promedio que le toma un disco en ir de una colisión a la siguiente. Más formalmente

$$t_c = \frac{1}{\#c_{ij}} \sum_{c_{ij}} t_{ij}, \quad (2.6)$$

donde  $t_{ij}$  es el tiempo de la colisión válida entre los discos  $i$  y  $j$ ,  $\#c_{ij}$  es el número total de colisiones válidas, y la suma es sobre todas las colisiones disco-disco y disco-muro —también válidas— que ocurrieron durante el tiempo de simulación. Por ejemplo, suponga que sabemos que 40 colisiones ocurrieron en un tiempo de 2,5 segundos para un sistema de 16 discos. Debido a que dos discos participan en cada colisión, hubo un promedio de  $80/16$  colisiones por disco. Por lo tanto,  $t_c = 2,5/(80/16) = 0,5$ . Escriba un método que calcule el tiempo libre medio y determina esta cantidad como una función de la densidad. Haga la correspondiente gráfica e interprete sus resultados en términos físicos.

*Cálculo del camino libre medio.* El camino libre medio,  $\ell$ , es la distancia media que un disco viaja entre dos colisiones consecutivas. A medida que aumenta la temperatura, el camino libre medio aumenta, manteniendo la presión constante. Típicamente, la relación entre el camino libre medio y el tiempo libre medio está dada por la siguiente ecuación:

$$\ell = \bar{v} t_c, \quad (2.7)$$

donde  $\bar{v}$  es la raíz cuadrada de la velocidad cuadrática media,  $\bar{v}^2 = \overline{v^2}$ . Escriba un método que calcule el camino libre medio del sistema de discos. Haga un análisis de esta cantidad como función de la densidad de discos. Note que el desplazamiento del disco  $i$  durante un tiempo  $t$  es  $v_i t$ , donde  $v_i$  es la rapidez del disco  $i$ . ¿Cuál es la relación que encuentra entre el camino libre medio y el tiempo libre medio? Analice distintos parámetros de simulación.

### 2.4.6. Difusión y movimiento browniano

El desplazamiento cuadrático medio, de un sistema de discos con posiciones  $\mathbf{r}_k(t)$ , está definido como

$$\overline{R(t)^2} = \overline{[\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(t_0)]^2}, \quad (2.8)$$

donde el rótulo  $k$  se refiere a un disco representativo del sistema. El promedio al que se refiere esta ecuación es sobre todas las posibles elecciones del tiempo inicial  $t_0$ . Debido que el sistema está en equilibrio, la selección

de tiempo  $t_0 = 0$  es arbitraria, y entonces, esta cantidad depende solamente de la diferencia de tiempo  $t - t_0$ . Si las colisiones de un disco con todos los otros discos es “aleatoria”, entonces dicho disco sigue un camino “aleatorio” y la dependencia temporal del desplazamiento cuadrático medio estaría dada por

$$\overline{R(t)^2} = 4Dt, \quad t \rightarrow \infty. \quad (2.9)$$

$D$  se conoce como el coeficiente de autodifusión. Debido a que el comportamiento promedio de todos los discos debería ser el mismo, encontraremos mejores resultados si promediamos esta cantidad sobre todos los discos —y no solamente sobre el disco  $k$ —. La ecuación de arriba relaciona un coeficiente de transporte macroscópico, como  $D$ , con una cantidad microscópica, como el desplazamiento cuadrático medio,  $\overline{R(t)^2}$ . Además, nos ofrece una manera de calcular el coeficiente de autodifusión  $D$ .

Para un sistema de discos finito — $N$  partículas en un contenedor de dimensiones finitas— la diferencia de tiempo  $t - t_0$  no puede ser muy grande debido que el desplazamiento de un disco está acotado. ¿Cuál es el valor máximo del desplazamiento cuadrático medio  $\overline{R(t)^2}$ ?

*Cálculo del desplazamiento cuadrático medio.* Calcule  $\overline{R(t)^2}$  para un valor fijo de densidad de discos. ¿Cuál es la forma funcional de esta cantidad como función del tiempo  $t$ ? ¿El desplazamiento cuadrático medio aumenta linealmente o cuadráticamente a medida que el tiempo aumenta? Realice el mismo análisis para varios parámetros de simulación. Agrupe sus resultados en una sola gráfica.

Use la ecuación de arriba para estimar la magnitud del coeficiente de autodifusión, a partir de la pendiente del desplazamiento cuadrático medio como función del tiempo, para un intervalo de tiempo en el que haya aproximadamente una relación lineal. Estime la precisión de su valor de  $D$  haciendo promedios sobre distintas simulaciones con un conjunto de parámetros de simulación fijo. Realice este procedimiento para distintos parámetros de simulación con el fin de obtener una gráfica del coeficiente de autodifusión como función de la densidad de discos.

### 2.4.7. Análisis asintótico de la simulación

Desde el punto de vista computacional, el análisis asintótico de la simulación es de suma importancia. Como sabemos, la eficiencia y rendimiento de una solución computacional depende fuertemente de qué estructuras de datos y algoritmos son implementados. Es por eso que es imperativo realizar el análisis del algoritmo desarrollado en este laboratorio de simulación.

Usando el código desarrollado para estudiar las propiedades de un sistema de discos impenetrables, analice el tiempo de ejecución  $T(N)$  en términos del número de discos  $N$ . Realice su análisis dividiendo el código en dos partes: (i) la inicialización de las posiciones y velocidades de los discos, y (ii) el ciclo tipo `while` en el que se resuelven las colisiones en un tiempo de colisión dado. Si considera que debe incluir otras variables en su análisis no dude en hacerlo. Por ejemplo, las dimensiones del contenedor o el tiempo total de simulación.

Para su análisis tenga en cuenta que la implementación estándar de una cola de prioridades garantiza un tiempo logarítmico por operación. Esto es porque dicha implementación usa un montículo binario (*binary heap*). Como se señaló al principio, usar una cola de prioridades permite simulaciones con un gran número de partículas y tiempos grandes.

Discuta cómo cambian los resultados de su análisis de la simulación cuando esta, en lugar de una cola de prioridades, implementa (a) un diccionario o (b) una lista. Justifique sus respuestas de forma clara y concisa.