72.25 - “SIMULACIÓN DE SISTEMAS“

DINÁMICA MOLECULAR DIRIGDA POR EVENTOS

De Simone, Franco - 61100
Dizenhaus, Manuel - 61101

1. Introducción

Introducción

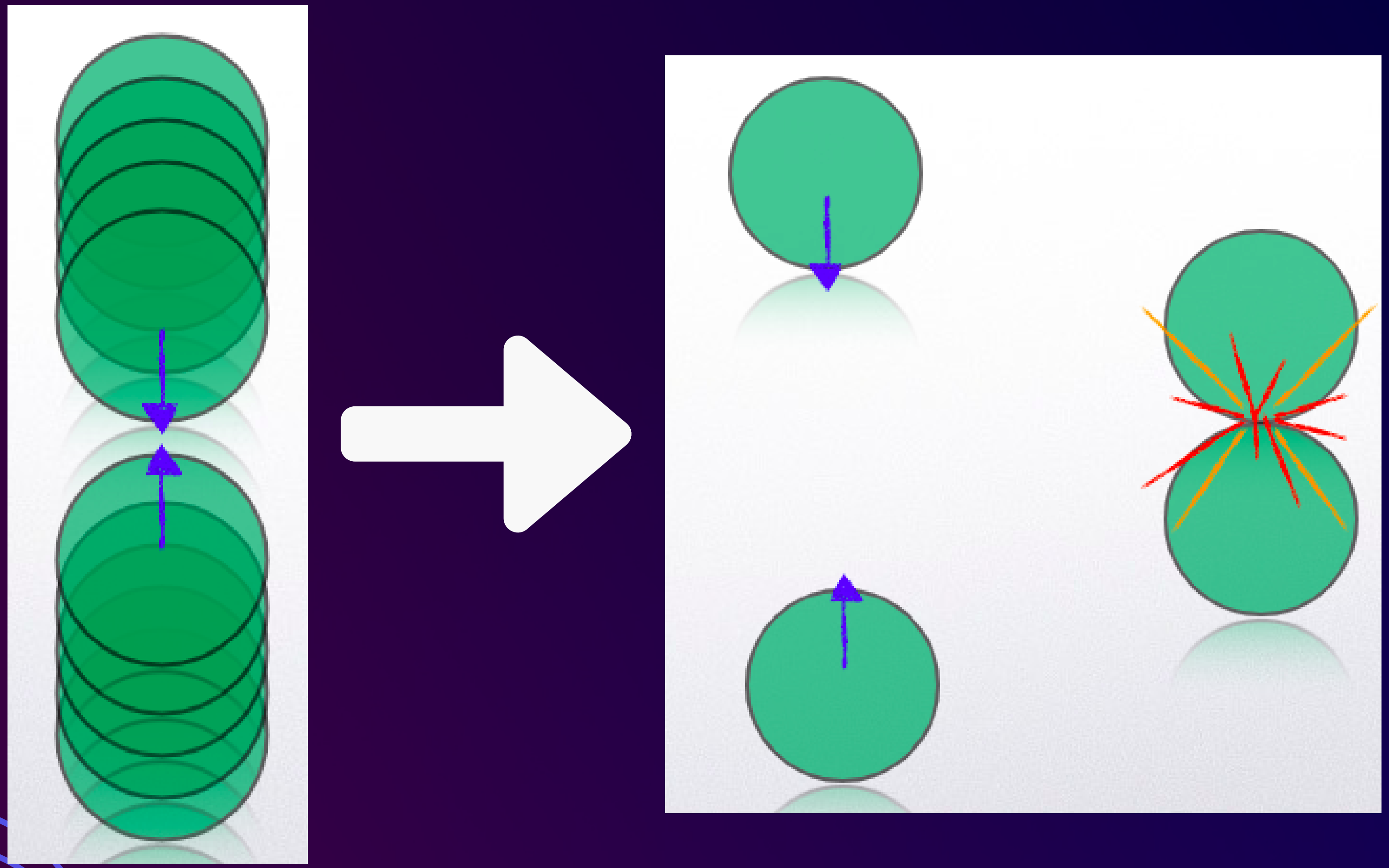
- Explorar el funcionamiento de un sistema cuya dinámica molecular está regida por eventos

