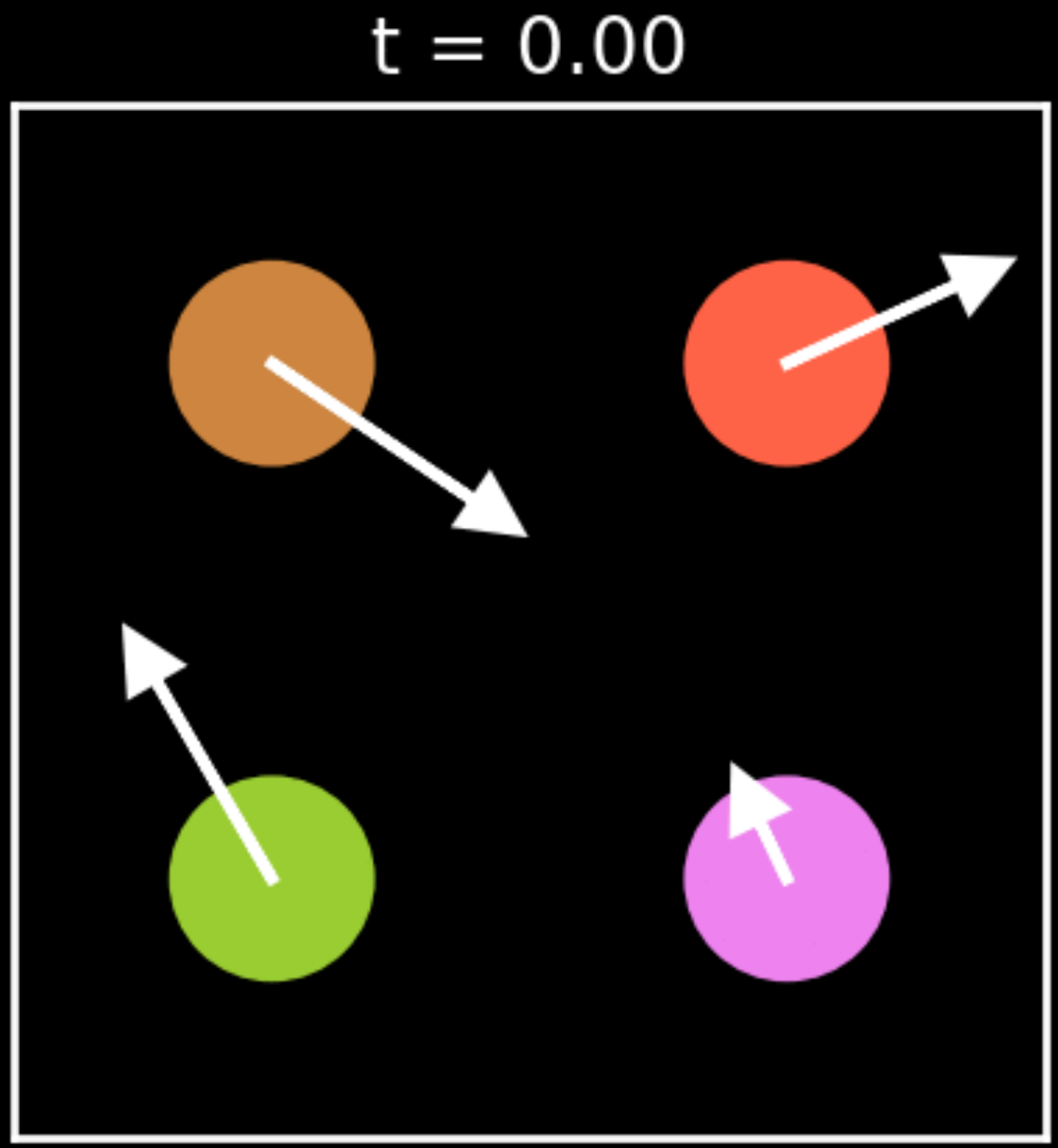
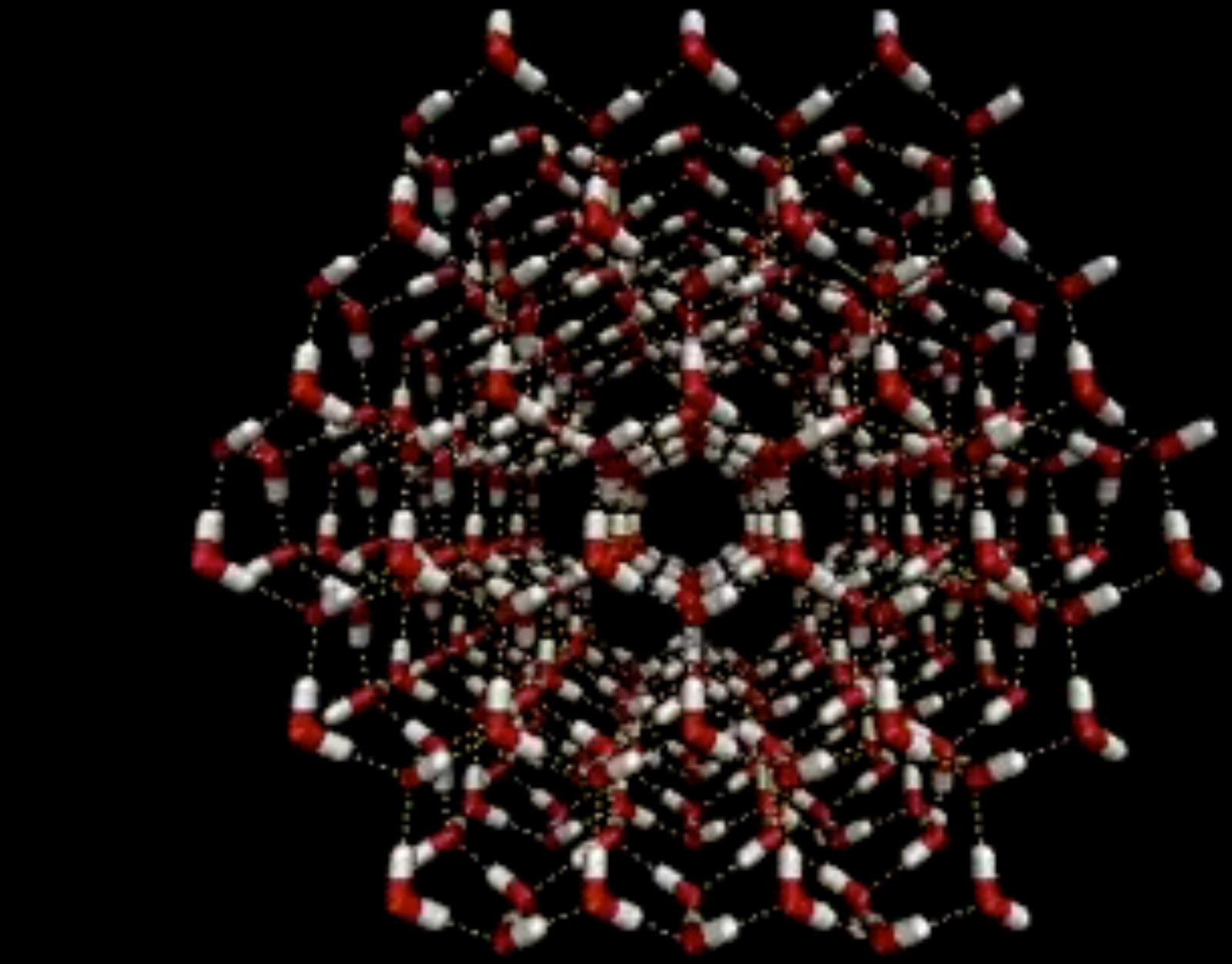
La dynamique moléculaire des disques durs

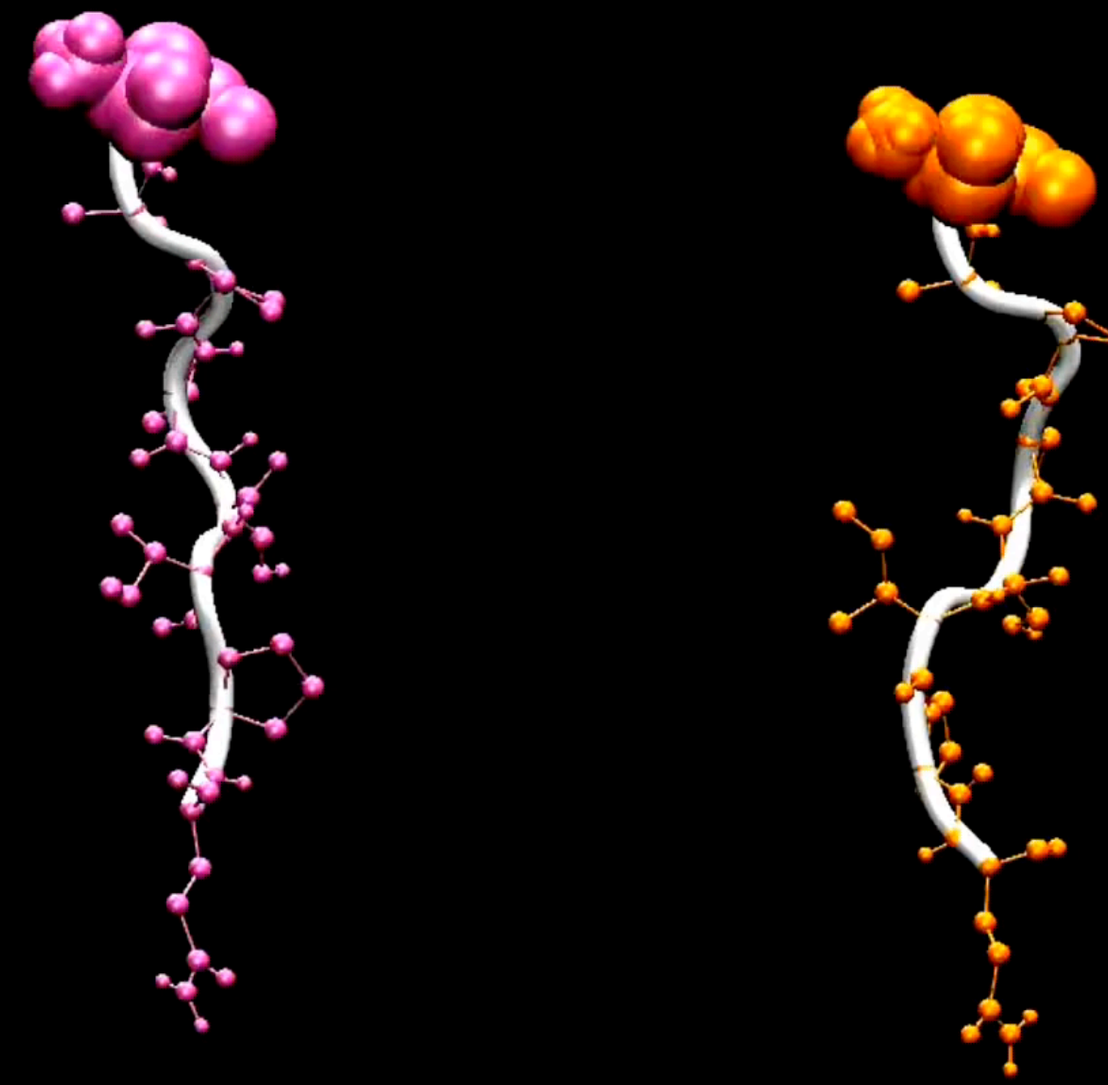


La dynamique moléculaire de la fonte des glaces



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

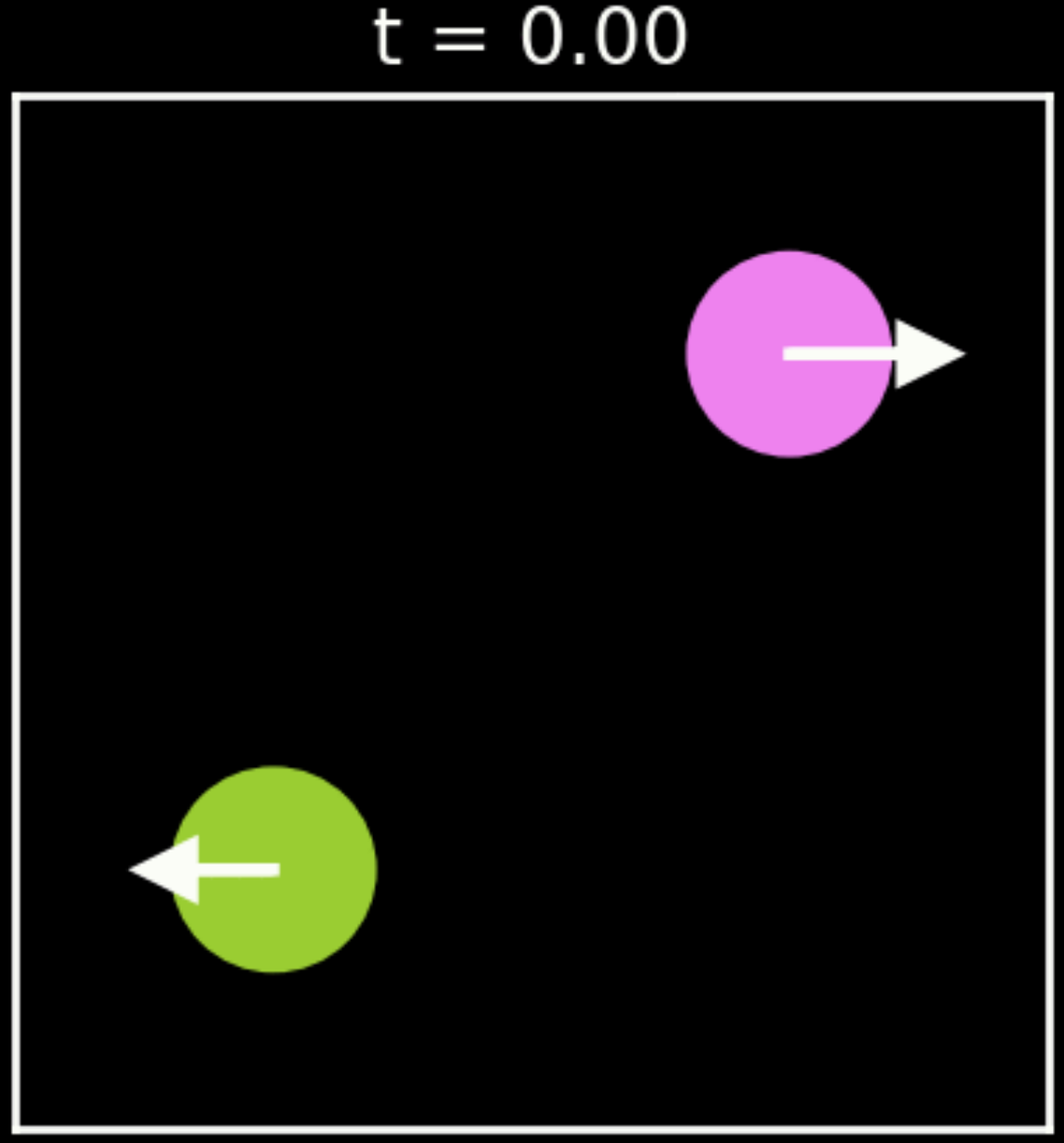
The Washington Post
- Corona simulator -

https://www.washingtonpost.com/graphics/2020/world/corona-simulator/

La dynamique moléculaire des disques durs

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

$$\vec{F} = \sum_{i}^{N} \vec{F}_i = \sum_{i}^{N} \dot{\vec{p}}_i = 0 \quad (2)$$



