



# Simulación de Sistemas

---

Simulaciones dirigidas por eventos.



# Dinámica Molecular Regida por Eventos

(“Event Driven Molecular Dynamics”)

Simular el movimiento de  $N$  partículas que colisionan es importante para entender y predecir las propiedades de los sistemas físicos como la dinámica microscópica de gases, la difusión, mecánica estadística, transiciones de fase, medios granulares, etc, etc.

Las mismas técnicas se pueden aplicar para visualizar este tipo de sistemas con aplicaciones en el cine o video-juegos.



# Dinámica Molecular Regida por Eventos

## Definición del Sistema

- N partículas confinadas en movimiento.
- Cada partícula tiene definida su posición, velocidad, radio y masa.
- Las partículas tienen interacciones elásticas entre ellas y con el contorno.
- Si no hay otras fuerzas que actúen sobre las partículas, estas viajan en linea recta y a velocidad constante entre colisiones.
- Si fuesen partículas macroscópicas sometidas a un campo gravitatorio, estas siguen sus trayectorias balísticas entre colisiones.



# Dinámica Molecular Regida por Eventos

## Definición del Sistema

Cuando es válido el enfoque de simulación “dirigida por eventos”?

- Densidad media-baja de partículas.
- Tiempo de vuelo (entre choques)  $\gg$  duración del choque.
- Choque instantáneo (de duración infinitesimal).



# Dinámica Molecular Regida por Eventos

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Sea  $t$  la suma acumulada de  $(t_c)$ . Si  $t \sim k dt^2$ , se guarda el estado.
- 5) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 6) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias rectas (sistema sin gravedad)

- 1) La partícula  $i$  tiene definida su posición  $(x_i, y_i)$ , su velocidad  $(v_{xi}, v_{yi})$ , su radio  $R_i$  y supondremos masa = 1 para todas las partículas.
- 2) El tiempo  $t_c$  es el mínimo de todos los tiempos de choque entre partículas vecinas y paredes.
- 3) El vuelo libre de las partículas está dado por :

$$x_i(t) = x_i(0) + v_x t$$

idem para la coordenada  $y$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) **Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.**
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

**1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.**

Se generan partículas de a una, con posiciones y velocidades random dentro de la caja y tal que cada partícula nueva ( $i$ ) no se superponga con ninguna de las existentes ( $j$ ) ni con las paredes.

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 > (R_i + R_j)^2$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).**
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias rectas (sistema sin gravedad)

Cálculo tiempo choque ( $t_c$ ) con paredes:

Sean  $x_{p1} < x_{p2}$  las coordenadas de las paredes verticales.

si  $vx_i > 0$ , entonces se cumple que :

$$(x_{p2} - R) = x(0) + vx t \quad \Rightarrow \quad t_c = (x_{p2} - R - x(0)) / vx$$

si  $vx_i < 0$ , entonces se cumple que :

$$(x_{p1} + R) = x(0) + vx t \quad \Rightarrow \quad t_c = (x_{p1} + R - x(0)) / vx$$

(idem para paredes horizontales y coordenada  $y$  )



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias rectas (sistema sin gravedad)

Cálculo tiempo choque ( $t_c$ ) con otras partículas  
(seleccionadas eficientemente las que pertenecen al vecindario):

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 = (R_i + R_j)^2$$

donde:

$$x_i(t) = x_i(0) + v_x t$$

$$y_i(t) = y_i(0) + v_y t$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias rectas (sistema sin gravedad)

Reemplazando y Simplificando, el tiempo de colisión resulta:

$$t_c = \begin{cases} \infty & \text{si } \Delta v \cdot \Delta r \geq 0, \\ \infty & \text{si } d < 0, \\ -\frac{\Delta v \cdot \Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v \cdot \Delta v} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde:  $d = (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v) (\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2)$ ,

siendo:  $\sigma = R_i + R_j$

$$\Delta r = (\Delta x, \Delta y) = (x_j - x_i, y_j - y_i)$$

$$\Delta v = (\Delta vx, \Delta vy) = (vx_j - vx_i, vy_j - vy_i)$$

$$\Delta r \cdot \Delta r = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2$$

$$\Delta v \cdot \Delta v = (\Delta vx)^2 + (\Delta vy)^2$$

$$\Delta v \cdot \Delta r = (\Delta vx)(\Delta x) + (\Delta vy)(\Delta y).$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$  .**
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo Trayectorias rectas (sistema sin gravedad)

