

# Simulación de un gas de partículas con colisiones elásticas y breve exploración de la mecánica estadística

Isabella Martínez Martínez\* and Camilo Martínez Mejía†  
(Dated: December 15, 2019)

En la práctica realizada se simuló un gas de partículas sencillo en dos dimensiones que consiste en discos impenetrables que no giran o rotan y donde el sistema de partículas se establece bajo colisiones elásticas, lo anterior utilizando el algoritmo de simulación por eventos. Además se calcularon distintos datos estadísticos y se analizó la complejidad computacional de la simulación.

## I. INTRODUCCIÓN

En el presente informe se pretende estudiar el movimiento de  $N$  partículas que chocan de acuerdo con las condiciones de una colisión elástica. Se calcularon cantidades estadísticas como presión, temperatura, camino libre medio, entre otras. Así pues, este es un puente para explorar el campo de la mecánica estadística, a partir de nuestros conocimientos en mecánica newtoniana.

El método de simulación que se utilizó fue *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 microscópico.

## II. MARCO TEÓRICO

### A. Modelo de discos impenetrables

Se consideran  $N$  discos impenetrables confinados en un contenedor  $L_x \times L_y$  con muros impenetrables. El origen del sistema de coordenadas de laboratorio está en la esquina inferior izquierda del contenedor. La energía potencial  $U(r)$  de los discos es infinitamente repulsiva si sus áreas se solapan o cero en caso contrario.

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.

El modelo supone que las colisiones entre discos, y las colisiones entre discos y muros son elásticas. Este tipo de colisiones se caracterizan dado que la energía cinética total se conserva, es decir no se pierde ni se gana energía cinética durante la colisión. En este tipo de colisión las fuerzas de interacción son conservativas, su único rol 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 describiendo una trayectoria en línea recta. Adicionalmente, los discos no rotan.

En la resolución de las colisiones elásticas entre dos discos  $i, j$  con radios  $\sigma_i, \sigma_j$  y masas  $m_i, m_j$  se concretó que la velocidad final del disco  $i$  es

$$\mathbf{v}'_i = -\frac{c_j}{(\sigma_i + \sigma_j)^2} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij} + \mathbf{v}_i, \quad (1)$$

donde  $c_j = 2m_j/(m_i + m_j)$ ,  $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$  y  $\mathbf{v}_i$  es la velocidad anterior a la colisión. Se obtiene la ecuación para  $\mathbf{v}'_j$  si se intercambian las variables  $i \longleftrightarrow j$  en la Eq. 1.

En el caso de las colisiones con muros, de ser un muro horizontal se refleja la componente de la velocidad en  $y$  y de ser un muro vertical se refleja la componente de la velocidad en  $x$ .

En el cálculo del tiempo de colisión entre dos discos se determinó

$$t_{ij} = \begin{cases} \infty & \text{si } v_{ij} = 0 \\ \infty & \text{si } \mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} > 0 \\ \infty & \text{si } d_{ij} < 0 \\ -\frac{\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} + \sqrt{d_{ij}^2}}{v_{ij}^2} & \text{en caso contrario.} \end{cases} \quad (2)$$

Donde  $d_{ij} = (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij})^2 - v_{ij}^2 (r_{ij}^2 - \sigma^2)$  y  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ .

En el caso del tiempo de colisión de un disco  $k$  con un muro horizontal se determinó

$$t_k = \begin{cases} \frac{\sigma_k - r_{ky}}{v_{ky}} & \text{si } v_{ky} < 0 \\ \frac{L_y - \sigma_k - r_{ky}}{v_{ky}} & \text{si } v_{ky} > 0 \\ \infty & \text{si } v_{ky} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Una ecuación análoga predice el tiempo de colisión con un muro vertical. Solamente se intercambian las posiciones, las dimensiones del contenedor y las componentes de la velocidad a lo largo de las direcciones canónicas ( $x \longleftrightarrow y$ ) en la Eq. 3.

### B. Simulación dirigida por eventos

En este tipo de simulación se tiene en cuenta los momentos en que ocurren eventos de interés, en nuestro caso

\* isabella.martinezm@urosario.edu.co

† camiloandres.marti01@urosario.edu.co

las colisiones. Lo que se busca es tener una lista ordenada de tiempos de colisión, para esto se emplea una cola de prioridades ya que resulta ser particularmente eficiente. En esta cola de prioridades se colocan los eventos futuros ordenados por tiempo.

