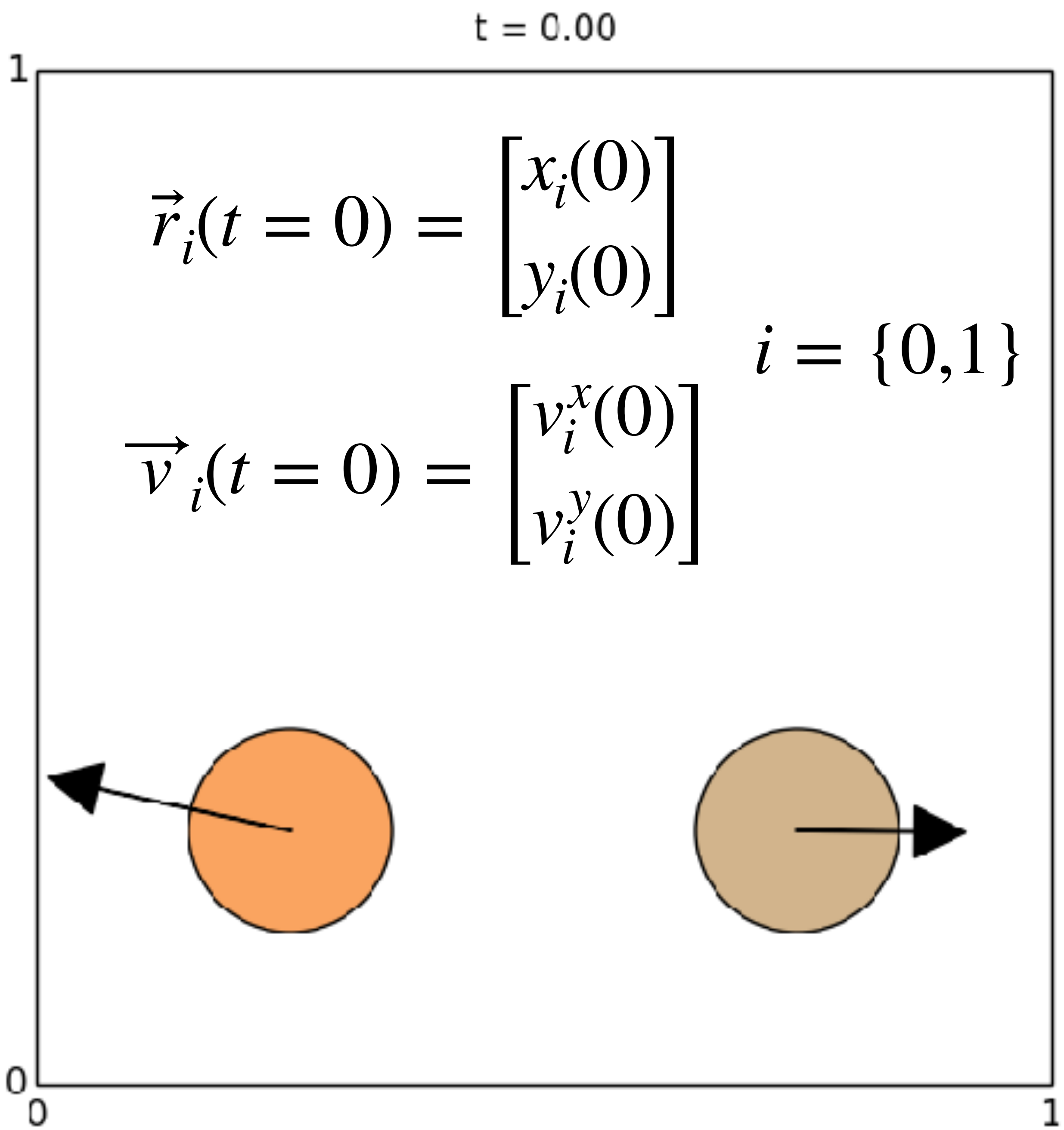
Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs



$$\vec{r}_i(t=0) = \begin{bmatrix} x_i(0) \\ y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$i = \{0,1\}$$

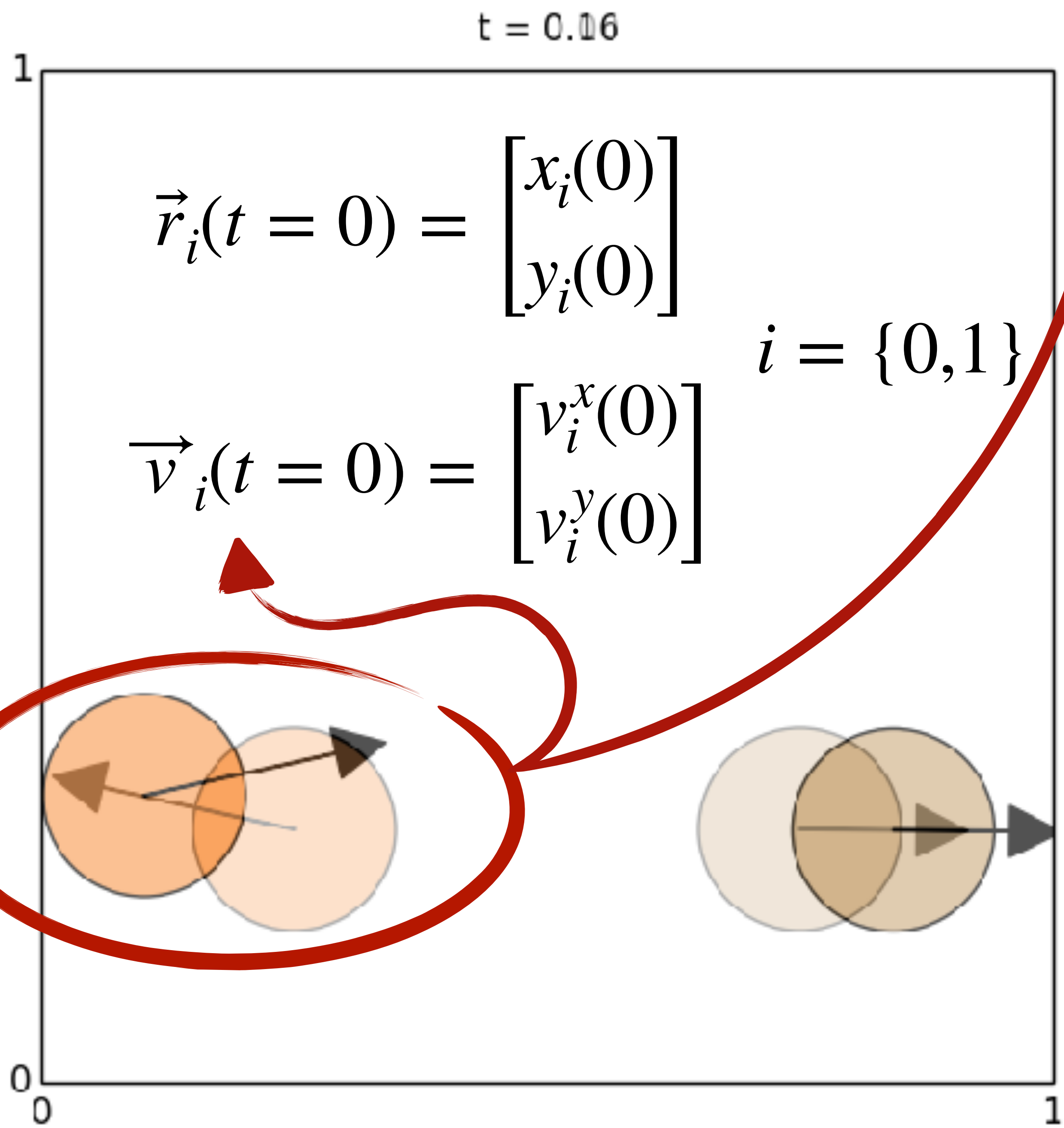
$$\overrightarrow{v}_i(t=0) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \\ v_i^y(0) \end{bmatrix}$$

$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0) \cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs



$$\vec{r}_i(t=0) = \begin{bmatrix} x_i(0) \\ y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\overrightarrow{v}_i(t=0) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \\ v_i^y(0) \end{bmatrix}$$