- Se estudiará mediante la combinación de parámetros, y luego observando los resultados mediante animaciones

2. Fundamentos

Fundamentos

- Simulación dirigida por paso temporal ≠ Simulación dirigida por eventos



- Sistema 2D
- Colisiones elásticas
- Tiempo entre choques >>> Duración del choque
- Densidad media baja de partículas
- Tiempo de vuelo dado por movimiento rectilineo de las partículas:

$$x_i(t) = x_i(0) + v_x t$$

$$y_i(t) = y_i(0) + v_y\, t$$

Fundamentos

Posibles choques: contra una pared

Contra una pared vertical

$$v_x^d = -v_x^a$$

(Análisis con pared horizontal es análogo pero en la componente y)

Calculo de tiempo hasta impacto con pared

si $vx_i > 0$, entonces se cumple que :

$$(x_{p2} - R) = x(0) + vx\, t \quad \Rightarrow \quad t_c = (x_{p2} - R - x(0)) / vx$$

si $vx_i < 0$, entonces se cumple que :

$$(x_{p1} + R) = x(0) + vx\, t \quad \Rightarrow \quad t_c = (x_{p1} + R - x(0)) / vx$$

Fundamentos

Posibles choques: contra otra partícula

Cálculo del tiempo para choque

$$\boxed{t_c = \begin{cases} \infty & si\ \Delta v \cdot \Delta r \geq 0, \\ \infty & si\ d < 0, \\ -\dfrac{\Delta v \cdot \Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v \cdot \Delta v} & en\ otro\ caso \end{cases}} \quad donde:\ d = (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v)\,(\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2),$$

siendo: $\sigma = R_i + R_j$

$$\begin{aligned} \Delta r &= (\Delta x,\ \Delta y) = (x_j - x_i,\ y_j - y_i) \\ \Delta v &= (\Delta vx,\ \Delta vy) = (vx_j - vx_i,\ vy_j - vy_i) \\ \Delta r \cdot \Delta r &= (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta v &= (\Delta vx)^2 + (\Delta vy)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta r &= (\Delta vx)(\Delta x) + (\Delta vy)(\Delta y). \end{aligned}$$

Fundamentos

Posibles choques: contra otra partícula

Cambio de velocidades

$$J_x = \frac{J\,\Delta\,x}{\sigma}, \quad J_y = \frac{J\,\Delta\,y}{\sigma}, \quad \text{donde} \quad J = \frac{2\,m_i\,m_j\,(\Delta v \cdot \Delta r)}{\sigma\,(m_i + m_j)}$$

Y por conservación del impulso:

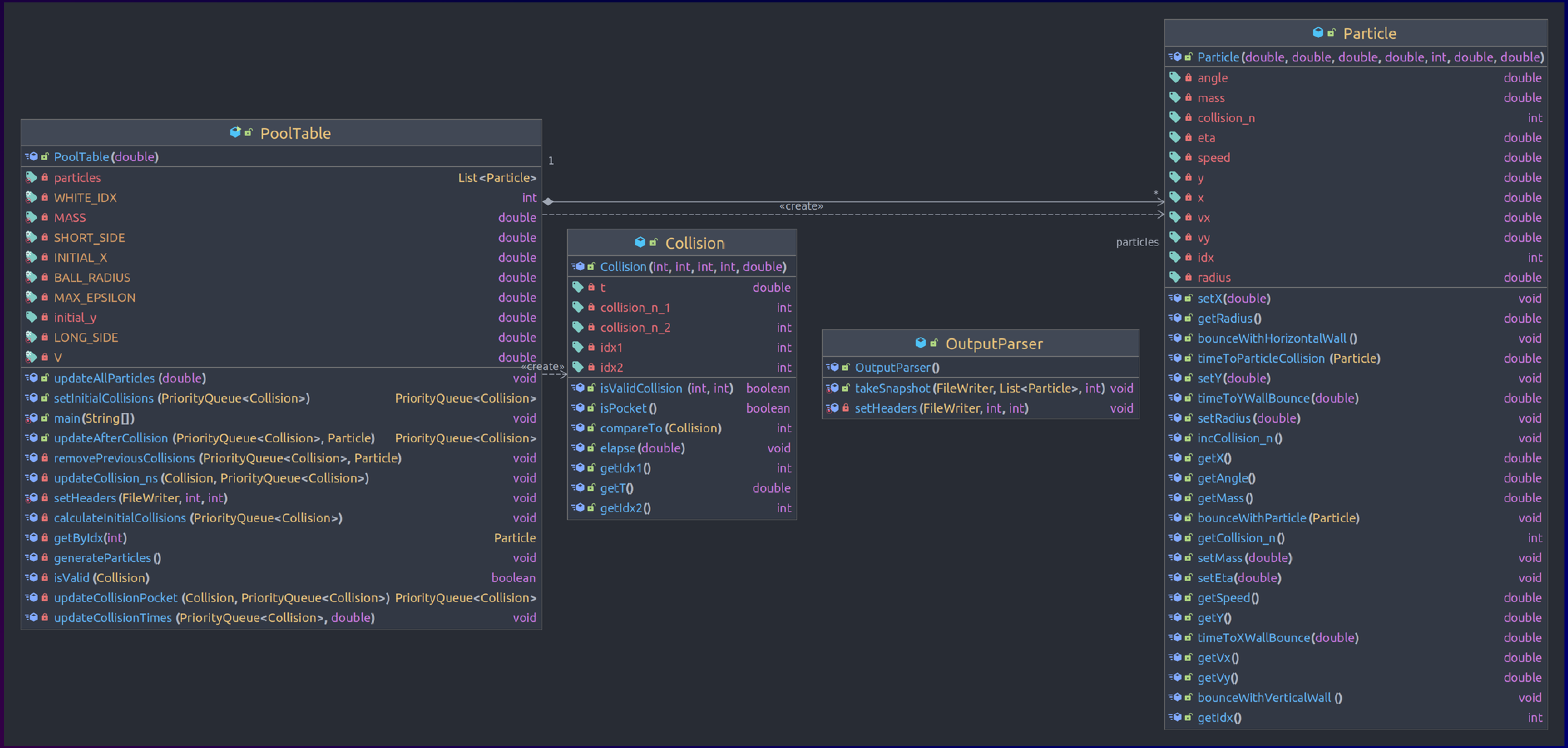
$$vx_i^d = vx_i^a + J_x/m_i \qquad vx_j^d = vx_j^a - J_x/m_j$$

$$vy_i^d = vy_i^a + J_y/m_i \qquad vy_j^d = vy_j^a - J_y/m_j$$

3. Implementación

Implementación

Diagrama UML



Implementación

Algoritmo en pseudocódigo

1) Se definen las condiciones iniciales

Para cada iteración:

2) Cálculo del tiempo hasta el primer choque (tc).

3) Evolución de las partículas según sus ecuaciones de movimiento hasta tc .

4) Guardado del estado del sistema (posiciones y velocidades) en $t = tc$

5) Nuevas velocidades post-choque para partículas involucradas, con el "operador de colisión"