A medida que transcurre el tiempo existen eventos inválidos, es decir, ya no es posible que ocurran debido a que otros eventos han tenido lugar antes. Estos eventos se dejan en la cola de prioridades para que cuando se evalué esta simplemente se descarten tales eventos.

---

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

---

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

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

**repeat**

    Eliminar de la cola de prioridades el siguiente evento; es decir, el que tiene la prioridad mínima,  $t_{ij}$ ;

**if** *el evento es una colisión inválida* **then**

        Descártelo;

**else if** *el evento corresponde a una colisión física entre discos  $i$  y  $j$*  **then**

        Avance todos los discos al tiempo  $t_{ij}$  siguiendo una trayectoria en línea recta; Calcule los observables de interés y acumule los datos;

        Actualice las velocidades de los discos en colisión de acuerdo con una colisión elástica;

        Determine todas las colisiones futuras que ocurrirán con  $i$  y  $j$ , suponiendo que todos los discos siguen trayectorias en línea recta desde el tiempo  $t_{ij}$  en adelante;

        Inserte estos nuevos eventos en la cola de prioridades;

**else if** *el evento corresponde a una colisión física entre el disco  $i$  y un muro* **then**

        Haga el procedimiento correspondiente para el disco  $i$ ;

**end**

**until** *no haya más eventos o se alcance el tiempo de simulación*;

---

### C. Propiedades estadísticas de discos impenetrables

El momentum lineal total se calcula de la siguiente manera

$$\mathbf{P}_{\text{tot}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i(t). \quad (4)$$

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,

$$n = \frac{N}{L_x L_y}. \quad (5)$$

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

$$k_B T(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(t), \quad (6)$$

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

La presión  $P = P(t)$  está relacionada a la fuerza por unidad de área normal a una superficie imaginaria sobre el sistema de discos. La fórmula del virial muestra que la presión en el instante de tiempo  $t$  está dada por

$$P(t) = \frac{N k_B T(t)}{V} + \frac{1}{V} \frac{1}{t} \sum_{c_{ij}} \frac{m_i}{2} \Delta \mathbf{v}_{ij}(t) \cdot \mathbf{r}_{ij}(t), \quad (7)$$

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  $\Delta \mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}_i - (\mathbf{v}'_j - \mathbf{v}_j)$ .

El tiempo libre medio  $t_c$  es el tiempo promedio que le toma a un disco en ir de una colisión a la siguiente. Es decir

$$t_c = \frac{1}{\#c_{ij}} \sum_{c_{ij}} t_{ij}, \quad (8)$$

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.

El camino libre medio  $\ell$ , es la distancia media que un disco viaja entre dos colisiones consecutivas. Típicamente, la relación entre el camino libre medio y el tiempo libre medio está dada por la siguiente ecuación:

$$\ell = \bar{v} t_c, \quad (9)$$

donde  $\bar{v}$  es la raíz cuadrada de la velocidad cuadrática media,  $\bar{v}^2 = v^2$ .

### III. PROCEDIMIENTO

Para describir o tratar la dinámica del sistema de partículas se deben calcular los tiempos de colisión y los cambios instantáneos de las velocidades, lo anterior tanto para colisión disco-disco y disco-muro. Para esto se usa la simulación dirigida por eventos, ver Algoritmo (1).

Debido a que se tiene que manejar gran cantidad de eventos (colisiones), la dinámica del sistema de discos impenetrables se puede tratar como una sucesión de colisiones elásticas entre dos objetos. Lo fundamental es considerar todos los pares de discos  $i$  y  $j$  y encontrar su tiempo de colisión asociado  $t_{ij}$  sin tener en cuenta a los demás discos. Al tener los tiempos de colisión entre todos los pares de objetos calculados, el paso que sigue es encontrar el tiempo de colisión mínimo, a partir de este dato se desplazan todas las partículas en el tiempo hasta que la colisión ocurre y se calculan las velocidades del par asociado después de la colisión. Este proceso se repite de manera iterativa.

