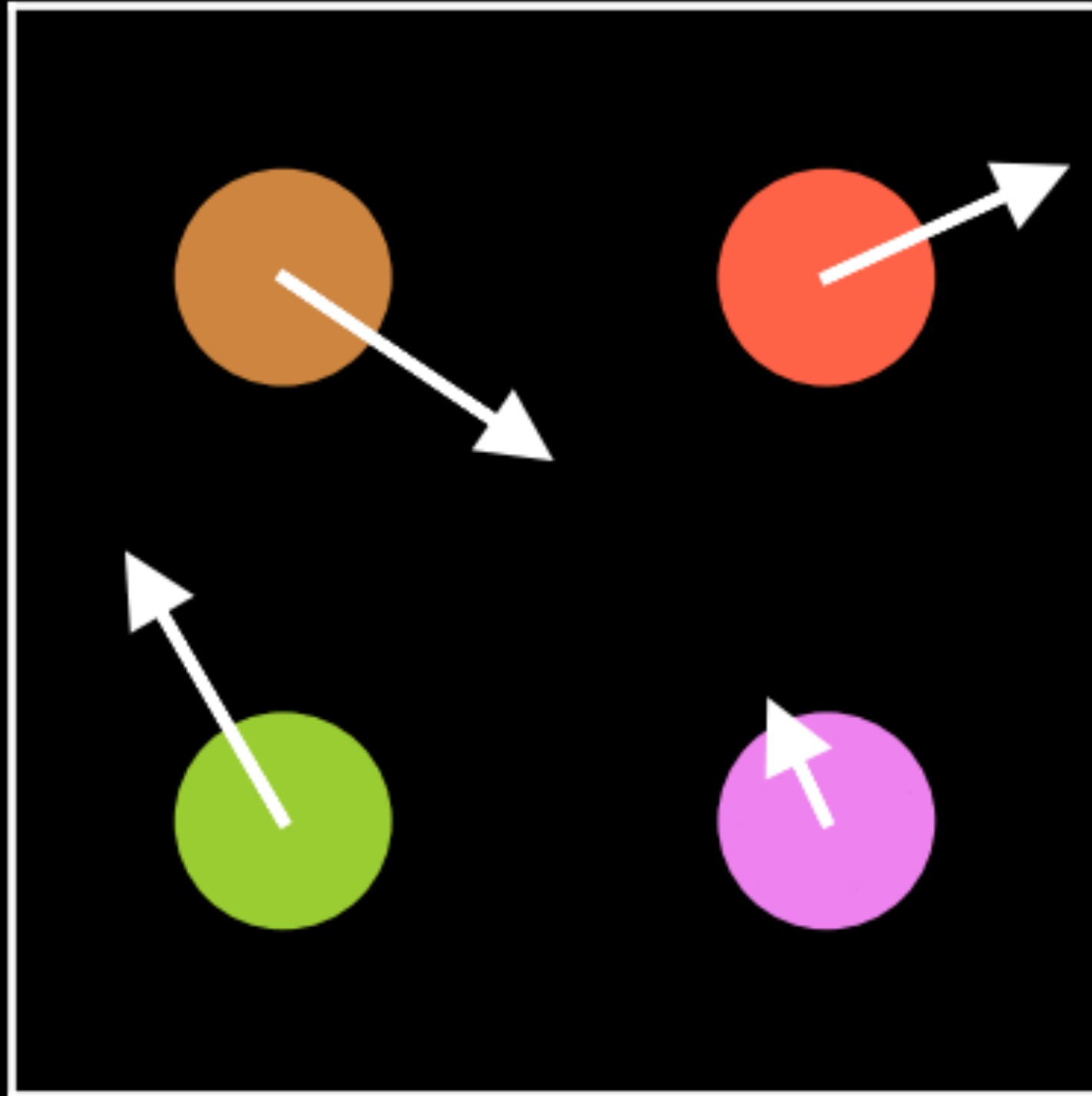
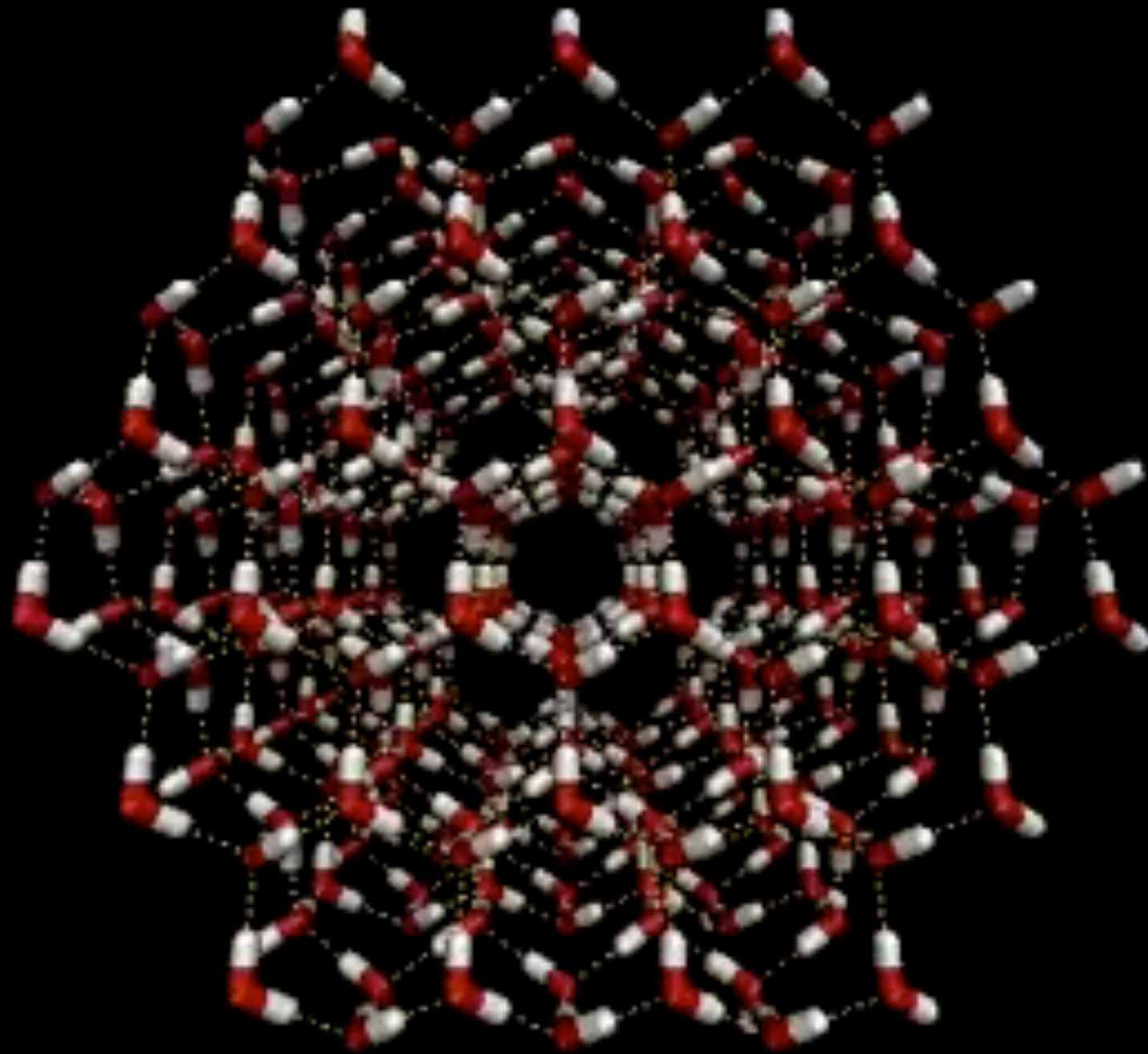