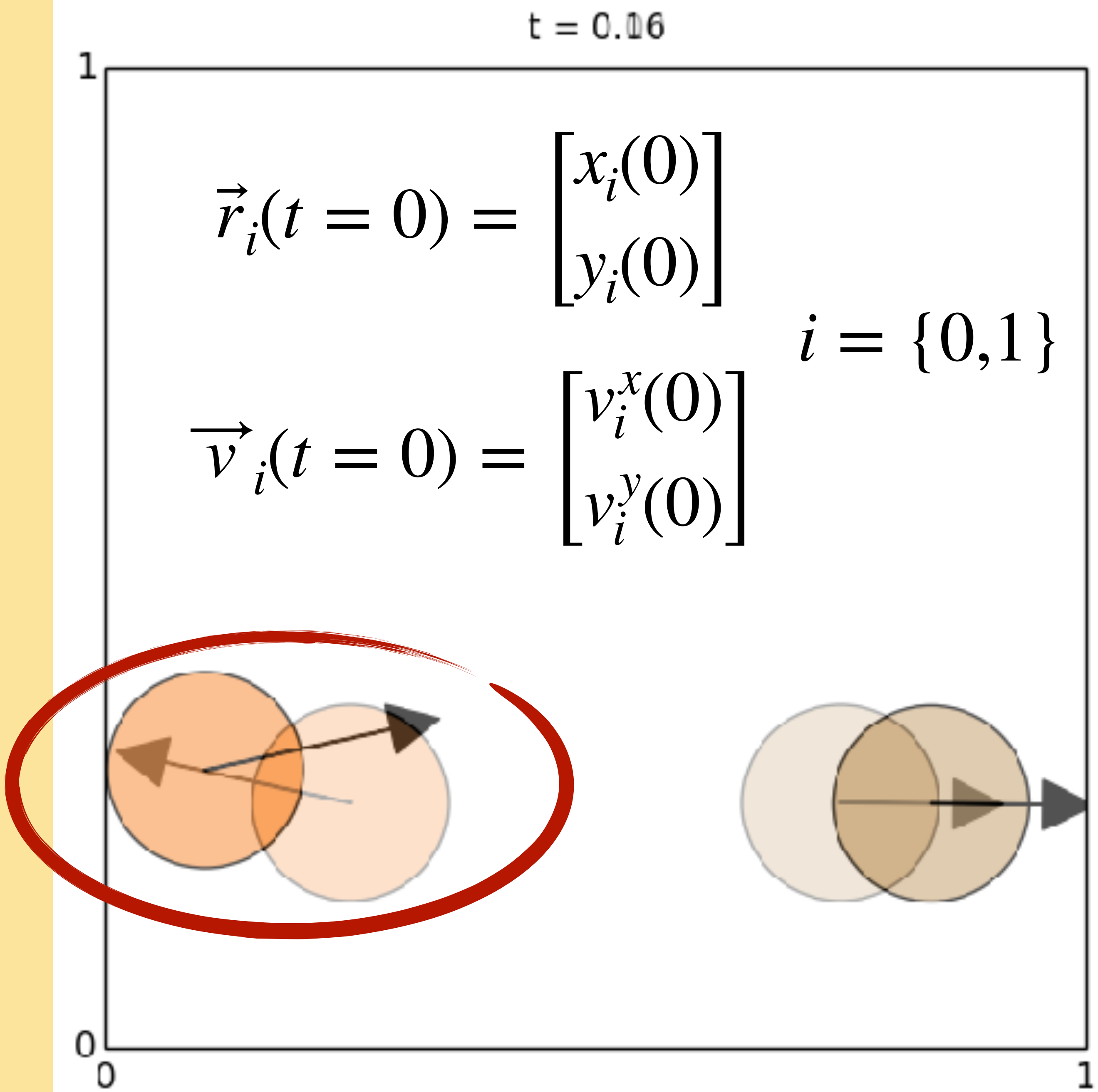
$$i = \{0,1\}$$

$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0) \cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs



$$\vec{r}_i(t=0) = \begin{bmatrix} x_i(0) \\ y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$i = \{0,1\}$$

$$\overrightarrow{v}_i(t=0) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \\ v_i^y(0) \end{bmatrix}$$

$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0) \cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

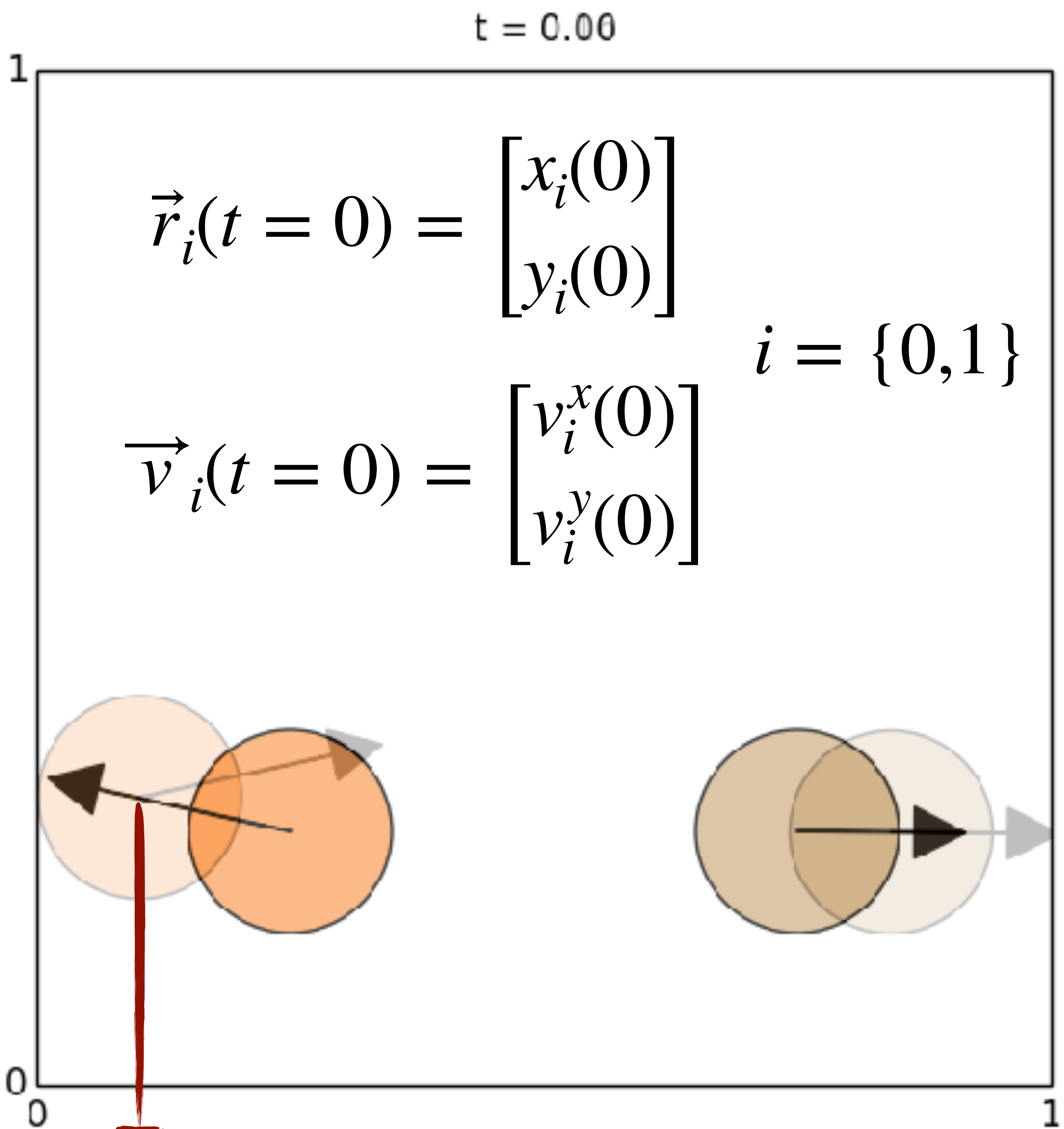
$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → T_{coll}
2) Déplacez toutes les particules jusqu'à $t = T_{collision}$. → $\overrightarrow{x}_i(T_c)$
3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision. → $\overrightarrow{v}_i(t > T_c)$
4) Revenez au point 1).

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs



$$\vec{r}_i(t=0) = \begin{bmatrix} x_i(0) \\ y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$i = \{0,1\}$$

$$\overrightarrow{v}_i(t=0) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \\ v_i^y(0) \end{bmatrix}$$

$$x = rayon$$

$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0)\cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0)\cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. $\rightarrow T_{coll}$

Mur de gauche:

$$x_i(T_i^{Gauch}) = r$$

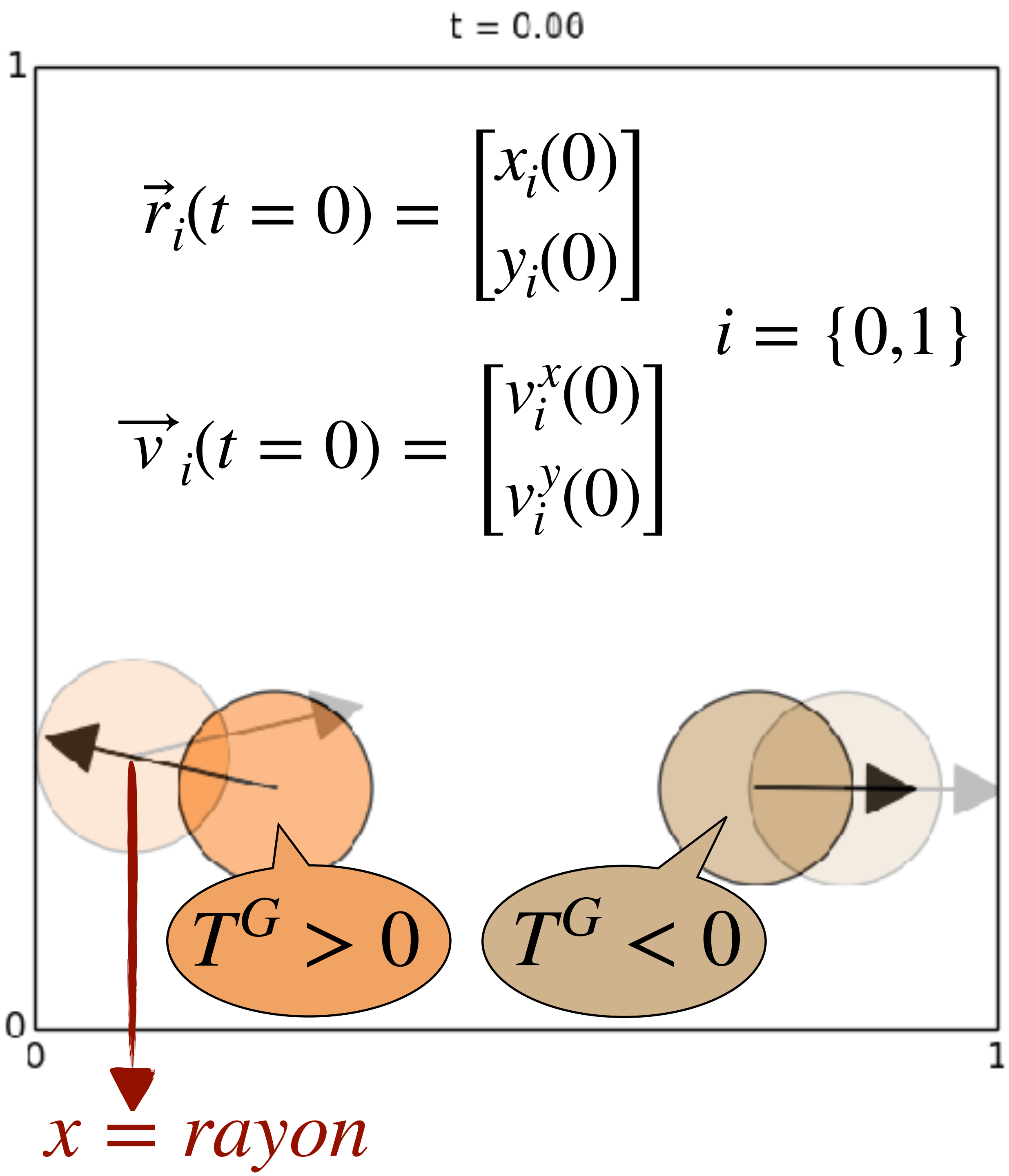
Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

