

# Guia d'usuari

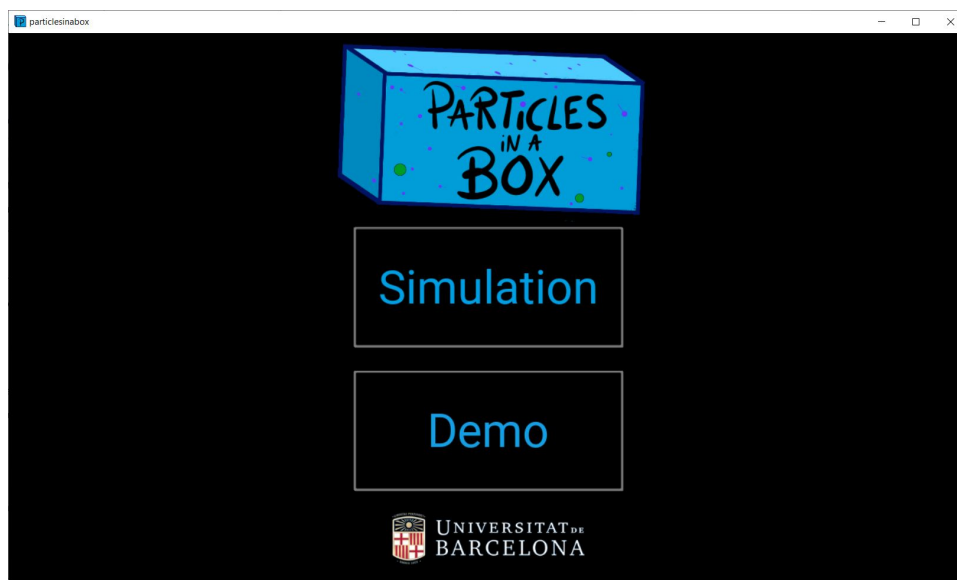


Figura A.1: Menú, pàgina per defecte en obrir el programa.

Aquesta guia d'usuari pretén explicar de manera clara els diferents elements del programa. Es divideix en dues parts, en una s'explica com fer servir la pàgina de *Demo* i en l'altra la de *Subsystems*.

## 1. Demo

Aquesta és la pàgina recomanada en fer servir el programa per primera vegada, o per usuaris que no es vulguin endinsar en personalitzar les simulacions. Aquesta pàgina permet visualitzar simulacions carregades a més de mostrar un petit resum que explica el que està passant.

Per poder fer servir correctament aquesta pàgina, s'ha de descarregar les simulacions que hem generat amb una breu descripció del que s'està mostrant, o bé l'usuari ha de guardar les simulacions que faci en la pàgina *Subsystems* (això s'explicarà en la secció de *Subsystems* amb més detall). Si el programa detecta que no hi ha cap simulació guardada, s'obrirà un *Pop-up* i avisarà que no es pot accedir a aquesta pàgina.

Com es pot veure a la figura A.2, la utilització d'aquesta pàgina és força intuïtiva: la pàgina es divideix en dues parts: la interacció de les partícules