La dynamique moléculaire des disques durs

$t = 0.00$

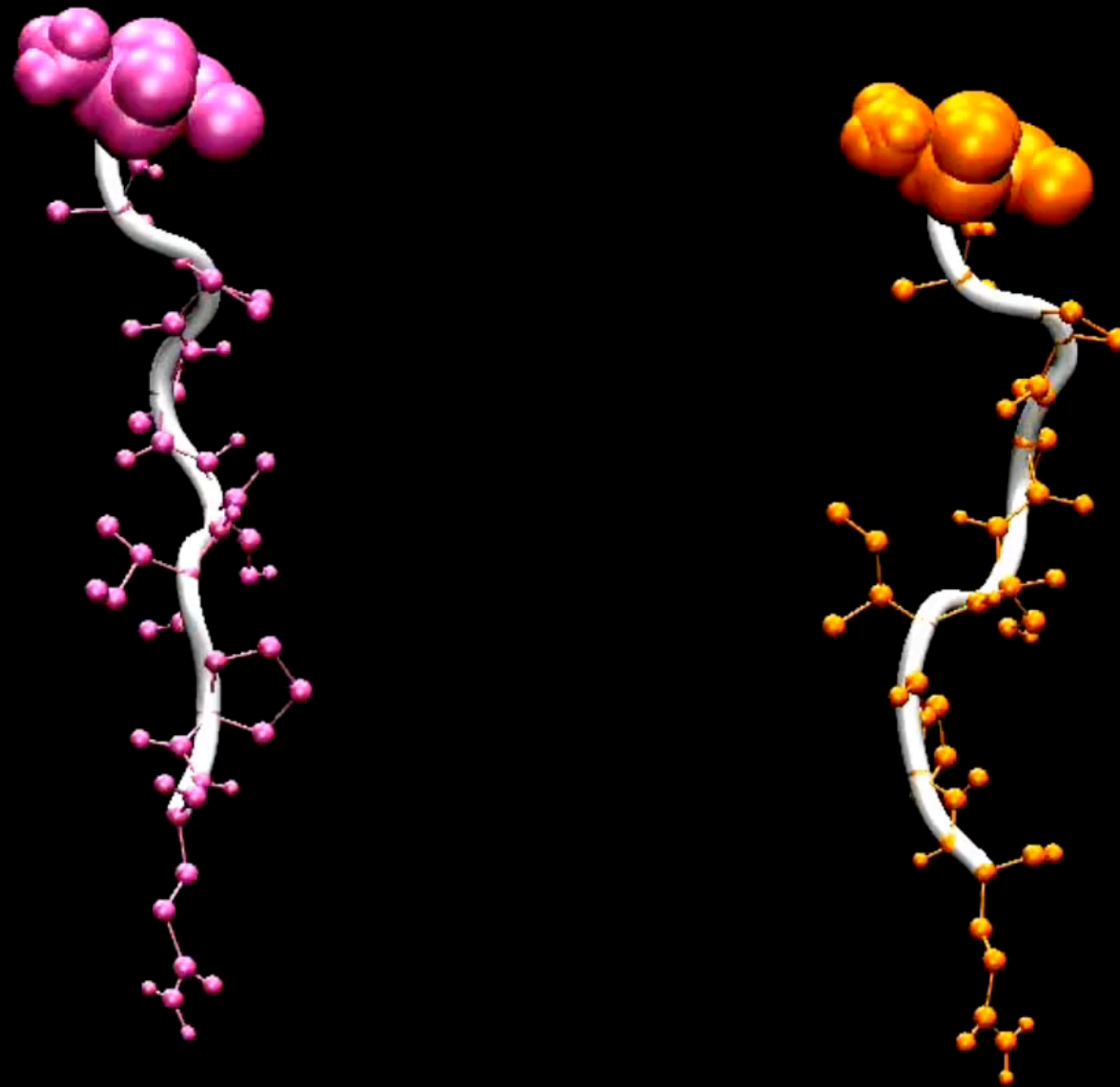


La dynamique moléculaire de la fonte des glaces



10 Å

La dynamique moléculaire: self assembling Peptide



The Washington Post

- Corona simulator -

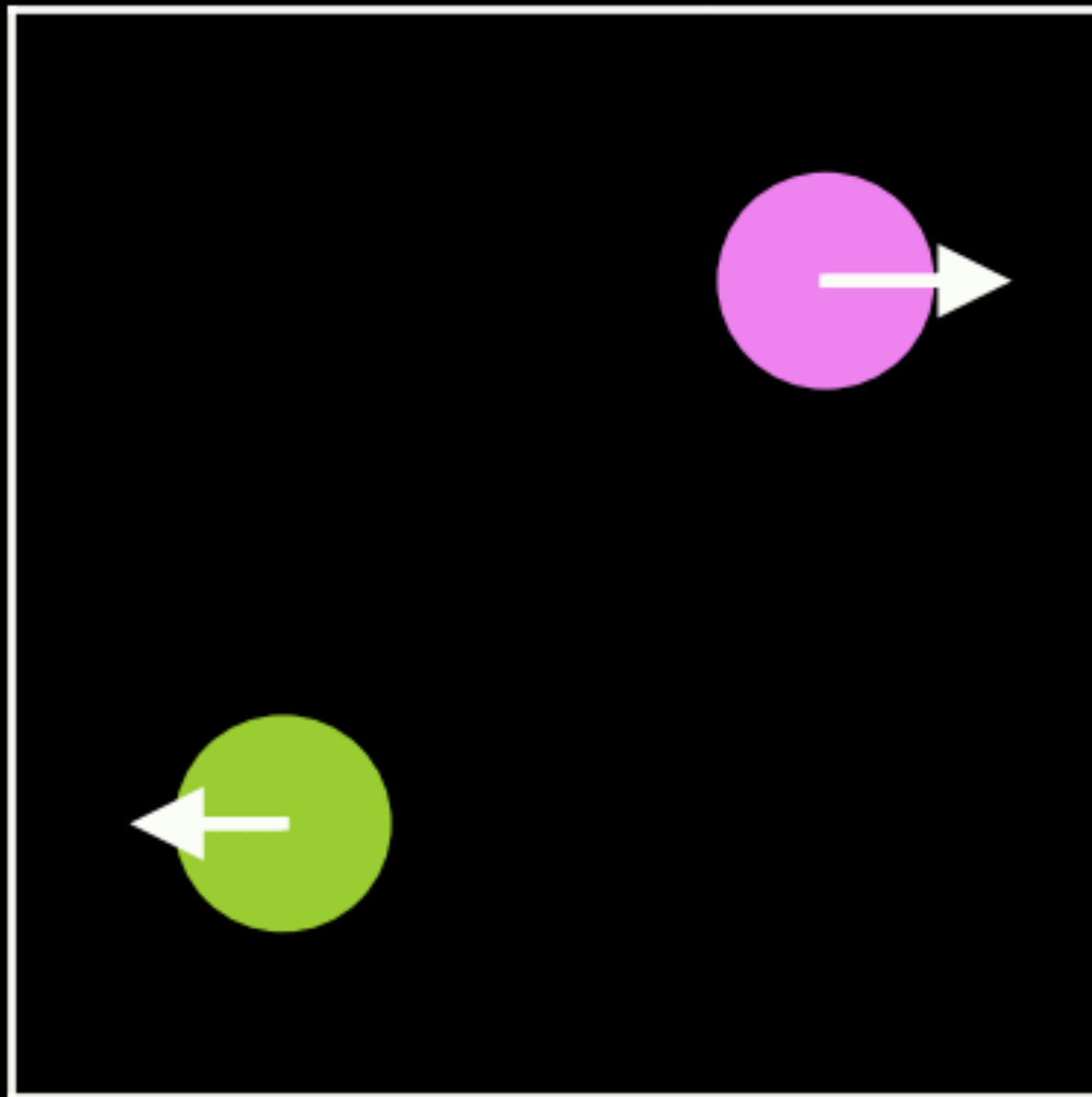
[https://www.washingtonpost.com/
graphics/2020/world/corona-simulator/](https://www.washingtonpost.com/graphics/2020/world/corona-simulator/)

La dynamique moléculaire des disques durs

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

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

t = 0.00



Entre les collisions :

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

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

Temps de collision :

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

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

Temps de collision ?

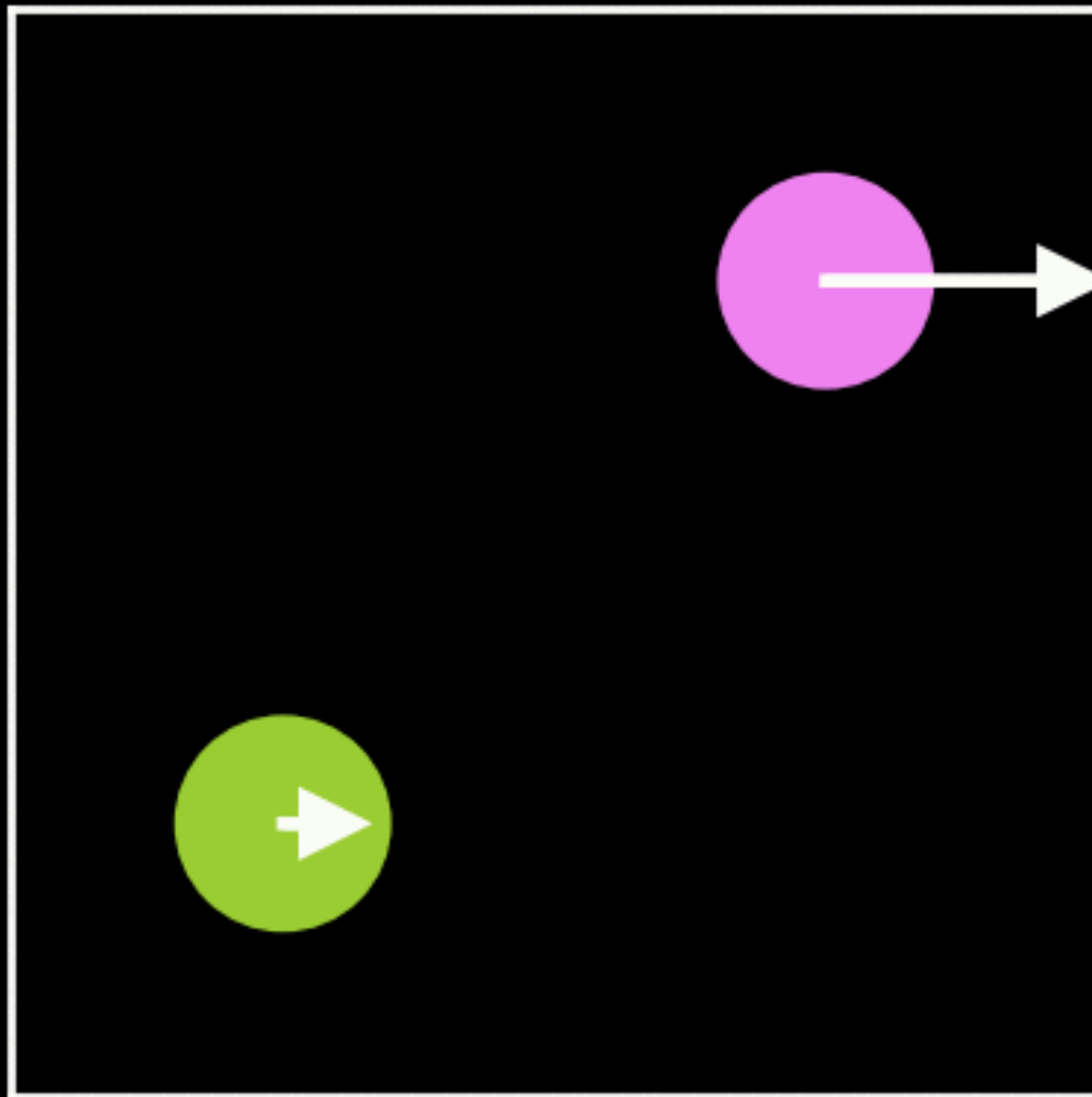
La dynamique moléculaire des disques durs

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

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

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

t = 0.00



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) Mettez 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

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

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

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

$t = 0.00$

PRINCIPE DE BASE

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

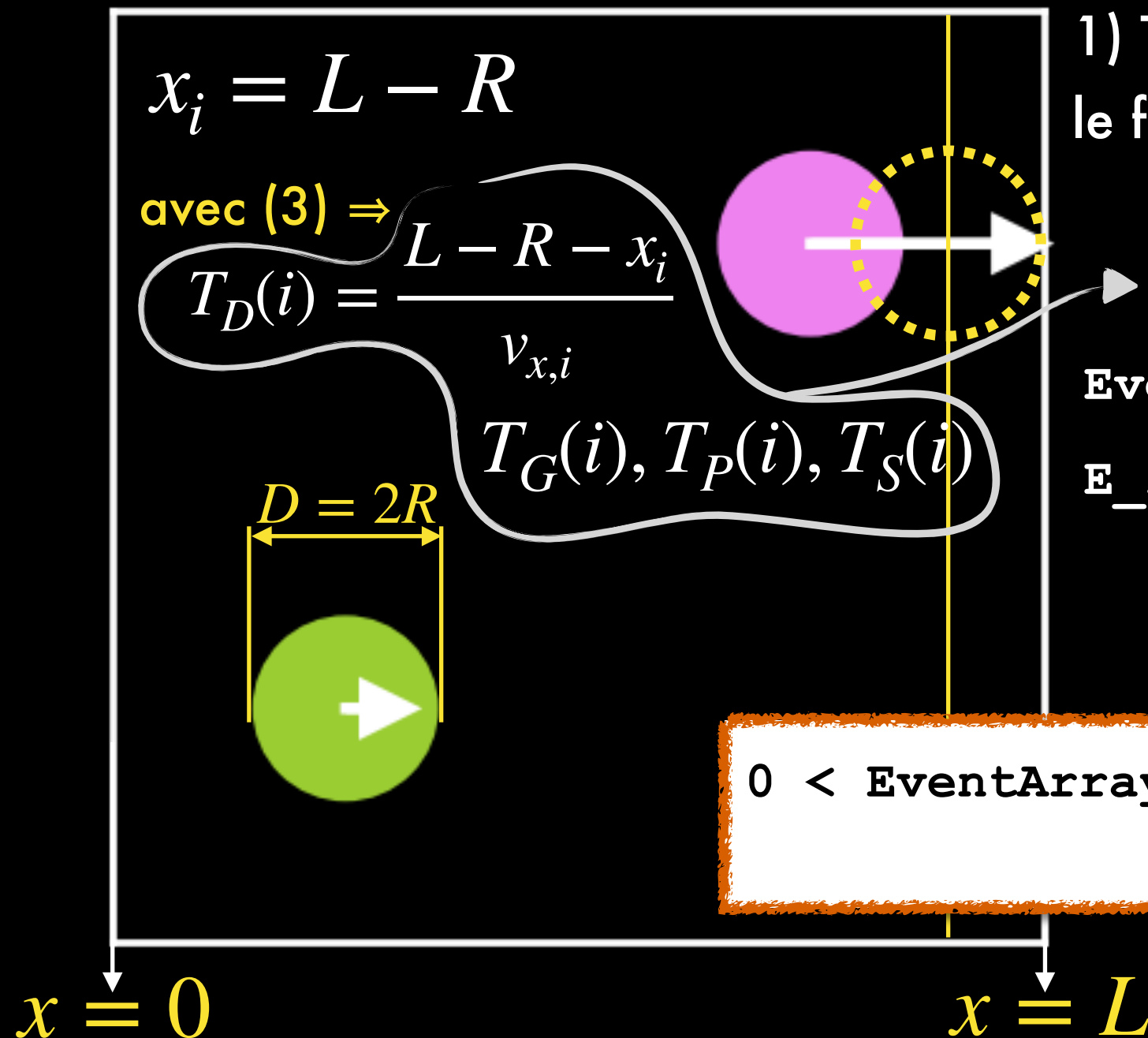
t_c

Tableau des événements:

EventArray = [E_0, ..., E_(4N-1)]

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

$0 < \text{EventArray}[k].\text{time} < \text{EventArray}[i].\text{time}$
NextEvent = **k**



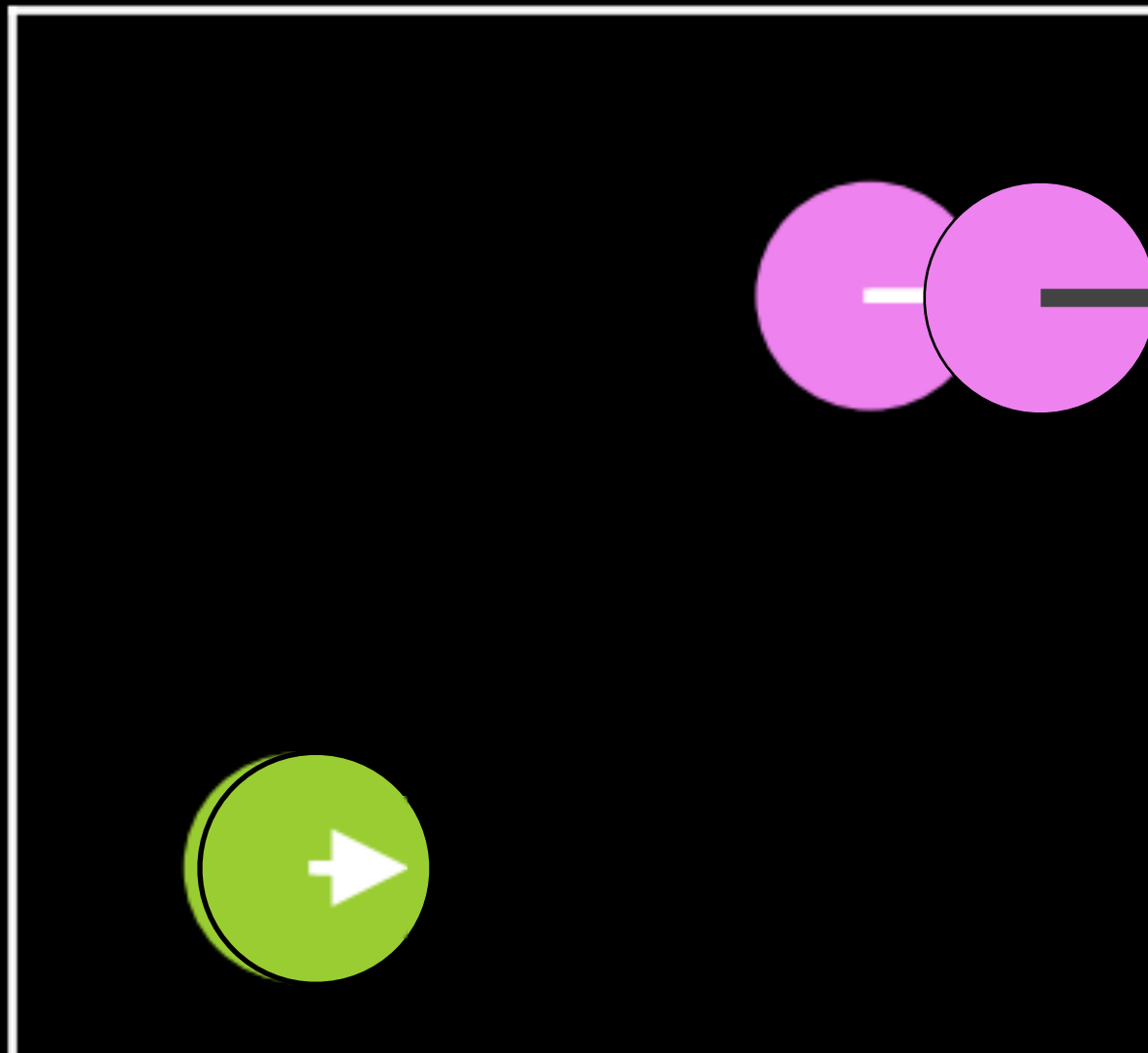
La dynamique moléculaire des disques durs

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

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

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

t = 0.00



PRINCIPE DE BASE

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

$0 < \text{EventArray}[k].\text{time} < \text{EventArray}[i].\text{time}$
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) $\Rightarrow \text{PArray}[i].x += \text{PArray}[i].vx * \text{EventArray}[k].\text{time}$

La dynamique moléculaire des disques durs

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

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

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

$t = 0.15$

PRINCIPE DE BASE

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

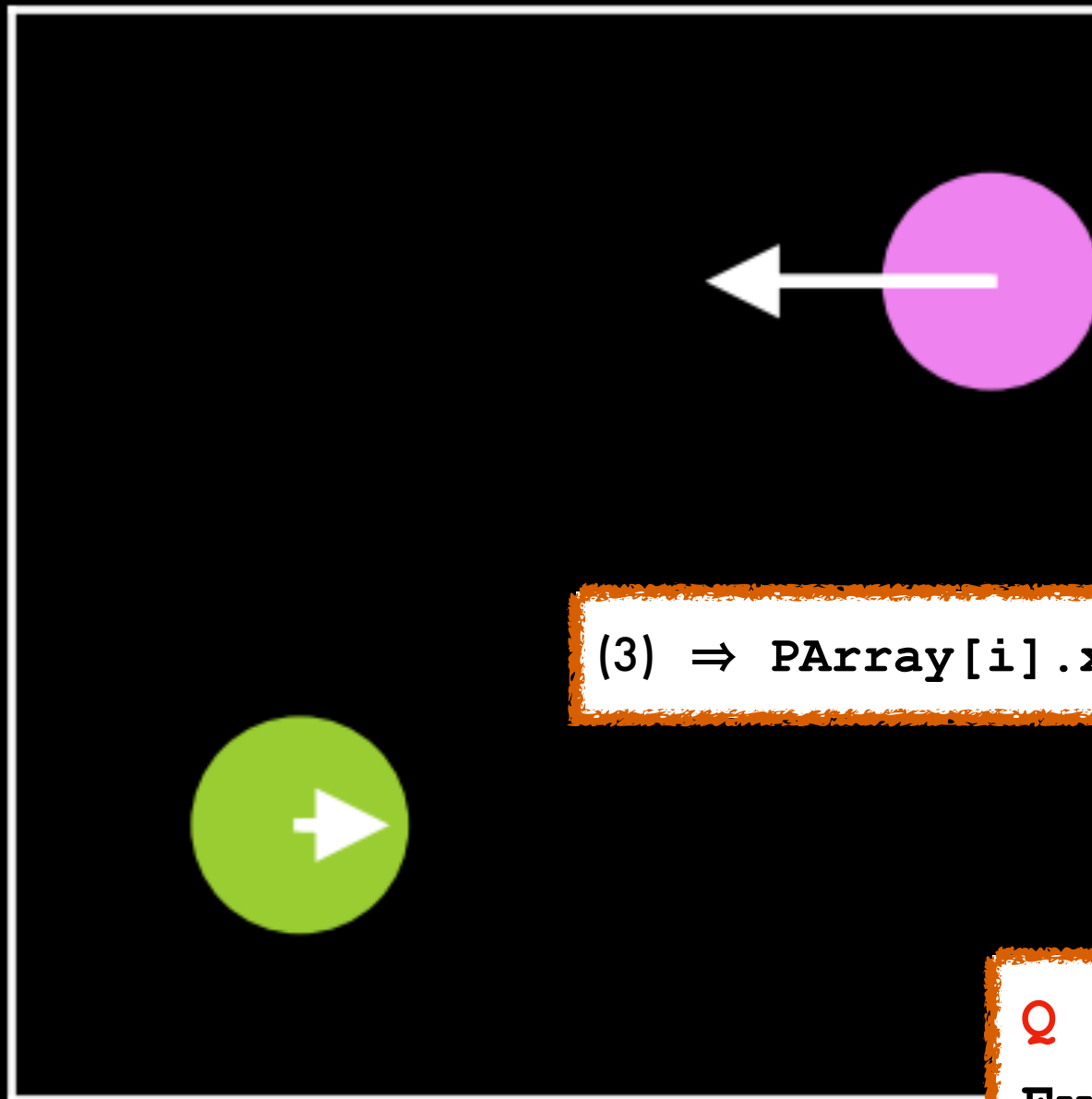
```
0 < EventArray[k].time < EventArray[i].time  
NextEvent = k
```