$$\vec{r}_i(t=0) = \begin{bmatrix} x_i(0) \\ y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\vec{v}_i(t=0) = \begin{bmatrix} v_i^x(0) \\ v_i^y(0) \end{bmatrix}$$

$$i = \{0,1\}$$



$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0)\cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0)\cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. $\rightarrow T_{coll}$

Mur de gauche:

$$x_i(T_i^{Gauch}) = r$$

$$T_i^G = \frac{r - x_i(0)}{v_i^x(0)}$$

$$T_i^D = ?\,,\, T_i^P = ?\,,\, T_i^S = ?$$

Dynamique moléculaire

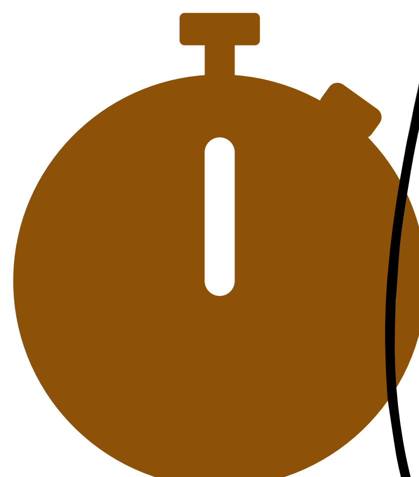
➡ Disques durs, collisions avec les murs

4 murs

```
EventArray = {E_0, …, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}
```

➡ Trouvez le **`E_j`** avec $T_{collision}$ la plus proche dans le **futur**.✳



➡ Gardez le indice **`j`**.

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → T_{coll}

Mur de gauche:

$$x_i(T_i^{Gauch}) = r$$

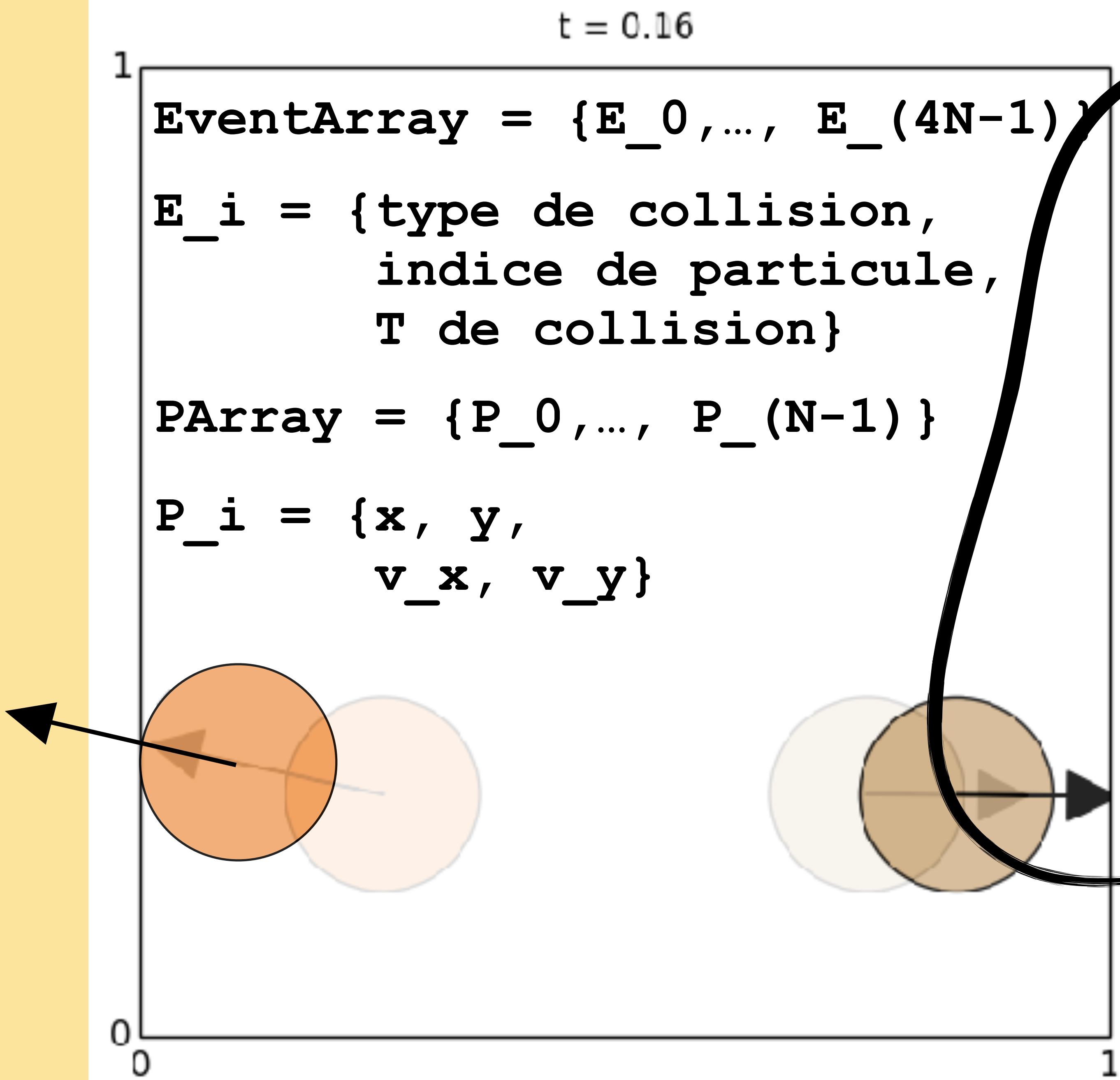
$$T_i^G = \frac{r - x_i(0)}{v_i^x(0)}$$

$$T_i^D = ?\,, T_i^P = ?\,, T_i^S = ?$$

✳ Futur: t > 0

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs




```
EventArray = {E_0,…, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}

PArray = {P_0,…, P_(N-1)}

P_i = {x, y,
       v_x, v_y}
```

$$\vec{r}_i(t) = \begin{bmatrix} v_i^x(0)\cdot t + x_i(0) \\ v_i^y(0)\cdot t + y_i(0) \end{bmatrix}$$

$$\forall \quad t \leq T_{collision}$$

<u>PRINCIPE DE BASE</u>

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → `j`
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au

   $t =$ `EventArray[j].time.`

   → `PArray[i].x, PArray[i].y`

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

t = 0.16

```
EventArray = {E_0,…, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}

PArray = {P_0,…, P_(N-1)}

P_i = {x, y,
       v_x, v_y}
```

```
EventArray[j].indice → k

EventArray[j].type == left || right
PArray[k].v_x = -1×PArray[k].v_x

EventArray[j].type == top || bottom
PArray[k].v_y = -1×PArray[k].v_y
```

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → j
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au
   $t =$ `EventArray[j].time`.
   → `PArray[i].x`, `PArray[i].y`
3) Mettez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision. → `PArray[k].v_x`

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

t = 0.16

```
EventArray = {E_0,…, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}

PArray = {P_0,…, P_(N-1)}

P_i = {x, y,
       v_x, v_y}
```

```
EventArray[j].indice → k

EventArray[j].type == left || right
PArray[k].v_x = -1×PArray[k].v_x

EventArray[j].type == top || bottom
PArray[k].v_y = -1×PArray[k].v_y
```