**3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .**

$$x_i(t_c) = x_i(0) + v_x t_c$$

$$y_i(t_c) = y_i(0) + v_y t_c$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.**
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Implementación

Colisión con “Partícula-Paredes” verticales y horizontales

- Partícula con velocidad  $(vx, vy)$
- si choca con pared Vertical       $\rightarrow (-vx, vy)$
- si choca con pared Horizontal  $\rightarrow (vx, -vy)$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Implementación

Colisión de Partículas de distinta masa (choque elástico: sin fricción ni rotación).  
A partir de la conservación del Impulso ( $J_x, J_y$ ) antes y después del choque:

$$J_x = \frac{J \Delta x}{\sigma}, \quad J_y = \frac{J \Delta y}{\sigma}, \quad \text{donde} \quad J = \frac{2 m_i m_j (\Delta v \cdot \Delta r)}{\sigma (m_i + m_j)}$$

$m_i, m_j$  son las masas de las partículas, el resto de los símbolos según se definió en la diapositiva 12.

Luego las velocidades se transforman:

$$vx_i^d = vx_i^a + J_x/m_i \qquad vx_j^d = vx_j^a - J_x/m_j$$

$$vy_i^d = vy_i^a + J_y/m_i \qquad vy_j^d = vy_j^a - J_y/m_j$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Ejercicios T.P. (partículas de igual masa)

Implementar los mismos casos que en autómata celular 2D y comparar:

- Fluido alrededor de una barrera.

Con este enfoque, como se puede variar el número Re?

- Difusión de un gas.

Idem caso autómata celular.

Repetir con dos colores de partículas uno en cada recinto inicialmente.



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Ejercicio T.P. (partículas distinta masa, choques elásticos)

- Movimiento Browniano (Einstein): 1 partícula grande roja y N partículas azules mas pequeñas.
- Tiempo y Camino Libre Medio, Histogramas.
- Frecuencia de Colisiones (Nro de colisiones por unidad de tiempo).
- Distribución de Velocidades. Maxwell-Boltzman? qué es la temperatura?
- Presión. Fuerza por unidad de longitud (en 2D) ejercida por las partículas contra las paredes.
- Se cumple Ley de Gases Ideales (  $P V = N k_B T$  ) ?

P : presión  
V : volumen  
T : temperatura  
N : Nro. de Partículas  
 $k_B \sim 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Partículas en Presencia de Gravedad

Trayectorias Parabólicas



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).**
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias parabólicas (sistema con campo gravitatorio)

Cálculo tiempo choque ( $t_c$ ) con otras partículas  
(seleccionadas eficientemente las que pertenecen al vecindario):

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 = (R_i + R_j)^2 \quad (1)$$

donde:

$$x_i(t) = x_i(0) + v_x t \quad (2)$$

$$y_i(t) = y_i(0) + v_y(0)t + \frac{g}{2}t^2$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación: Trayectorias parabólicas (sistema con campo gravitatorio)

Cálculo tiempo choque ( $t_c$ ) con otras partículas  
(seleccionadas eficientemente las que pertenecen al vecindario):

En este caso, si reemplazamos las ecuaciones (2) en la (1)  
obtendremos un polinomio de grado 4 ( $\sim t^4$ ).

El cual se puede resolver con métodos analíticos o numéricos.



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$  .**
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Simulación Dirigida por Eventos: Trayectorias parabólicas  
(sistema con campo gravitatorio).

**3) Una vez hallado  $t_c$  se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento:**

$$x(t_c) = x_i(0) + v_x t_c$$

$$y_i(t_c) = y_i(0) + v_y(0)t_c + \frac{g}{2}t_c^2$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Simulación Dirigida por Eventos: Algoritmo

- 1) Se definen las posiciones y velocidades iniciales, los radios y tamaño de la caja.
- 2) Se calcula el tiempo hasta el primer choque (evento!) ( $t_c$ ).
- 3) Se evolucionan todas las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta  $t_c$ .
- 4) Con el “operador de colisión” se determinan las nuevas velocidades después del choque, solo para las partículas que chocaron.**
- 5) ir a 2).