Entre les collisions :

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

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

Temps de collision :

(1) ⇒

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

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

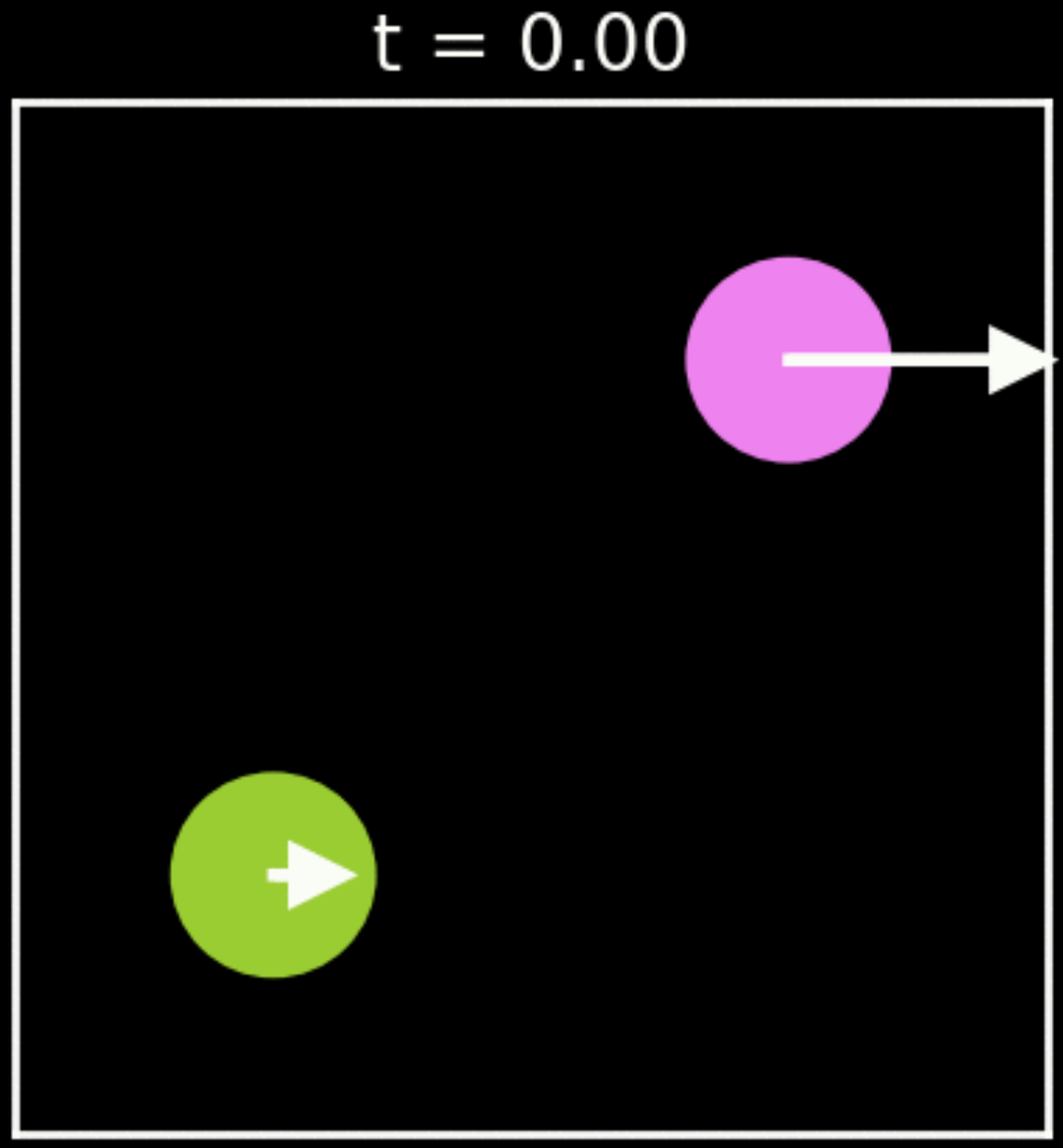
Temps de collision ?

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 !

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

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

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

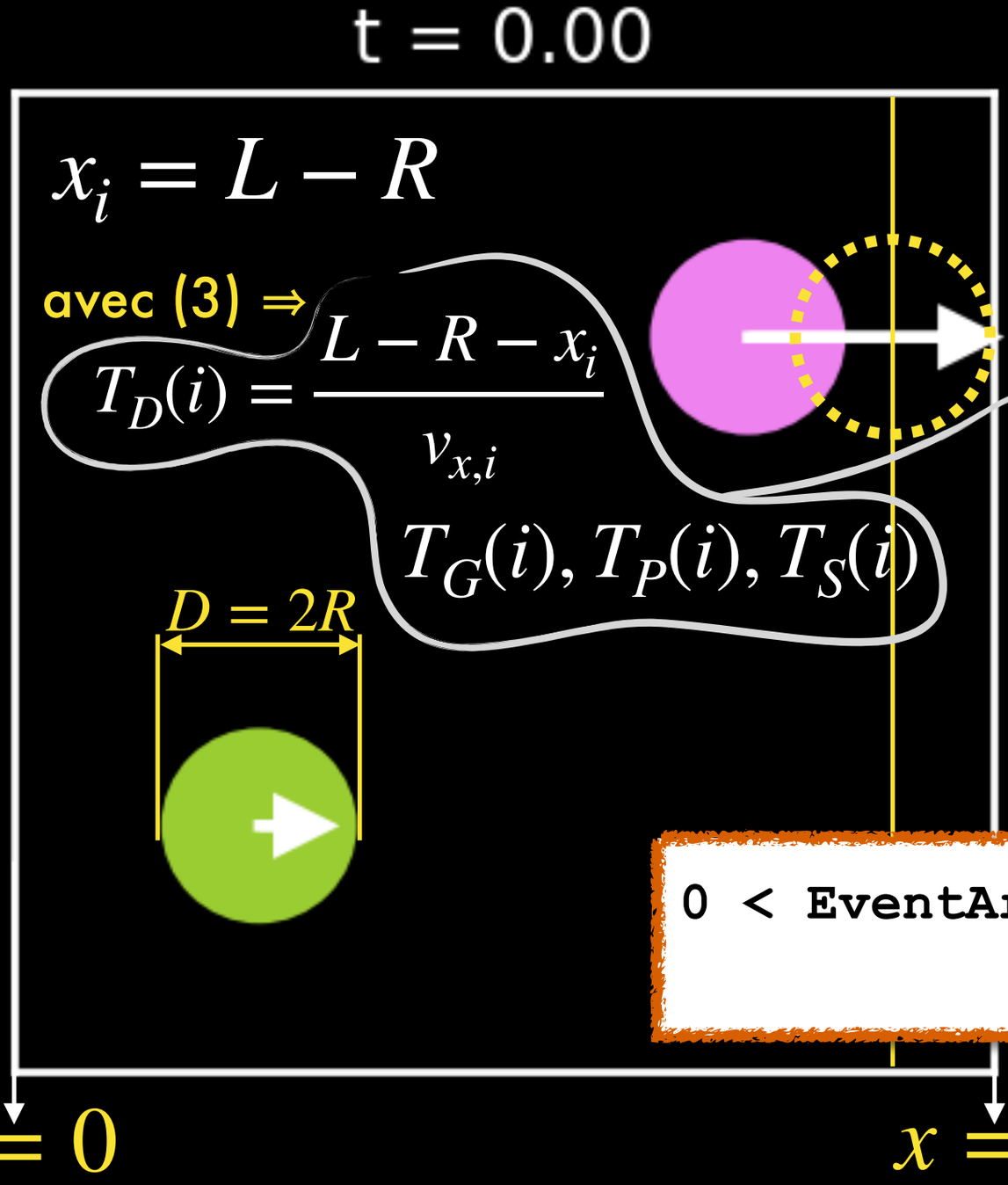
4) Revenez au point 1).

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

Tableau des événements:

```
EventArray = [E_0, …, E_(4N-1)]

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

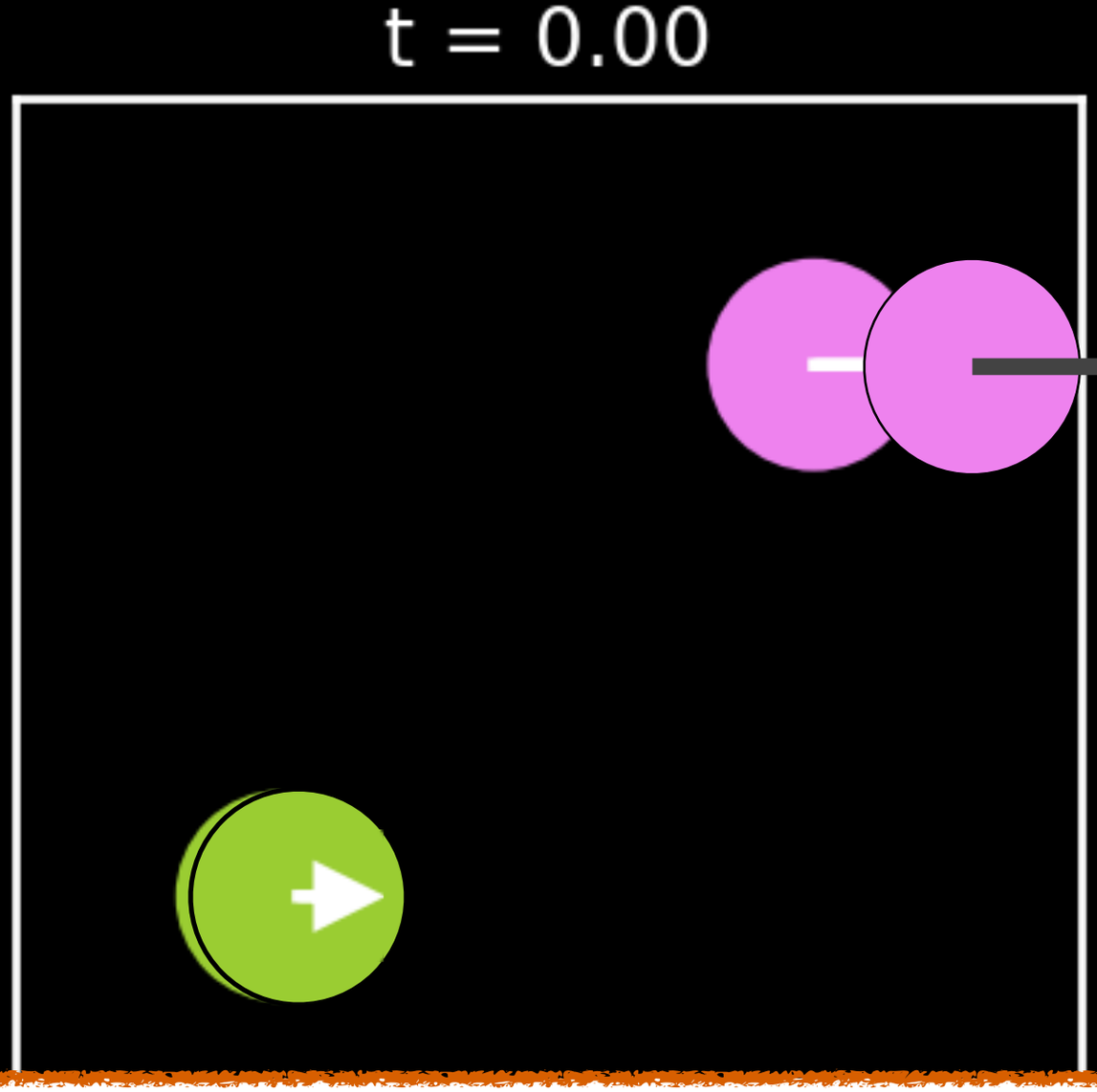
```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time
                NextEvent = k
```

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]
```