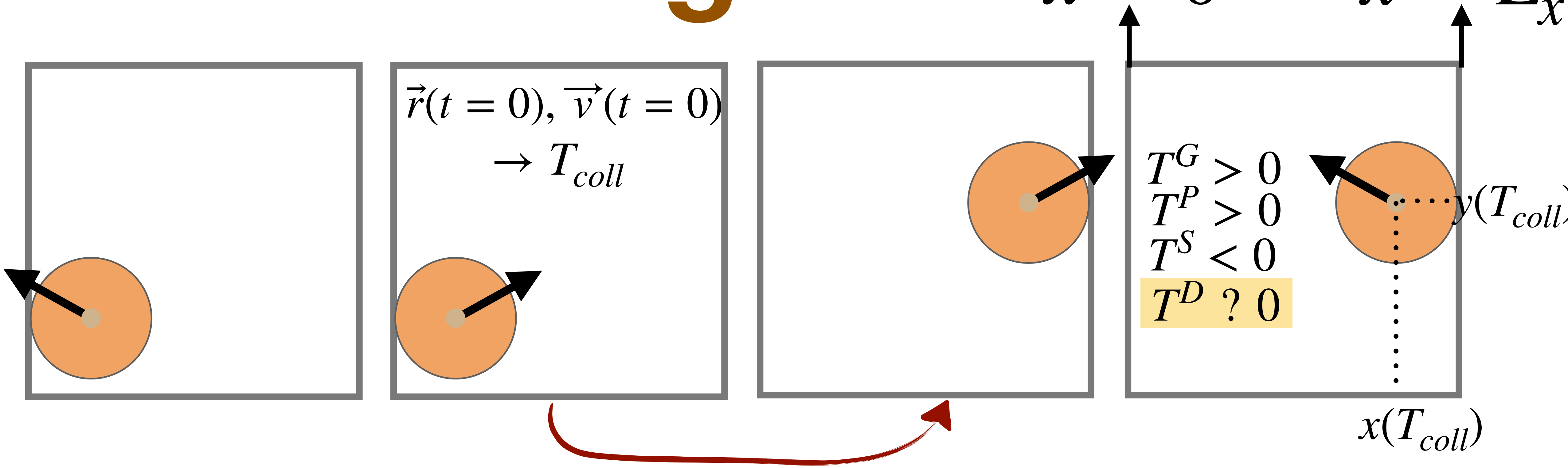
PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → `j`
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au $t =$ `EventArray[j].time`. → `PArray[i].x`, `PArray[i].y`
3) Mettez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision. → `PArray[k].v_x`

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



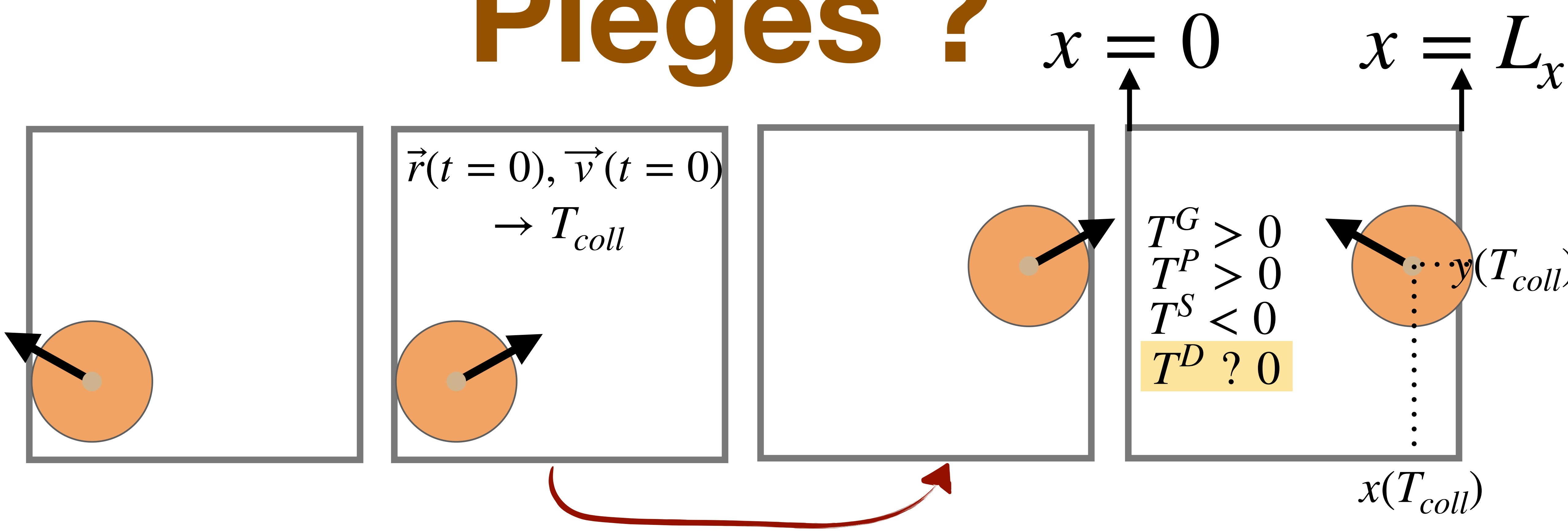
$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0) \cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r \pm \epsilon \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



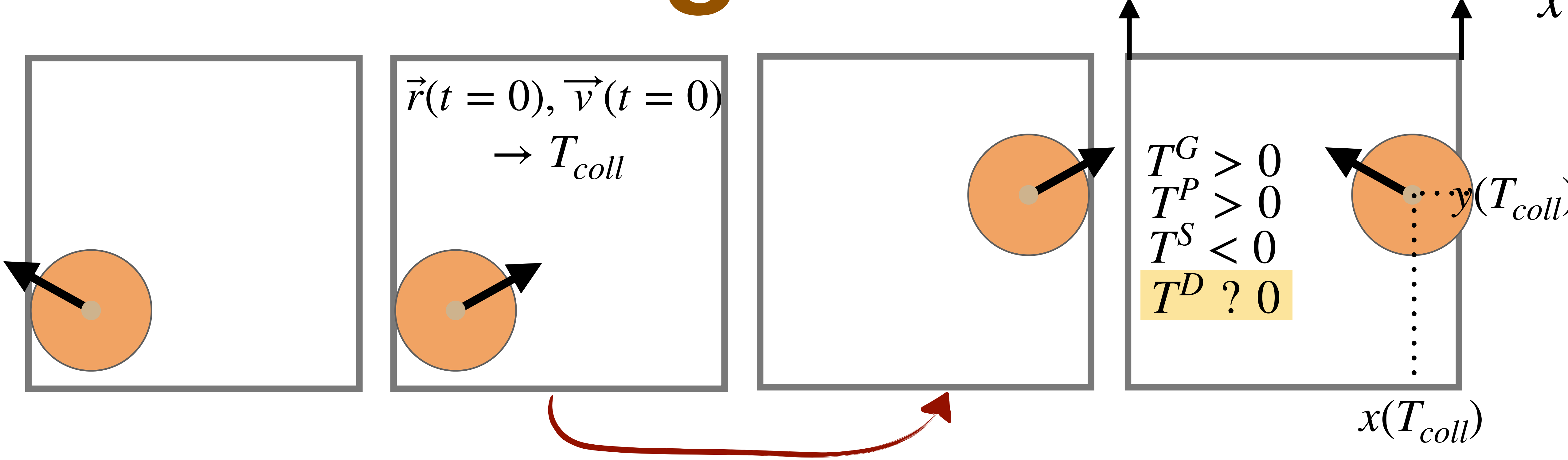
$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0)\cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r + \epsilon \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0) \cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r + \epsilon \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

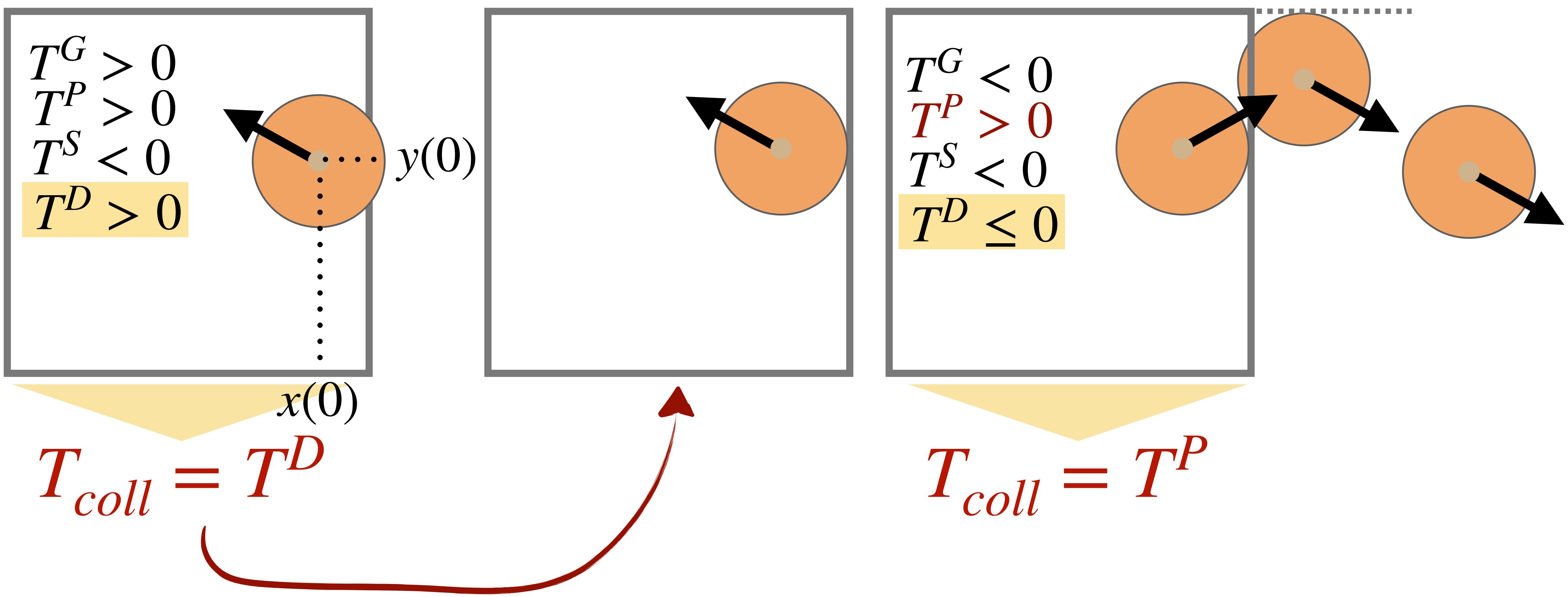
Conddition $T^D \rightarrow \ x(t) = L_x - r$ ➡ $0 < T^D \ll 1$