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

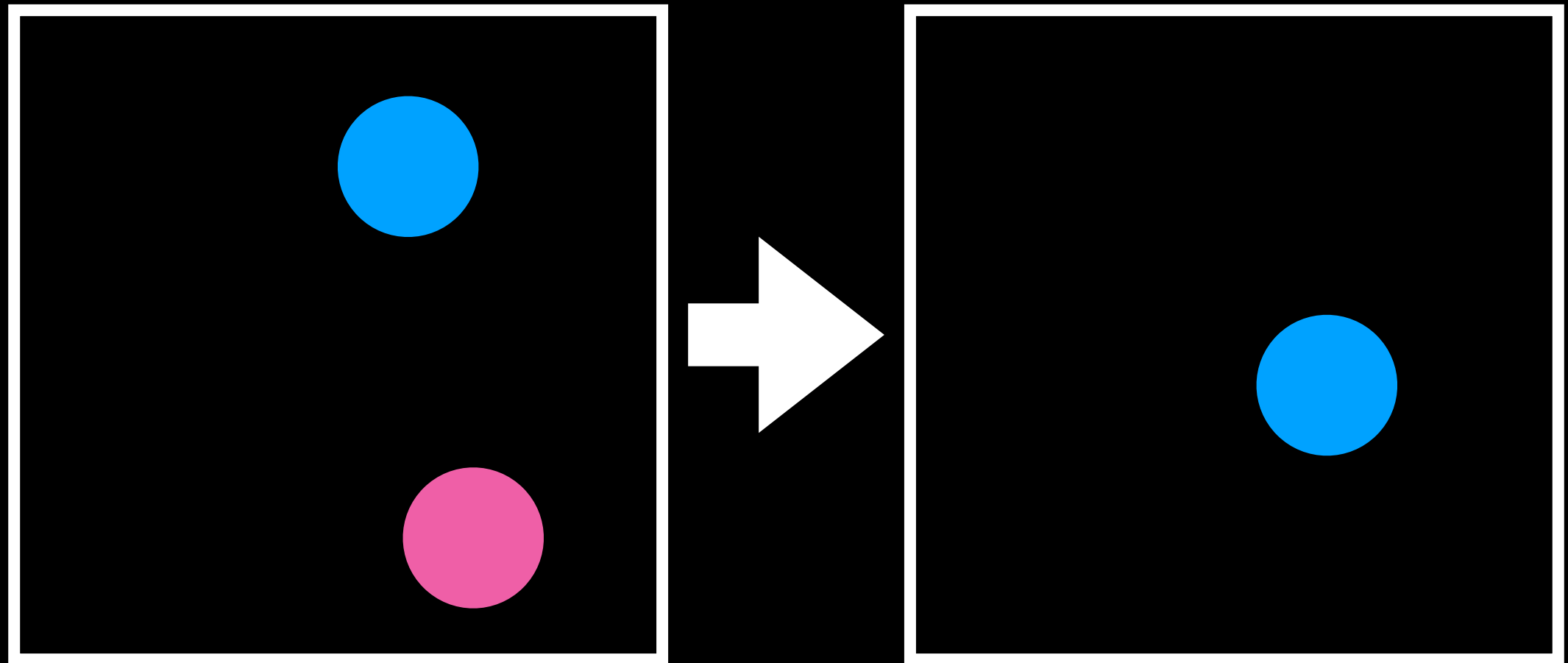
```
(3)  $\Rightarrow$  PArray[i].x += PArray[i].vx * EventArray[k].time
```

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

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



Piège de précision



Piège de précision

$$t_p > 0$$

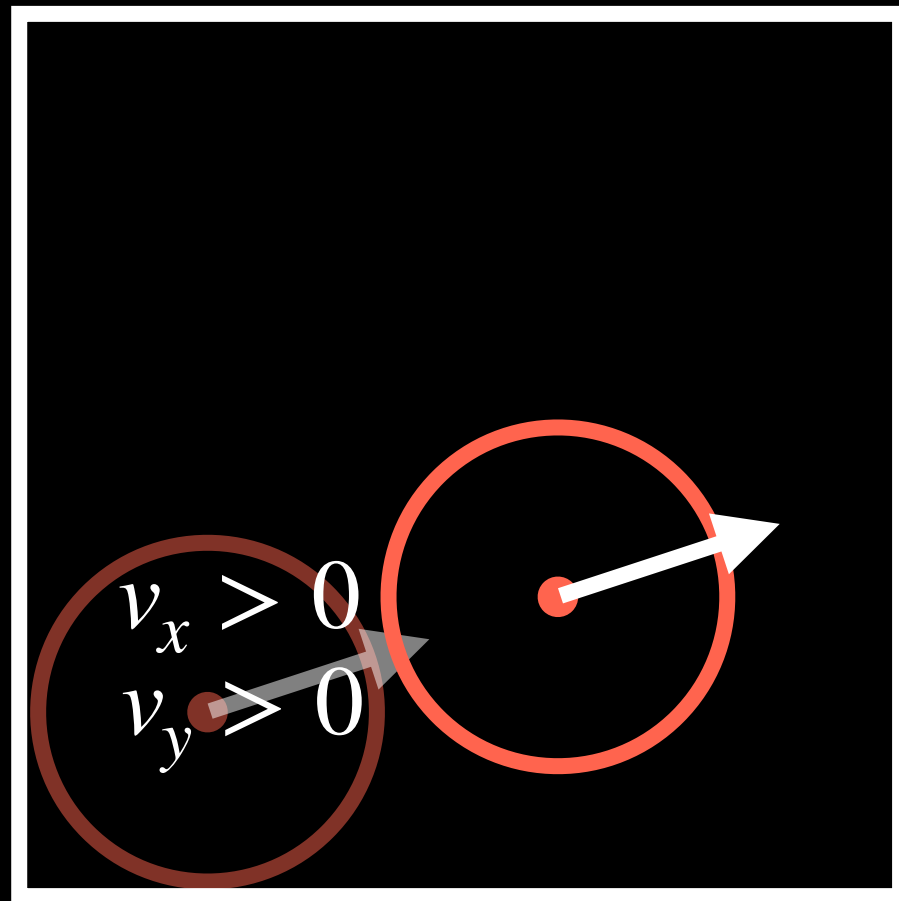
PRINCIPE DE BASE

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

$$t_c$$

$$t_G < 0$$

$$t_D > 0$$

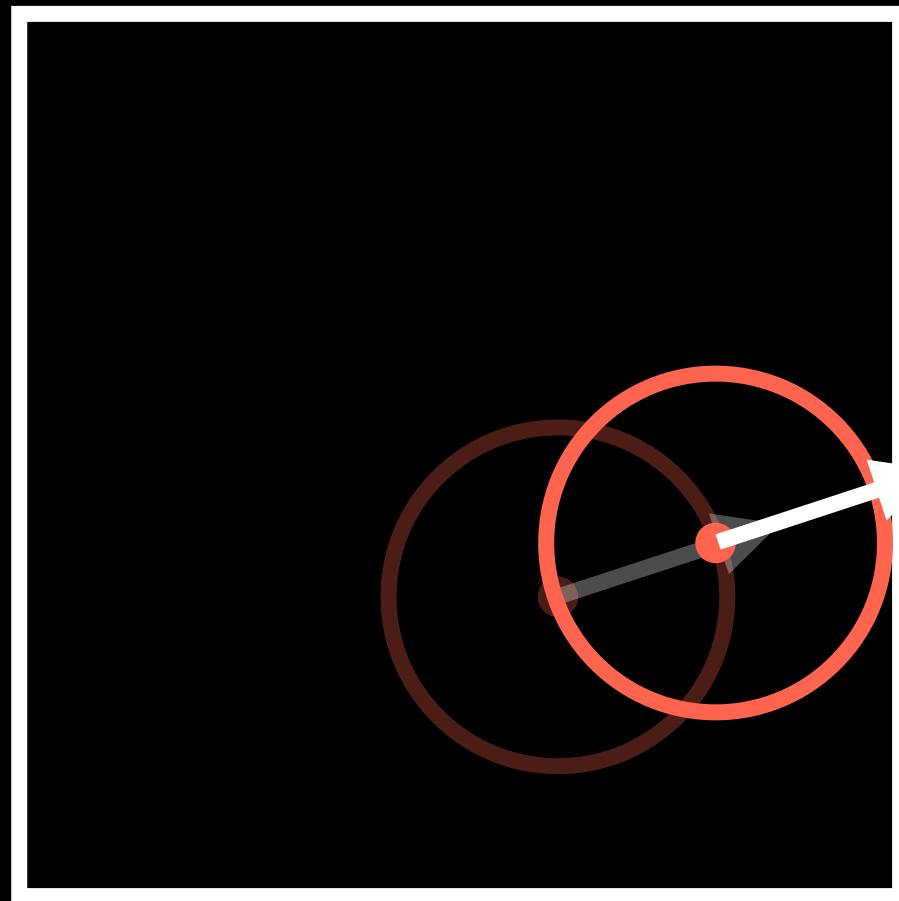


$$t_S < 0$$

Piège de précision

$$t_p > 0$$

$$t_G < 0$$



$$t_D > 0$$

$$t_S < 0$$

PRINCIPE DE BASE

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

$$t_c$$

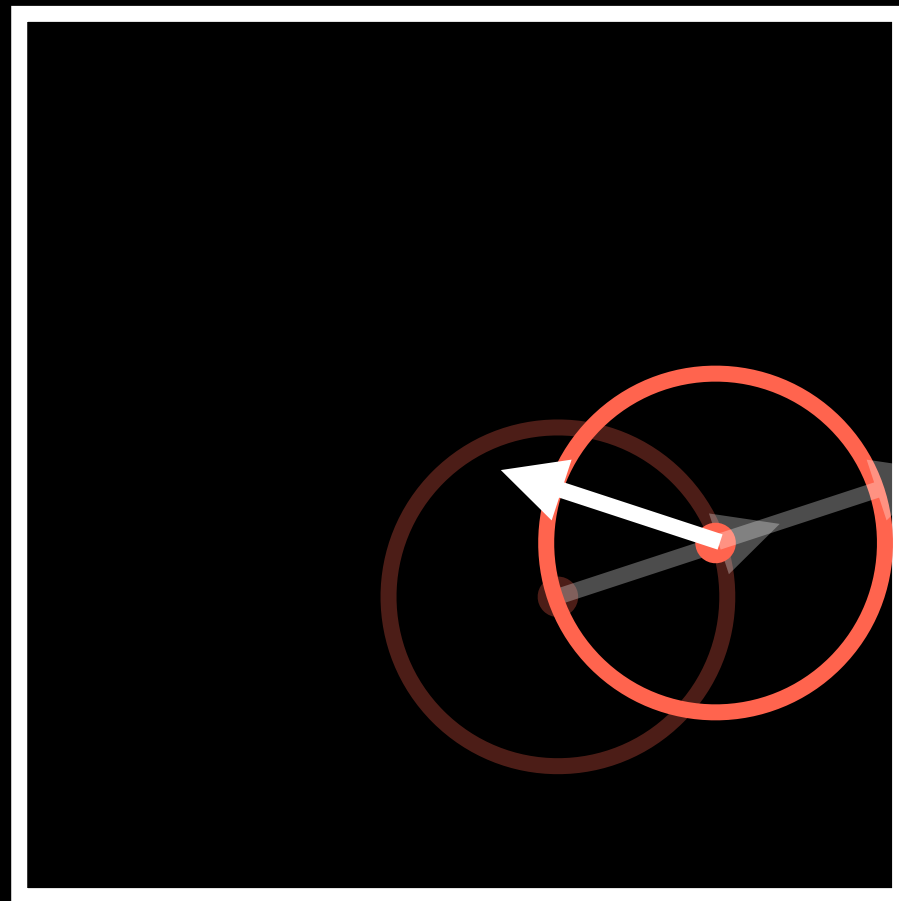
2) Déplacez toutes les particules jusqu'au moment de la collision !

