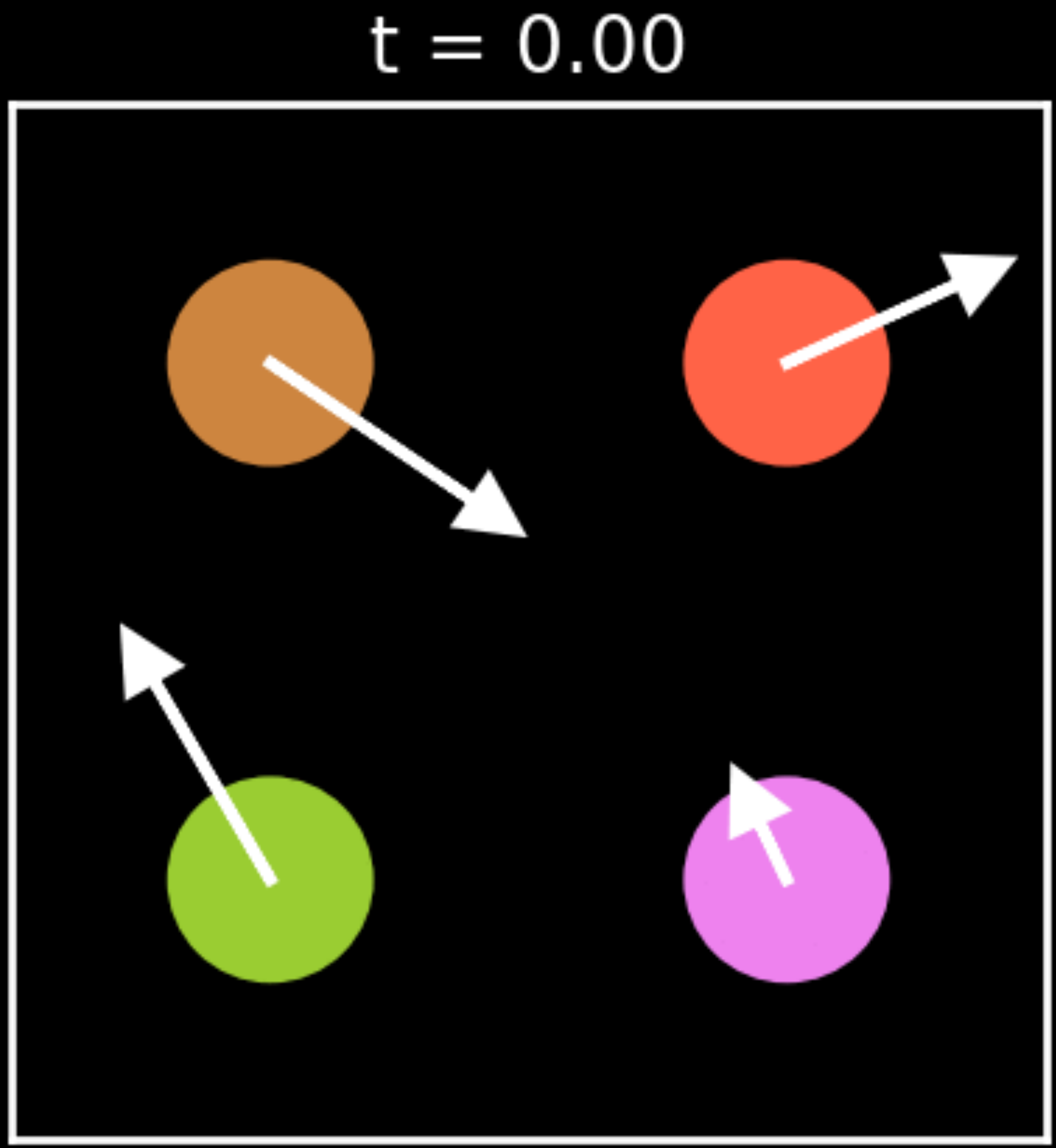
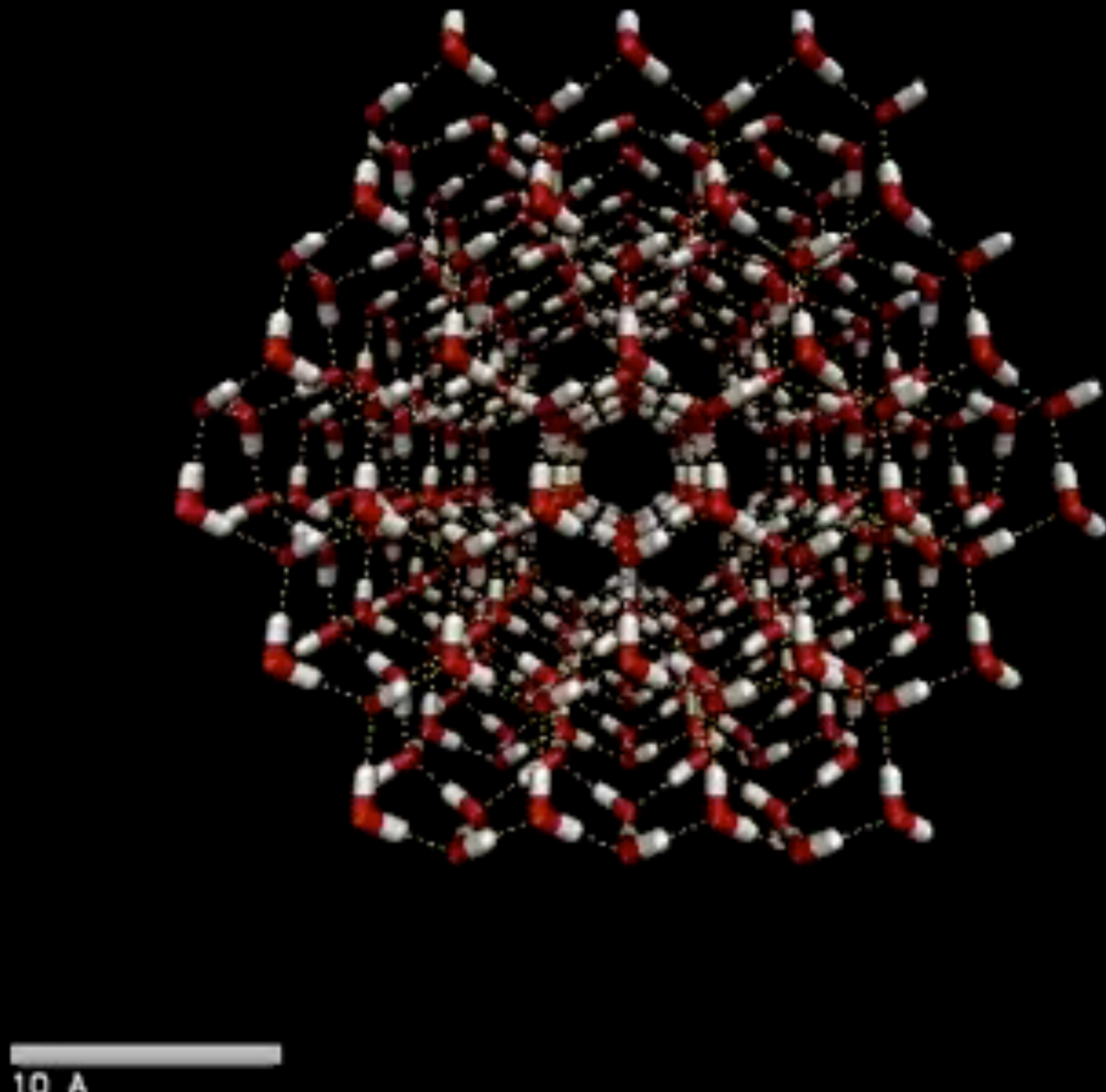
La dynamique moléculaire des disques durs