Por otro lado se debe registrar la energía mecánica y el momento lineal totales del sistema en función del tiempo, para esto se emplea la Eq. 4 para el momento y la Eq. 6 para la energía cinética. También se debe calcular densidad, temperatura, presión, tiempo libre medio y camino libre medio, esto con las respectivas ecuaciones mencionadas en el marco teórico.

Por último se debe realizar un análisis asintótico de la simulación con el fin de establecer la eficiencia y rendimiento del algoritmo implementado.

### IV. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Para la ejecución de la simulación y la obtención de los resultados, a no ser de que se diga lo contrario, se emplearon ciertos parámetros, ver Tabla I.

TABLE I. Parámetros de Simulación

Parámetro	Valor
Tamaño del contenedor	$100 \times 100$
Tiempo simulación	1000
Número de partículas	100
Radio de las partículas	1
Masa de las partículas	1

Como el modelo está basado en colisiones elásticas se debería garantizar la conservación del momentum lineal, y efectivamente en las colisiones disco-disco se evidencia esto. Sin embargo, como los muros actúan como fuerzas externas se observa que en las colisiones disco-muro el momentum lineal **no se conserva**, por lo tanto el mo-

mentum lineal del sistema de partículas no se conserva, lo anterior se puede observar en las Fig. 1 y Fig. 2.

Se comprobó esto al calcular en intervalos regulares de tiempo el momentum lineal total tanto en el eje  $x$  como en el  $y$ .

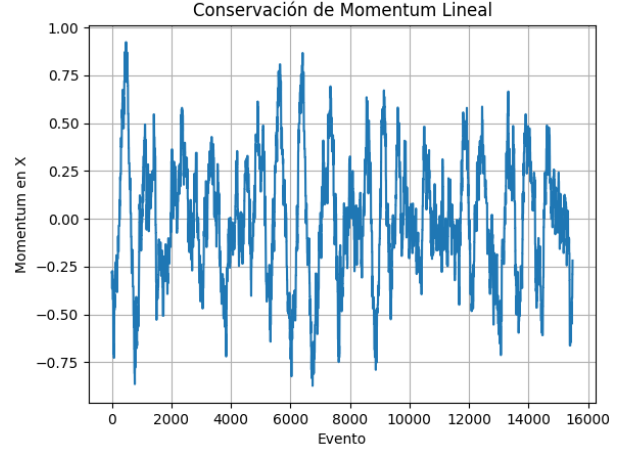


FIG. 1. Momentum lineal en el eje X

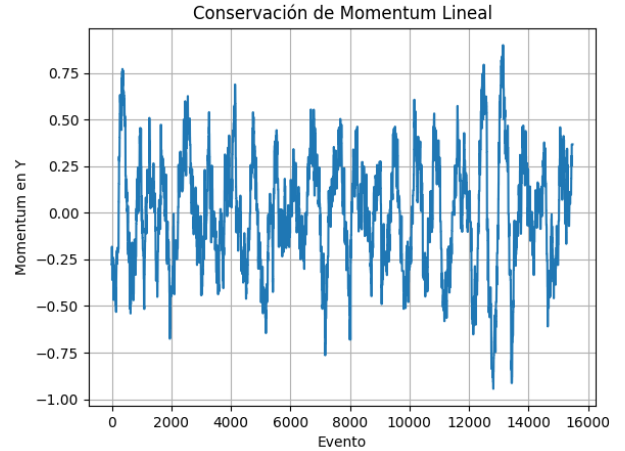


FIG. 2. Momentum lineal en el eje Y

Si los discos tienen el mismo radio  $\sigma_k$  y el contenedor tiene una dimensión  $L_x \times L_y$ , la densidad máxima  $n_{\text{máx}}$  si los discos son ubicados en una red cuadrada esta dada por la siguiente expresión

$$n_{\text{máx}} = \frac{1}{L_y^2} \left( \left\lfloor \frac{L_y}{2\sigma_k} \right\rfloor \right)^2.$$