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$

Piège de précision

$$t_p > 0$$

$$t_G < 0$$



$$t_D > 0$$

$$t_S < 0$$

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

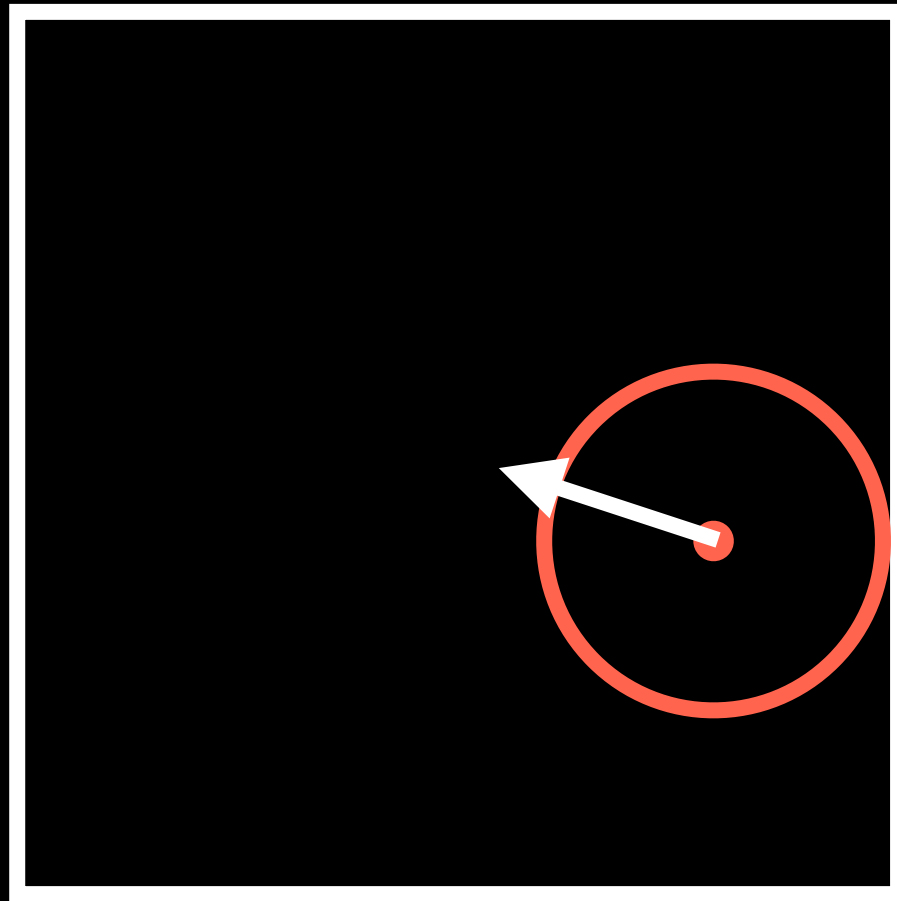
$$v_x(k) \rightarrow v'_x(k)$$

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

$$t_p > 0$$

$$t_D = \frac{L - R - x_i}{v_{x,i}}$$

$$t_D \geq 0$$

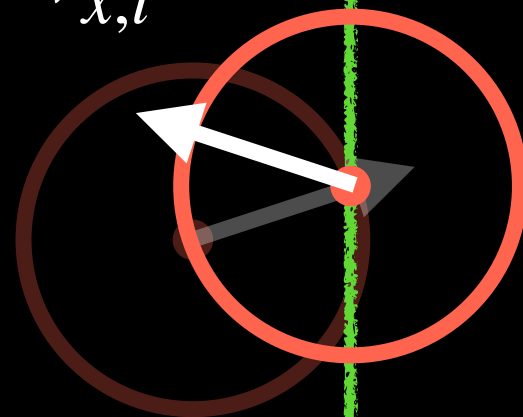
$$t_s < 0$$

$$X = 0$$

$$X = L$$

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

$$t_G > 0$$



Piège de précision

PRINCIPE DE BASE

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

t_c

$$t_p > 0$$

$$t_D = \frac{L - R - x_i}{v_{x,i}}$$

$$t_G > 0$$

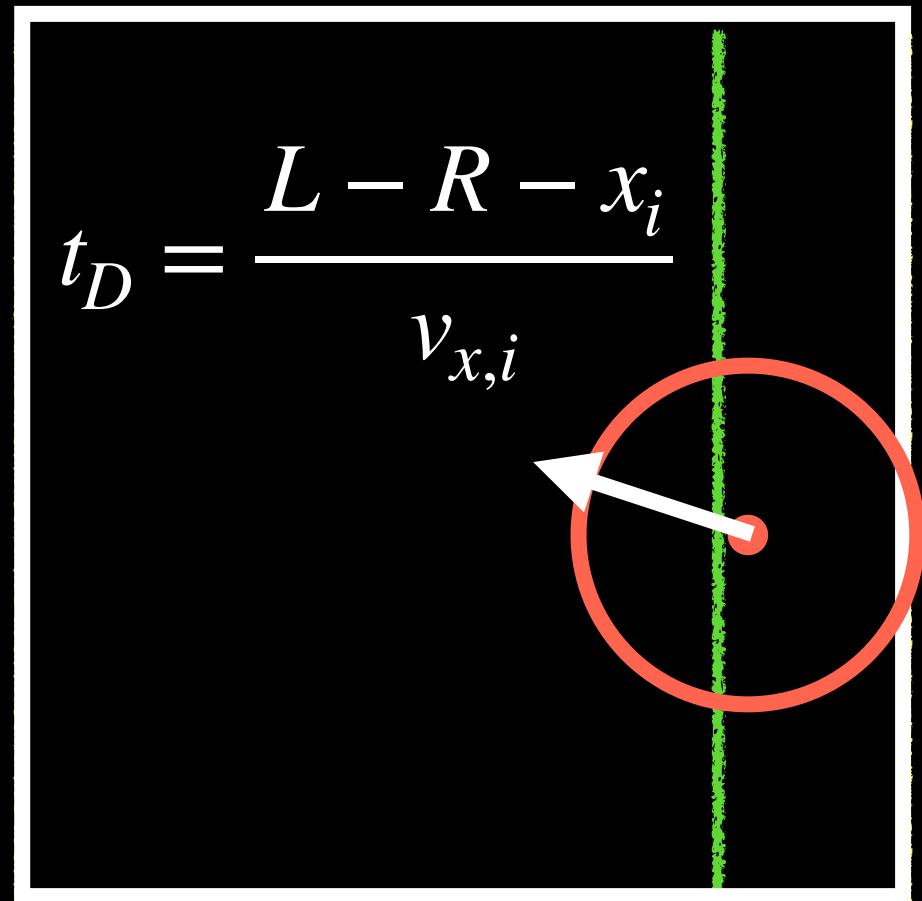
$$t_D > 0$$

$$t_S < 0$$

$$X = 0$$

$$X = L$$

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



Piège de précision

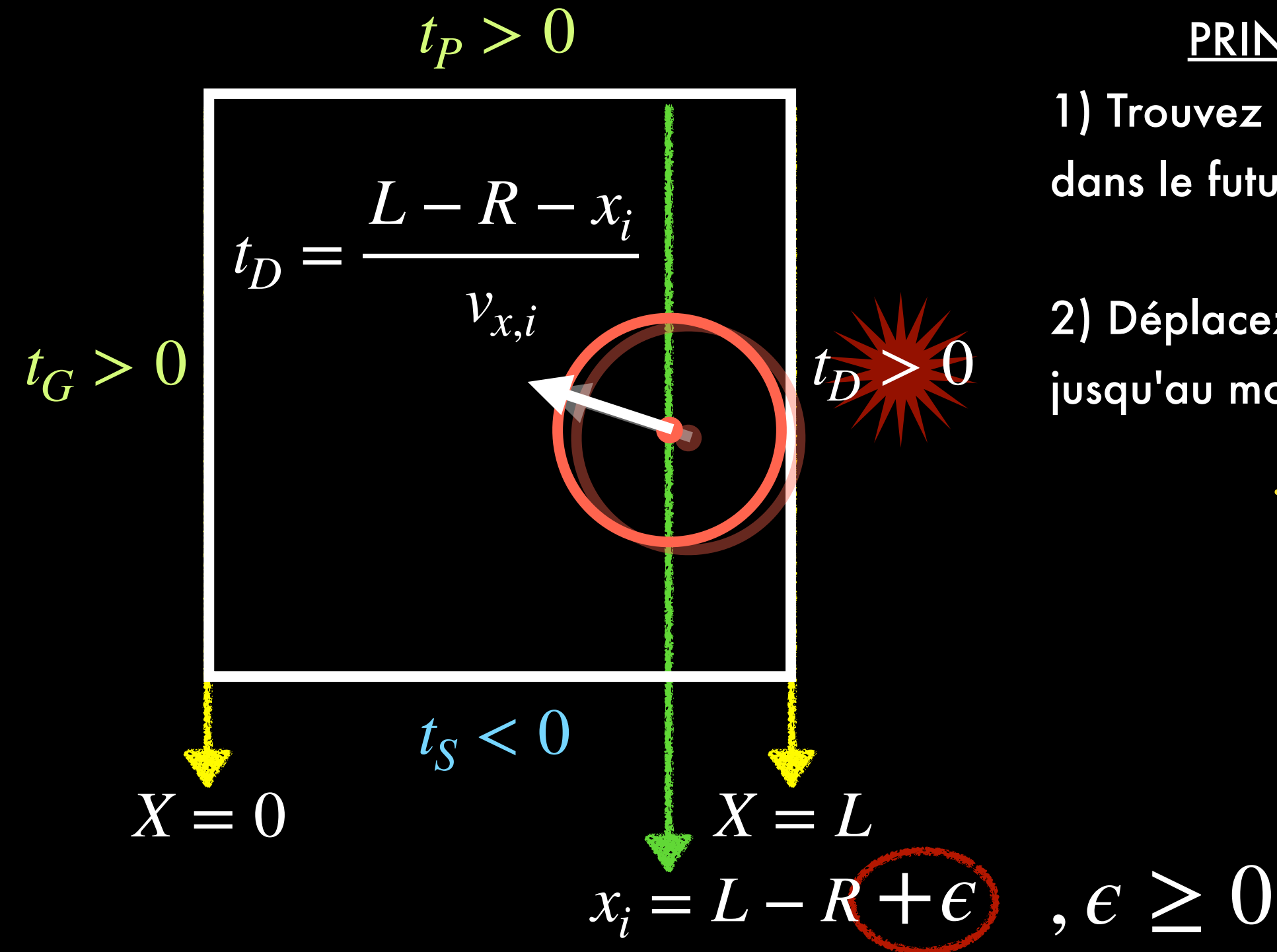
PRINCIPE DE BASE

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