6) ir a 2) o finalizar con condición de corte

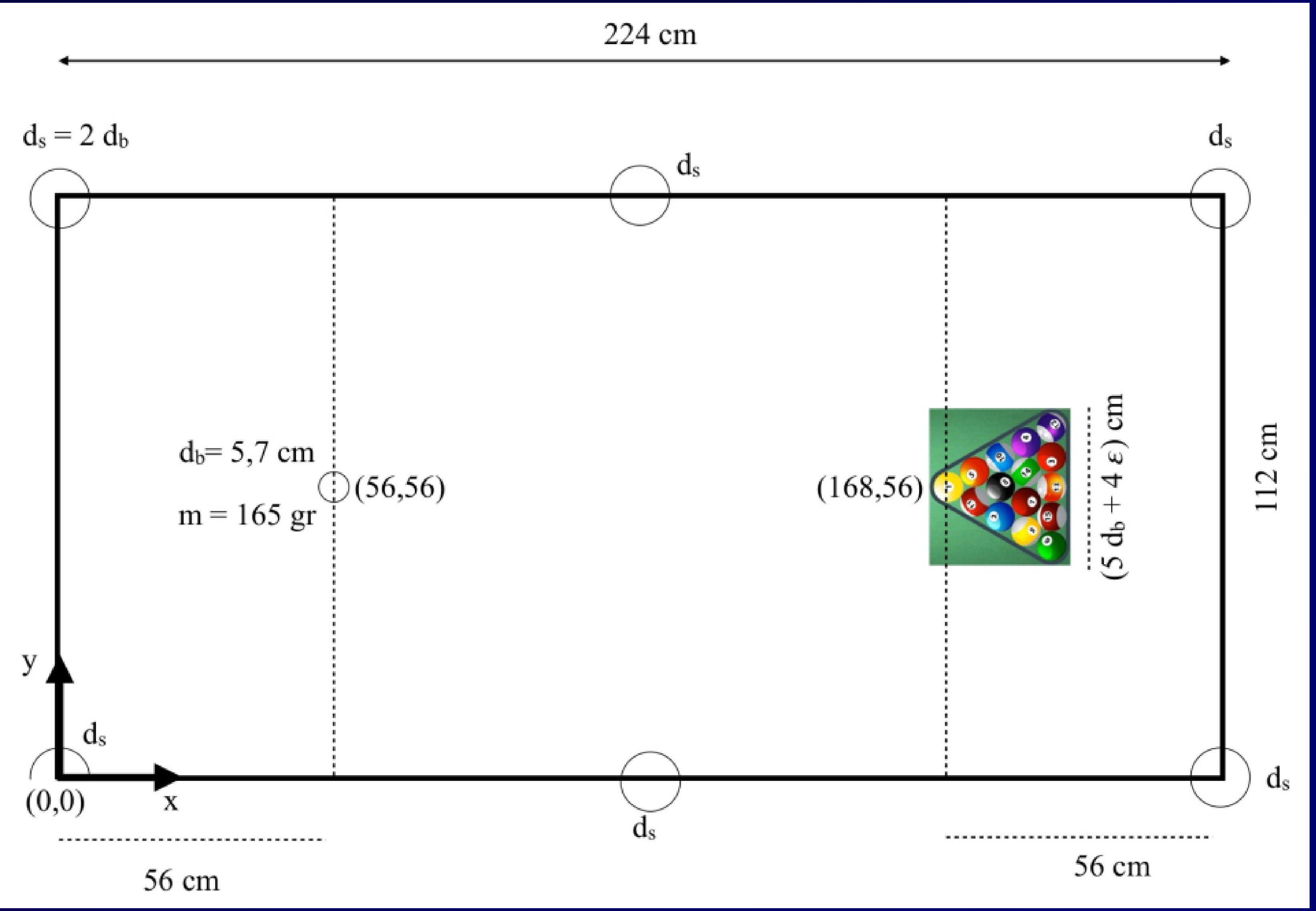
4. Simulaciones

Simulaciones

Sistema a simular: **Mesa de Pool**

Variables a considerar:

- *Altura inicial de bola blanca, y0*
- *Velocidad inicial de bola blanca, v0*
- *Separación entre bolas en triangulo inicial, ε*



Simulaciones

Promedio: $$\overline{X} = \frac{\sum X}{N}$$

Parámetros a medir:

- *Tiempo en el que todas las bolas desaparecen (tiempo total)*
- *Tiempo entre eventos*