$T^D \ll T^G, T^P$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



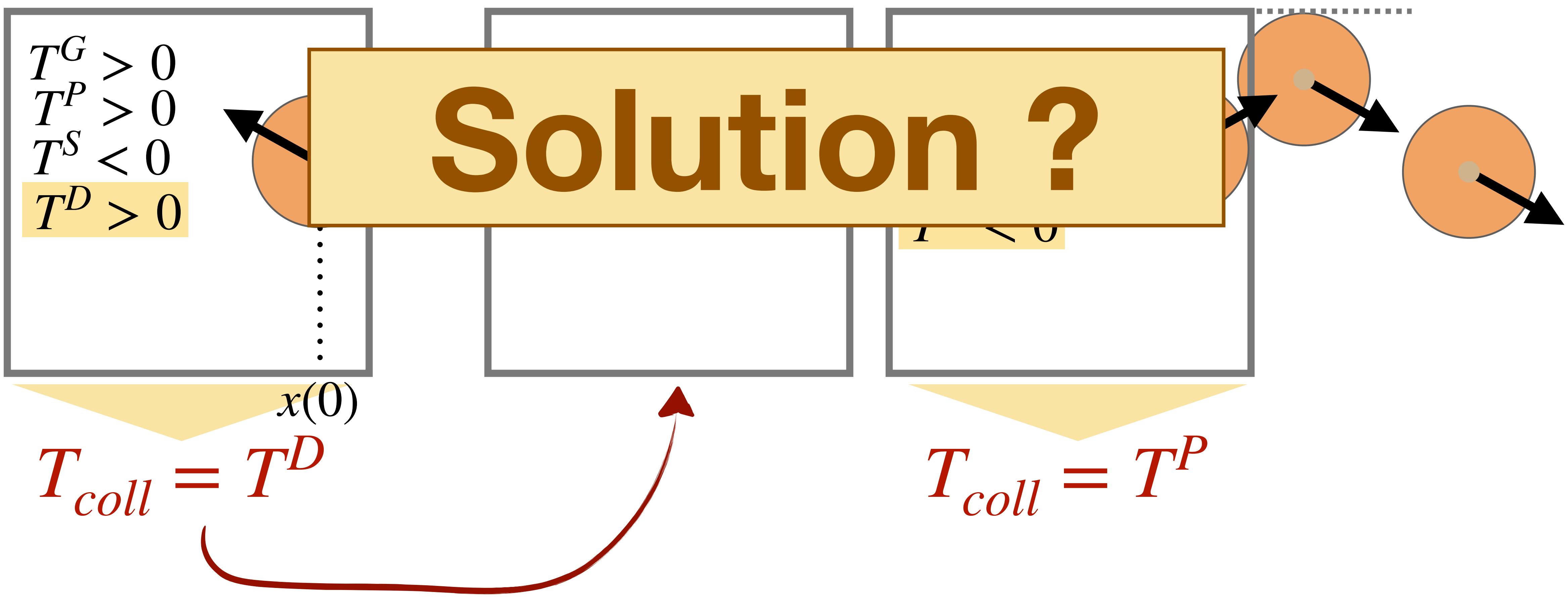
$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0) \cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r + \epsilon \\ v_y(0) \cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0)\cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r + \epsilon \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → T_{coll}

Mur de gauche:

$$x_i(T_i^{Gauch}) = r$$

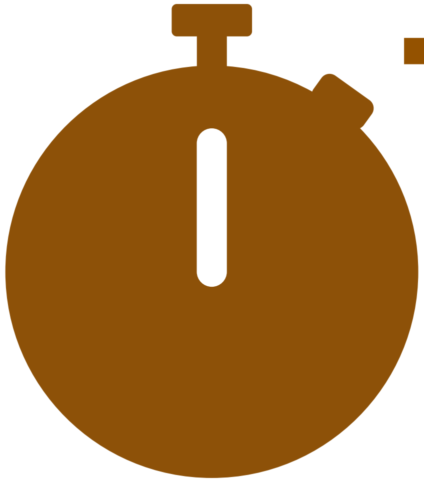
$$T_i^G = \frac{r - x_i(0)}{v_i^x(0)}$$

$$T_i^D = ?\,,\, T_i^P = ?\,,\, T_i^S = ?$$

4 murs

```
EventArray = {E_0, …, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}
```



➡ Trouvez le `E_j` avec $T_{collision}$ la plus proche dans le **future**.✶

➡ Gardez le indice `j`.

✶ Futur: t > 0

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

PRINCIPE DE BASE

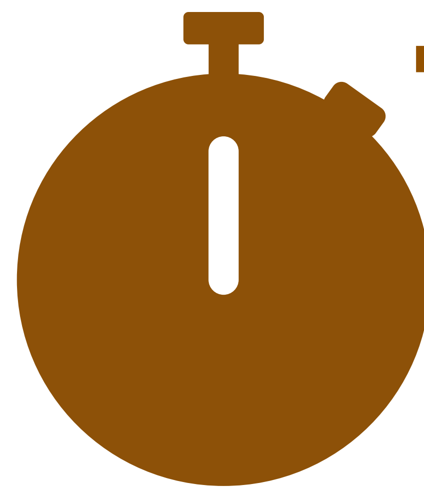
1) Trouvez le temps de la collision la plus proche dans le futur. → T_{coll}

v_i^x		v_i^y	
< 0	> 0	$\cdots$	$\cdots$
$T^D < 0$ $T^D = -1$	$T^D > 0$	$\cdots$	$\cdots$
$T^G > 0$	$T^G < 0$ $T^G = -1$	$\cdots$	$\cdots$

4 murs

```
EventArray = {E_0, …, E_(4N-1)}

E_i = {type de collision,
       indice de particule,
       T de collision}
```



➡ Trouvez le `E_j` avec $T_{collision}$ la plus proche dans le **future**.✶

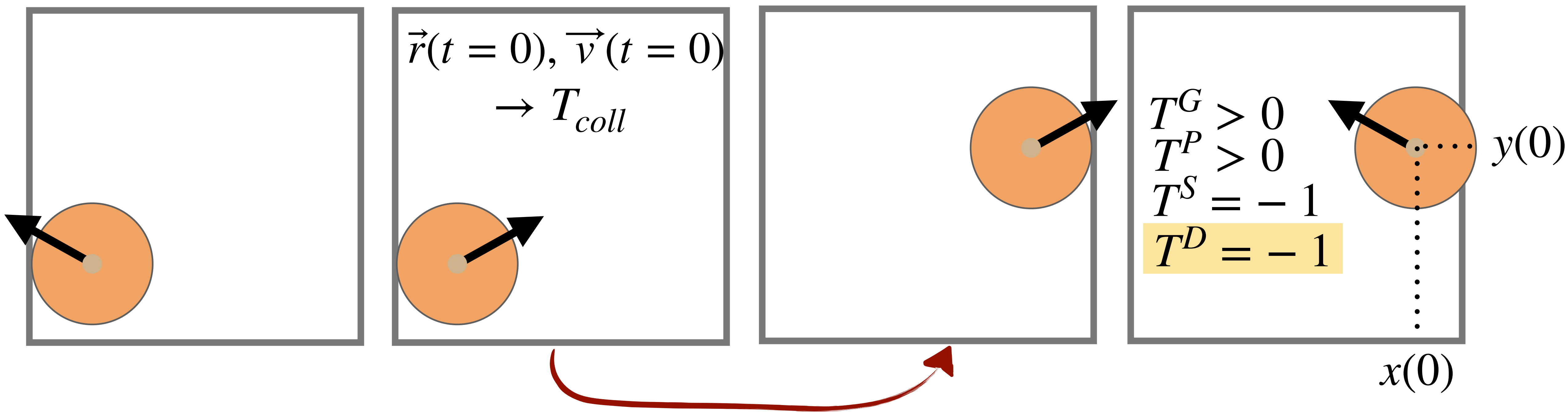
➡ Gardez le indice `j`.