$$t_p > 0$$

$$t_D = \frac{L - R - x_i}{v_{x,i}}$$

$$v_{x,i}$$

$$t_D > 0$$

$$t_G > 0$$

$$t_S < 0$$

$$X = 0$$

$$X = L$$

$$x_i = L - R + \epsilon$$

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

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

$$, \epsilon \geq 0$$

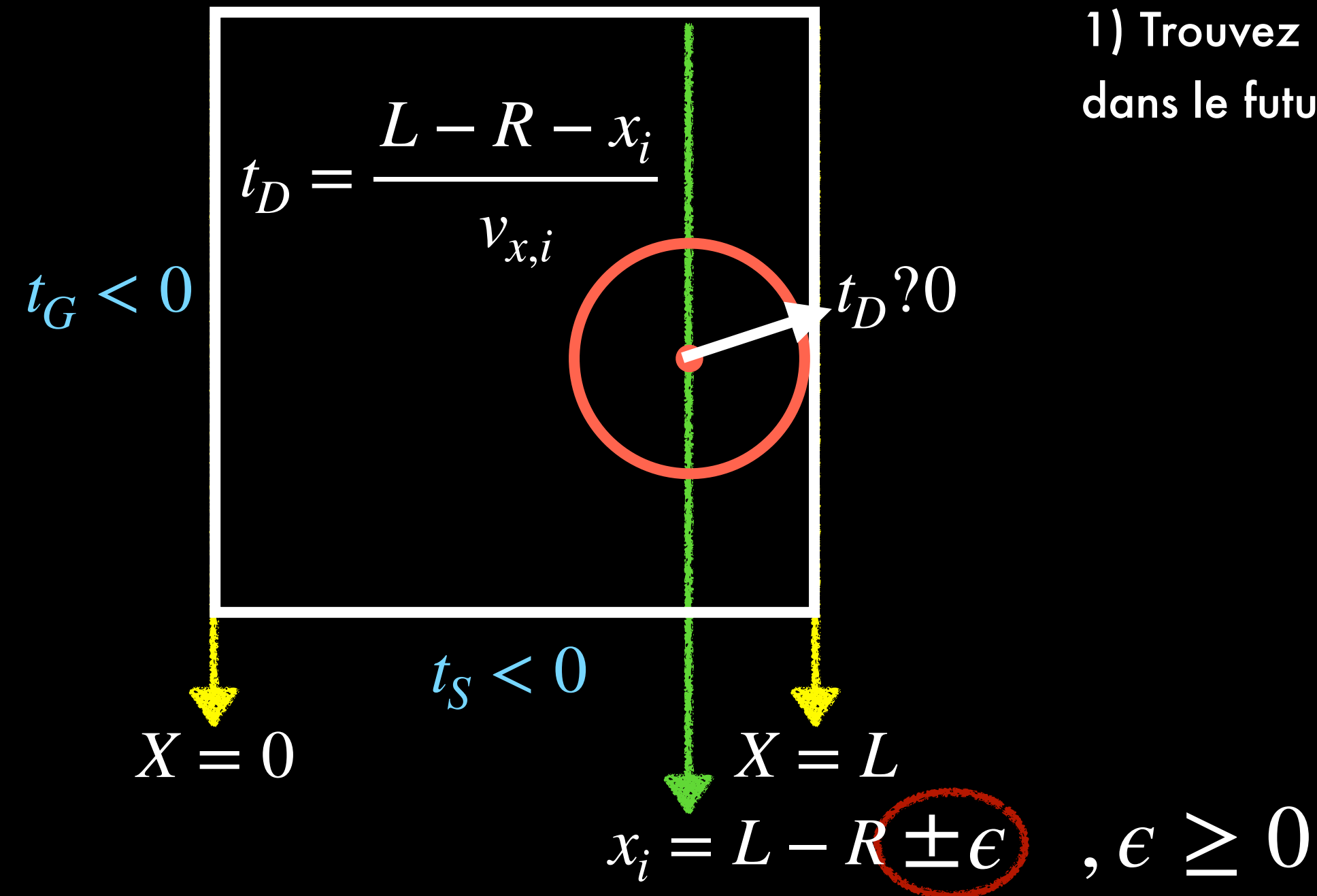
Piège de précision

$$t_p > 0$$

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

$$t_p > 0$$

$$t_D = \frac{L - R - x_i}{v_{x,i}}$$

$$t_G < 0$$

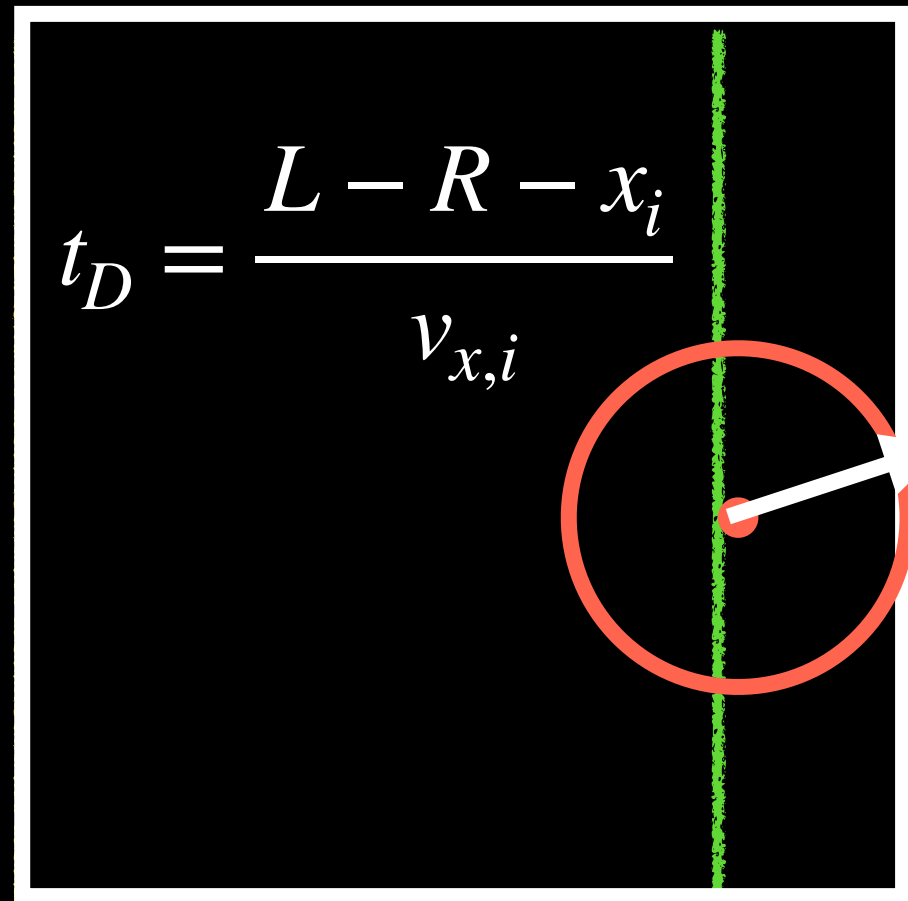
$$t_D ? 0$$

$$t_S < 0$$

$$X = 0$$

$$X = L$$

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



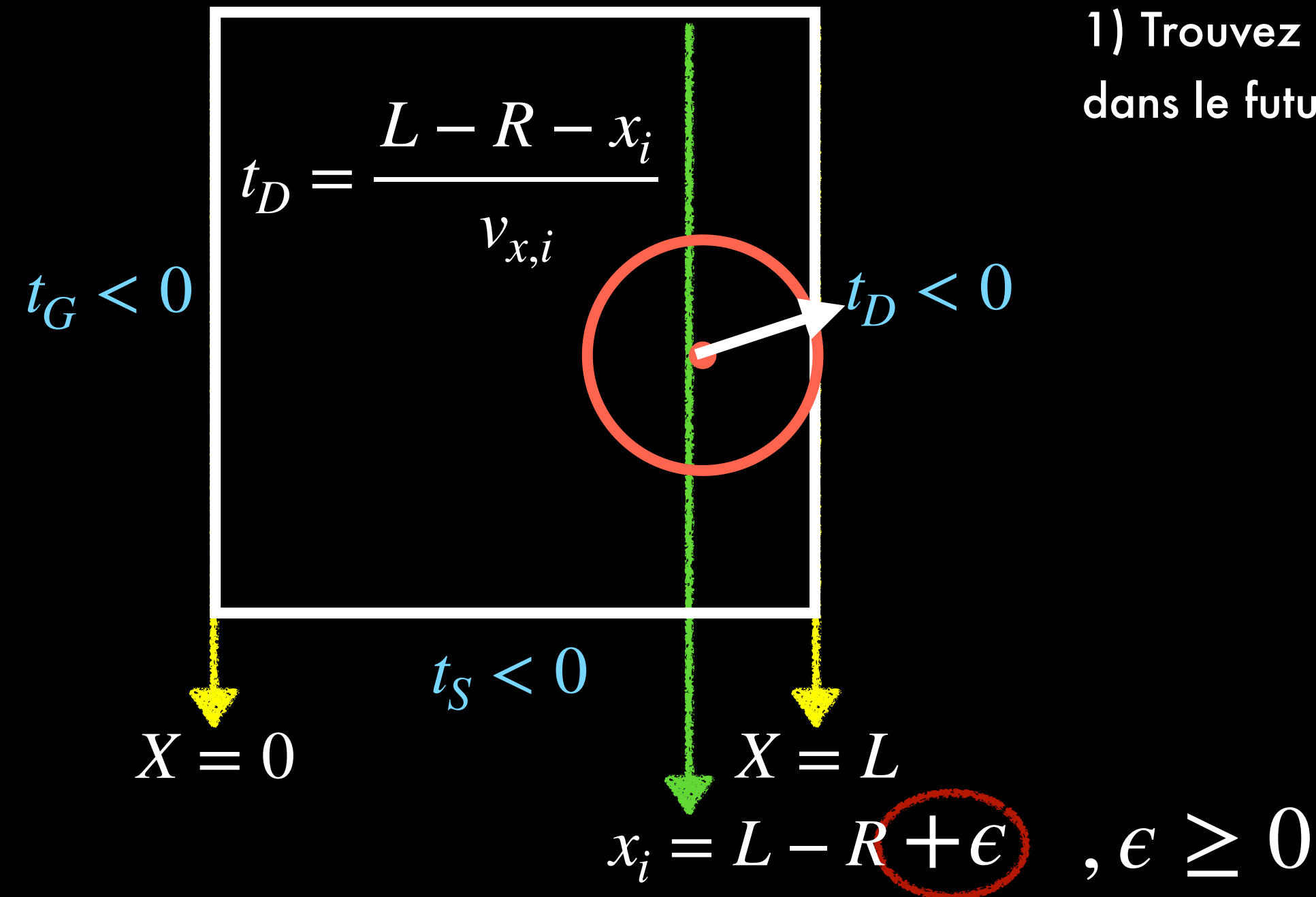
Piège de précision

$$t_p > 0$$

PRINCIPE DE BASE

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

$$t_c$$



Piège de précision

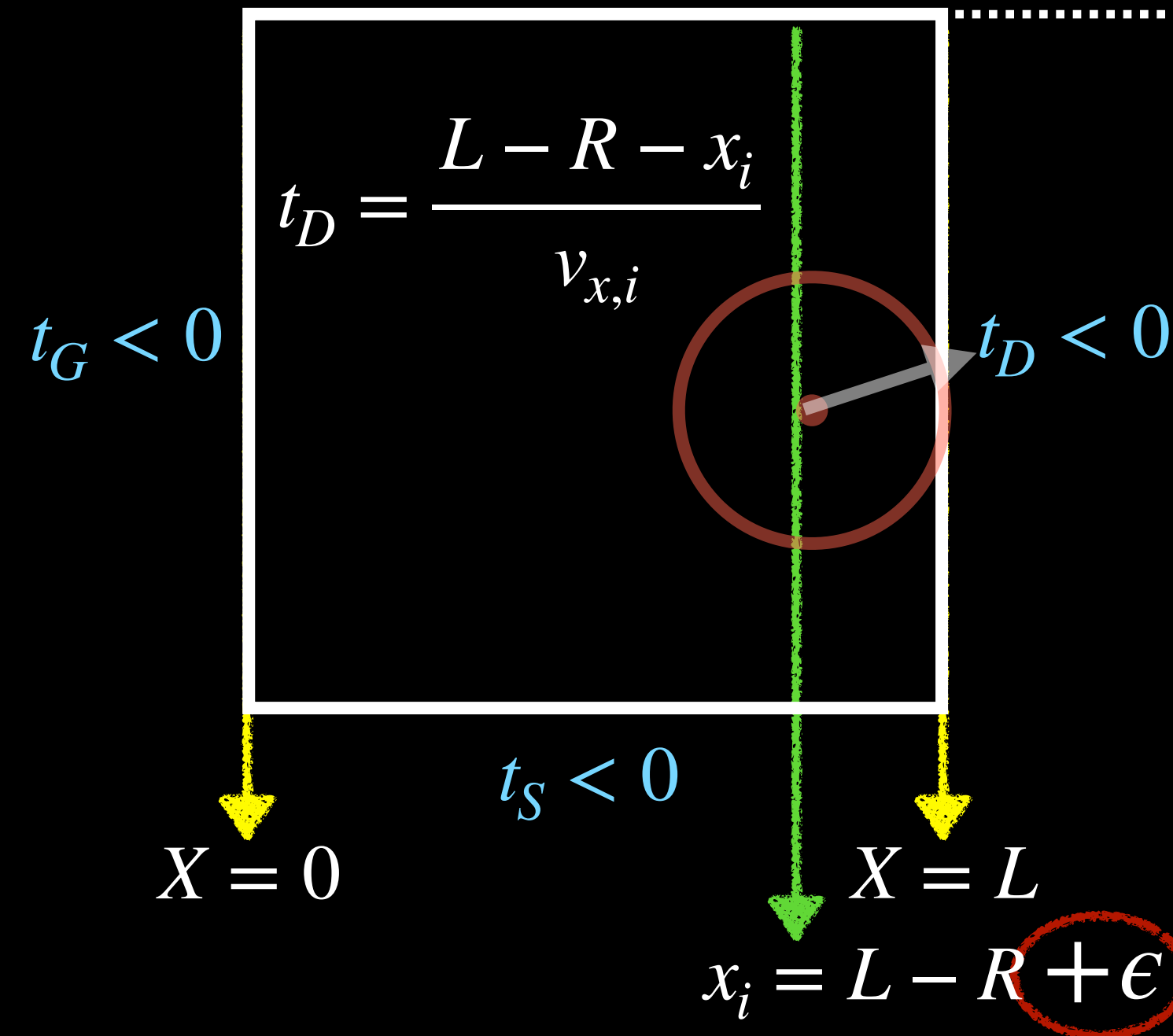
$$t_p > 0$$

PRINCIPE DE BASE

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