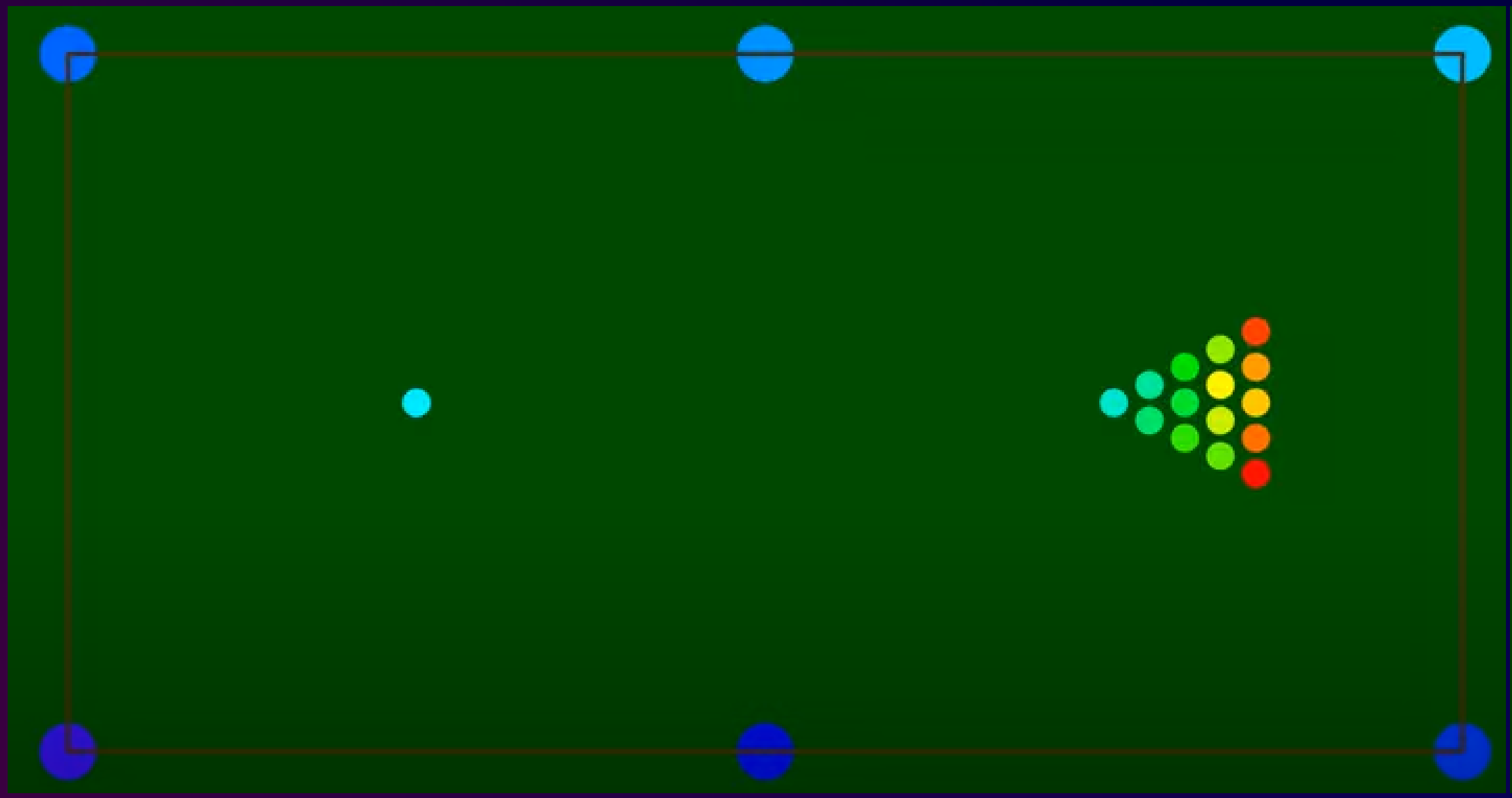
Desvío estándar: $$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_i^N (X_i - \bar{X})^2}{N}}$$

$$\text{error estándar} = \sqrt{\frac{\sigma^2}{n}} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$$