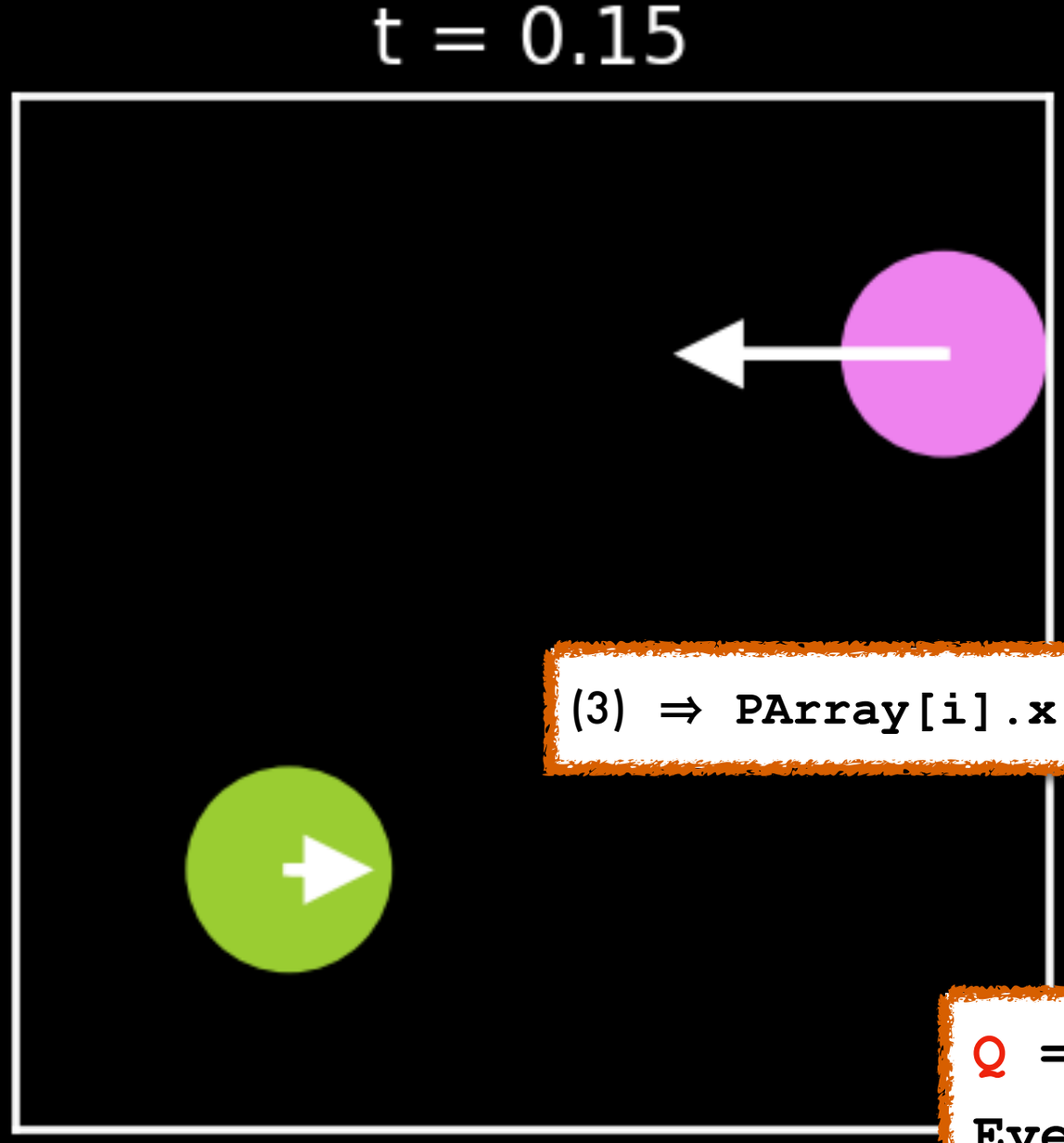
```
(3) ⇒ PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

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
```

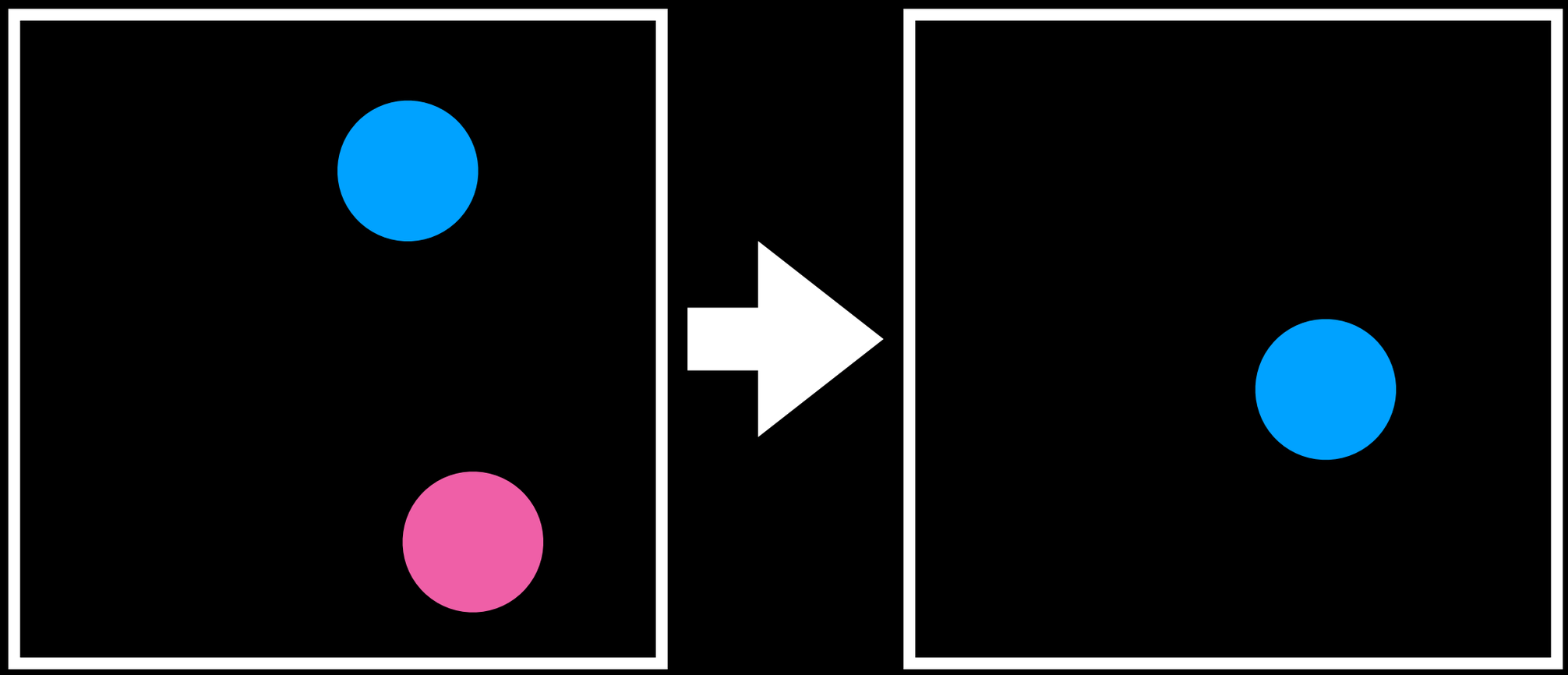
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

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

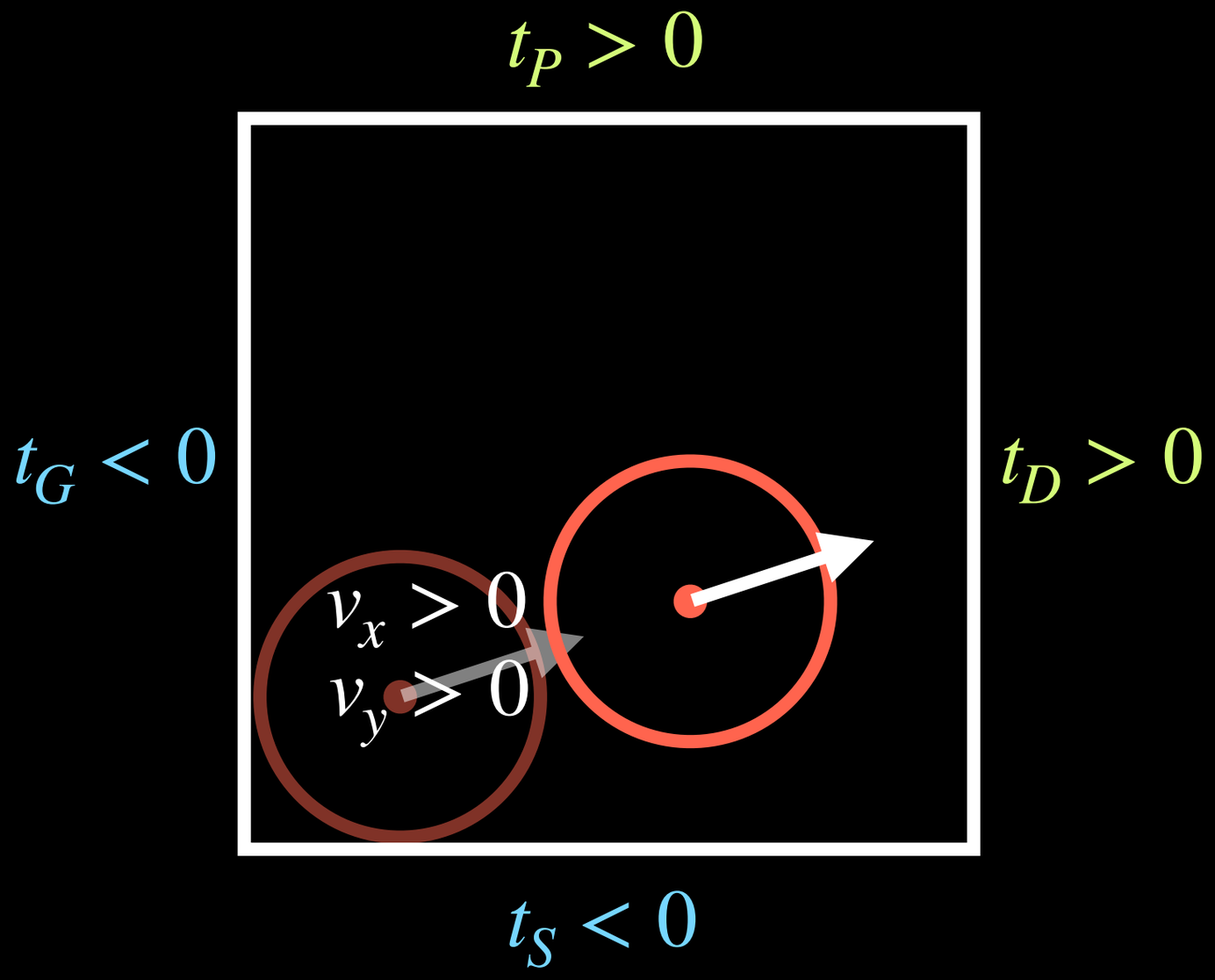
3) Mettrez à jour les vitesses des particules impliquées dans la collision.