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

$$x_i \rightarrow x_i(t_c)$$



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

Piège de précision

$$t_p > 0$$

PRINCIPE DE BASE

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

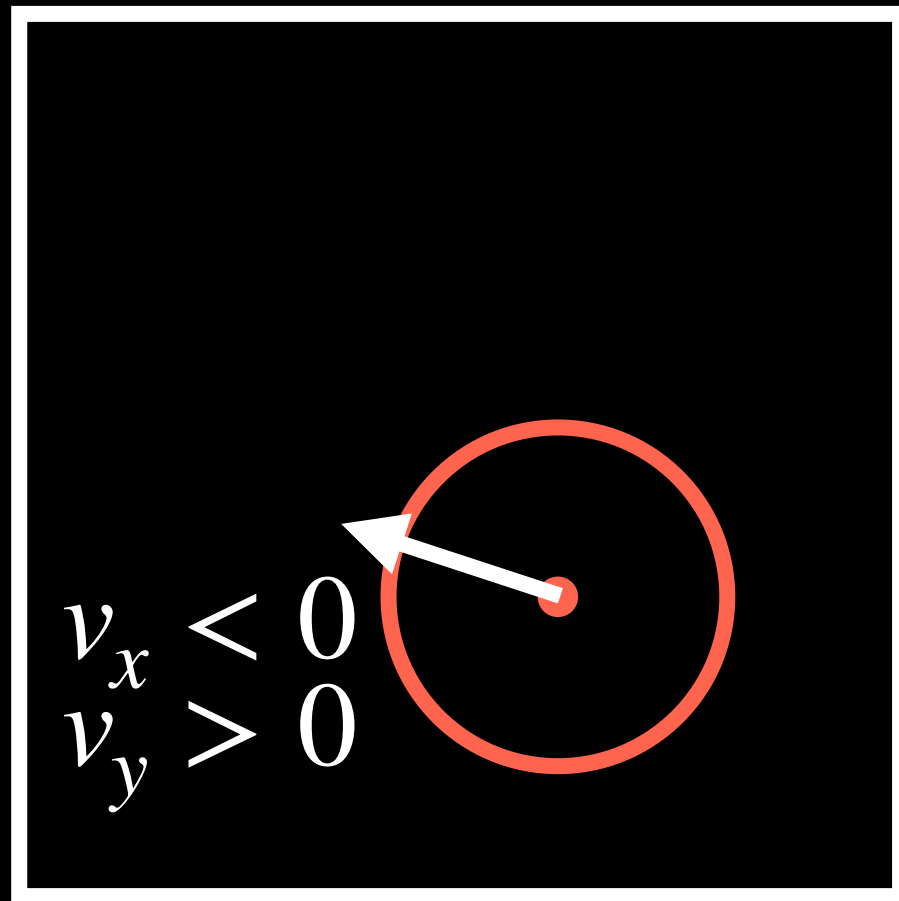
$$t_c$$

$$t_G > 0$$

$$t_D < 0$$

$$\begin{aligned} v_x &< 0 \\ v_y &> 0 \end{aligned}$$

$$t_S < 0$$



Piège de précision

PRINCIPE DE BASE

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

t_c

$$t_p > 0$$

$$t_D = \frac{L - R - x_i}{v_{x,i}}$$

$v_{x,i}$

$$t_D < 0$$

$$\begin{aligned} v_x &< 0 \\ v_y &> 0 \end{aligned}$$

$$t_S < 0$$

$$X = 0$$

$$X = L$$

$$x_i = L - R$$

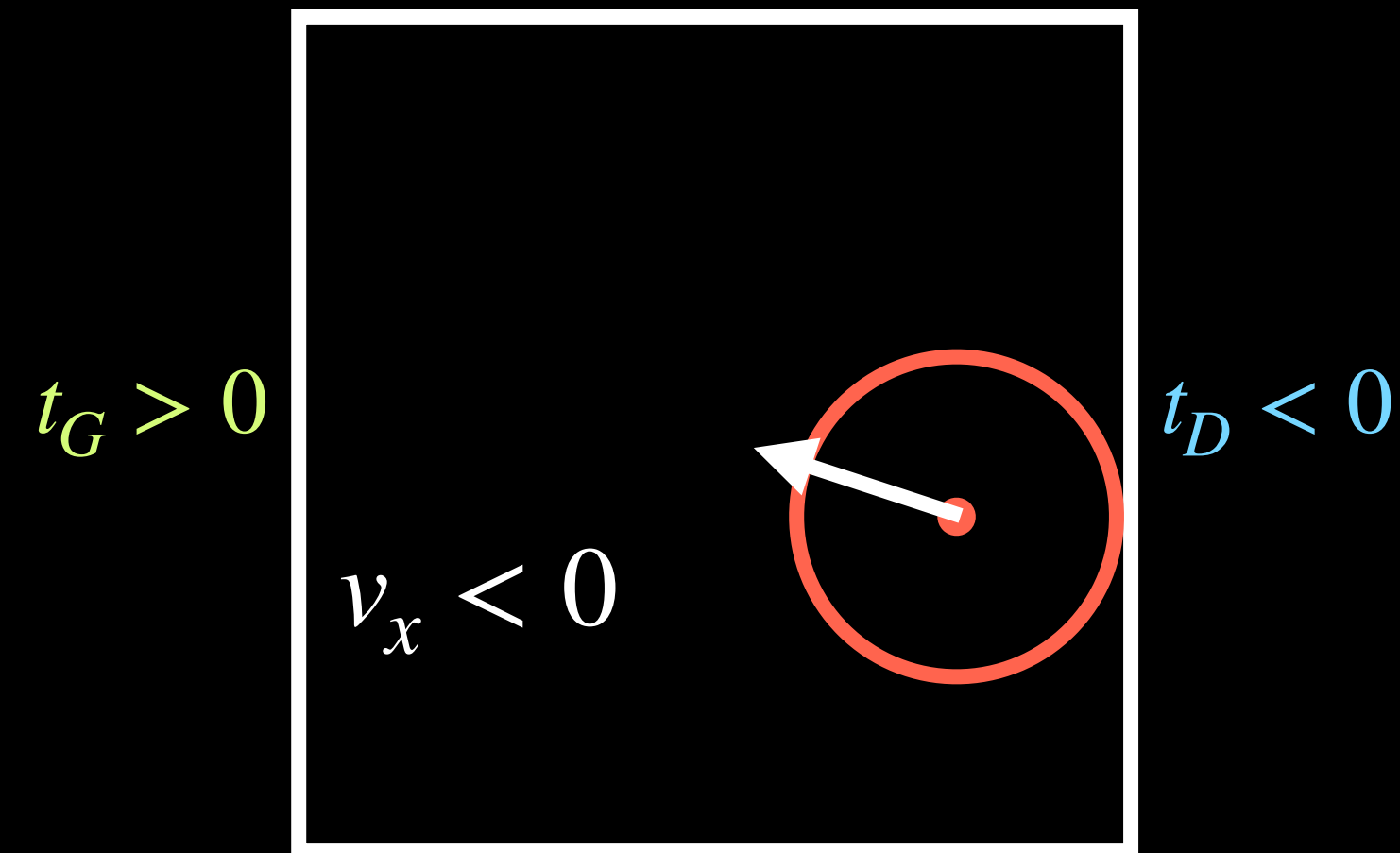
$$t_G > 0$$

Piège de précision

PRINCIPE DE BASE

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

t_c

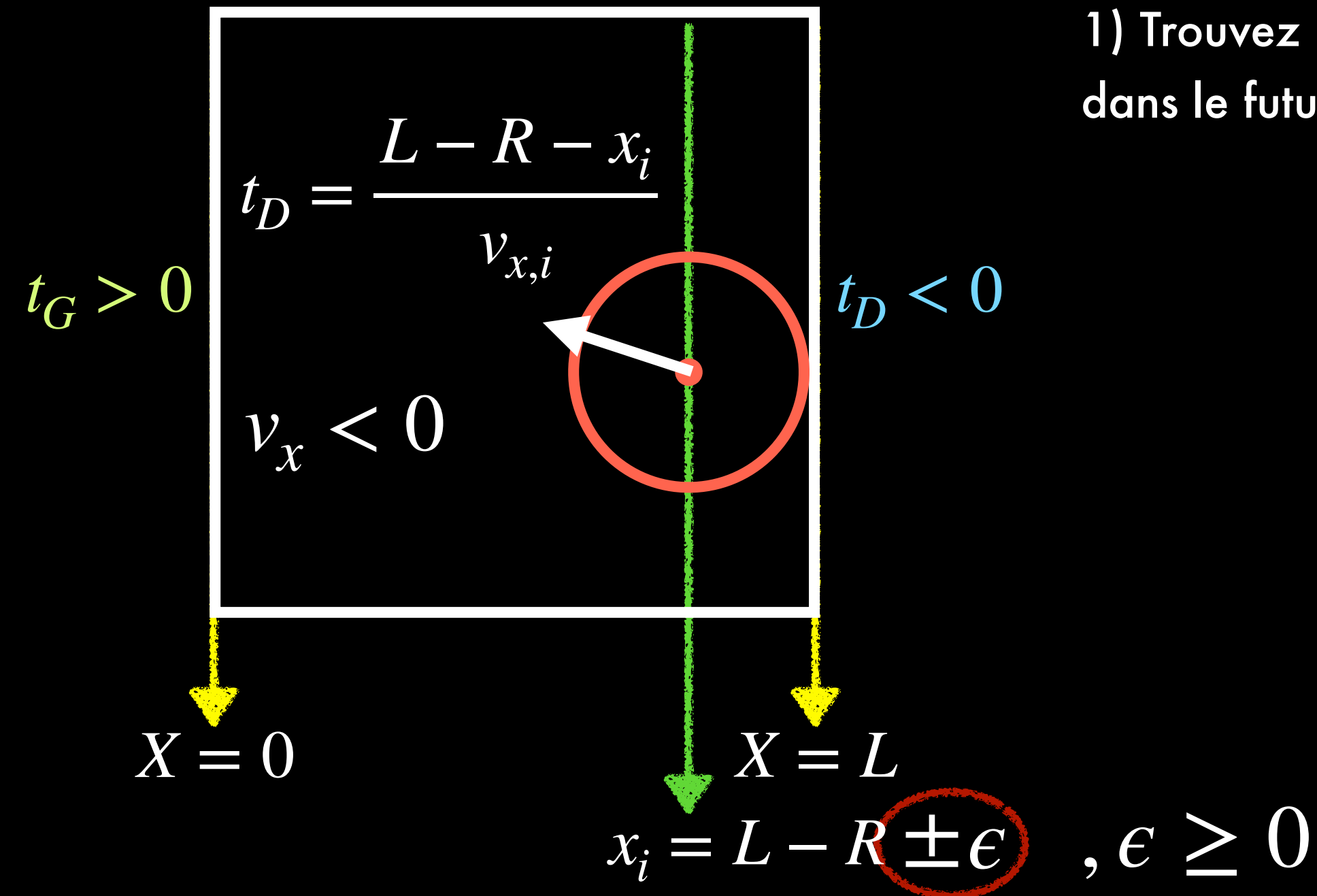


Piège de précision

PRINCIPE DE BASE


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