5. Resultados

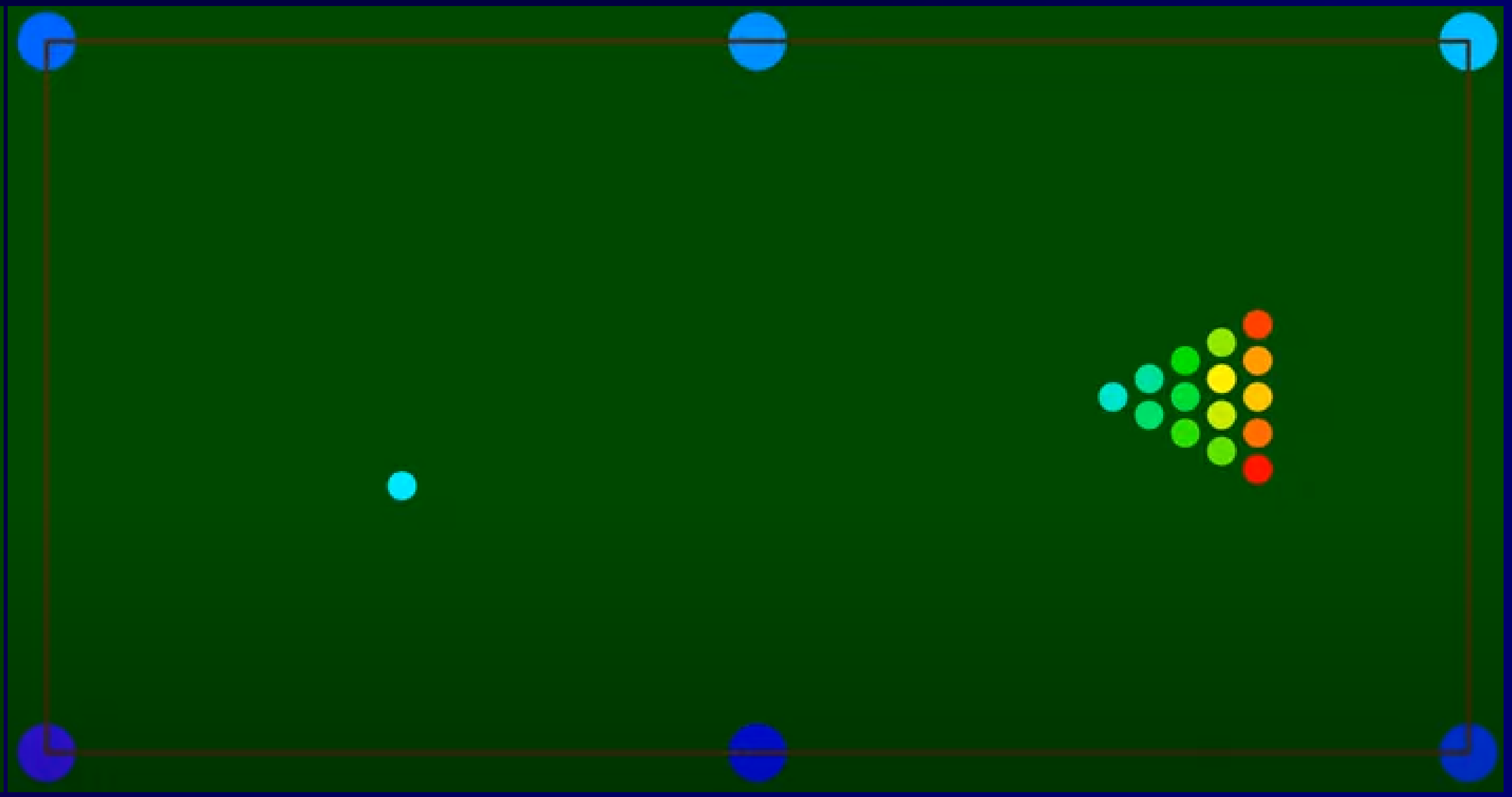
Resultados

Variación de altura inicial (v0 = 2m/s, ε variable, 500 iteraciones)