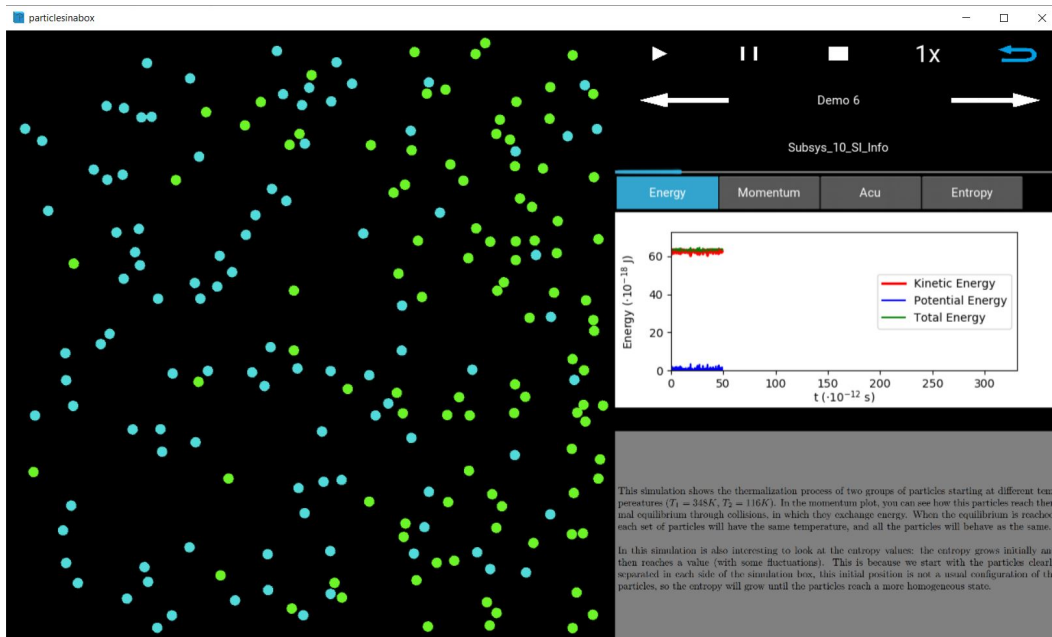


Figura A.2: Imatge de la pàgina *Demo* durant la reproducció d'una simulació on interactuen dues espècies de partícules amb temperatures inicials diferents.

a l'esquerra i el control i visualització de l'evolució de quantitats a la dreta.

A l'esquerra es mostra una simulació quadrada on interactuen partícules en moviment, les partícules xoquen les unes amb les altres i, depenent de les condicions de contorn seleccionades, poden xocar o bé travessar els límits de la simulació. Aquesta part esquerra és només per visualitzar i no s'hi pot interactuar amb el ratolí.

A la dreta es troba la part controlable per l'usuari. Els cinc botons de la part superior:

- *Play*, reproduueix la simulació en què ens trobem.
- *Pause* atura la simulació, permetent tornar a continuar la reproducció de la simulació clicant de nou *Play*.
- *Stop*, atura tota la simulació i la reinicialitza.
- Velocitat de reproducció, clicant et permet reproduir la simulació al ritme normal ( $\times 1$ ),  $\times 2$  (dues vegades més ràpid),  $\times 5$  (cinc vegades més ràpid) o  $\times 10$  (deu vegades més ràpid).

- El botó que et retorna al menú principal.

A sota d'aquests cinc botons es troben les dues fletxes que et permeten navegar a través de les simulacions carregades, mostrant el nom de la simulació entre les dues fletxes.

A baix d'aquestes, es troba la barra temporal que ens indica amb color blau en quin punt temporal ens trobem en la reproducció.

Després, es troba els 4 botons que permeten visualitzar l'evolució de diferents quantitats:

- *Energy*, aquesta gràfica mostra l'evolució de l'energia total del sistema, l'energia cinètica total i l'energia potencial total. Es pot observar petites discrepàncies en la conservació de l'energia, aquestes disminueixen disminuint el pas de temps computació.
- *Momentum*, aquí es mostra la distribució de moments de les partícules (com es pot veure en la Figura A.3). També es mostra la temperatura corresponent al moment de les partícules i la corba de distribucions (distribució de Maxwell-Boltzmann) esperades per a la temperatura que es troben, la distribució de moments correspondrà a aquesta corba en l'equilibri.
- *Acu*, en aquesta gràfica, a partir d'un cert temps, es mostra el moment de les partícules acumulat al llarg del temps, es pot veure com també segueixen una distribució de moments de Maxwell-Boltzmann.
- Si la simulació és del tipus *Random Lattice* o *Subsystems* es mostrarà *Entropy*, on es pot veure l'evolució del càlcul de l'entropia. Qualitativament, podem entendre que l'entropia creixerà fins que s'arribi a l'equilibri, on després s'estabilitzarà.
- Si en canvi la simulació és del tipus *Brownian*, es mostrarà el desplaçament quadràtic mitjà,  $\langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle$ , de la partícula gran *Browniana*. Aquí es pot veure com aquest desplaçament quadràtic mitjà hauria de ser proporcional a al temps ( $\langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle = 2Dt$ ).

## 2. Simulation

Aquesta és la pàgina on es poden dur a terme les simulacions personalitzades i amb els paràmetres que un vulgui. L'usuari pot preparar les simulacions