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

Piège de précision



Piège de **précision**

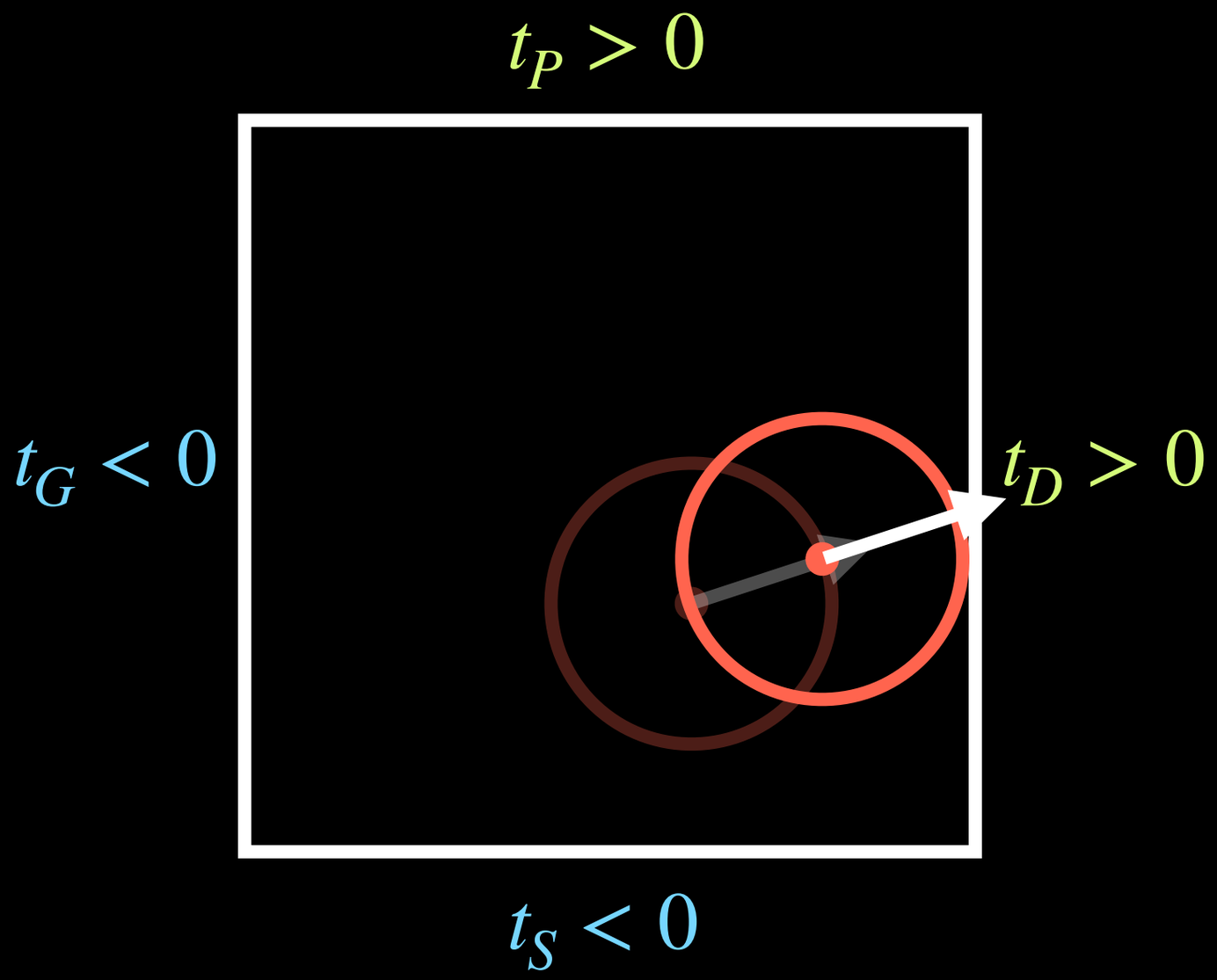


PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de **précision**



PRINCIPE DE BASE

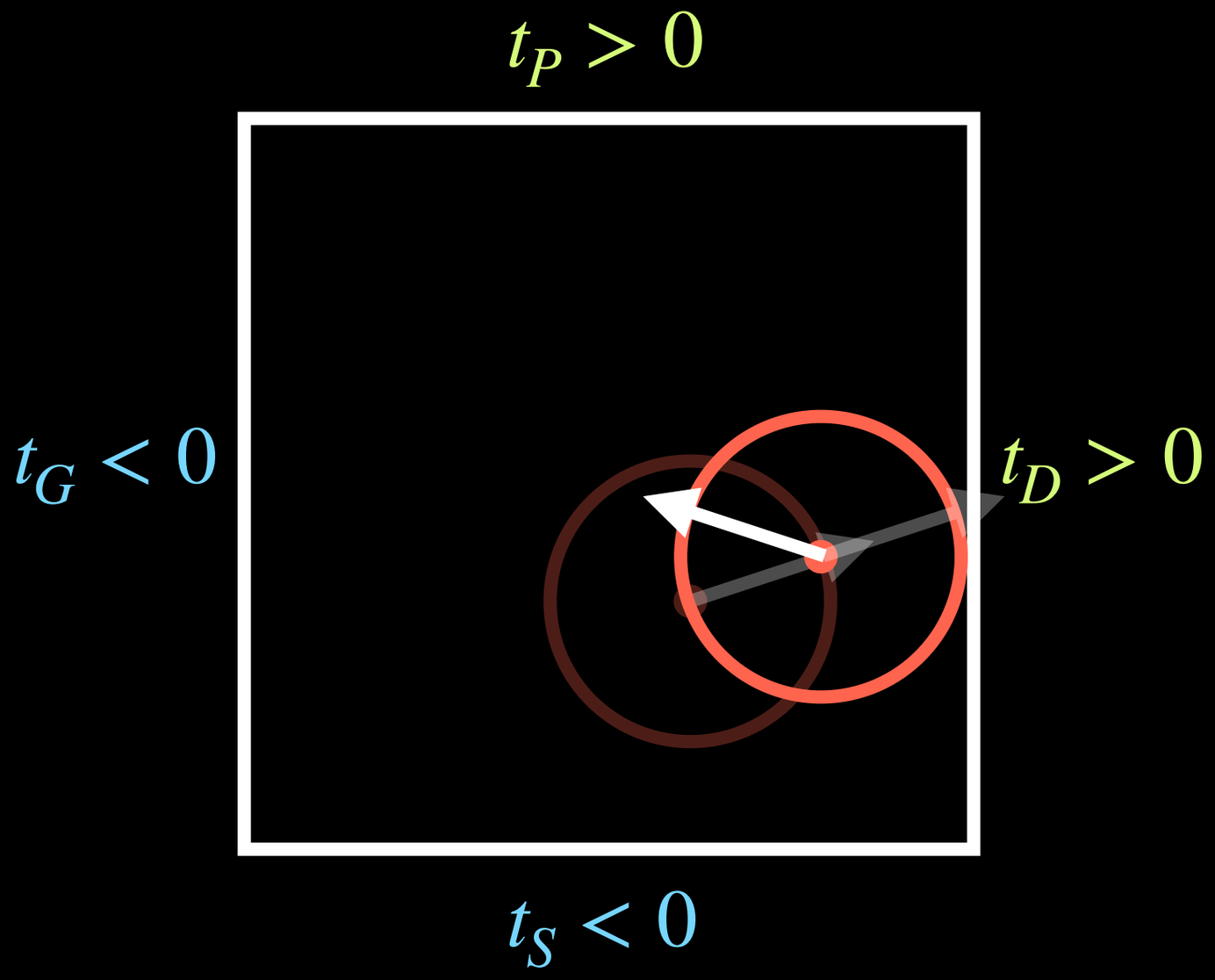
1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

t_c

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

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

Piège de **précision**



PRINCIPE DE BASE

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

t_c

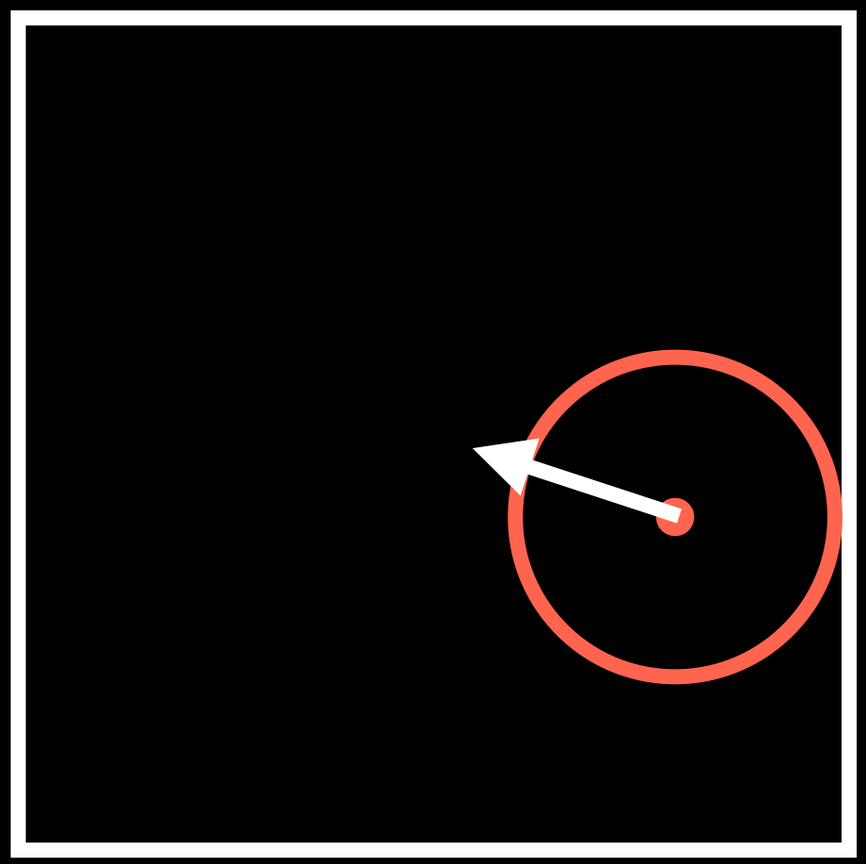
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