✶ Futur: t > 0

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions avec les murs

Pièges ?



$$\vec{r}(T_{coll}) = \begin{bmatrix} v_x(0)\cdot T_{coll} + x(0) \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x - r + \epsilon \\ v_y(0)\cdot T_{coll} + y(0) \end{bmatrix}$$

$0 \leq \epsilon \ll 1$

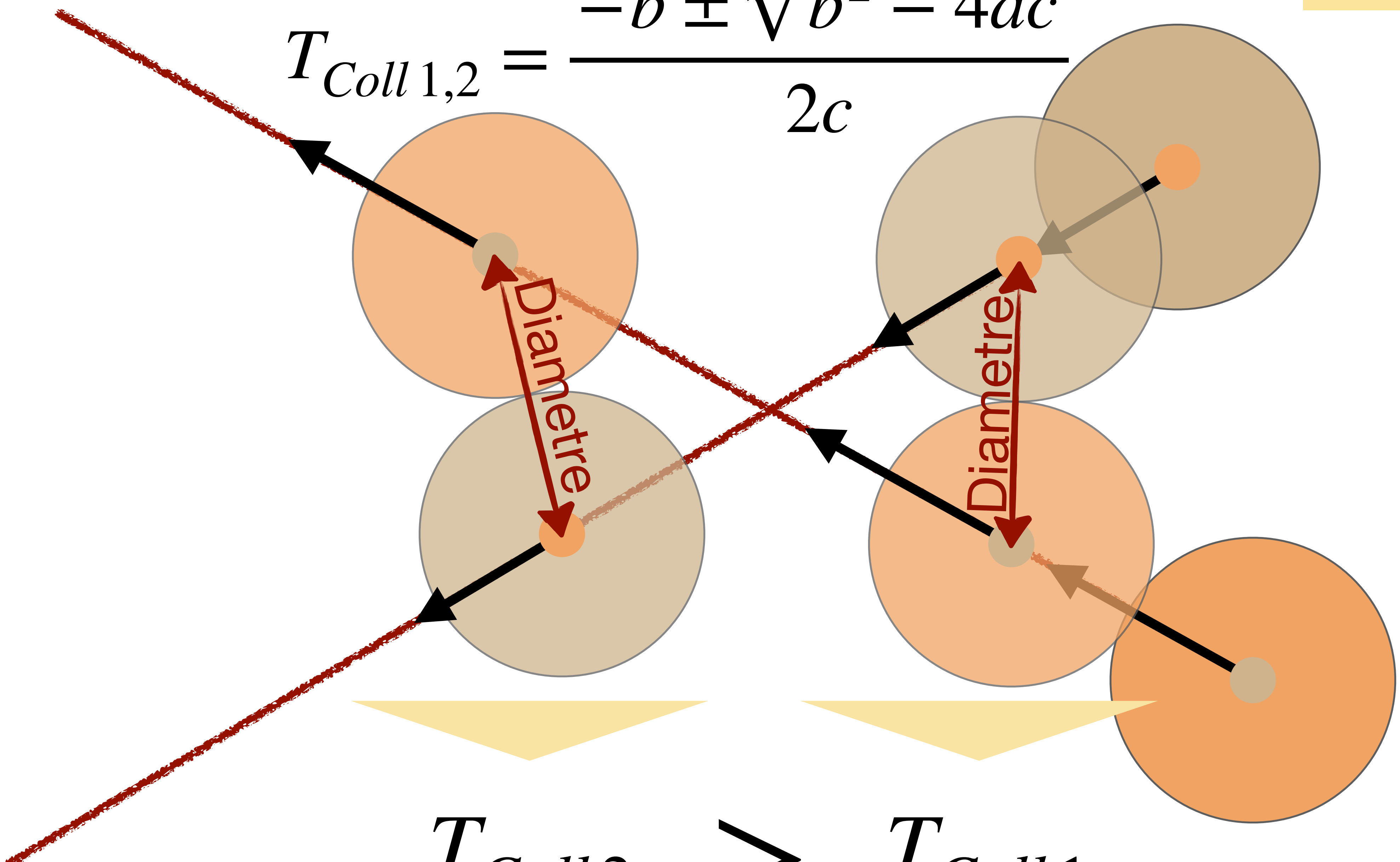
Dynamique moléculaire

➡ Disques durs, collisions entre particules

$$aT_{Coll}^2 + bT_{Coll} + c = 0$$

$$\Delta x, \Delta y$$
$$\Delta v_x, \Delta v_y$$

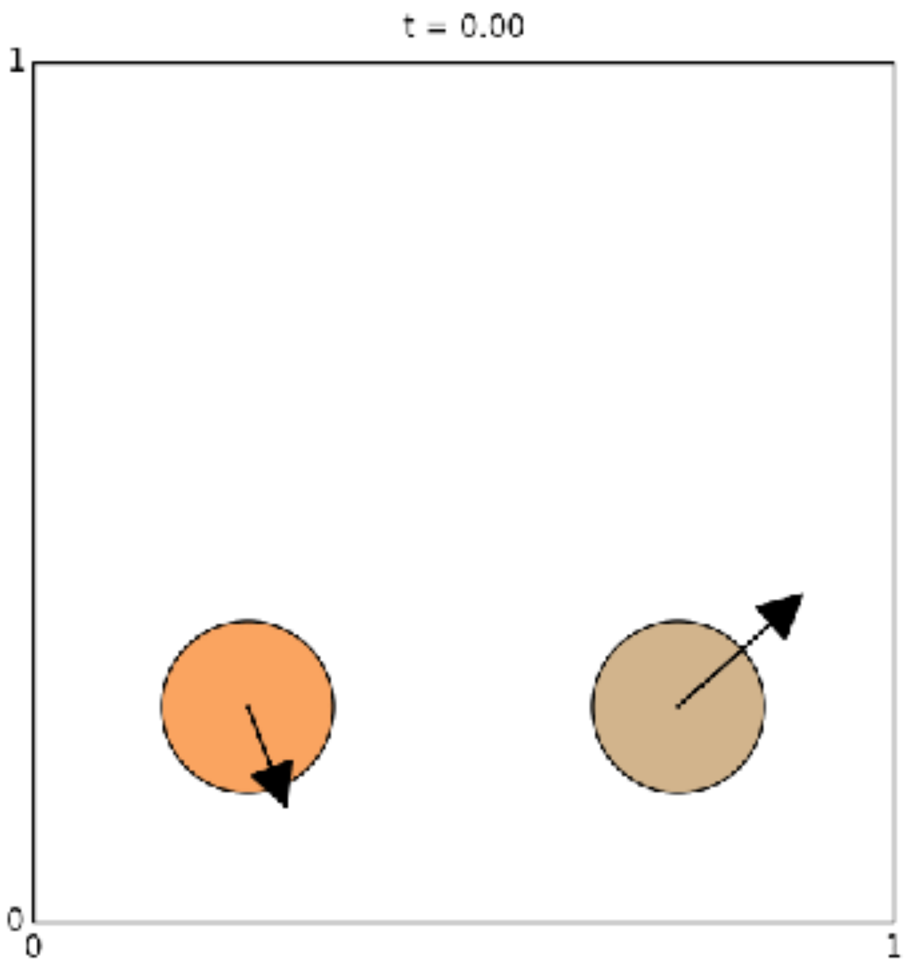
$$T_{Coll\,1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2c}$$