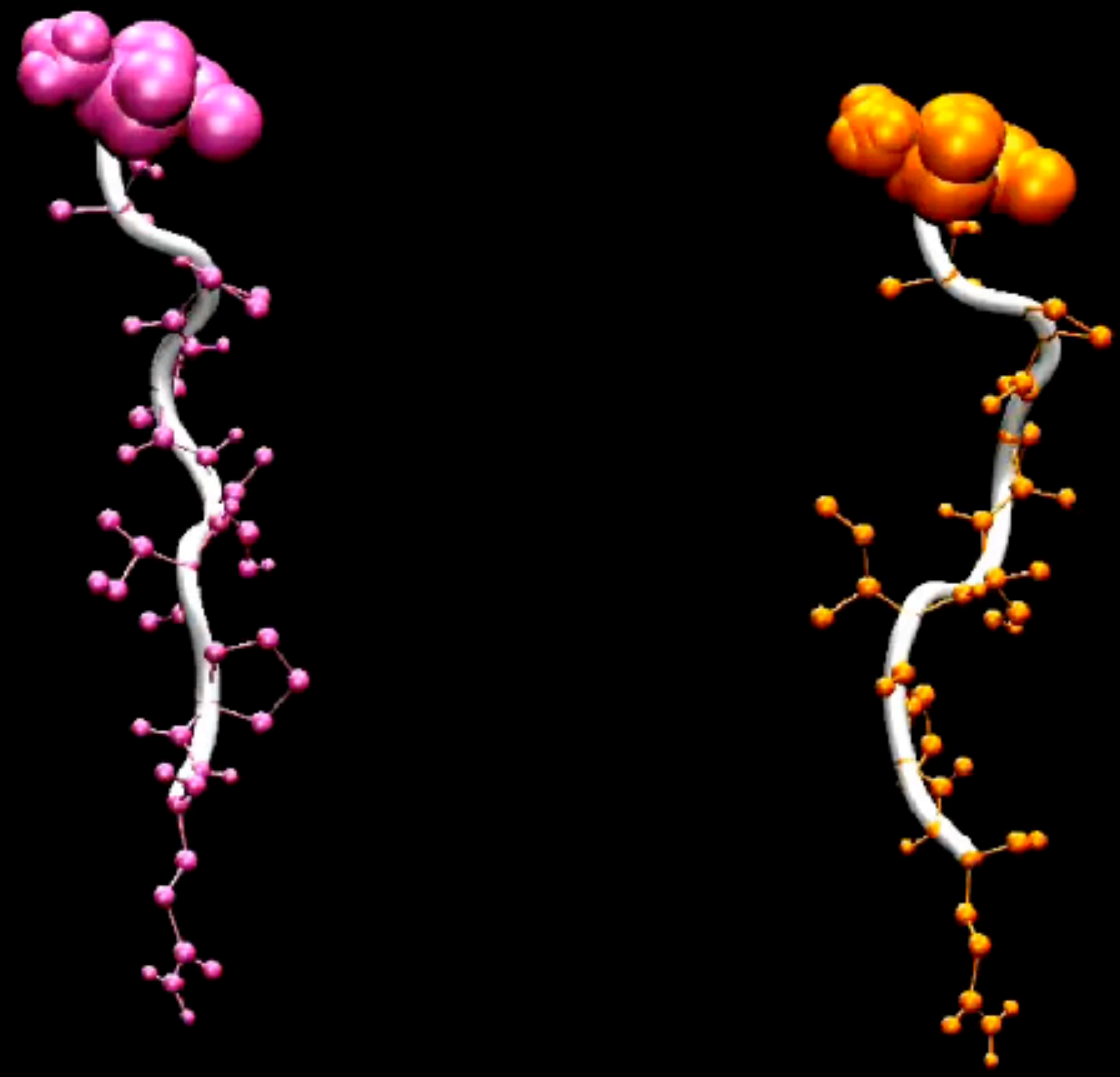


La dynamique moléculaire de la fonte des glaces



Dr. S. Shityakov from Würzburg University: https://www.youtube.com/watch?v=NQhjAtCKghE

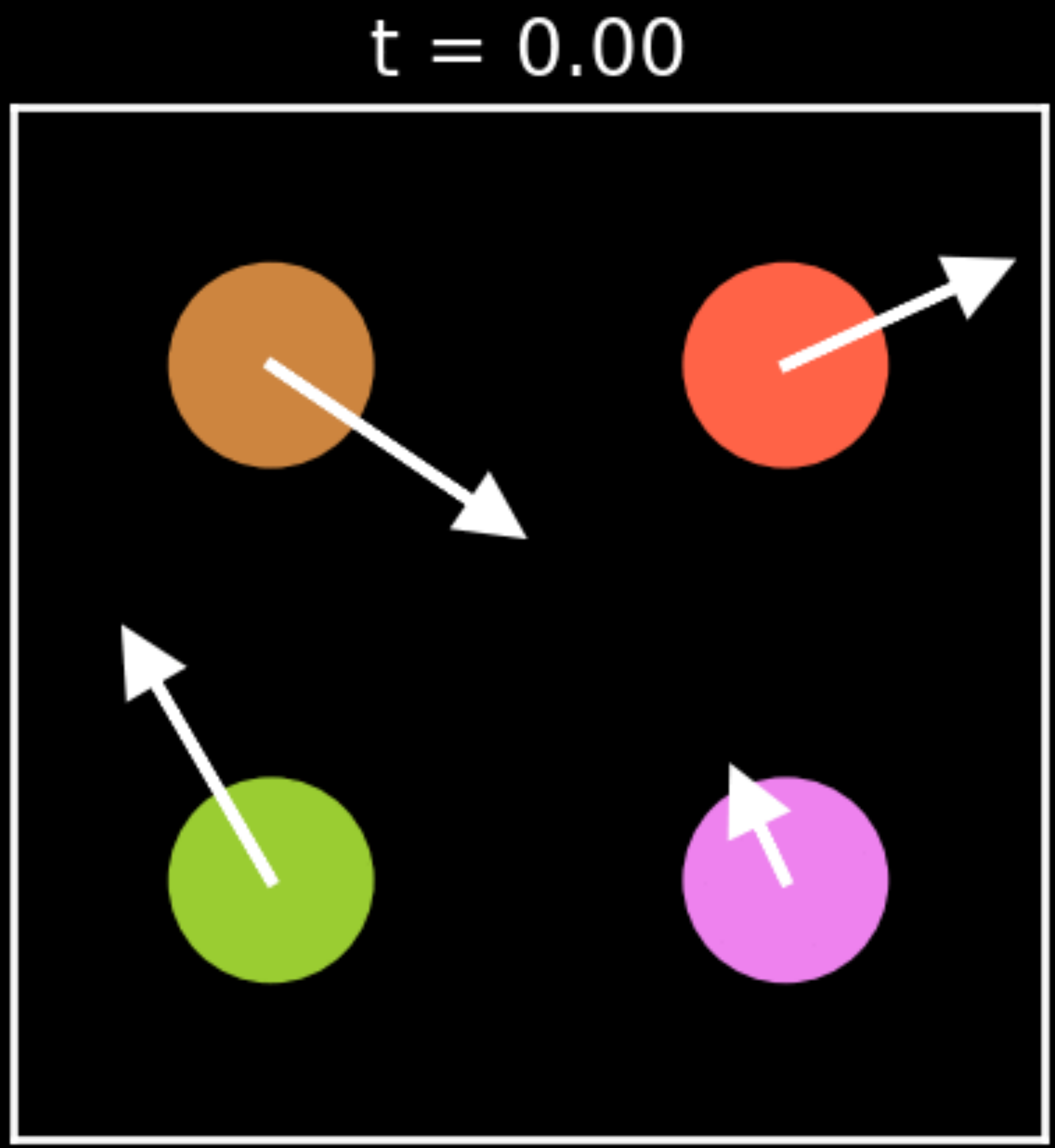
La dynamique moléculaire: self assembling Peptide