t_c



https://github.com/JulianeUta/TP_Programmation2020_ForStudents

Branch: master ▾ New pull request Create new file

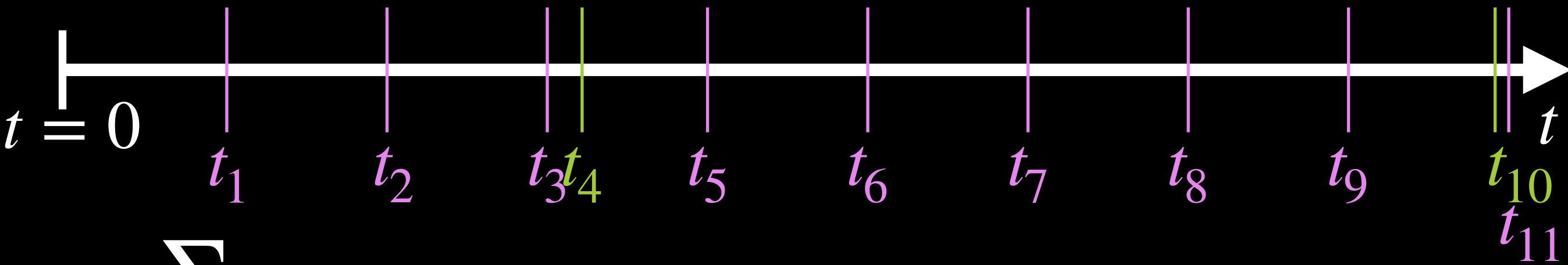
JulianeUta update

BooleanExamples	cleanup
Examples	update
InstallationInstructions	clear trouble shooting gnuplot
Pointer	Dynamic Array allocation with function examples
RGBFigures	
MDFlexBoxRadiusMass.zip	init bug
MDgtkBasicCodeWin7.zip	
MyFirstCode.zip	update
RandomNumbers.zip	correct mixed up file names

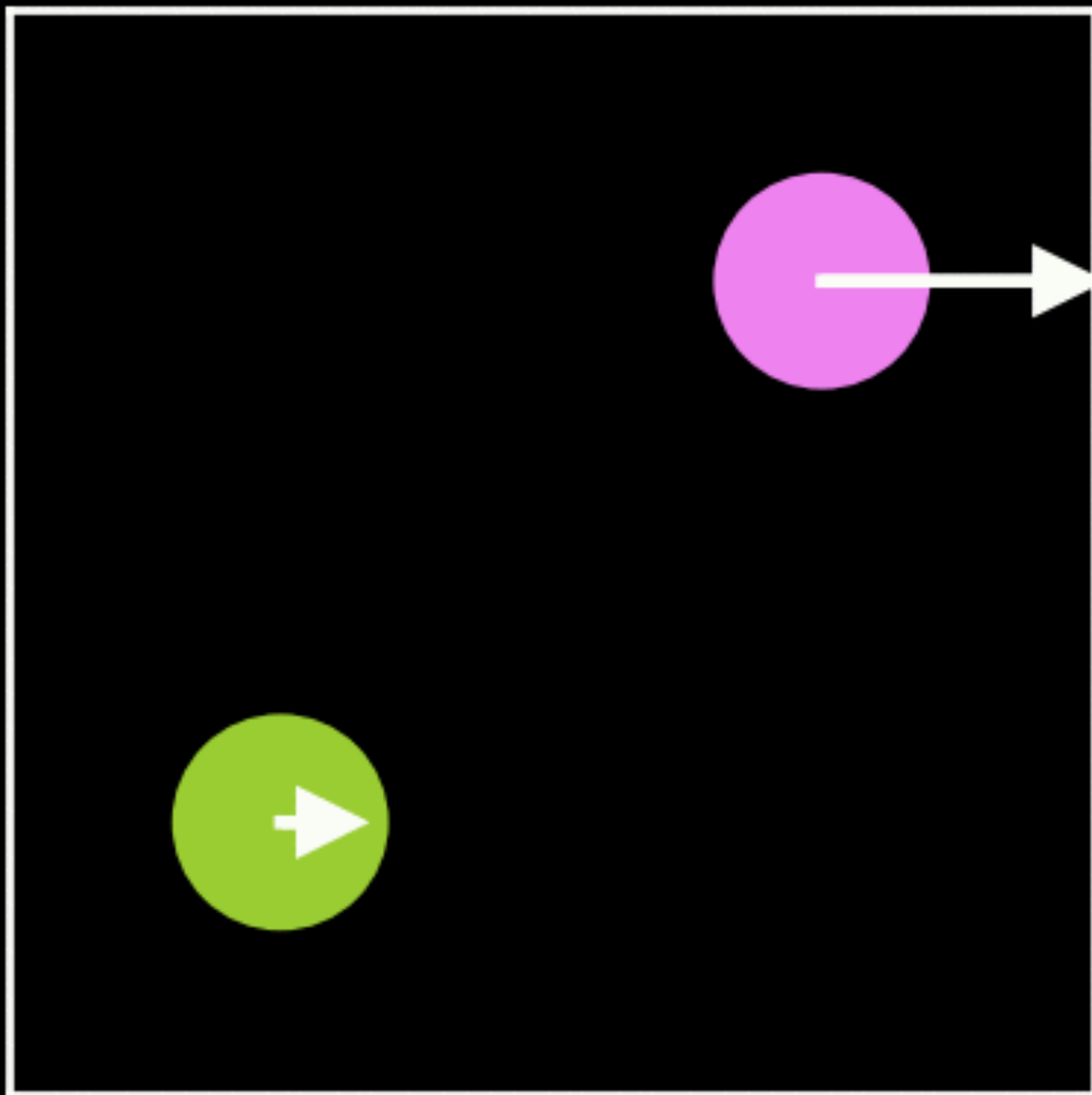
Ubuntu terminal & Mac

Msys2 terminal

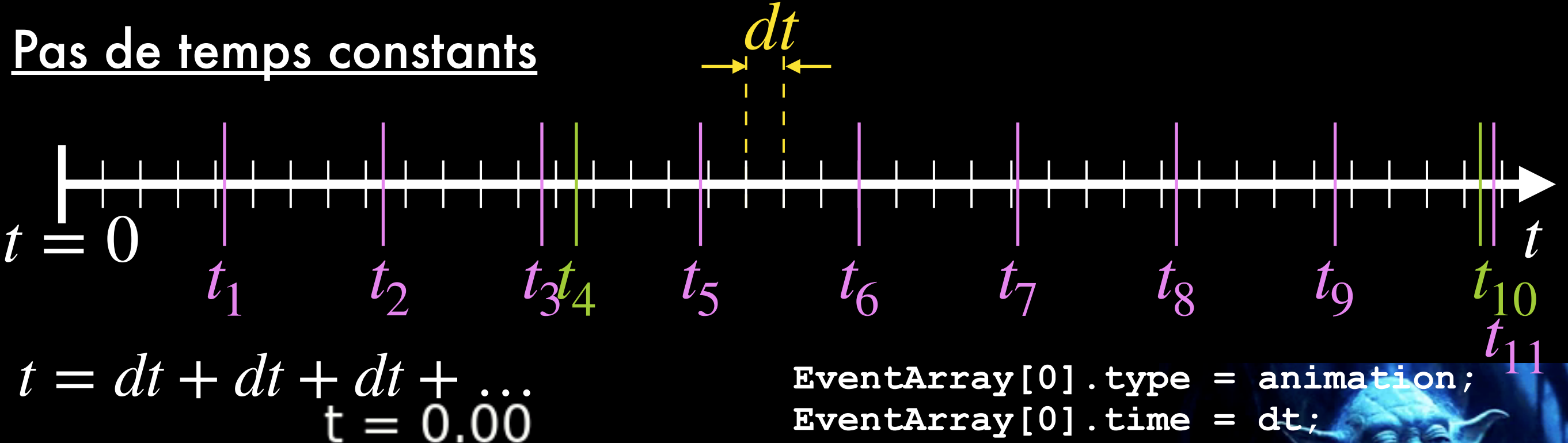
Pas de temps constants



$$t = \sum t_n \quad t = 0.00$$



Pas de temps constants



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

Do or not do.
[There is no try.]

PRINCIPE DE BASE

- 1) Trouvez l'événement le plus proche dans le futur !
 $\text{NextEvent} = k$
- 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 = ?