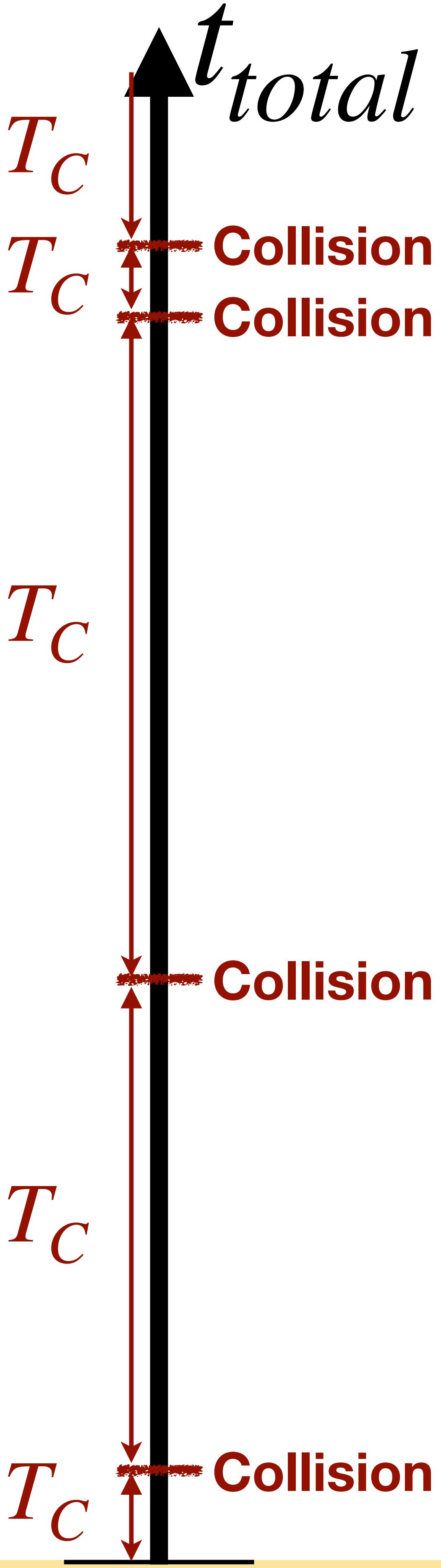
$$T_{Coll\,2} > T_{Coll\,1}$$

Dynamique moléculaire

➡ Disques durs

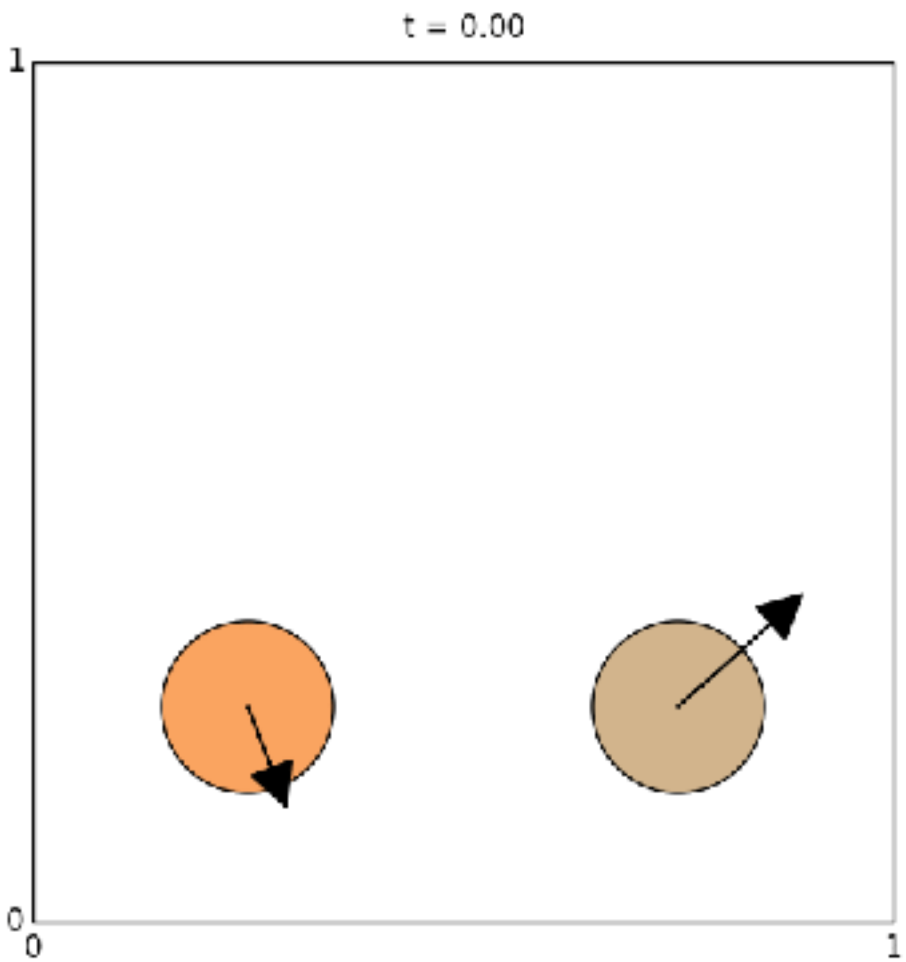


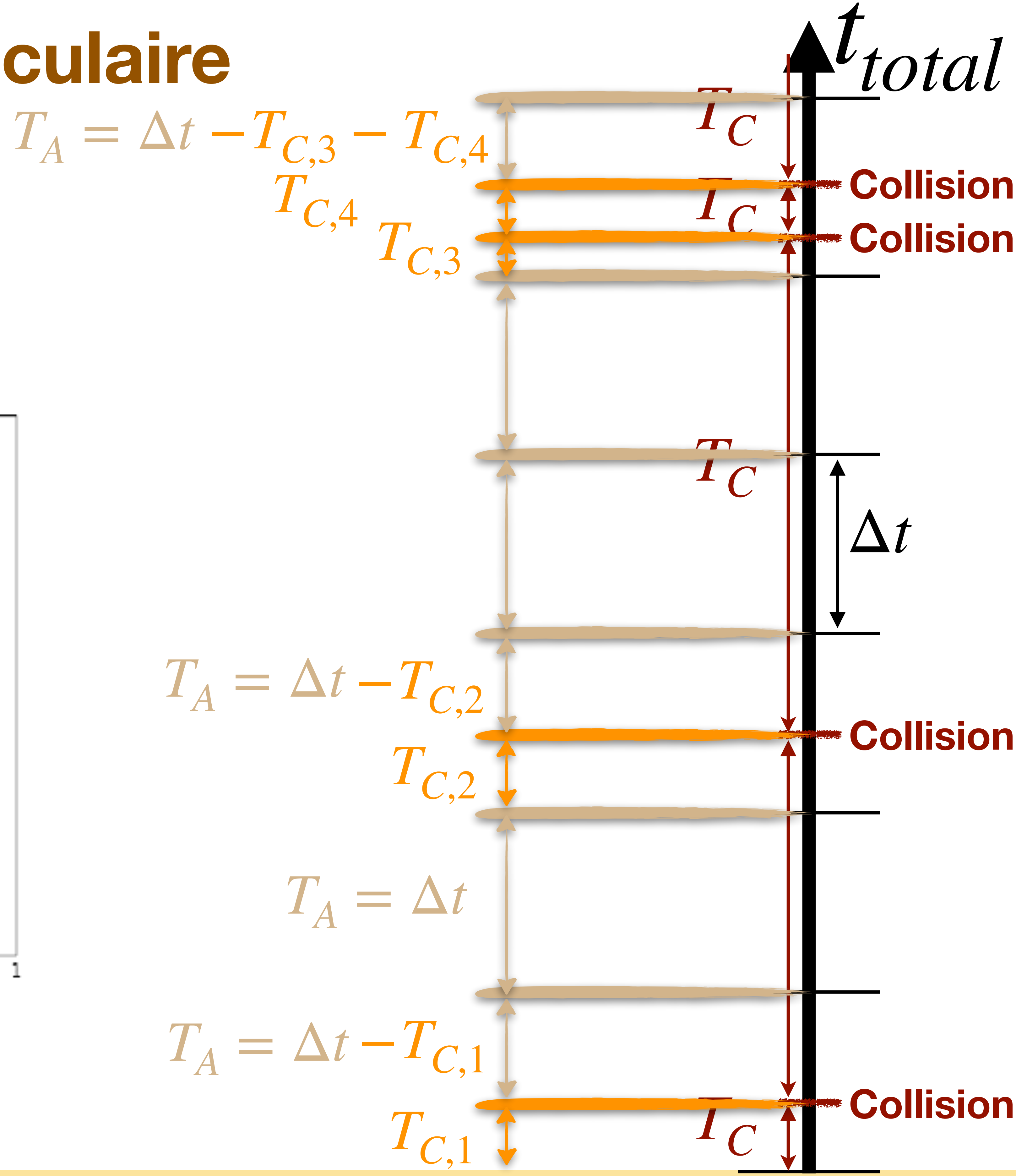
$$t_{total} = \sum T_c$$



Dynamique moléculaire

➡Disques durs



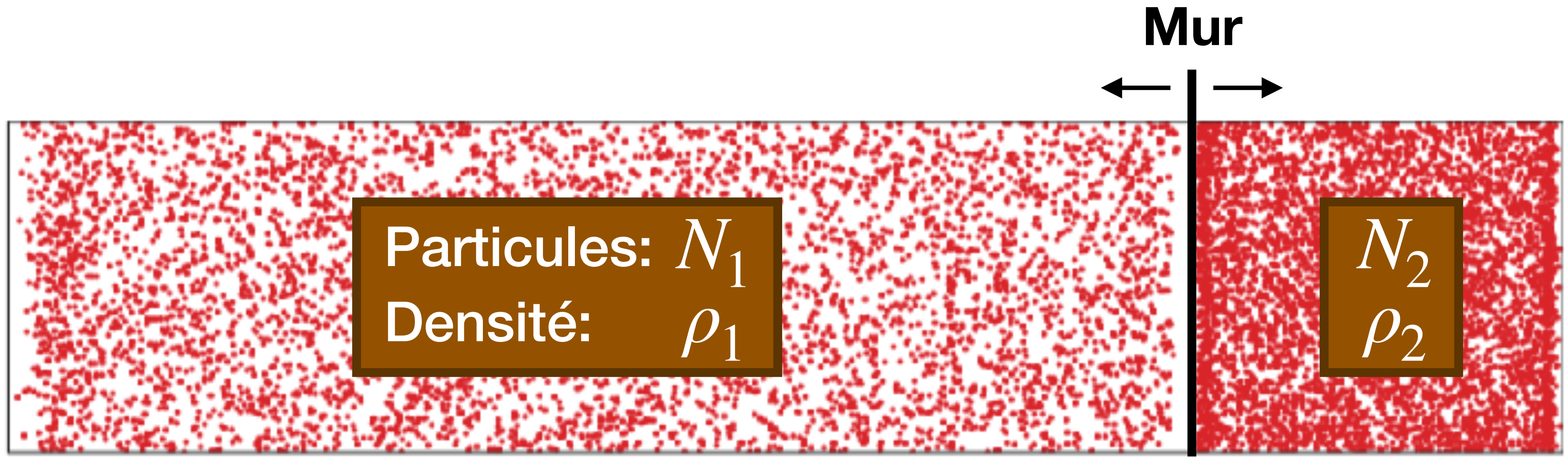


Dynamique moléculaire

➡ Murs mobiles sous pression

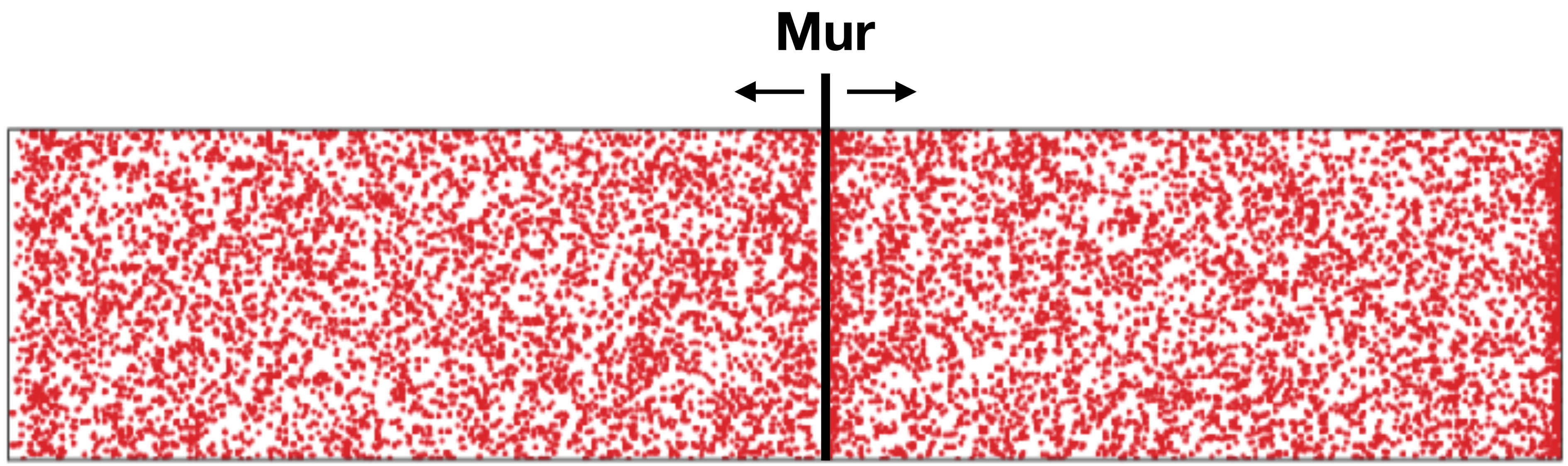
État initial

$$N_1 = N_2$$