A. Biswas et al., *Chem. Commun.* **50**, 2604 (2014). https://www.youtube.com/watch?v=B4sS1iIp-Qk

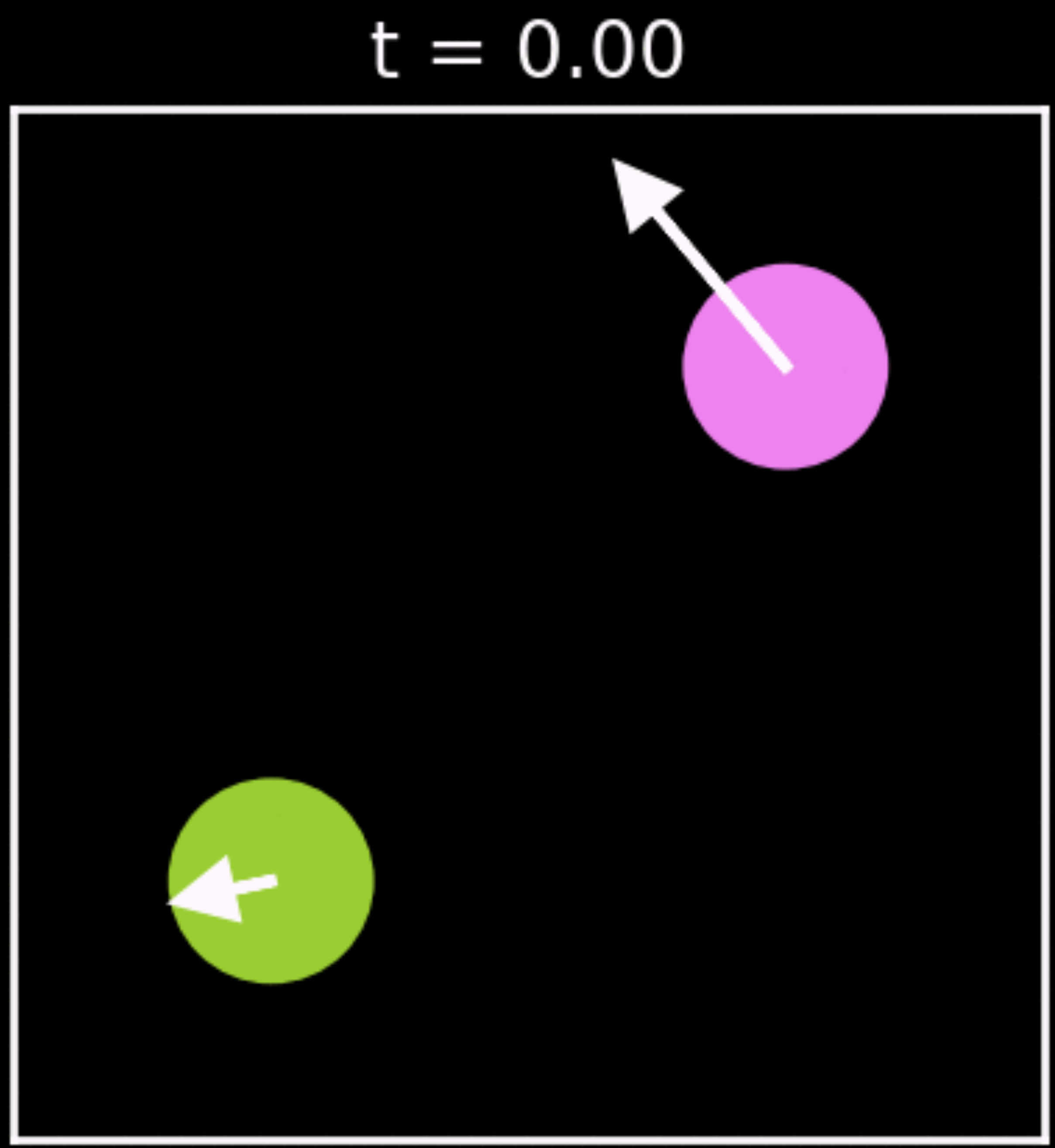
La dynamique moléculaire des disques durs

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \overrightarrow{v}_i^2 = const \quad (1) \qquad \overrightarrow{F} = \sum_i^N \overrightarrow{F}_i = \sum_i^N \dot{\overrightarrow{p}}_i = 0 \quad (2)$$



La dynamique moléculaire des disques durs

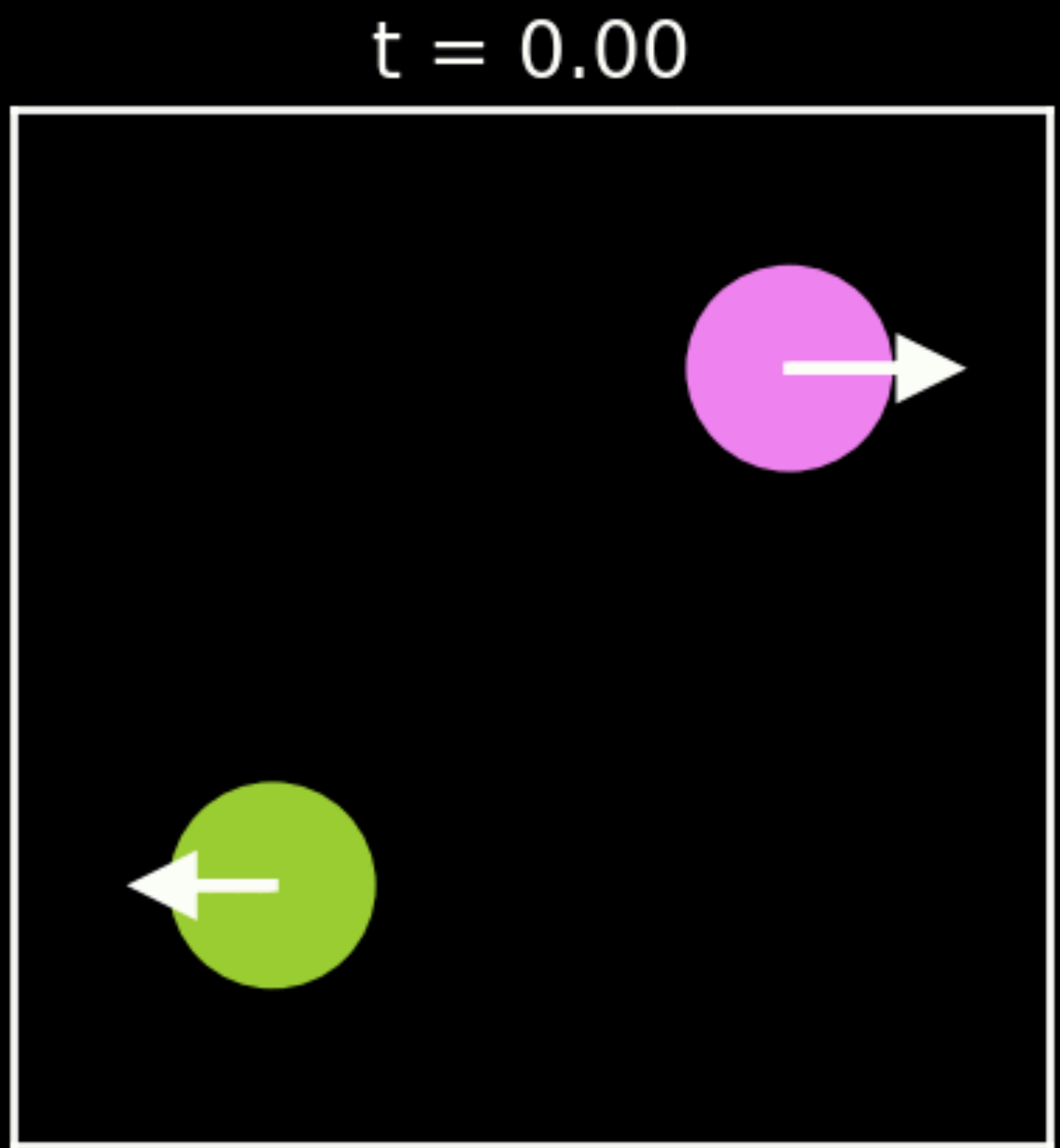
$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \overrightarrow{v}_i^2 = const \quad (1) \qquad \overrightarrow{F} = \sum_i^N \overrightarrow{F}_i = \sum_i^N \dot{\overrightarrow{p}}_i = 0 \quad (2)$$



La dynamique moléculaire des disques durs

$$E = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \overrightarrow{v}_i^2 = const \quad \text{(1)}$$

$$\overrightarrow{F} = \sum_i^N \overrightarrow{F}_i = \sum_i^N \dot{\overrightarrow{p}}_i = 0 \quad \text{(2)}$$



Entre les collisions :

$$\overrightarrow{v}_i = const$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \overrightarrow{v}_i \quad \text{(3)}$$

Temps de collision :

(1) $\Rightarrow$

$$\left(\overrightarrow{v}_1\right)^2 + \left(\overrightarrow{v}_2\right)^2 = \left(\overrightarrow{v}_1'\right)^2 + \left(\overrightarrow{v}_2'\right)^2$$

(2) $\Rightarrow$ $\overrightarrow{v}_1 + \overrightarrow{v}_2 = \overrightarrow{v}_1' + \overrightarrow{v}_2'$