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación (sistema con campo gravitatorio)

Las Colisiones entre Partículas y con Paredes se tratan del mismo modo que antes.

La presencia de la gravedad solo cambia el problema del vuelo y tiempos entre choques pero no cambia el choque en sí mismo.



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Implementación

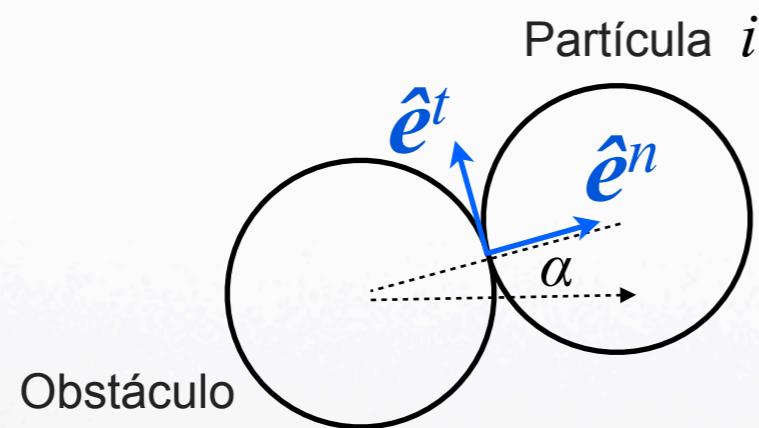
Caso Particular:  
Obstáculos fijos, partícula móvil única.



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Implementación

Caso obstáculos fijos, partícula móvil única.



$\hat{e}^t$  versor tangencial al choque

$\hat{e}^n$  versor normal al choque

$$\hat{e}^n = (e_x^n, e_y^n)$$

$$\hat{e}^t = (-e_y^n, e_x^n)$$

$\alpha$  es el ángulo entre el versor normal y el eje x.



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Implementación

Operador de Colisión (Partículas de igual masa)

$$\mathbf{v}^d = \mathbf{R}(-\alpha) \mathbf{S}(c_n, c_t) \mathbf{R}(\alpha) \mathbf{v}^a$$

donde:

$\mathbf{v}^a$  es la vel. de la partícula  $i$  en el instante anterior del choque ( $t_c^-$ ).

$\mathbf{v}^d$  es la vel. de la partícula  $i$  en el instante después del choque ( $t_c^+$ ).

**S** es la matriz de colisión.

$c_n$  y  $c_t$  son los coeficientes de restitución normal y tangencial, toman valores entre [0, 1) indicando la disminución de velocidad por disipación de la energía ( $c < 1$ ). El caso  $c = 1$  indica choque elástico.

**R** es la matriz de rotación:

$$\mathbf{R}(\alpha) = \begin{vmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{vmatrix}$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

## Implementación

Matriz de Colisión (Partículas de igual masa)

$$\mathbf{S}(c_n, c_t) = \begin{pmatrix} -c_n & 0 \\ 0 & c_t \end{pmatrix}$$

Finalmente el **Operador de Colisión** (para partículas de igual masa) resulta (S.E.U.O.) :

$$\mathbf{v}^f = \begin{pmatrix} -c_n \cos^2(\alpha) + c_t \sin^2(\alpha) & -(c_n + c_t) \sin(\alpha) \cos(\alpha) \\ -(c_n + c_t) \sin(\alpha) \cos(\alpha) & -c_n \sin^2(\alpha) + c_t \cos^2(\alpha) \end{pmatrix} \mathbf{v}^a$$



# Dinámica Molecular de Esferas Rígidas

Ejemplo de sistema con campo gravitatorio

Un sistema que se puede simular en el caso de partículas con gravedad. Es el **Billar de Galton**.

Arreglo Hexagonal de Obstáculos circulares a través del cual caen discos de similar diámetro. Lo que genera una distribución Gaussina a la salida del Billar.

...Como en los peajes ...