$$\rho_1 < \rho_2$$



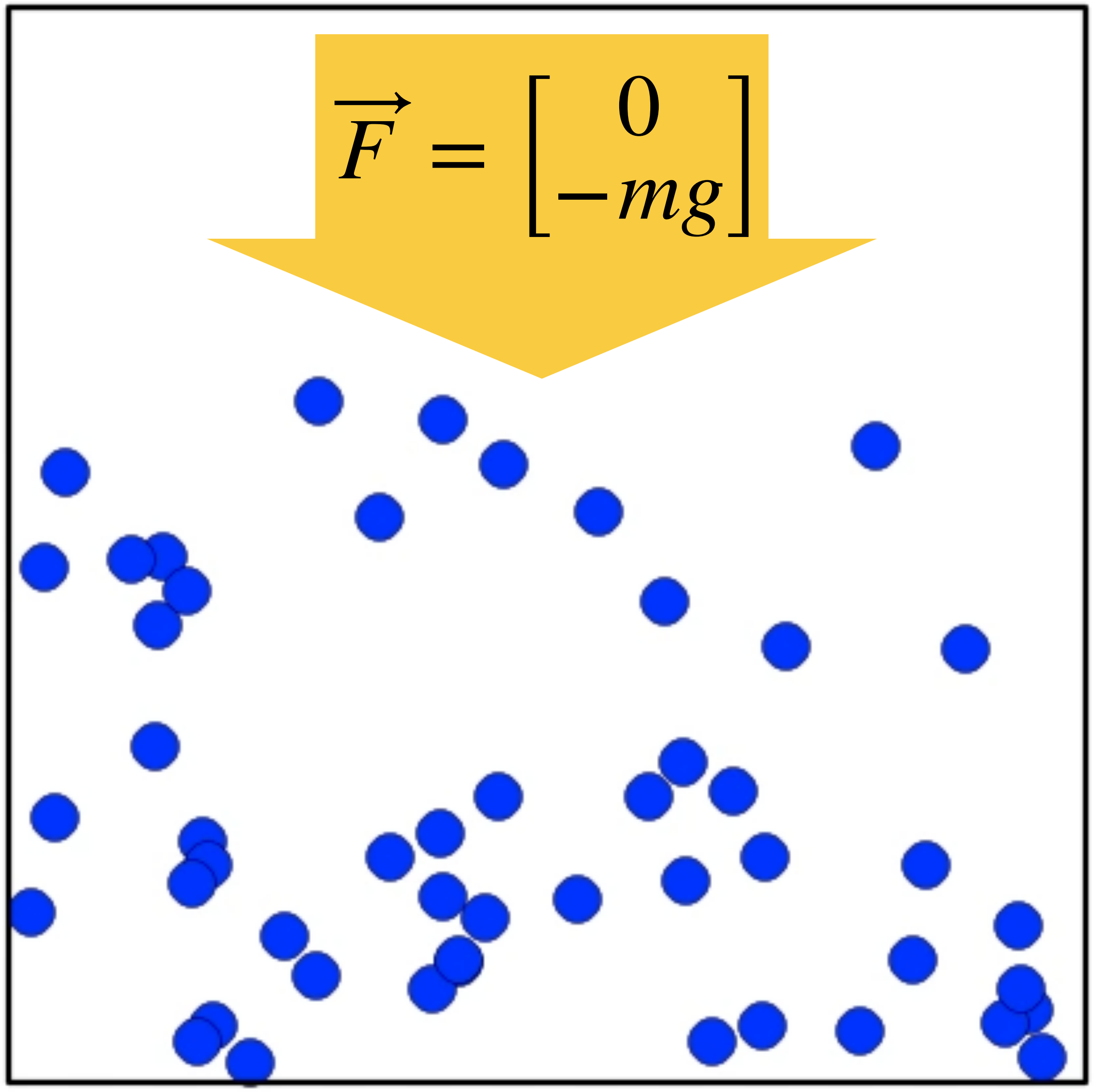
État stationnaire d'équilibre

$$N_1 = N_2$$
$$\rho_1 = \rho_2$$



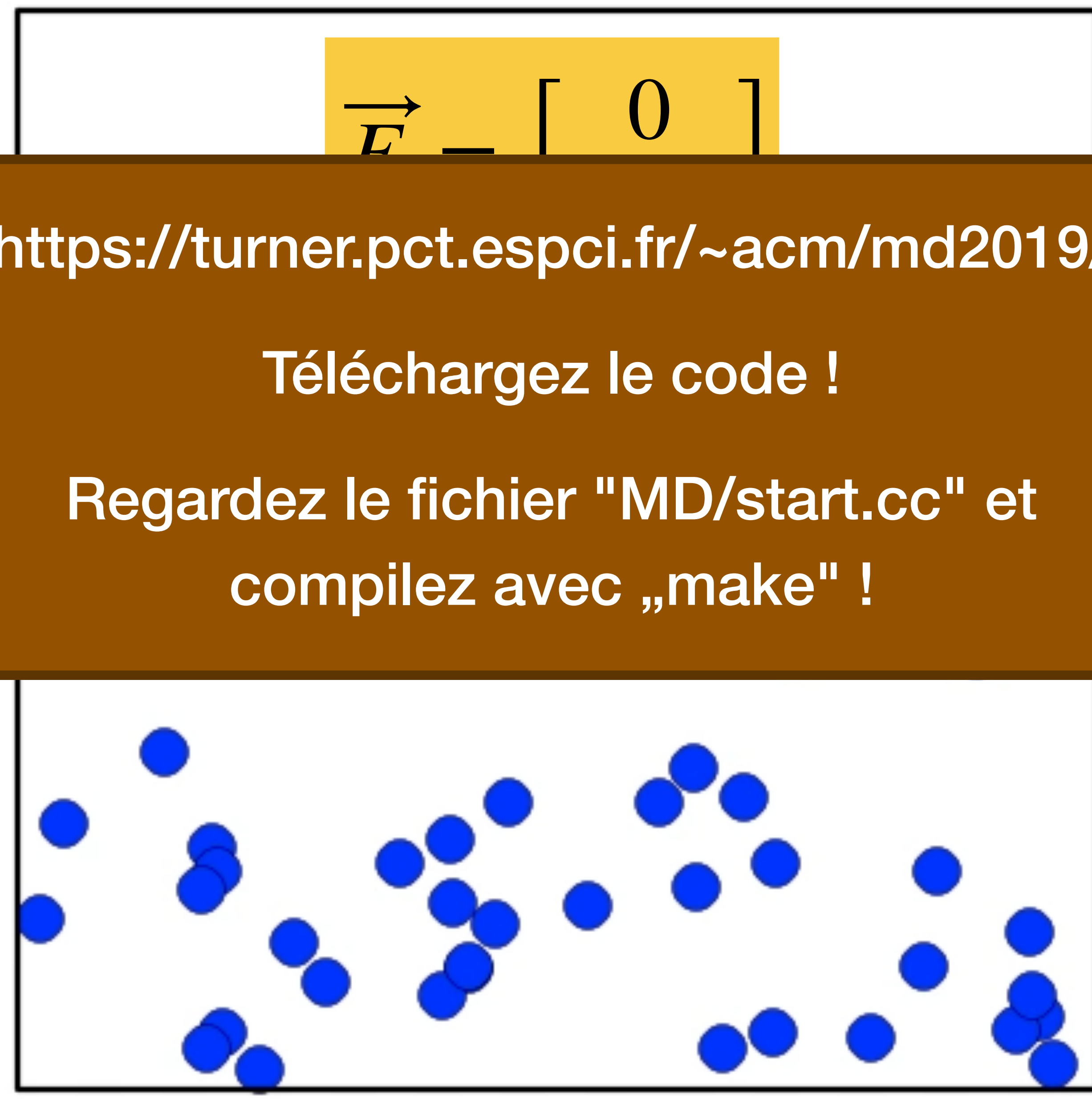
Dynamique moléculaire

➡ particules sous l'influence de la gravité



Dynamique moléculaire

➡ particules sous l'influence de la gravité



https://turner.pct.espci.fr/~acm/md2019/

Téléchargez le code !

Regardez le fichier "MD/start.cc" et compilez avec „make" !