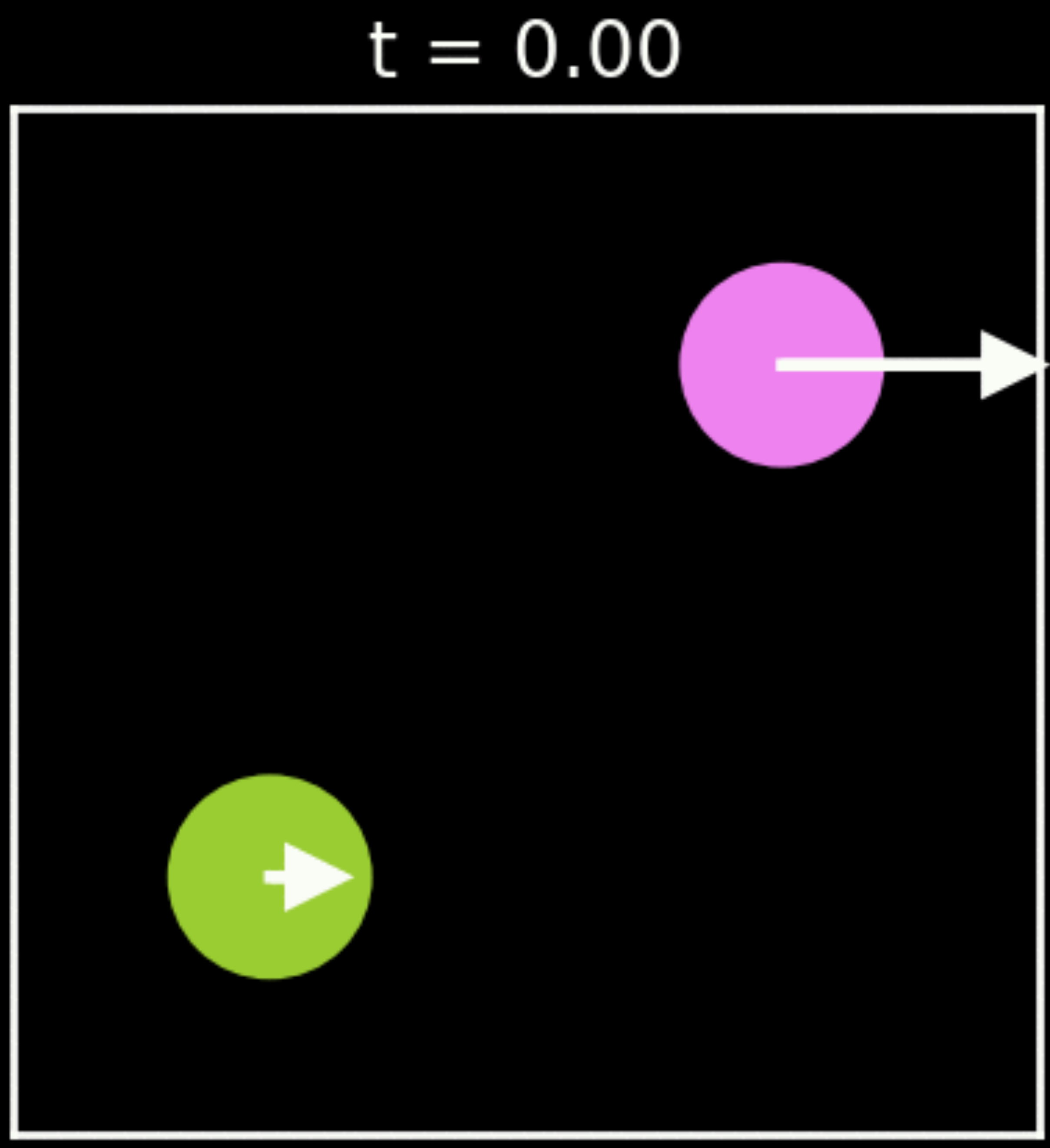
Temps de collision ?

La dynamique moléculaire des disques durs

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}'_1)^2 + (\vec{v}'_2)^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

$$t_c$$

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

$$x_i \to x_i(t_c)$$

3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

$$v_x(k) \to v'_x(k)$$

4) Revenez au point 1).

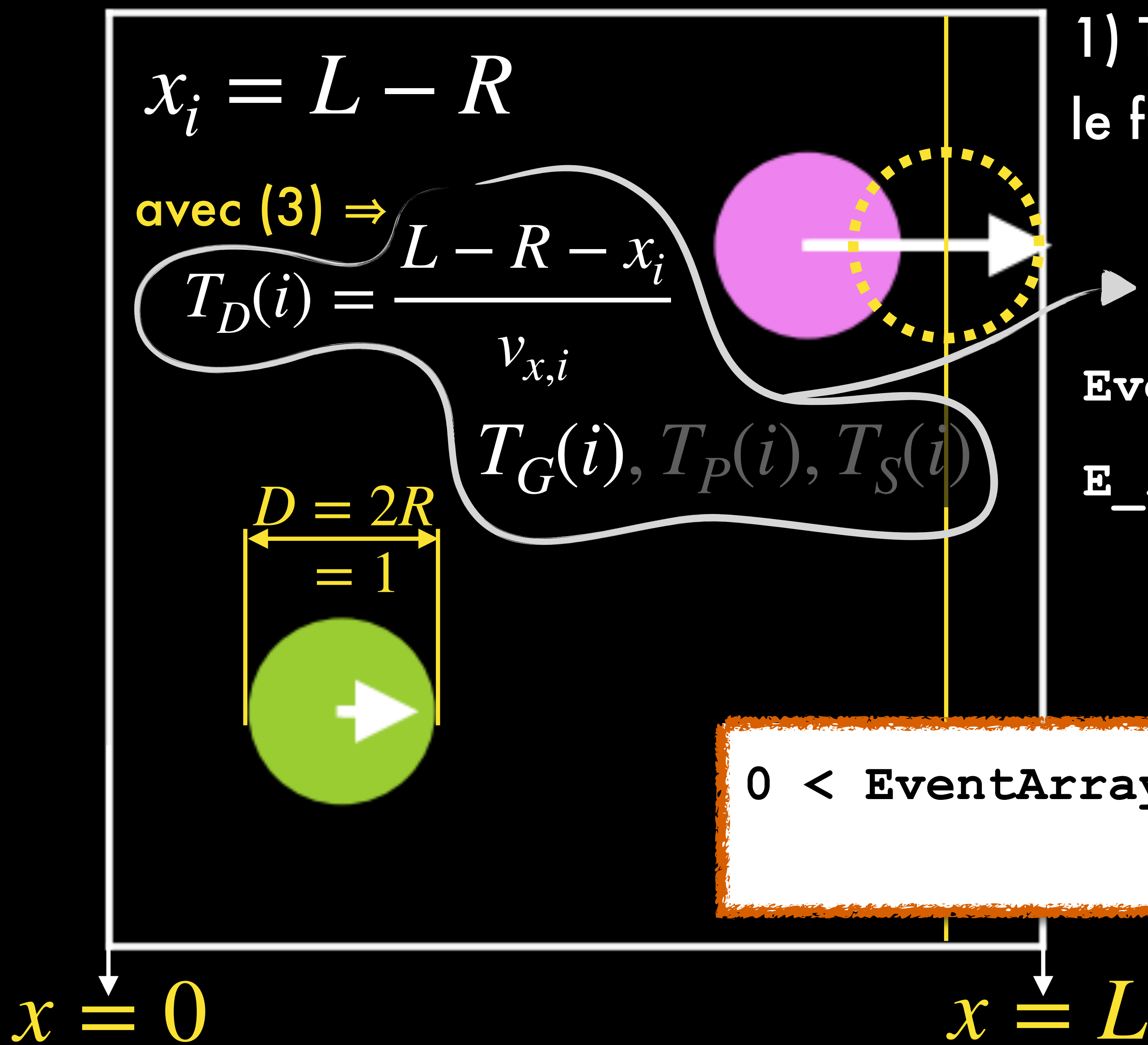
La dynamique moléculaire des disques durs

$$\left(\vec{v}_1\right)^2 + \left(\vec{v}_2\right)^2 = \left(\vec{v}'_1\right)^2 + \left(\vec{v}'_2\right)^2 \quad \textbf{(1)}$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 \quad \textbf{(2)}$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad \textbf{(3)}$$

t = 0.00



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

t_c

Tableau des événements:

```
EventArray = [E_0, …, E_(4N-1)]

E_i = {type (de collision),
       ia (indice de particule),
       time (de collision)}
```