Suponiendo los siguientes parámetros de la simulación:  $N = 100$  y  $L_x = L_y = 11$ , donde  $N$  es el número de partículas y  $L_x \times L_y$  es tamaño del contenedor. Se ubicaron dichas partículas en una red cuadrada de tamaño  $10 \times 10$  con el fin de analizar si la mayoría

de discos tiene aún cuatro vecinos cercanos. Se encontró que esto depende directamente del radio de los mismos, ya que para este caso el radio máximo en esta distribución de partículas es aproximadamente 0.5, y con el mismo se observó que la mayoría de las partículas todavía tiene cuatro vecinos cercanos después de varios cientos de colisiones (esto debido al poco espacio que tienen para moverse), Fig. 3. De otra manera, con un radio de 0.1 y un mayor rango de movimiento debido a esto, las partículas ya no tienen cuatro vecinos cercanos pues tiene mayor libertad, Fig. 4

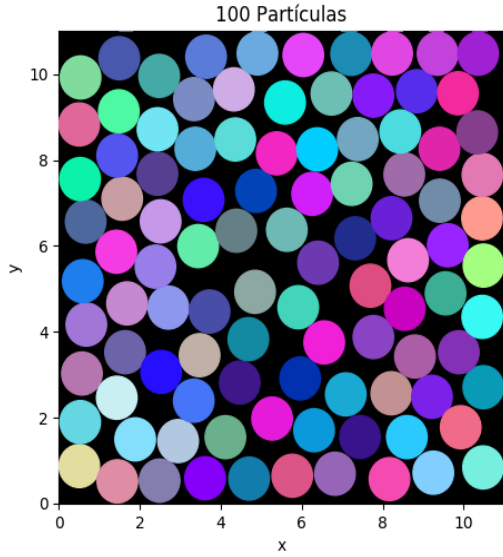


FIG. 3.  $\sigma = 0.5$

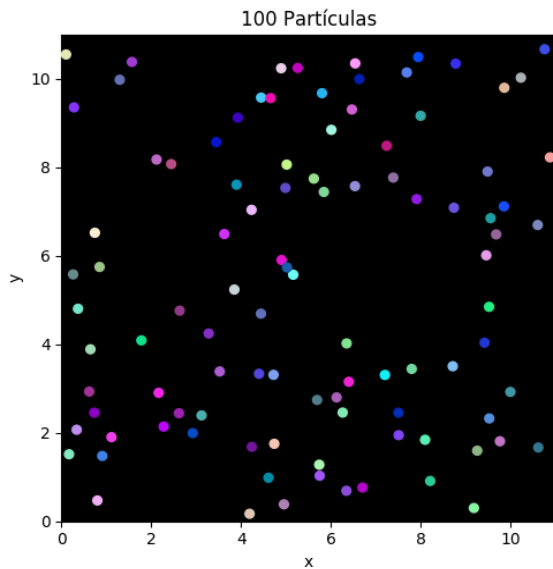


FIG. 4.  $\sigma = 0.1$

Por otro lado, teniendo en cuenta la temperatura en función del tiempo se observa que se conserva la misma en el sistema de partículas y por ende, la conservación de la energía mecánica pues estas dos están relacionadas por la Eq. 6, lo anterior se observa en la Fig. 5.

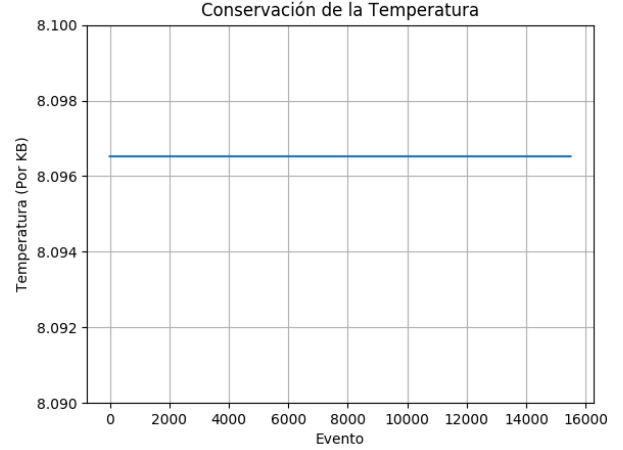


FIG. 5. Temperatura en función del evento

Además, si se aumentan todas las velocidades por un factor constante se nota un aumento directo en la temperatura. Es decir, la temperatura es directamente proporcional a la rapidez de las partículas en el contenedor.