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

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

Piège de **précision**

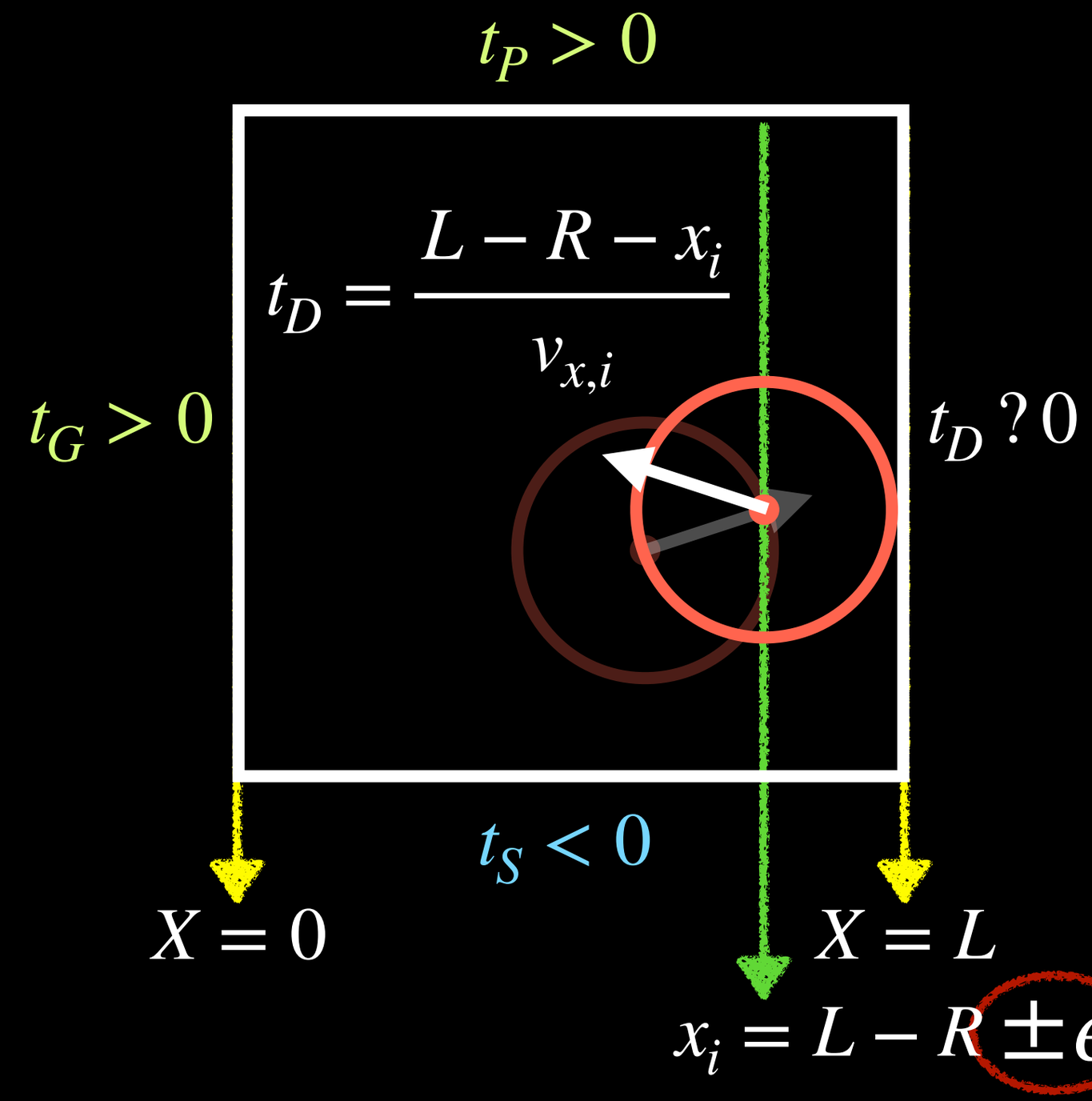


PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de **précision**



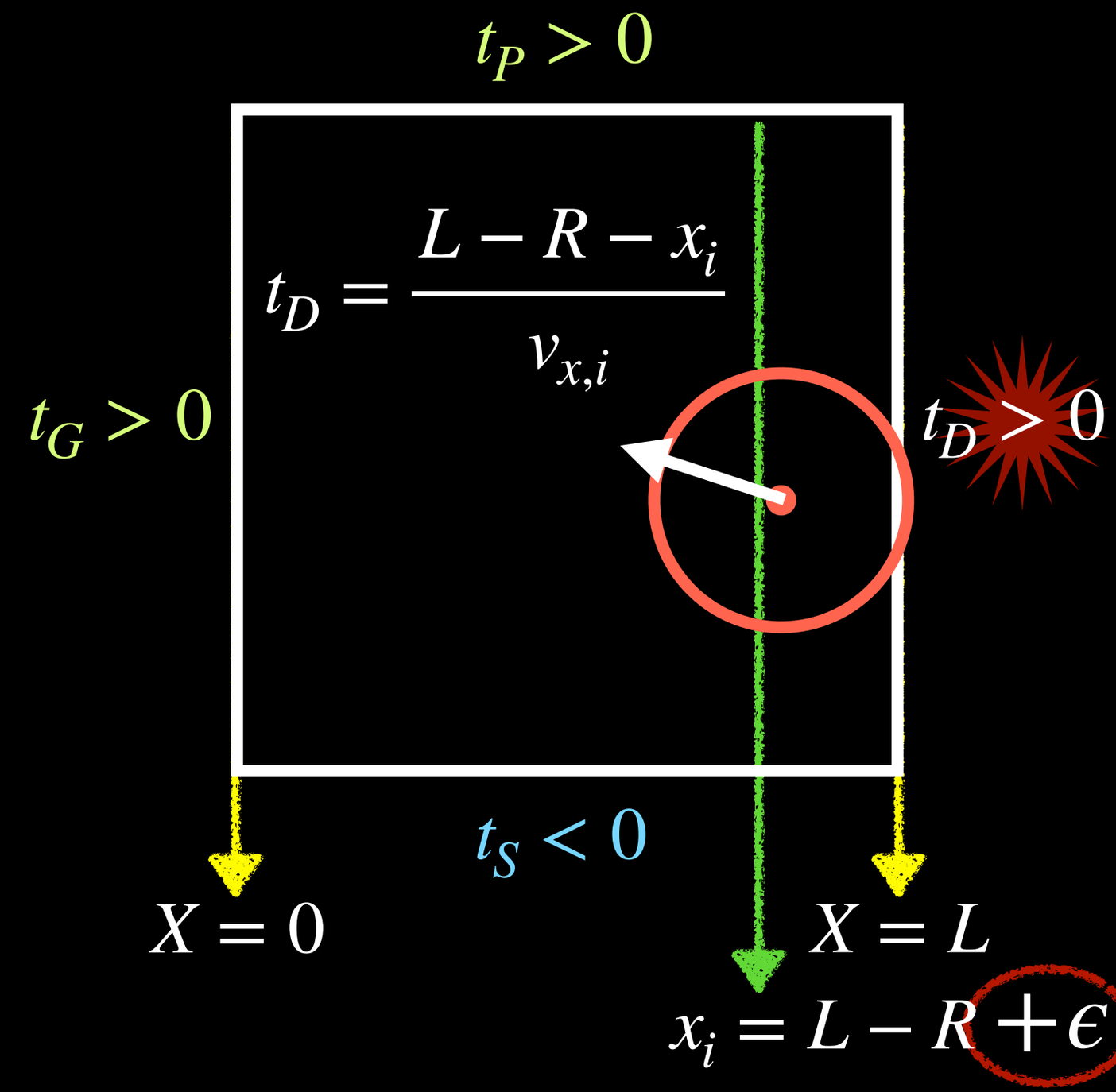
PRINCIPE DE BASE

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

t_c

$x_i = L - R \pm \epsilon \quad , \epsilon \geq 0$

Piège de **précision**



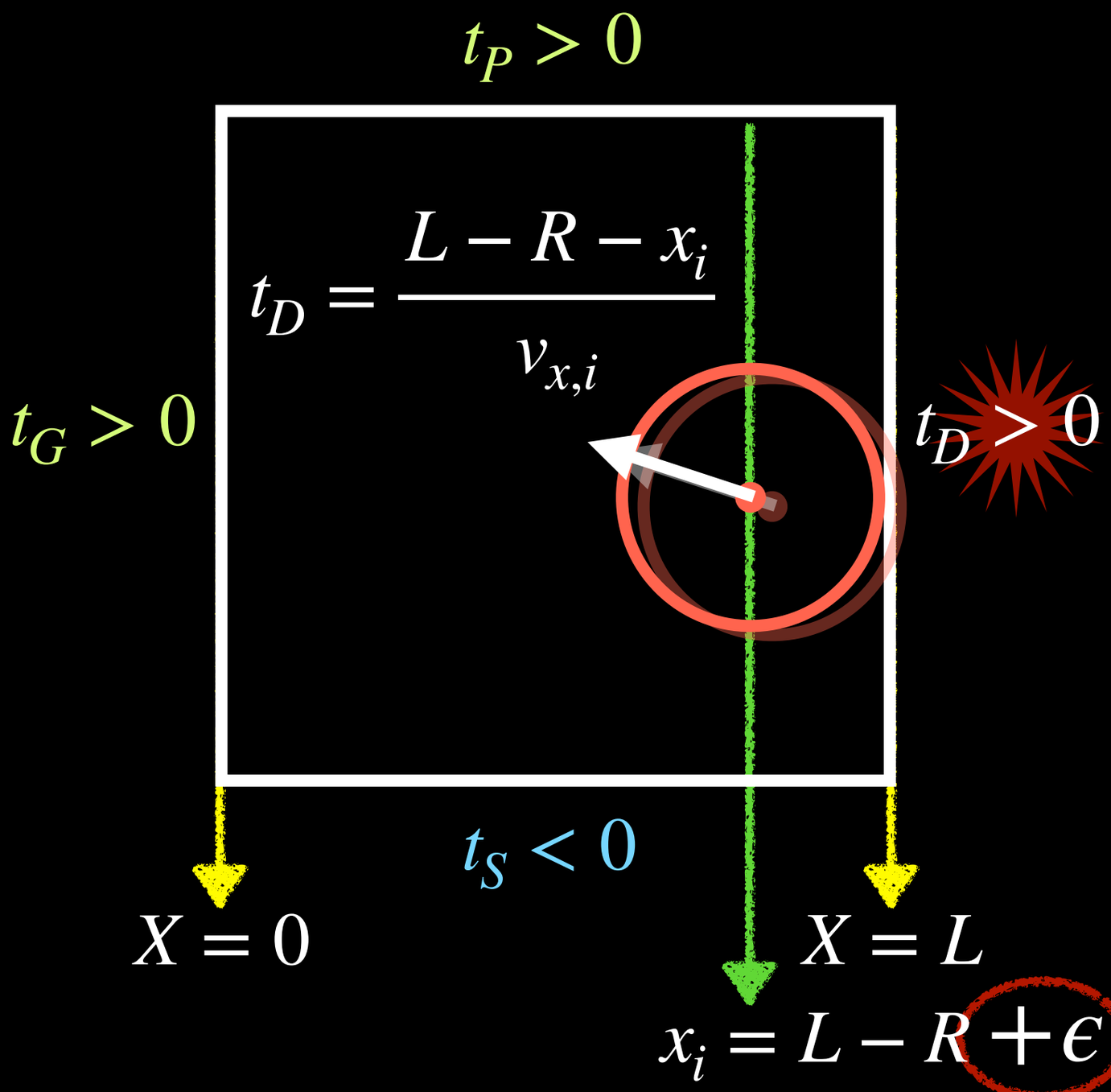
$x_i = L - R + \epsilon \quad , \epsilon \geq 0$

PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de **précision**



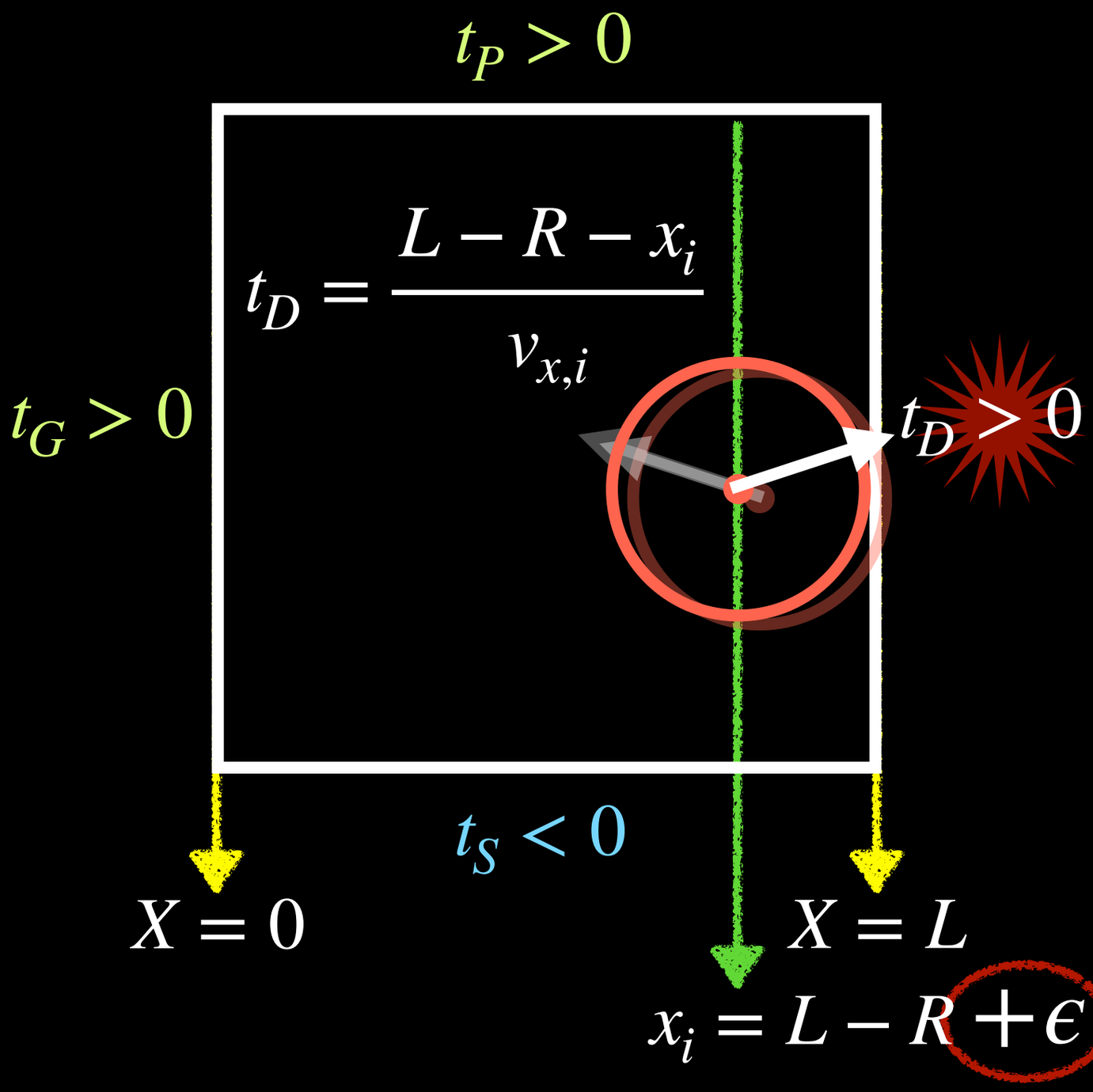
PRINCIPE DE BASE

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

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

$x_i \rightarrow x_i(t_c)$

Piège de **précision**



PRINCIPE DE BASE

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

t_c

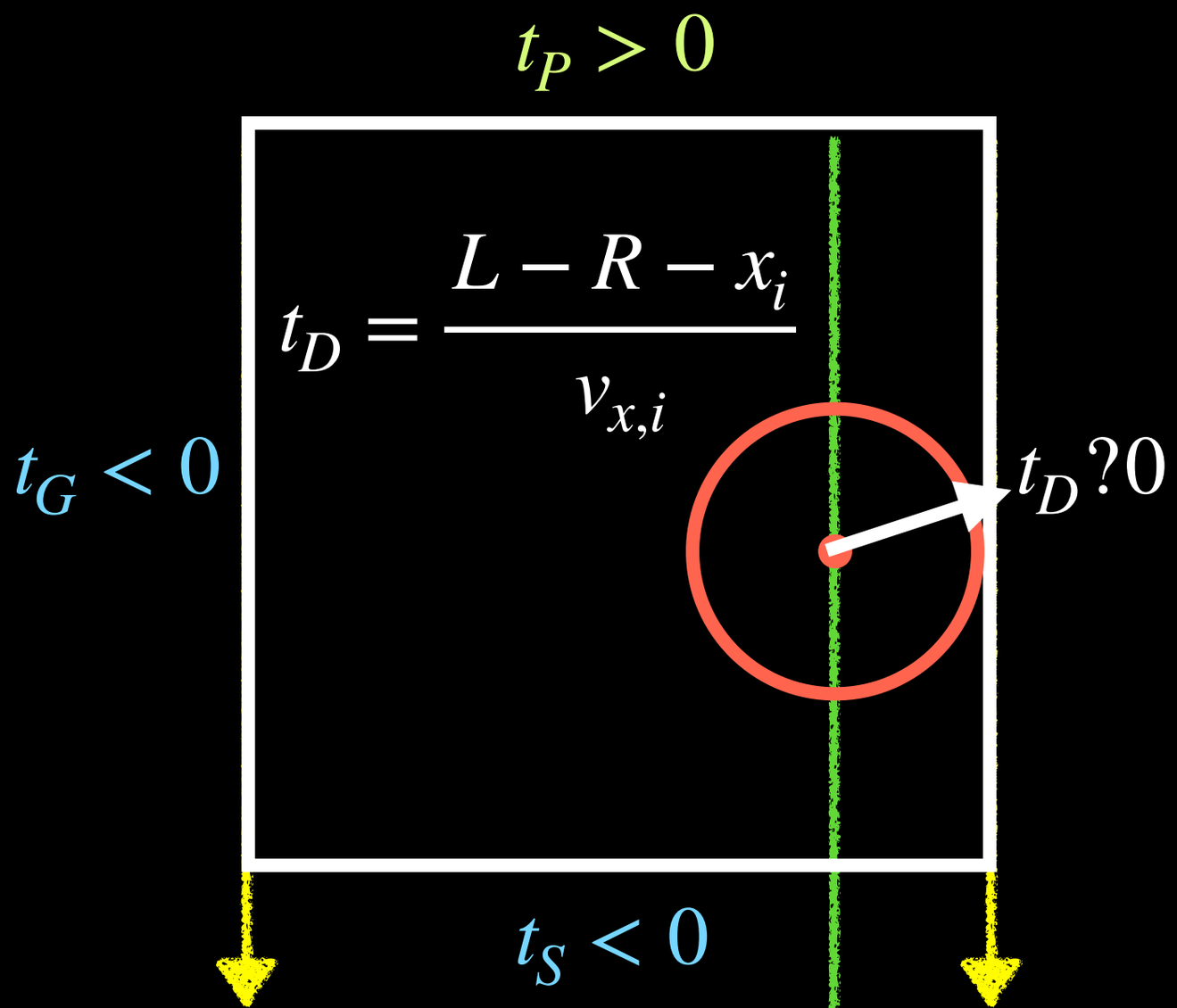
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