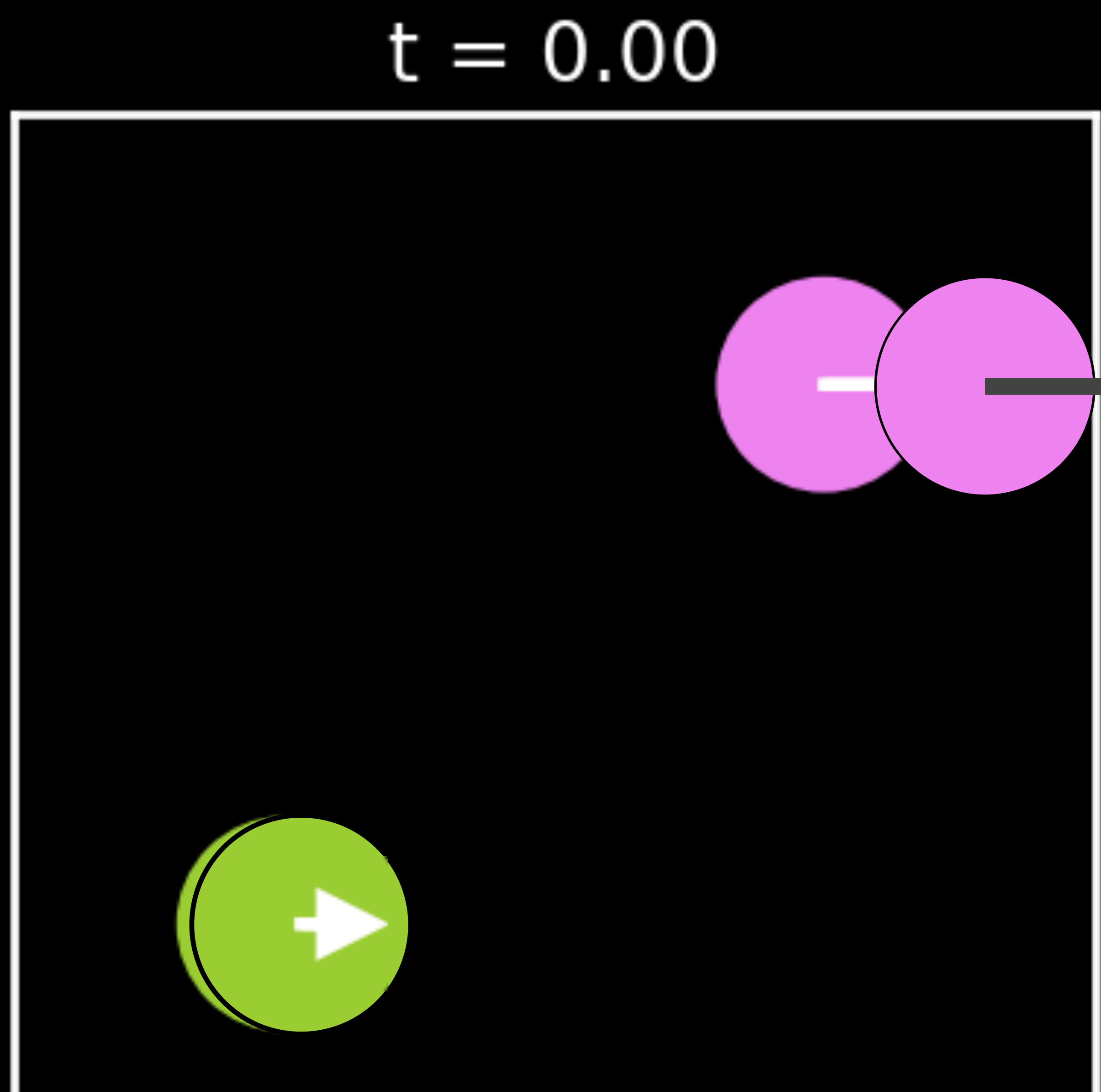
```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
             NextEvent = k
```

La dynamique moléculaire des disques durs

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}'_1)^2 + (\vec{v}'_2)^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
NextEvent = k
```

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

```
PArray = [P_0,…, P_(N-1)]
P_i = [x, y, vx, vy]
```

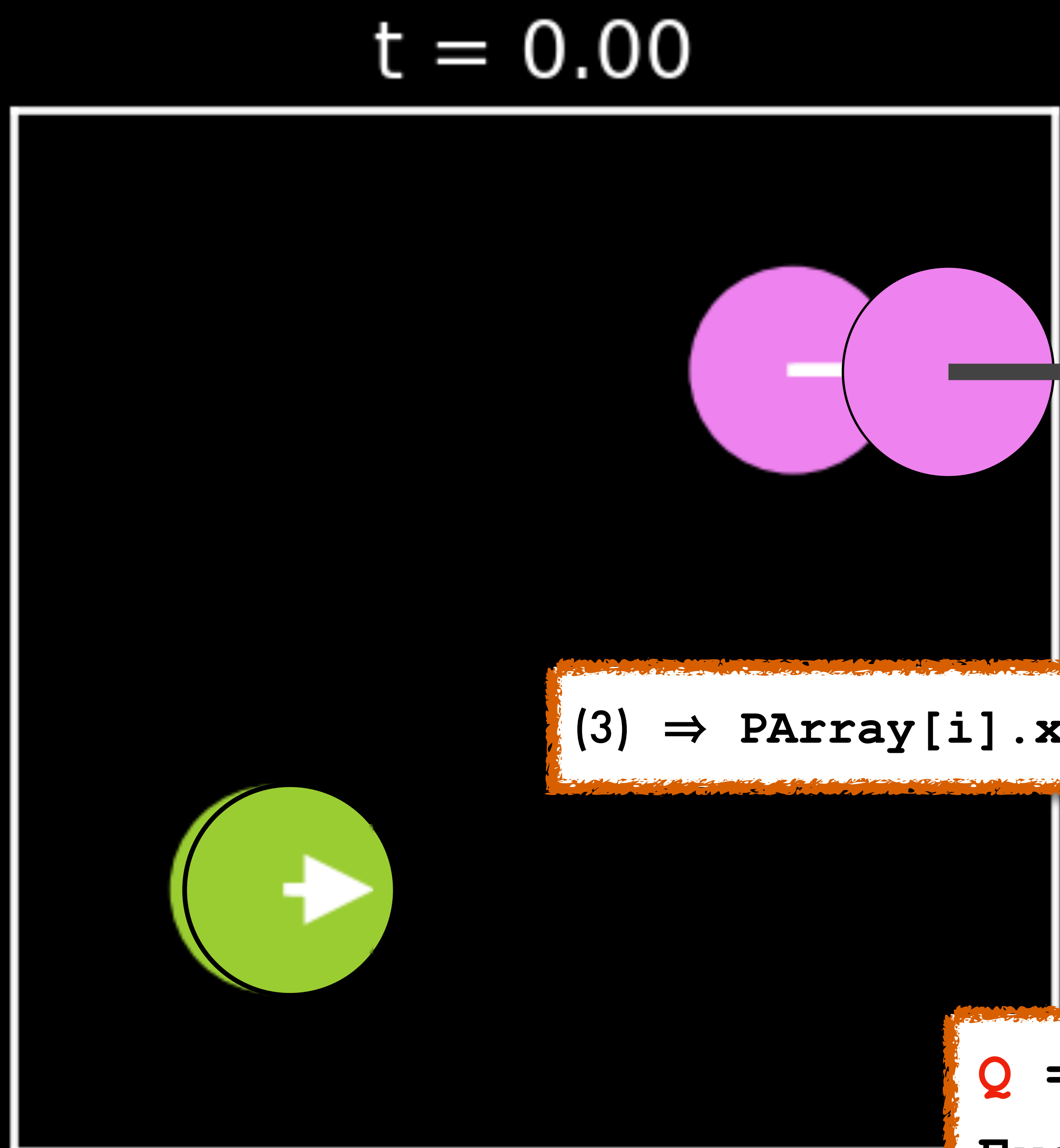
(3) ⇒ `PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time`

La dynamique moléculaire des disques durs

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}_1')^2 + (\vec{v}_2')^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}_1' + \vec{v}_2' \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
        NextEvent = k
```