Ahora, en cuanto a la presión del sistema, esta se calculó utilizando la Eq. 7, que es la formula del virial, y se notó una tendencia a estabilizarse conforme pasa el número de eventos y por ende, el tiempo.

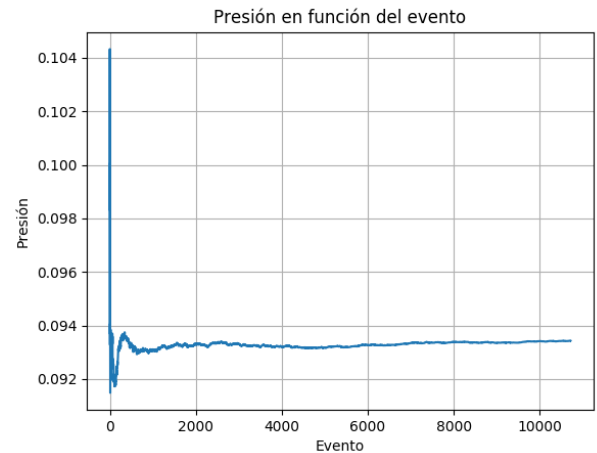


FIG. 6. Presión en función del evento

Con el fin de estudiar la dependencia de la presión media con la densidad de discos se mantuvieron estáticas

las dimensiones del contenedor ( $100 \times 100$ ) y se aumentó el número de partículas, los resultados para estas condiciones se observan en la Fig 7. Efectivamente, la presión es una función monótona creciente continua de la densidad. También se hizo una regresión lineal de los datos experimentales, obteniendo la ecuación  $y = 0.000949566473354x$  con  $R^2 = 0.998066174188719$ .

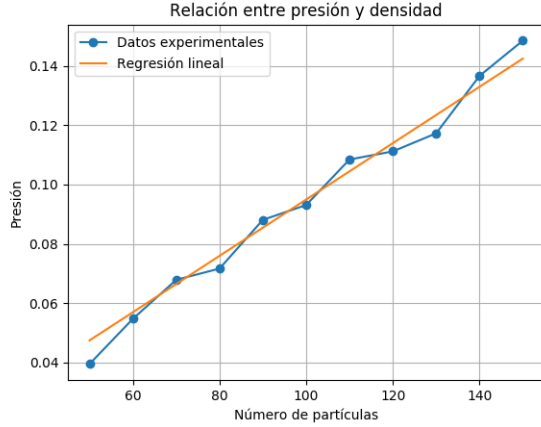


FIG. 7. Presión en función de la densidad

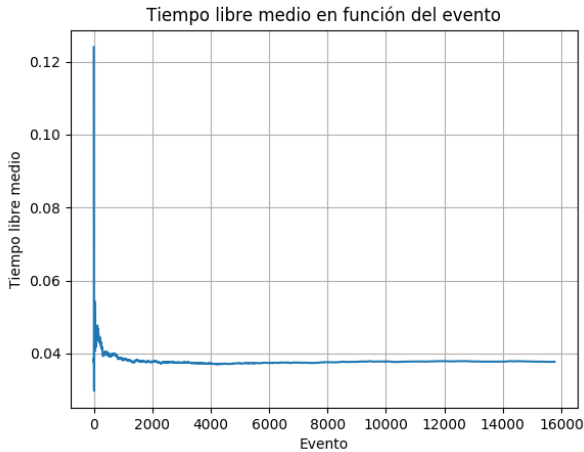


FIG. 8. Tiempo libre medio en función del evento

Por otra parte se evaluó el tiempo libre medio en intervalos regulares de tiempo, Fig. 8. Al igual que lo obtenido con la presión, posee una tendencia a estabilizarse conforme pasa el tiempo, como es lógico. Además, presenta un decaimiento exponencial en función de la densidad, Fig. 9, lo cual tiene sentido en términos físicos pues a mayor cantidad de partículas, menor es el tiempo promedio entre colisiones.