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

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

Piège de **précision**



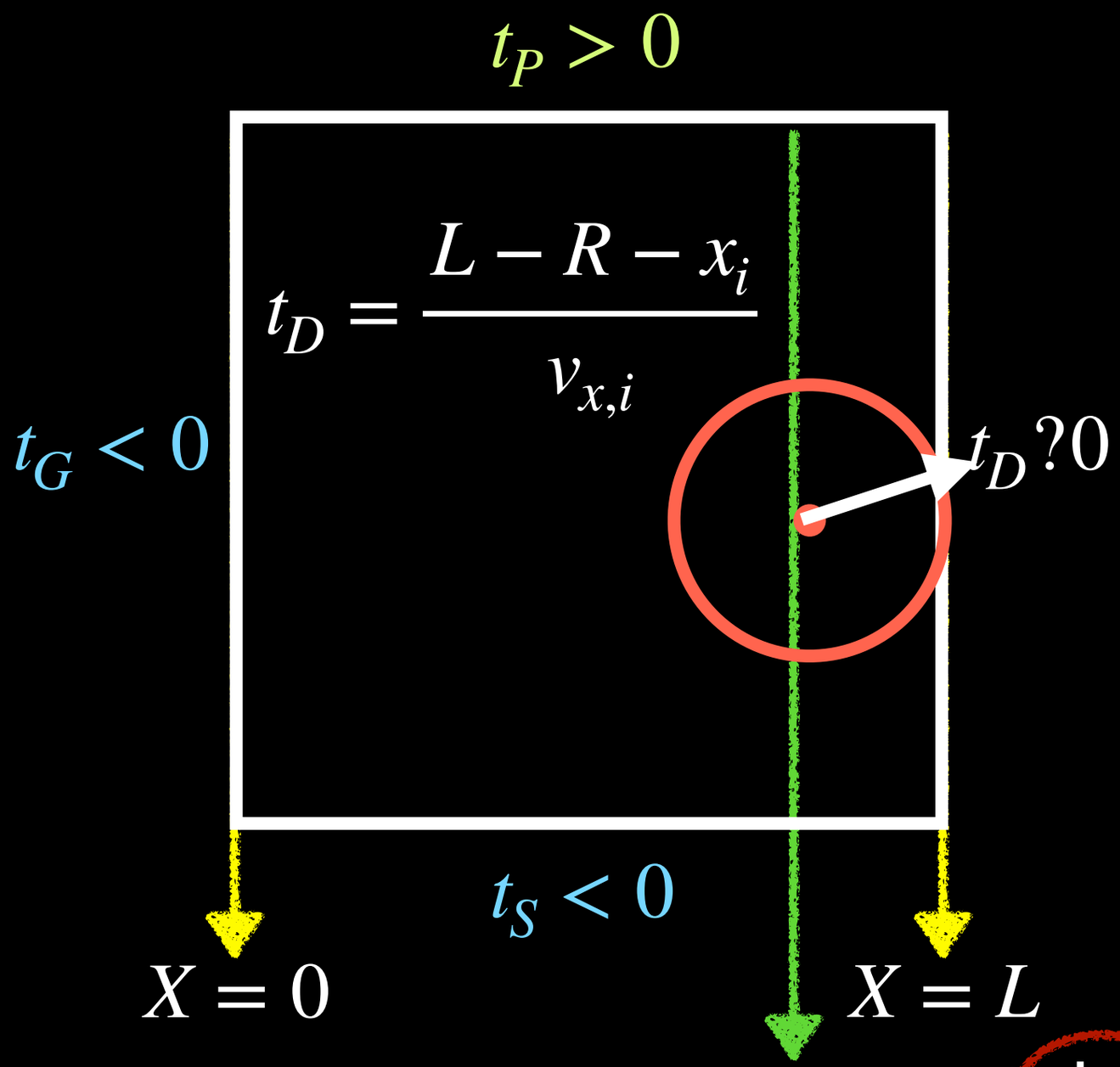
$x_i = L - R \pm \epsilon \quad , \epsilon \geq 0$

PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de précision

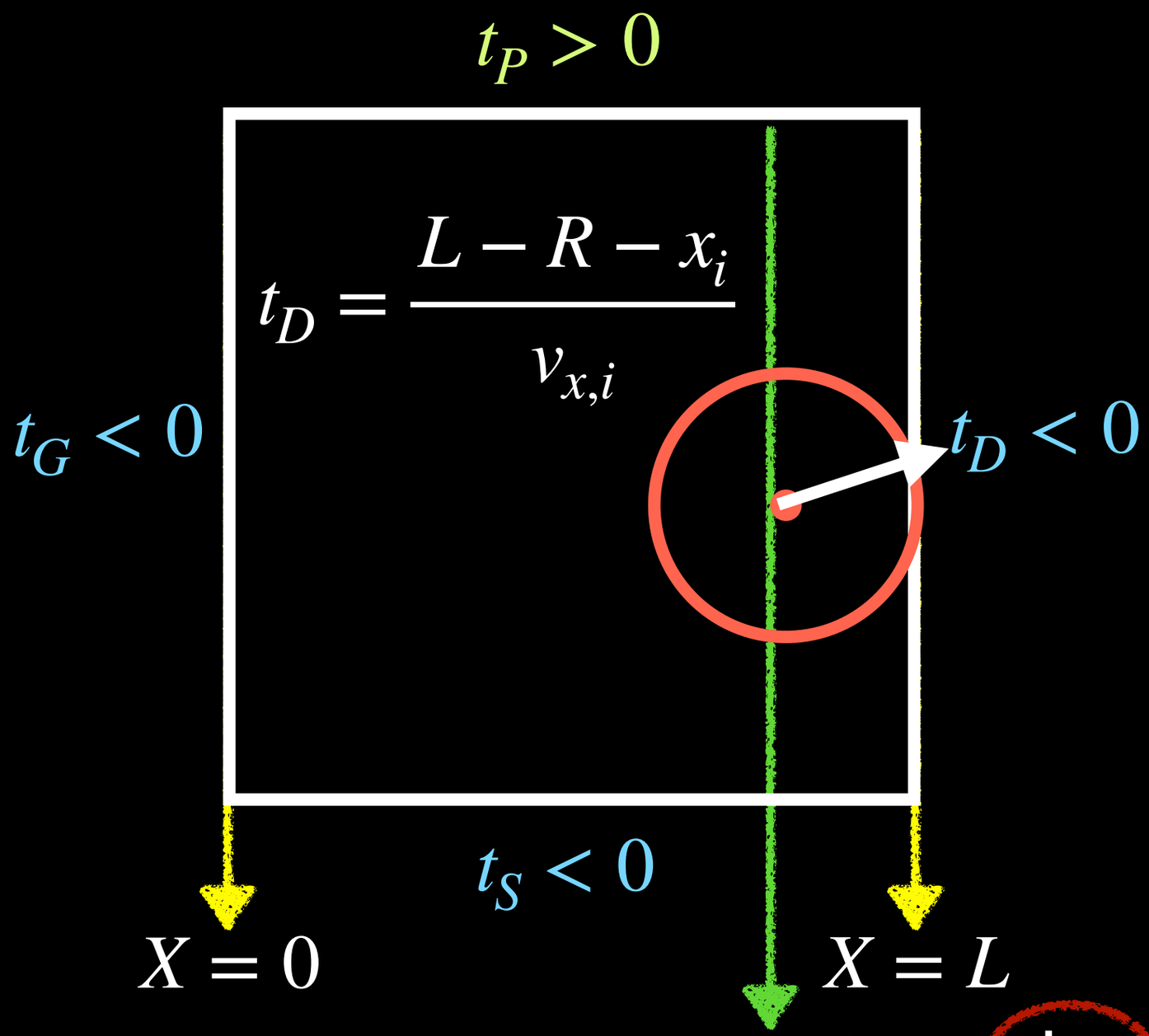


PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de précision

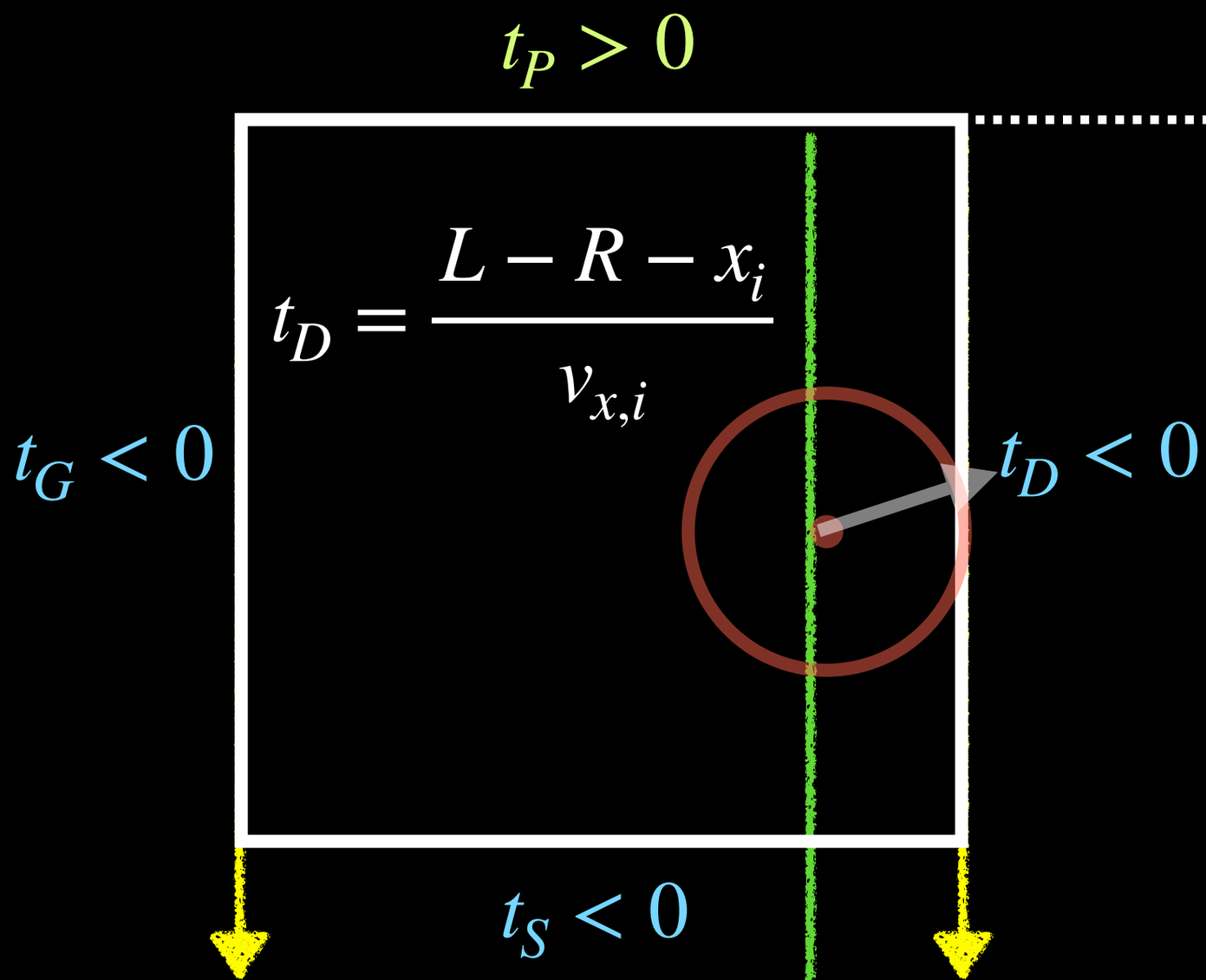


PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de précision



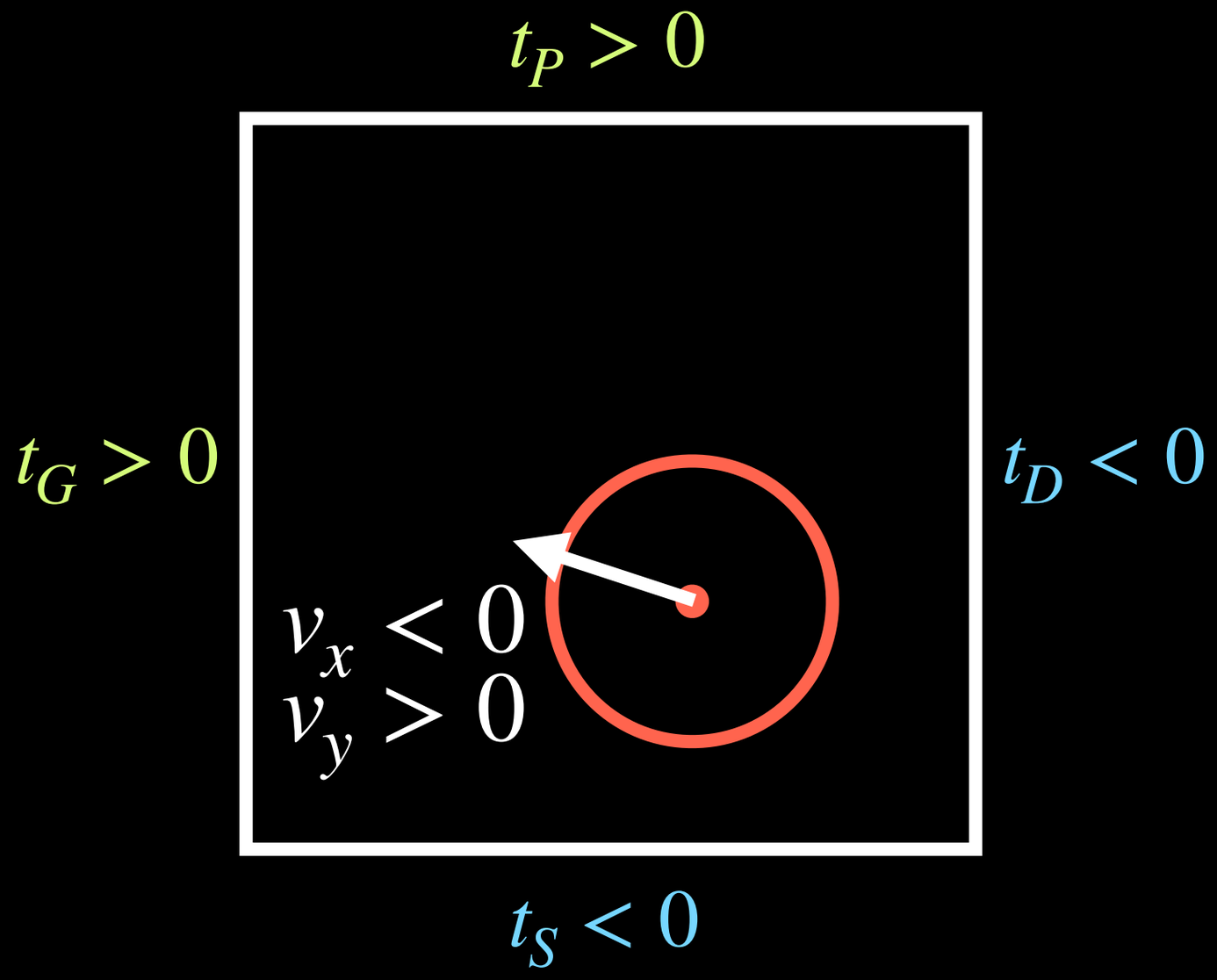
PRINCIPE DE BASE

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

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

$x_i \rightarrow x_i(t_c)$

Piège de **précision**

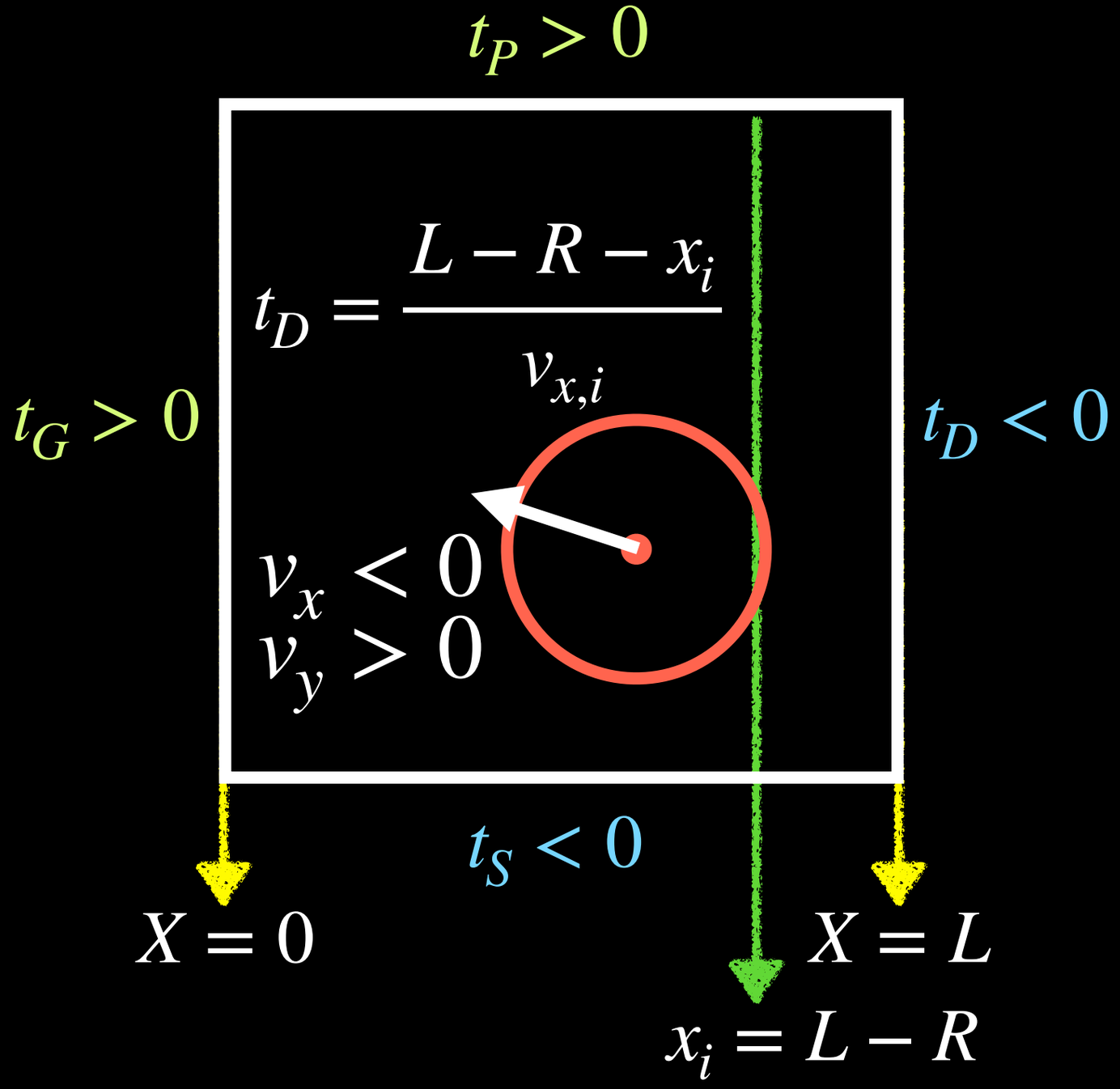


PRINCIPE DE BASE

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

t_c

Piège de **précision**



PRINCIPE DE BASE

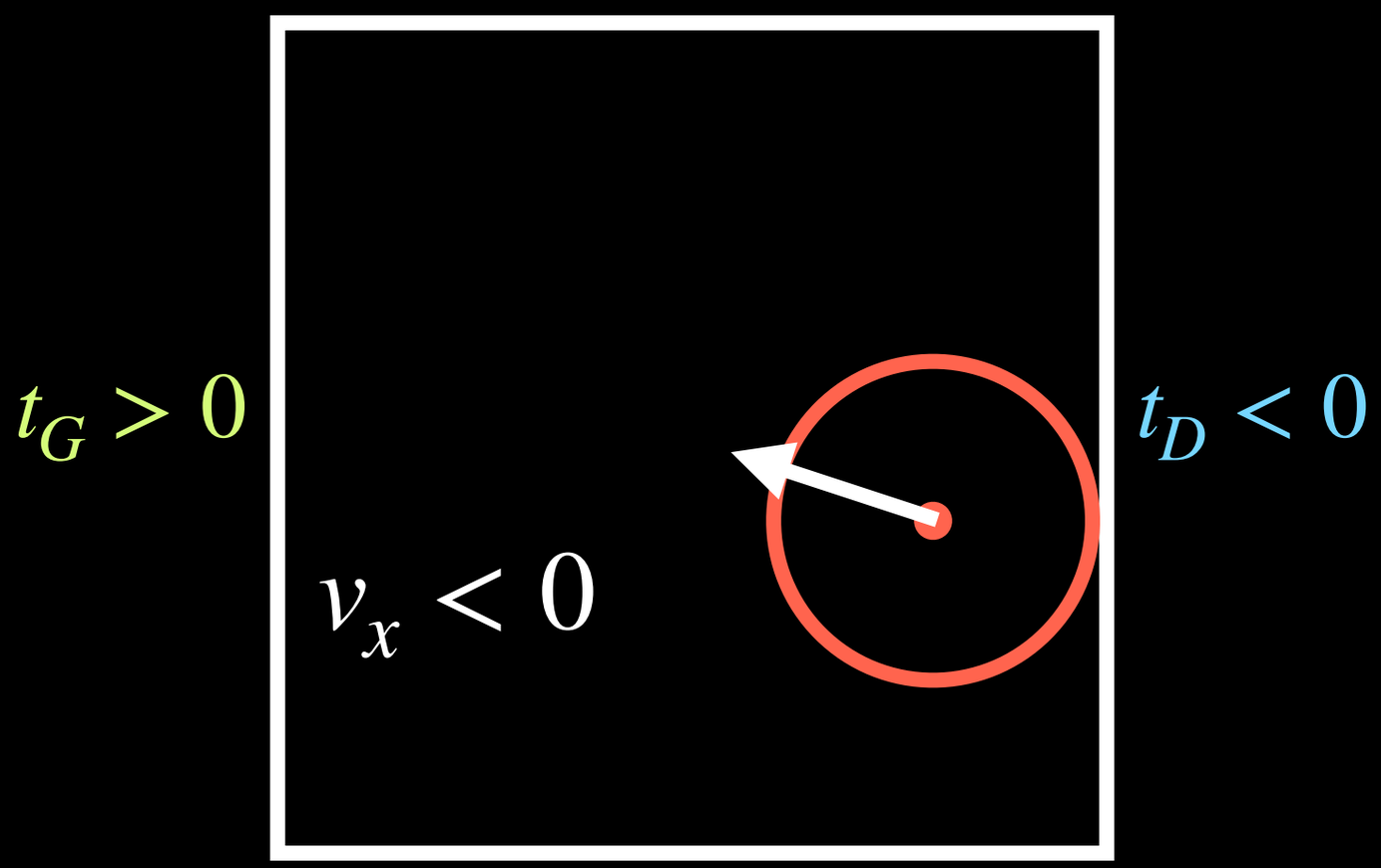
1) Trouvez la collision la plus proche dans le futur !