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

```
(3) ⇒ PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

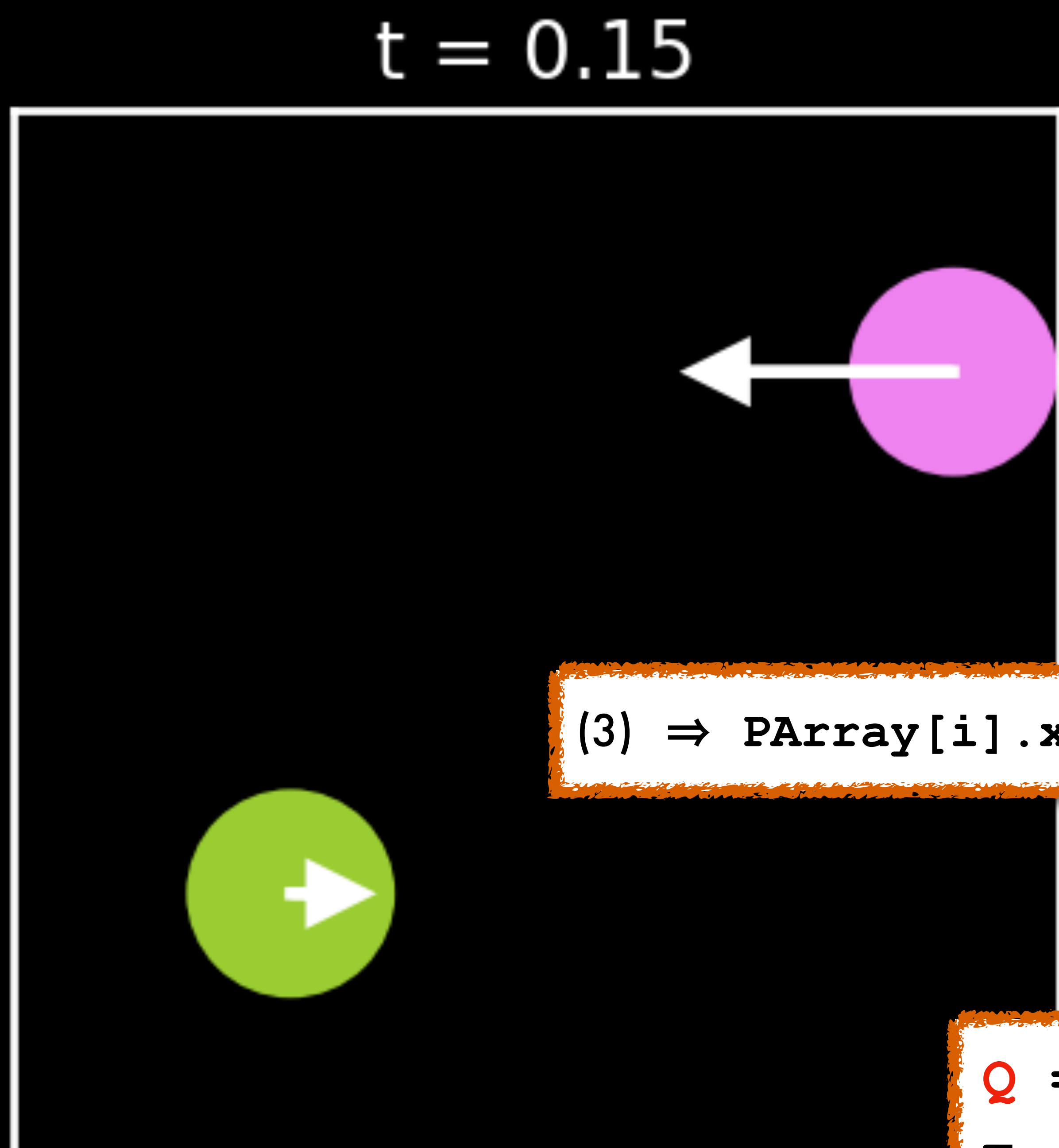
```
Q = EventArray[k].ia     }  nouvelle
EventArray[k].type       }  PArray[Q].vx
```

La dynamique moléculaire des disques durs

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}'_1)^2 + (\vec{v}'_2)^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
NextEvent = k
```

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

```
(3) ⇒ PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

```
Q = EventArray[k].ia
EventArray[k].type
```

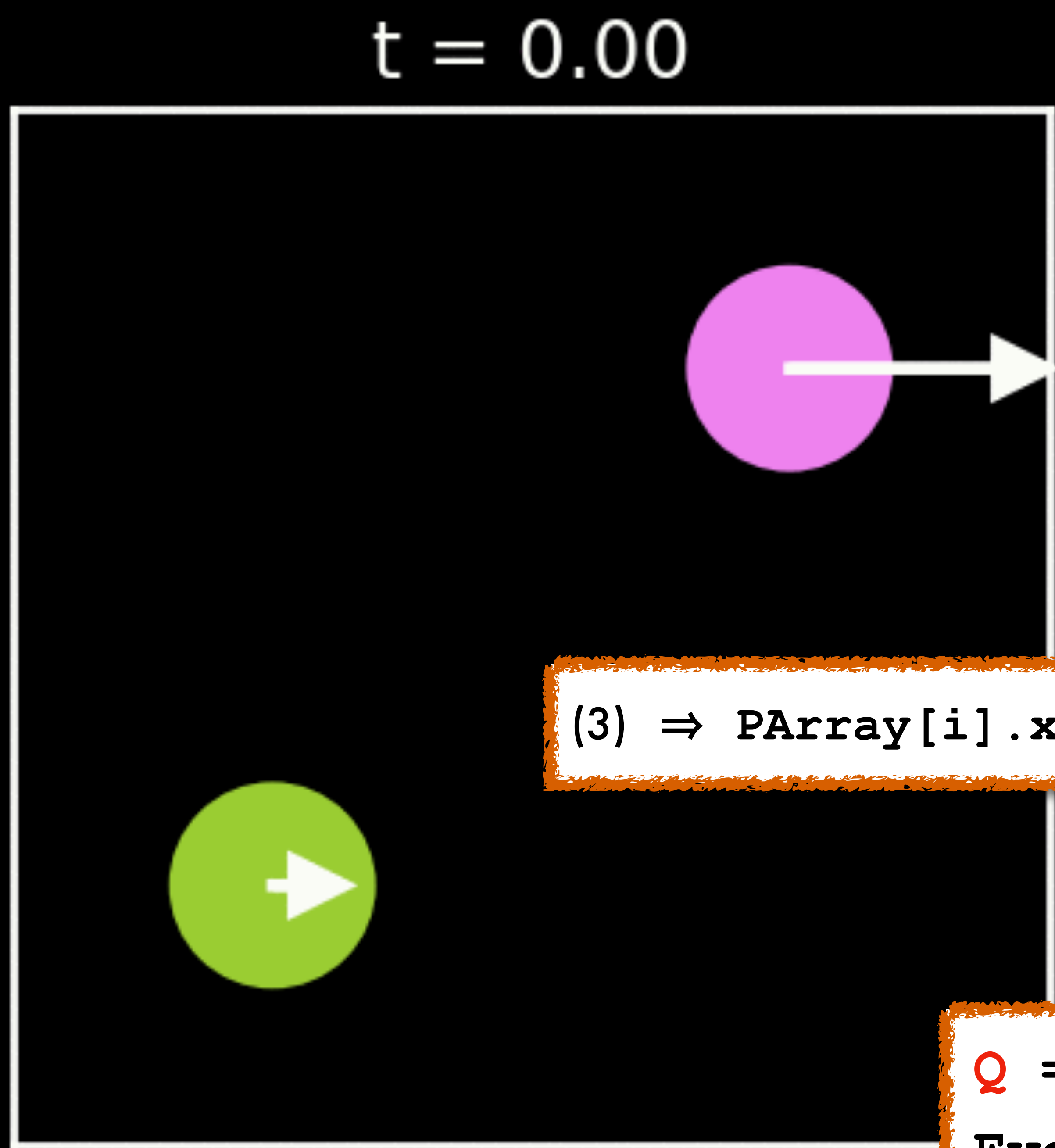
nouvelle `PArray[Q].vx`

La dynamique moléculaire des disques durs

$$\left(\vec{v}_1\right)^2 + \left(\vec{v}_2\right)^2 = \left(\vec{v}'_1\right)^2 + \left(\vec{v}'_2\right)^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2 \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
NextEvent = k
```