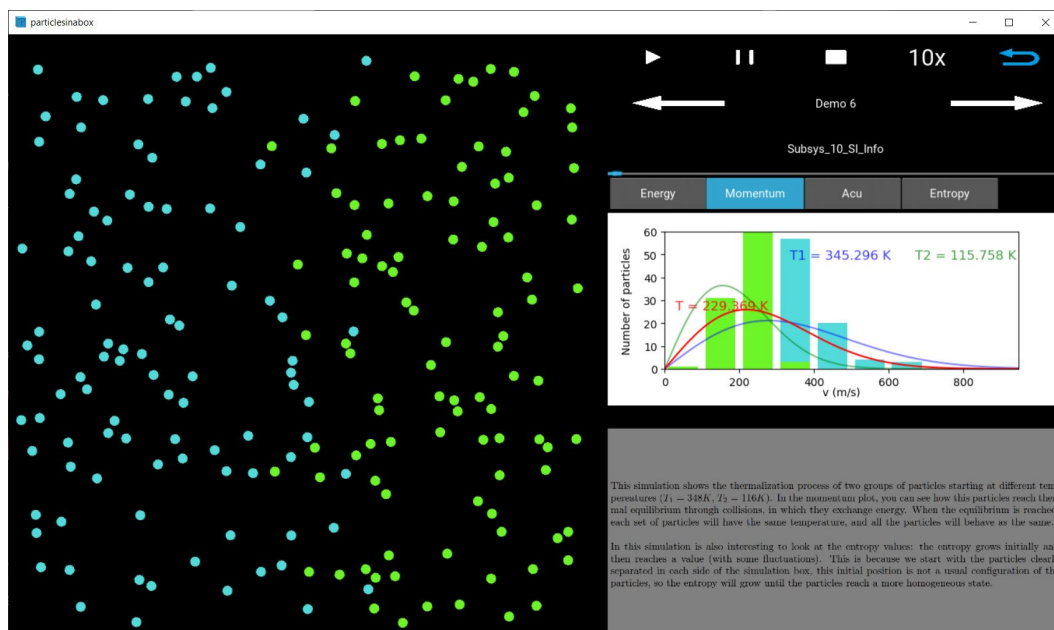


Figura A.3: Imatge durant la reproducció d'una simulació a la pàgina *Demo*, es pot veure a la dreta com a *Momentum* es mostra la distribució de moments i la temperatura de les partícules.

modificant paràmetres i navegant pels diferents menús. Després, les simulacions s'han de computar, i un cop acabat el càlcul, es poden observar de la manera que s'observaven a la pàgina de *Demo*. El fet que s'hagi d'esperar un temps de càlcul de les simulacions i el grau de complexitat que presenta aquesta pàgina, fa que sigui menys atractiva per l'usuari que simplement vol veure algunes simulacions sense haver d'esperar el temps de càlcul, però és molt interessant per poder observar casos particulars.

Com es pot veure en la Figura A.4, les gràfiques on es mostren els valors calculats són les mateixes que en el cas de la pàgina *Demo*. Hi ha un total de sis botons que permeten controlar el tipus de simulació, tres controlen les condicions de contorn i tres la distribució de partícules, anem a veure'ls:

## Condicions de contorn

El botó *In a box* és el més intuïtiu, les partícules interaccionen elàsticament amb els límits de la simulació. Amb el botó *Free!* les partícules no interaccionen amb els límits, sinó que tenen condicions periòdiques de contorn amb ells, fent que al travessar un límit, la partícula surti pel límit oposat.