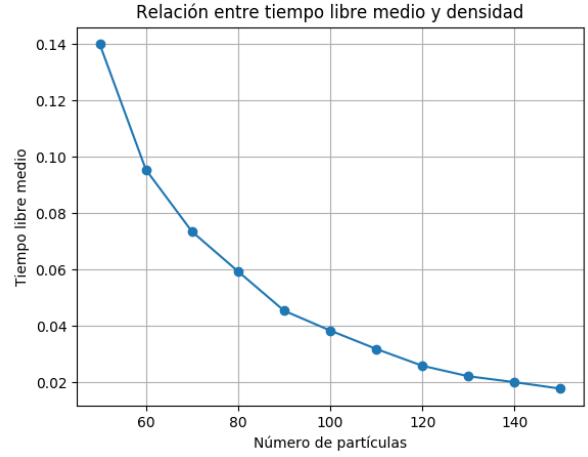


FIG. 9. Tiempo libre medio en función de la densidad

Dada la relación entre camino libre medio y la raíz cuadrada de la velocidad cuadrática media expresada en la Eq. 9, es conveniente conocer el comportamiento de la velocidad cuadrática media en el tiempo, Fig. 10.

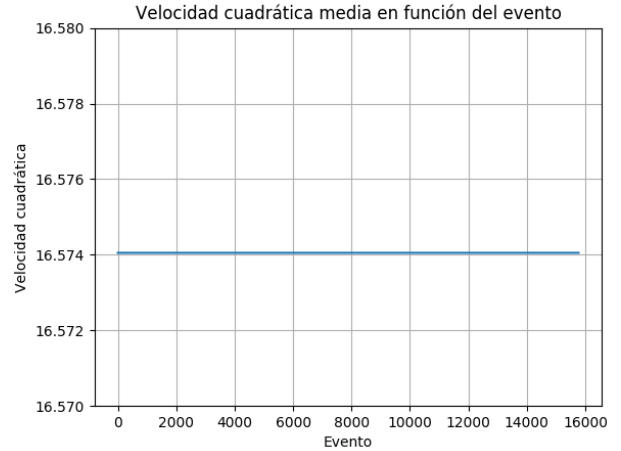


FIG. 10. Velocidad cuadrática media en función del evento

Se encontró que el motivo por el cual la velocidad cuadrática media es una constante en función del tiempo es debido a que todas las partículas tienen igual masa. Esto debido a que con igualdad de masas, la resolución de la colisión es simplemente un intercambio de velocidades entre los discos involucrados; luego la suma de las velocidades cuadráticas será igual. En cambio, con masas diferentes, las velocidades finales cambian completamente y ya no se conserva la velocidad cuadrática media.

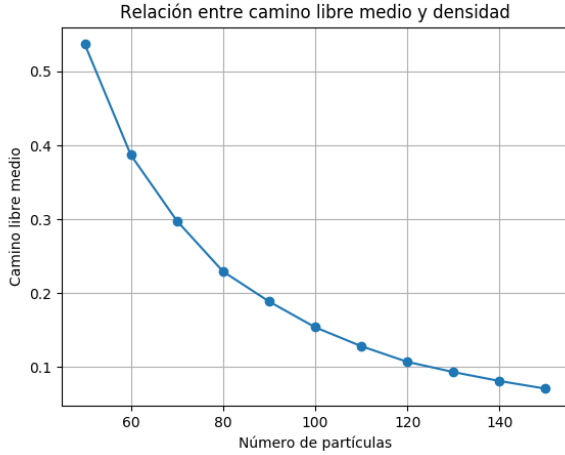


FIG. 11. Camino libre medio en función de la densidad

Dese cuenta que bajo las mismas condiciones que al evaluar presión y tiempo libre medio, el camino libre medio también decae exponencialmente en función de la densidad, Fig. 11. Tiene sentido pues el camino libre medio es la distancia media que un disco viaja entre dos colisiones consecutivas, y estas distancias son menores conforme se aumenta la cantidad de partículas dado que el número de eventos aumenta.

