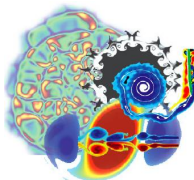


Simulaciones dinámica molecular de fluidos granulares

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)

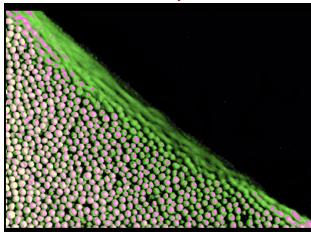
Interacciones:

- 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.

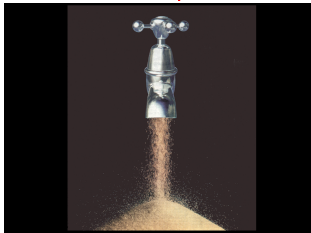


Se segregan por tamaño o forma.
Etc, etc,....

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.



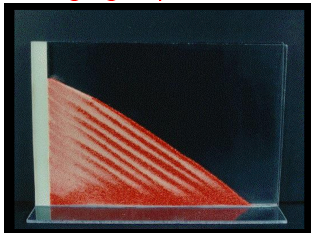
Se segregan por tamaño o forma.
Etc, etc,....

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.



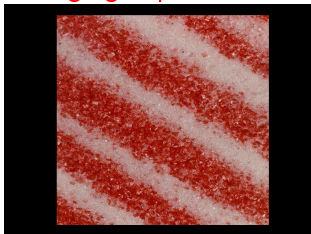
Etc, etc,....

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.

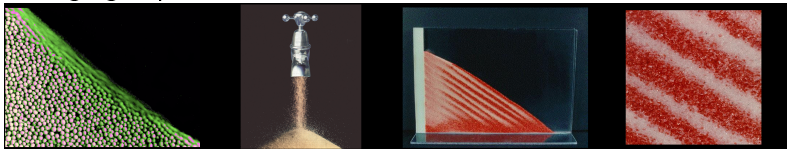


Etc, etc,....

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:

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

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

Versión simple, sin rotación.

- 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.

- 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.

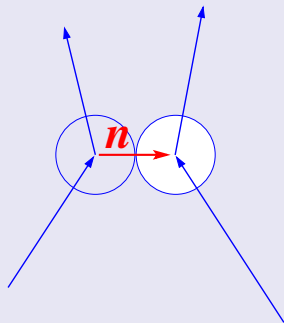
- Colisiones:

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

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

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

Coefficiente de restitución α ,
 $\alpha \leq 1$.



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: α_n ($0 \leq \alpha_n \leq 1$)
 - restitución tangente: α_t ($-1 \leq \alpha_t \leq 1$)
 - roce estático: μ_s ($0 \leq \mu_s$)
 - roce dinámico: μ_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: α_n ($0 \leq \alpha_n \leq 1$)
 - restitución tangente: α_t ($-1 \leq \alpha_t \leq 1$)
 - roce estático: μ_s ($0 \leq \mu_s$)
 - roce dinámico: μ_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

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

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

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 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: $t_{i,\text{pared}}$
- 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.

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.

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:

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

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

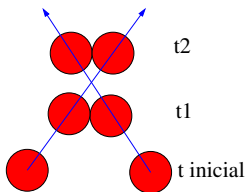
Ecuación cuadrática para t .

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

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

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

- Chocan:

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

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.

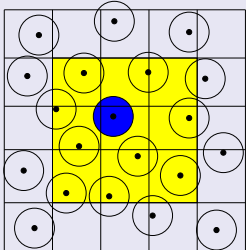
El algoritmo ingenuo tiene un costo de $\mathcal{O}(N^2)$ por cada evento.