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

```
(3) ⇒ PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

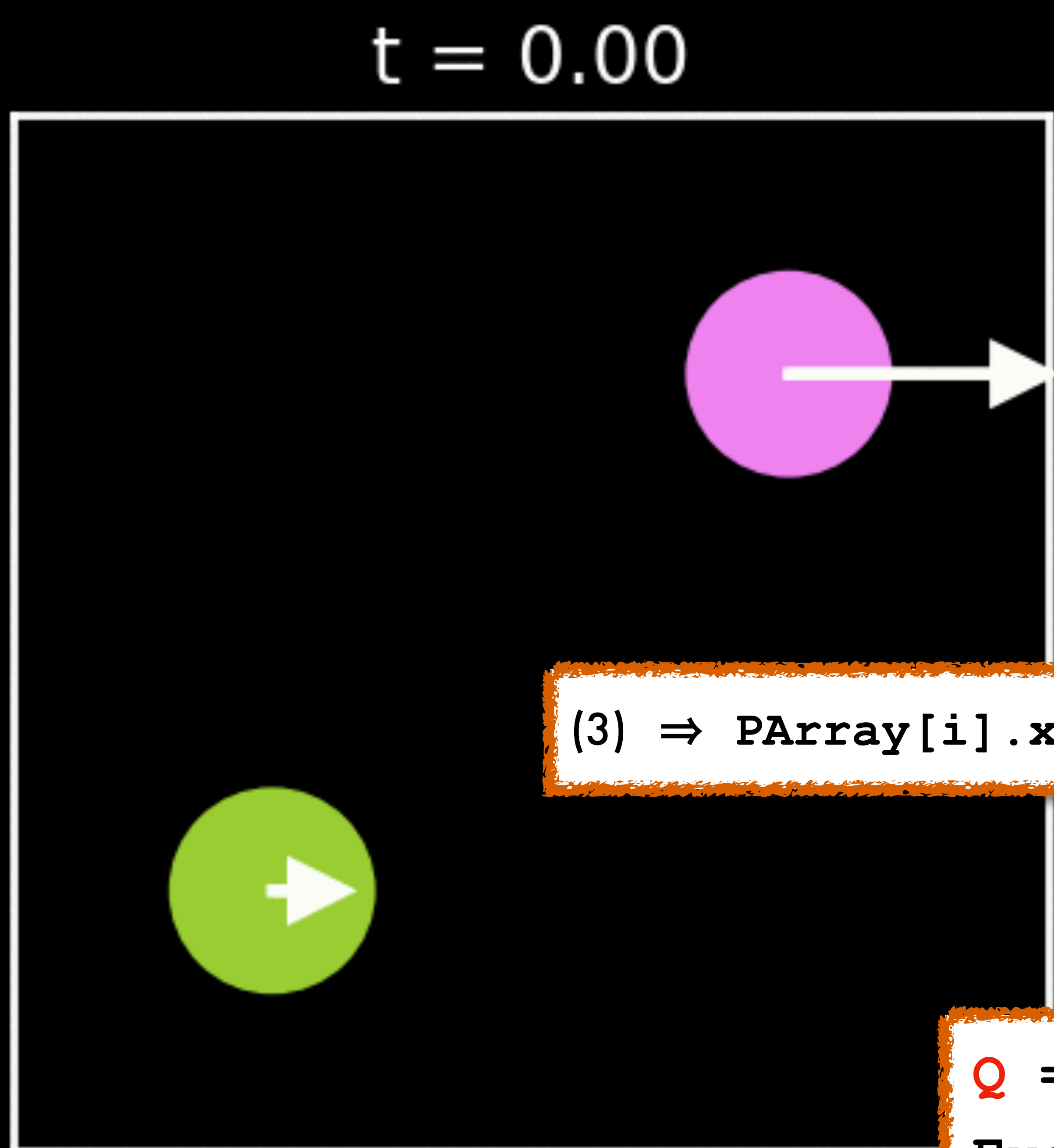
$$\left.\begin{array}{l}\texttt{Q = EventArray[k].ia}\\ \texttt{EventArray[k].type}\end{array}\right\} \begin{array}{l}\text{nouvelle}\\ \texttt{PArray[Q].vx}\end{array}$$

La dynamique moléculaire des disques durs

$$(\vec{v}_1)^2 + (\vec{v}_2)^2 = (\vec{v}\,'_1)^2 + (\vec{v}\,'_2)^2 \quad (1)$$

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}\,'_1 + \vec{v}\,'_2 \quad (2)$$

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i(0) + t \cdot \vec{v}_i \quad (3)$$



PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
NextEvent = k
```