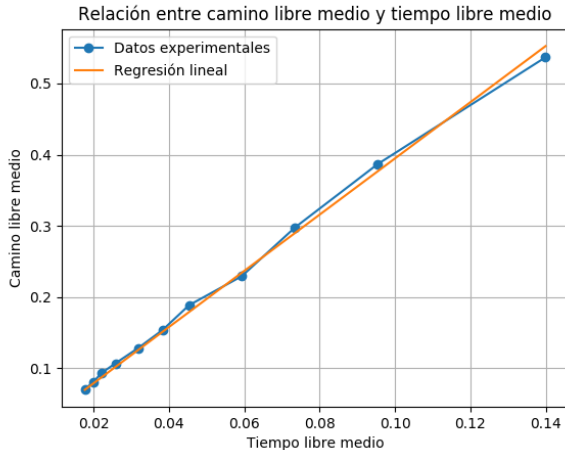


FIG. 12. Camino libre medio en función del tiempo libre medio

Además, se observó la relación entre el camino libre medio y el tiempo libre medio, como se observa en la Fig. 12, y se encontró una dependencia lineal entre los dos, siendo directamente proporcionales. Recuerde la Eq. 9, pues tiene sentido que la recta sea creciente dado que el factor de la pendiente es la raíz cuadrada de la velocidad cuadrática media, que es un factor positivo. En este caso también se llevó a cabo una regresión lineal, obteniendo la recta  $y = 3.9482376x$ , con  $R^2 = 0.999119766$ .

Desde el punto de vista computacional, el análisis asintótico es de suma importancia. Usando el código desarrollado para estudiar las propiedades de un sistema de discos impenetrables se analizó el tiempo de ejecución  $T(N)$  en términos del número de discos  $N$ . Para esto, se dividió 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. Cabe resaltar que se utilizó el modelo RAM.

TABLE II. Complejidad Computacional

Función	Caso promedio
Inicializar posiciones	$O(N^2)$
Inicializar velocidades	$O(N)$
Llenar lista posiciones partículas animación	$O(N)$
Calcula momento lineal del sistema	$O(N)$
Calcula temperatura del sistema	$O(N)$
Verifica validez del evento	$O(1)$
Mover partículas	$O(N)$
Calcula tiempo libre medio	$O(N)$
Calcular velocidad cuadrática media	$O(N)$
Calcular nuevas colisiones	$O(N)$

En síntesis, dado el número de discos, la simulación tiene un tiempo de ejecución  $T(N) = O(N^2)$ . Sin embargo, se encontró que el ciclo **while** depende también de otros factores como el tamaño del contenedor (a menor tamaño de contenedor, mayor cantidad de eventos ocurren y por ende el **while** es más largo), el radio de los discos (a mayor radio de discos, mayor cantidad de eventos y mayor ciclo **while**) y en general, del número de eventos, como se vio con los dos anteriores.

El uso de un montículo binario (*binary heap*) garantiza un tiempo logarítmico por operación. Si en lugar de la cola de prioridades se hubiera implementado una lista, aunque el método *append* y *pop* serían constantes, la inserción de los eventos de forma que estén organizados conforme se realiza la simulación sería  $O(N)$ . Implementando un diccionario, de manera similar, se tienen métodos *set* y *delete* constantes, pero, como el diccionario no permite ser organizado, cada vez que se requiera sacar el evento más cercano a ocurrir tocaría iterar sobre todos los elementos para encontrar el mínimo, siendo esto  $O(N)$ .

## V. CONCLUSIONES

1. La simulación dirigida por eventos es un método que resulta bastante preciso y eficiente en términos del tiempo de ejecución en el caso de la simulación de un gas de partículas con colisiones elásticas, a diferencia de un método donde se discretiza el tiempo. Esto debido a que habrá intervalos de

tiempo en donde no suceden eventos de interés y se gastaría memoria y tiempo en realizarlos.

2. En el caso del gas simulado son relevantes los resultados en cuanto a temperatura y presión, pues estos se conservan. Esto implica también conservación de la energía mecánica.
3. La presión es una función monótona creciente y continua de la densidad. En cambio, el tiempo

y camino libre medio presentan decaimiento exponencial en función de la densidad.

4. El uso de la cola de prioridades (*binary heap*) resulta ser más eficiente que el empleo de otro tipo de estructuras de datos como las listas y los diccionarios, reduciendo la complejidad computacional del algoritmo en general.

---

[1] H.D. Young, R.A. Freedman. *Sears & Zemansky's University Physics (13th ed.)*. Addison-Wesley, 2012.

[2] D. Kleppner and R. Kolenkow *An Introduction to Mechanics (2nd ed.)* Cambridge University Press, 2014.

[3] H. Gould, J. Tobochnik, W. Christian. *An Introduction to Computer Simulation Methods (3rd ed.)* Addison-Wesley, 2007.