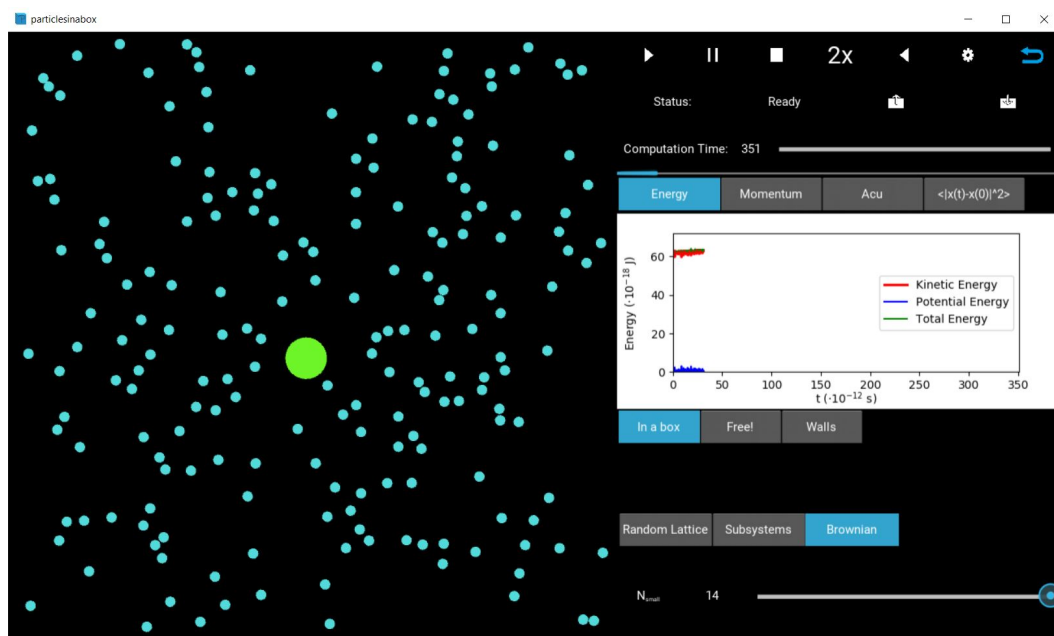


Figura A.4: Imatge de la pàgina *Simulation* durant la reproducció d'una simulació on interactuen diverses partícules amb una de més gran.

Finalment, el botó *Walls*, inclou una barrera elàstica amb un forat, amb la posició i el tamany del forat variables per l'usuari a través de dos *sliders*.

## Distribució de les partícules

Amb el botó *Random Lattice*, es genera una graella de  $N \times N$  partícules, sent  $N$  variable per l'usuari a través d'un *slider* que apareix a la part inferior. Amb el botó *Subsystems* es generen dues graelles de  $N_1 \times N_1$  i  $N_2 \times N_2$  partícules a temperatures diferents, sent  $N_1$  i  $N_2$  variable per l'usuari a través de dos *sliders*. Per últim, a *Brownian* (com el que es mostra en la Figura A.4), apareix una partícula més gran (i, per tant, amb més massa) que permet observar el moviment brownià que experimenta aquesta partícula a través de col·lisions amb la resta.

A part d'això, clicant el botó d'engranatge de la part superior a la dreta que es pot veure a la Figura A.4, s'obre un menú anomenat *Advanced Settings*. Aquest menú, que es pot veure en la Figura A.5, permet a l'usuari retocar molts paràmetres que afecten la simulació:

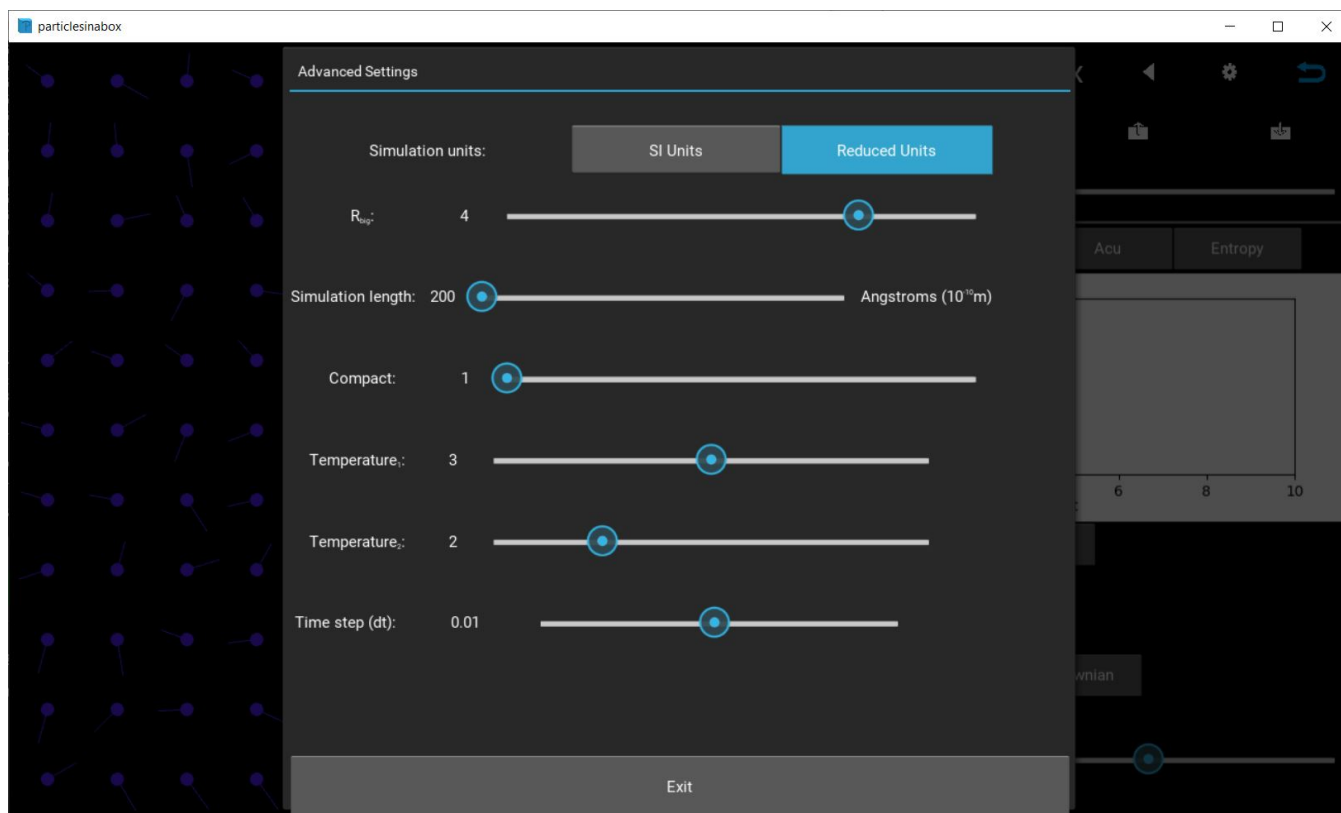


Figura A.5: Imatge del menú *Advanced Settings*, on es pot veure tots els paràmetres variables per l'usuari.

- *SI Units/Reduced Units*. Amb aquests dos botons es pot escollir si el resultat que es mostra en les gràfiques és mostrat en unitats del Sistema Internacional o bé unitats reduïdes. Resulta interessant mostrar les magnituds en unitats del Sistema Internacional per poder obtenir una idea de les quantitats que s'estan tractant. Les unitats reduïdes són útils per entendre el funcionament qualitatiu del sistema sense molestar-se amb les unitats.
- $R_{Big}$ . Aquest *slider* permet modificar la mida de la partícula gran que apareix en el mode *Brownian*. El nombre indica quantes vegades és més gran el radi de la partícula gran en relació amb el radi de les partícules normals.
- *Simulation length*. Amb aquest *slider* es pot ajustar la longitud d'un costat del recipient que conté les partícules (en Àngstroms), això fa que a l'augmentar aquesta longitud, les partícules es vegin més petites, i

per tant, n'hi càpiguen més dintre de la simulació.

- *Compact*. Modificar aquest paràmetre fa que les partícules en el mode *Random Lattice* es compactin, que la seva posició inicial sigui més propera entre elles.
- *Temperature 1*. Modifica la temperatura inicial de les partícules que es mostren en *Random Lattice*, les partícules petites de *Brownian* i l'espècie de partícules 1 en el mode *Subsystems*.
- *Temperature 2*. Modifica la temperatura inicial de les partícules de la segona espècie del mode *Subsystems*.
- *Time step (dt)*. Modifica el pas de temps amb què es calculen les simulacions. Valors més petits garanteixen una millor conservació de l'energia, però a canvi d'augmentar substancialment el temps de computació. El valor que es dona per defecte és un bon balanç entre un temps no molt elevat de càlcul i una prou bona conservació de l'energia.

Una altra característica important del programa és el botó de *Load* (en la Figura A.4, l'últim botó de la segona fila de botons de la part superior), que et permet carregar les simulacions ja computades que s'han guardat en l'ordinador (com les que es mostren en la pàgina de *Demo*) i poder veure els paràmetres amb què s'ha calculat. El botó que té al costat esquerre (com es pot veure en la Figura A.4) és el botó de *Save*, que et permet guardar la simulació que s'ha computat per poder-la reproduir posteriorment sense esperar el temps de càlcul de l'ordinador. També és interessant que aquestes simulacions que es guardin, es podran veure directament en la pàgina de *Demo*.

Per últim, un cop s'està reproduint una simulació, es pot clicar el botó *Reverse* (el botó que es pot veure a la dreta del multiplicador del temps de reproducció, en la figura A.4), aquest botó atura la reproducció de la simulació i gira les velocitats ( $180^\circ$ ) de les partícules al moment en què s'ha clicat, fent que si després es clicca el botó de càlcul, et calcula l'evolució del sistema des d'aquell estat. La idea principal és que les partícules haurien de tornar al seu estat inicial, ordenades com a l'inici. Això sol ser així quan no hi ha massa partícules (massa interaccions) i el temps de la simulació no és molt elevat, si no és així, és probable que a causa del càlcul finitament precís de l'ordinador sorgeixin evolucions que no retornen a l'inici com era esperat.