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

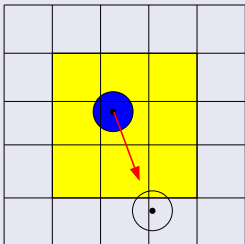
Duras $t_{i,\text{virtual}}$

- Siguiente Evento:**

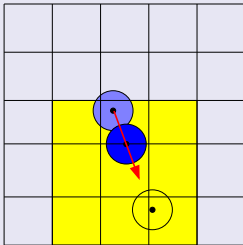
$$t_{SE} = \min\{t_{ik}; t_{i,\text{pared}}; t_{i,\text{virtual}}\}$$

- ¿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:
 - τ_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:
 - τ_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:
 - τ_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:
 - τ_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

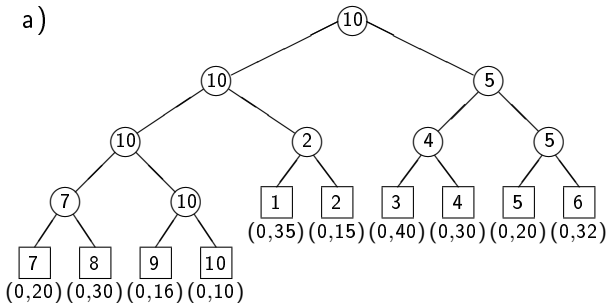
- Se deben guardar los eventos predichos
- Se debe buscar el mínimo

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).

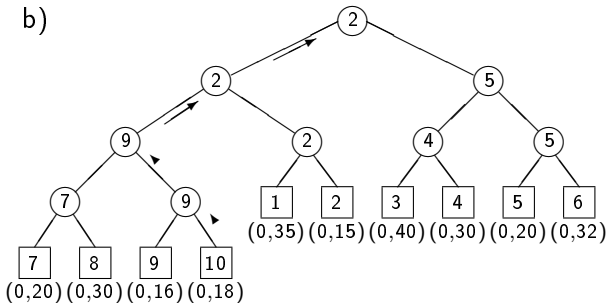
- El siguiente evento corresponde a la partícula 10 con $t = 0,10$.
- Luego de ejecutarlo, el siguiente evento para la partícula 10 tiene $t = 0,18$.



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 $t = 0,18$.

b)



¿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 Δt .
- 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 Δt .
- 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 .

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

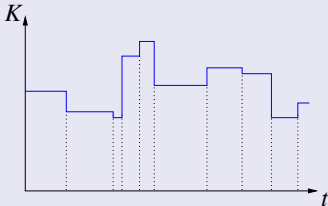
- K sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques, K es constante

Solución 2: Promedios “exactos”

- Consideremos el ejemplo de la energía cinética K .

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

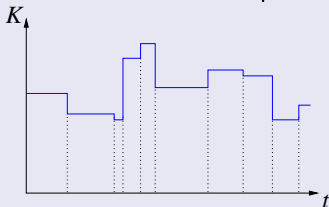
- K sólo cambia cuando una partícula choca con una pared CPD o cuando dos partículas chocan inelásticamente CPD
- Entre choques, K es constante



- 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 Δt_n es el tiempo en que la energía duró valiendo K_n .



- Se mantienen las variables K_{acum} y K_{actual} con los valores acumulados y actual de K y t_{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 Δt_n es el tiempo en que la energía duró valiendo K_n .

- Se mantienen las variables K_{acum} y K_{actual} con los valores acumulados y actual de K y t_{ultimo} con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
 - Se actualiza K_{acum} : $K_{\text{acum}} += K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
 - Se actualizan K_{actual} y t_{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 Δt_n es el tiempo en que la energía duró valiendo K_n .

- Se mantienen las variables K_{acum} y K_{actual} con los valores acumulados y actual de K y t_{ultimo} con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
 - Se actualiza K_{acum} : $K_{\text{acum}} + = K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
 - Se actualizan K_{actual} y t_{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 Δt_n es el tiempo en que la energía duró valiendo K_n .

- Se mantienen las variables K_{acum} y K_{actual} con los valores acumulados y actual de K y t_{ultimo} con el instante del último CPP o CPD
- En los eventos CPP y CPD
 - Se actualiza K_{acum} : $K_{\text{acum}+} = K_{\text{actual}}(t - t_{\text{ultimo}})$
 - Se actualizan K_{actual} y t_{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 Δt_n es el tiempo en que la energía duró valiendo K_n .

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

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

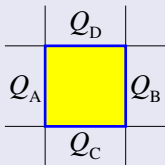
Ejemplo: flujo de calor

- 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

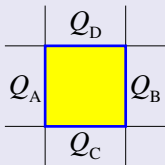
- Para construir el vector flujo se toman las paredes que rodean una celda, cada una define una componente.



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

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