t_c

Piège de **précision**

<u>PRINCIPE DE BASE</u>

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

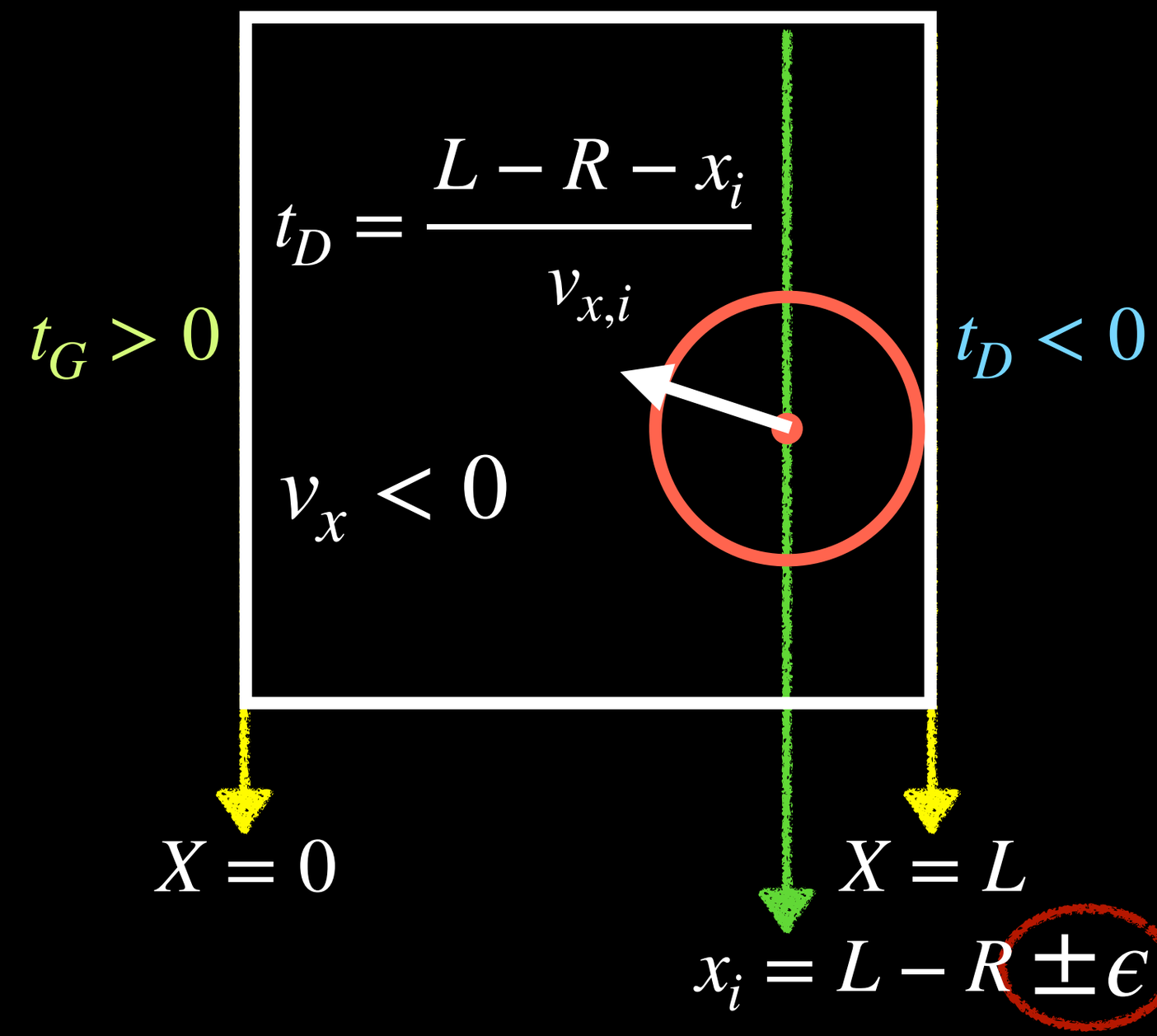


Piège de **précision**

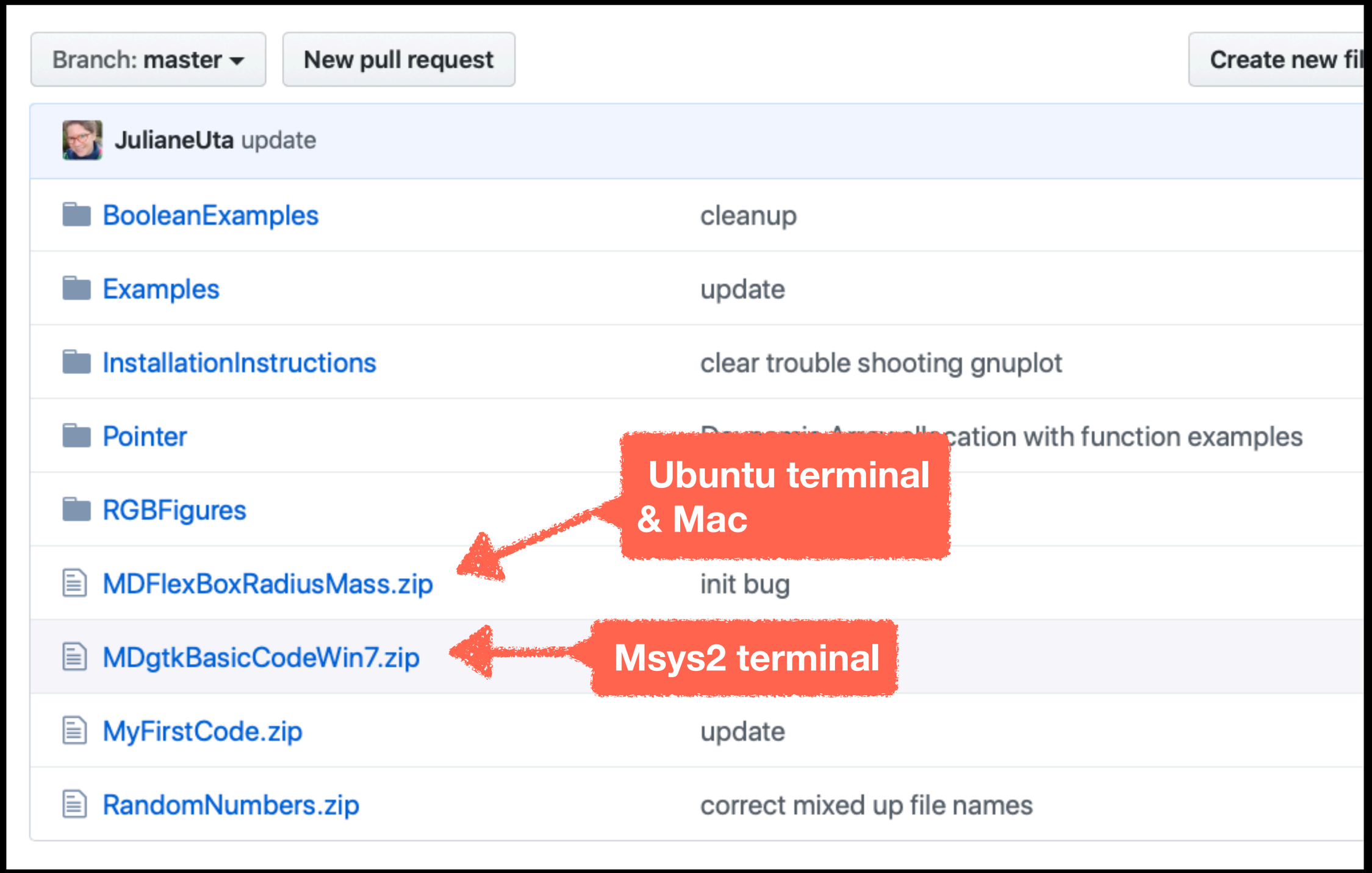
<u>PRINCIPE DE BASE</u>

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

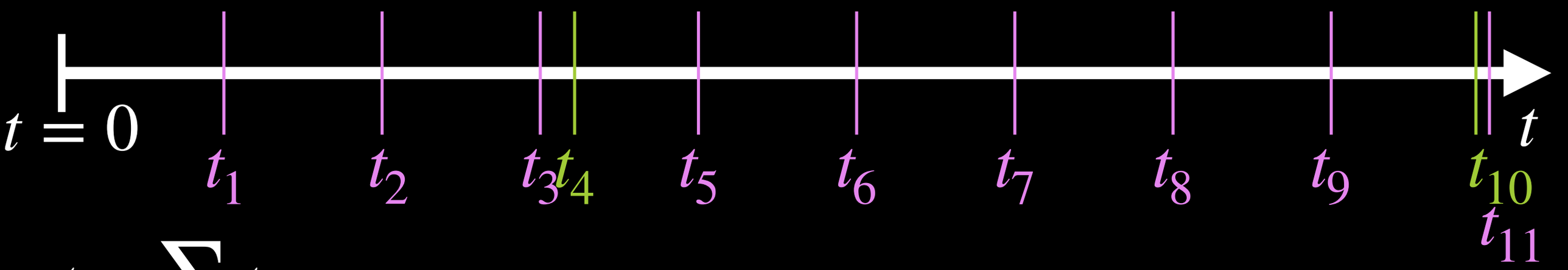
t_c



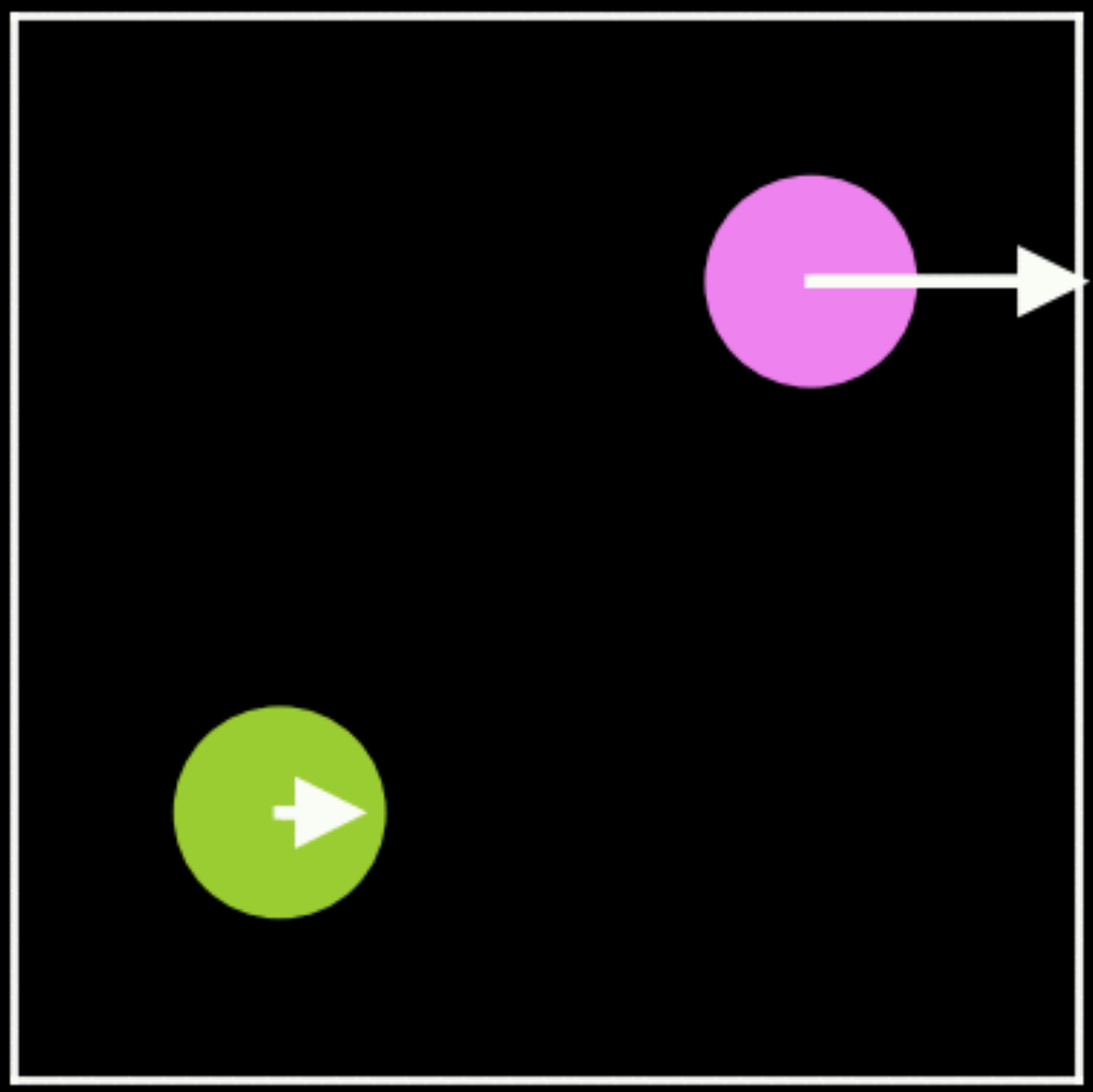
https://github.com/JulianeUta/TP_Programmation2020_ForStudents



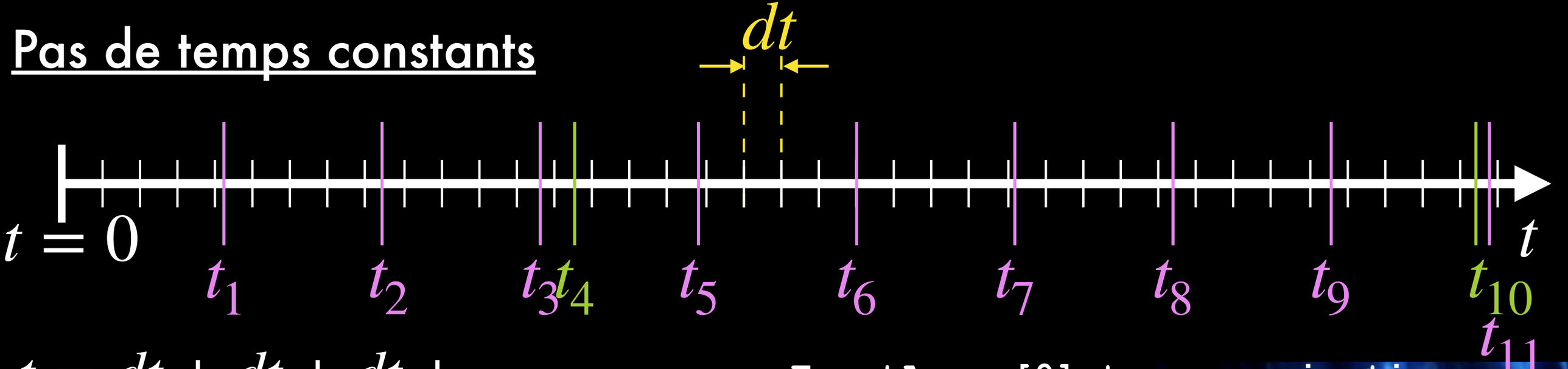
Pas de temps constants



$$t = \sum t_n$$

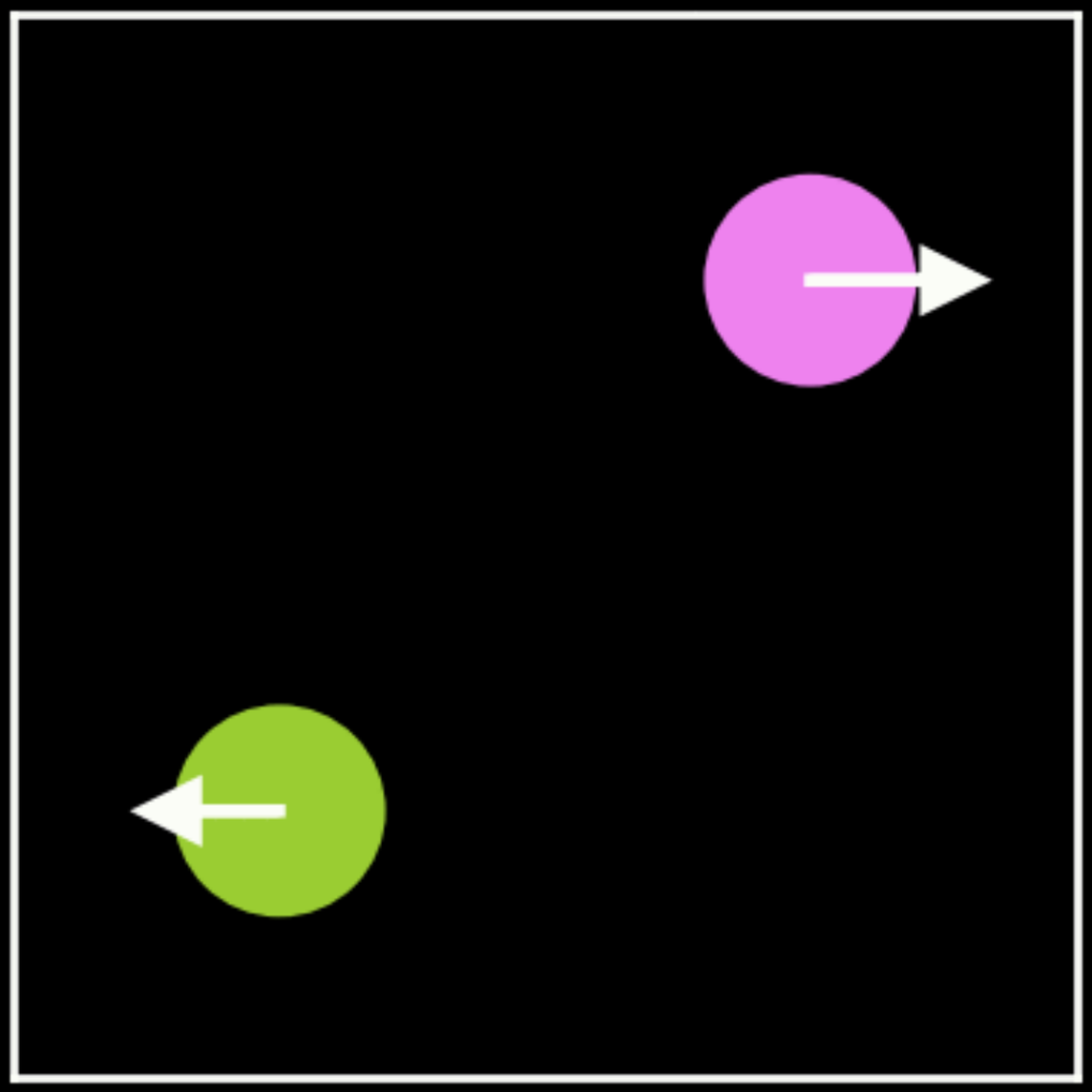


Pas de temps constants

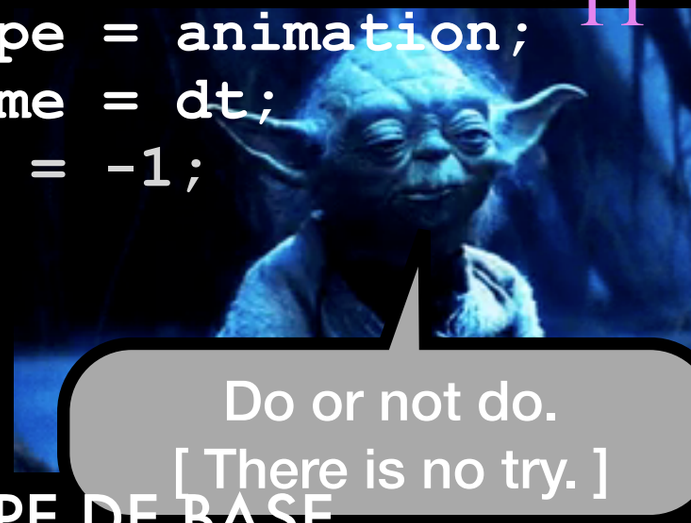


$t = dt + dt + dt + \ldots$

t = 0.00



```
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 = ?
```