2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

```
(3) ⇒ PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

$$\left.\begin{array}{l}\texttt{Q = EventArray[k].ia} \\ \texttt{EventArray[k].type}\end{array}\right\} \begin{array}{l}\text{nouvelle} \\ \texttt{PArray[Q].vx}\end{array}$$

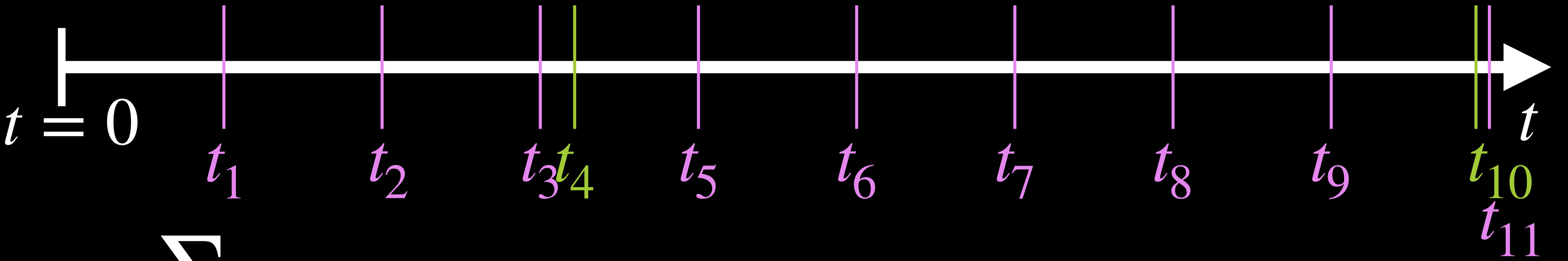
Téléchargez le code sur :

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

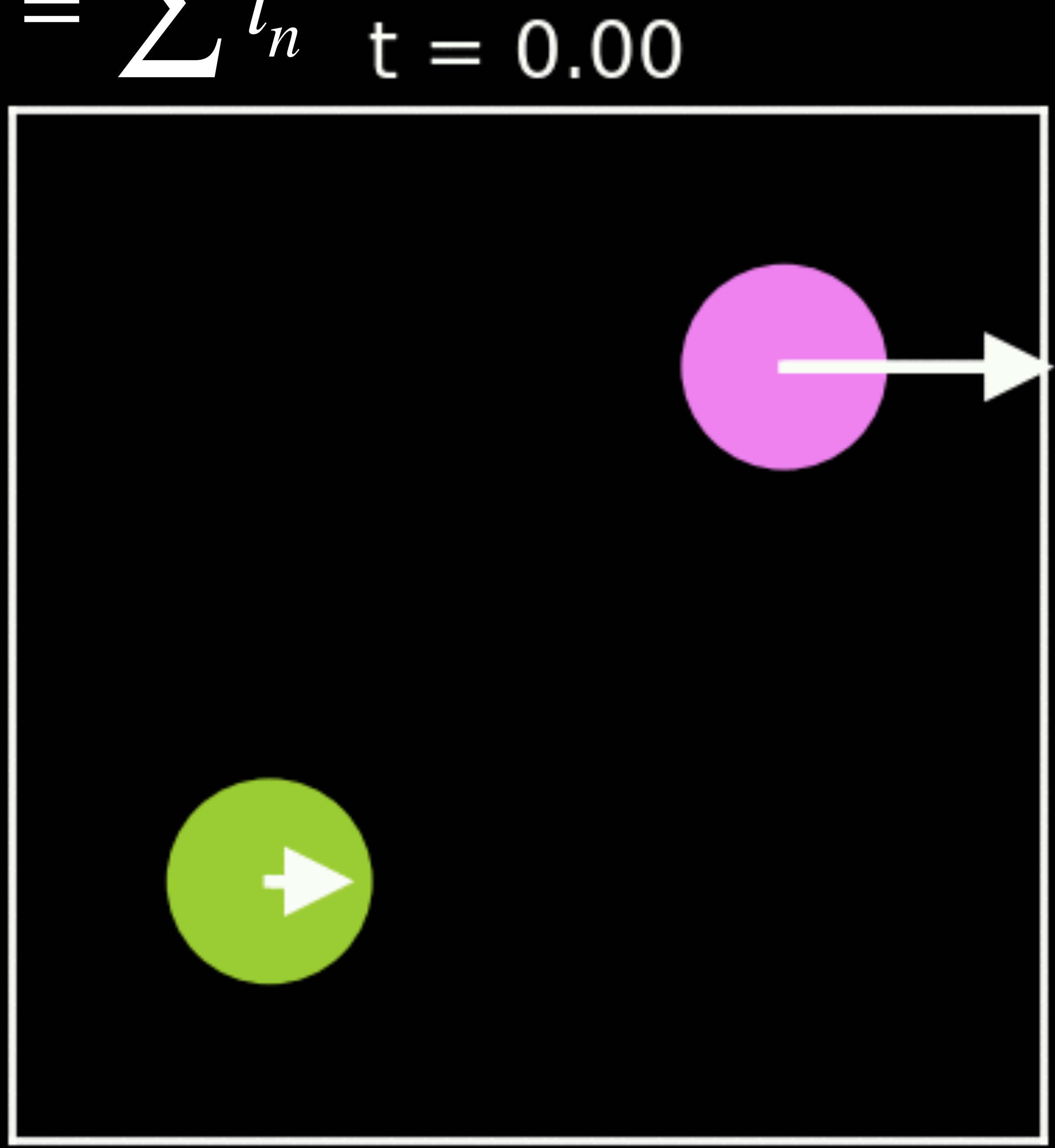
Regardez le fichier "MD/start.cc" et compilez avec "make" !

Le premier groupe qui perd une particule crie:

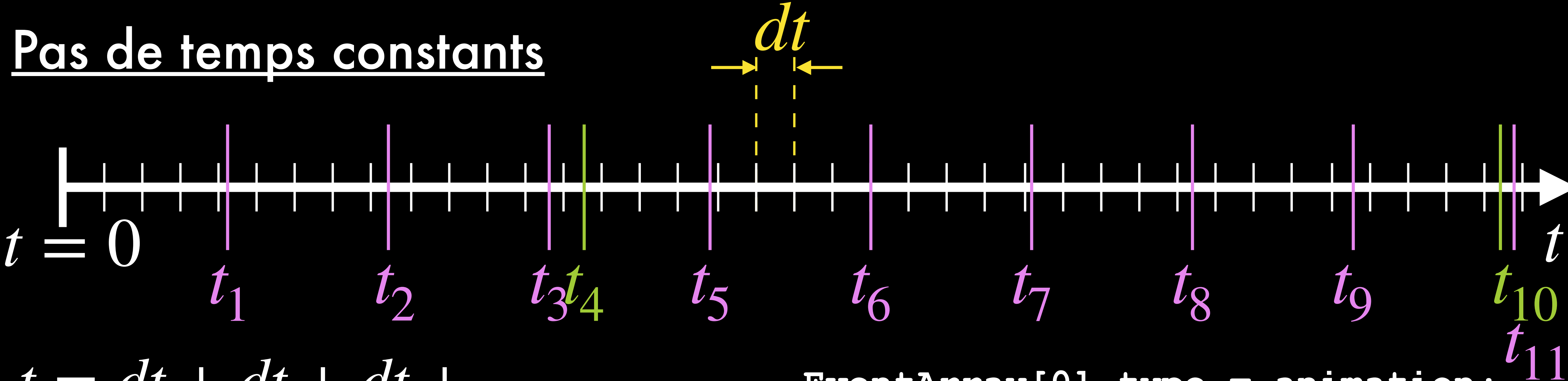
Pas de temps constants



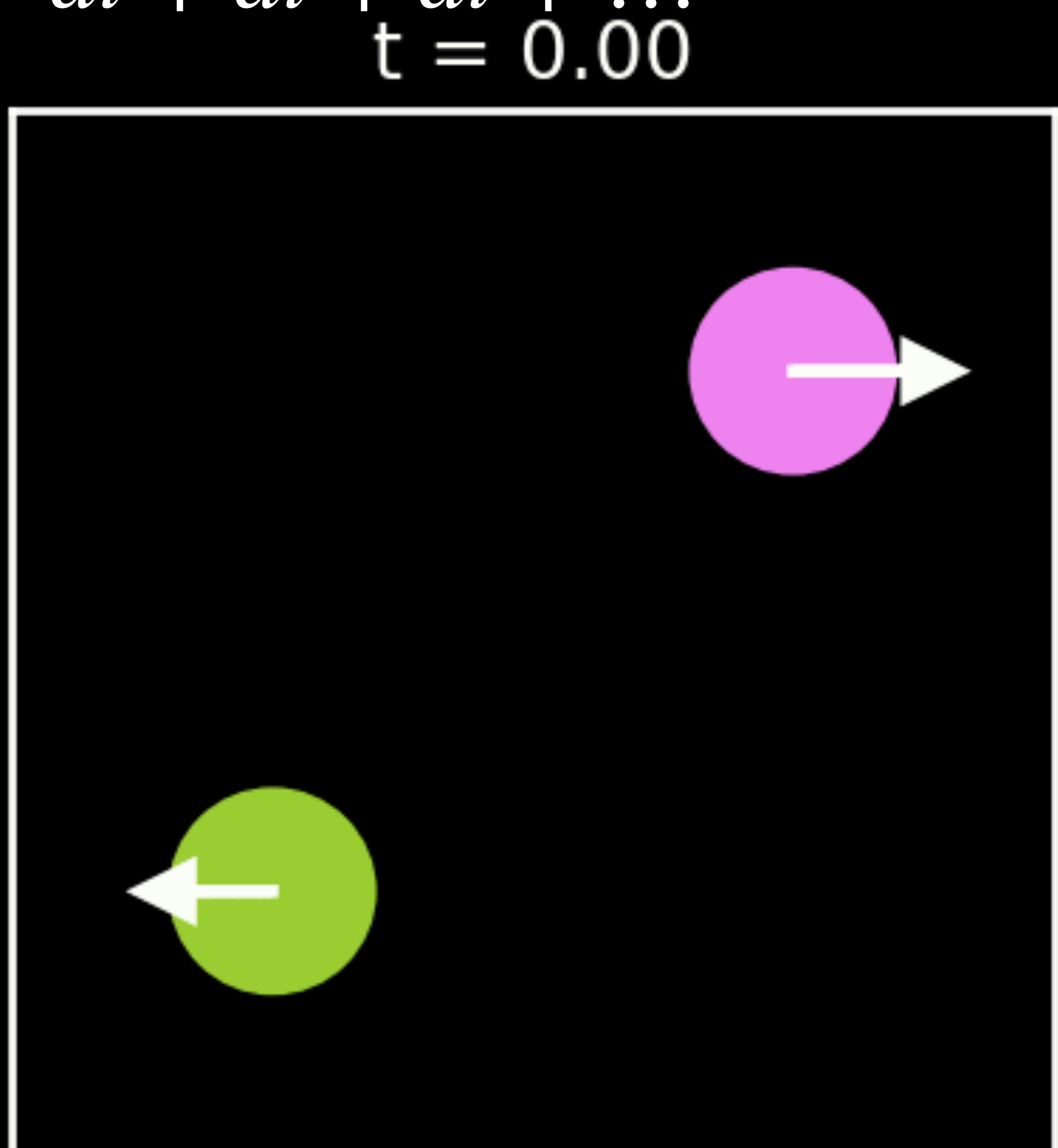
$$t = \sum t_n$$



Pas de temps constants



$$t = dt + dt + dt + \ldots$$




```
EventArray[0].type = animation;
EventArray[0].time = dt;
EventArray[0].ia = -1;
EventArray[1]
⋮
EventArray[4*N]
```

PRINCIPE DE BASE

1) Trouvez l'événement le plus proche dans le futur ! `NextEvent = k`

2) `p[i].x += p[i].vx * e[k].time`

3) `IF (EventArray[k].type == animation):`

```
    ANIMATE!!!!
    EventArray[0].time = ?
ELSE:
```

$$v_x(k) \rightarrow v_x'(k)$$

```
    EventArray[0].time = ?
```

https://itsfoss.com/install-bash-on-windows/