Altura inicial de bola blanca = 0.56m

https://youtu.be/nswjFZ9zQPQ



Altura inicial de bola blanca = 0.42m

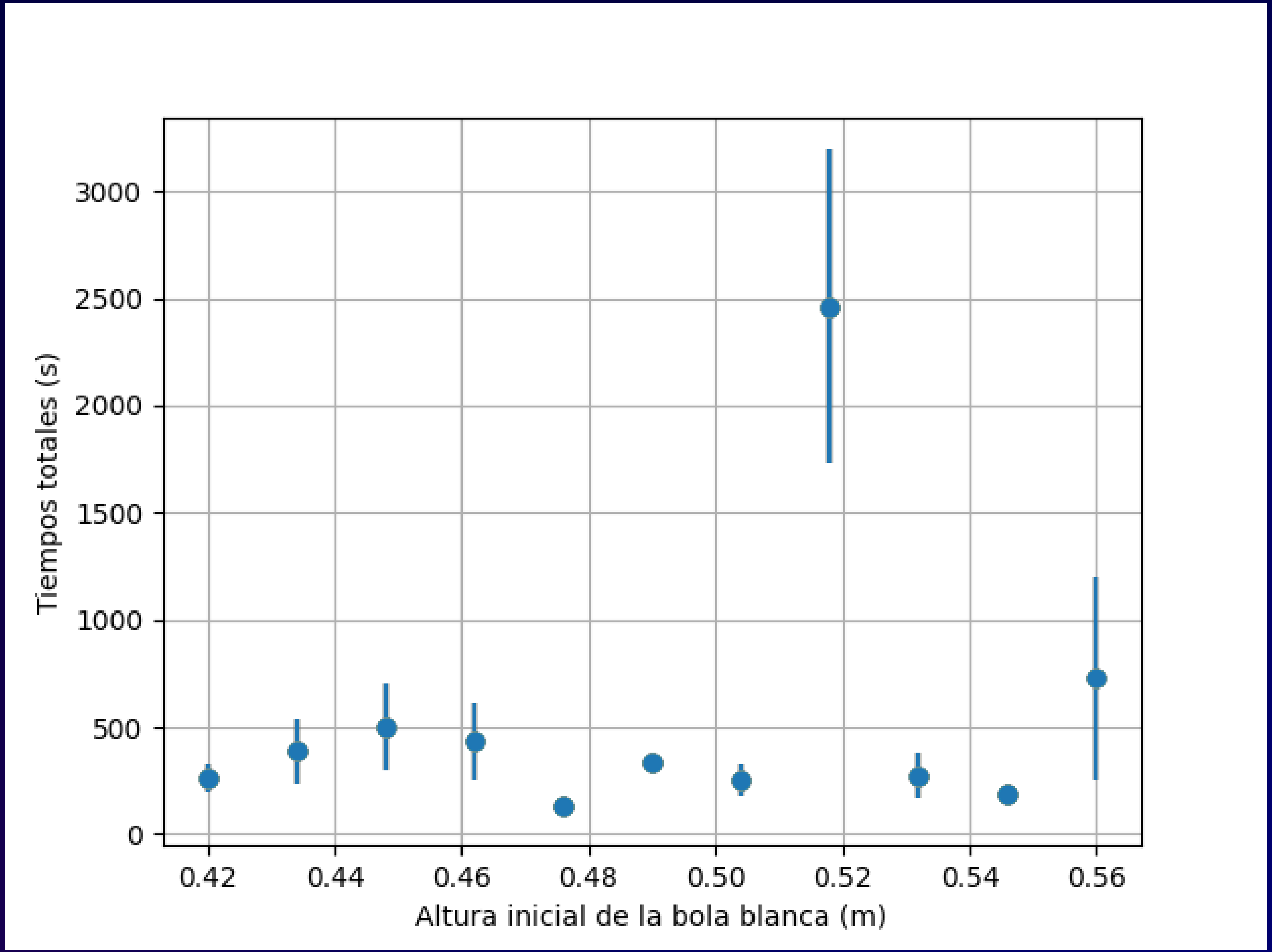
https://youtu.be/TwoDVv072DQ

Tiempo total en función de la altura inicial

Condiciones fijas

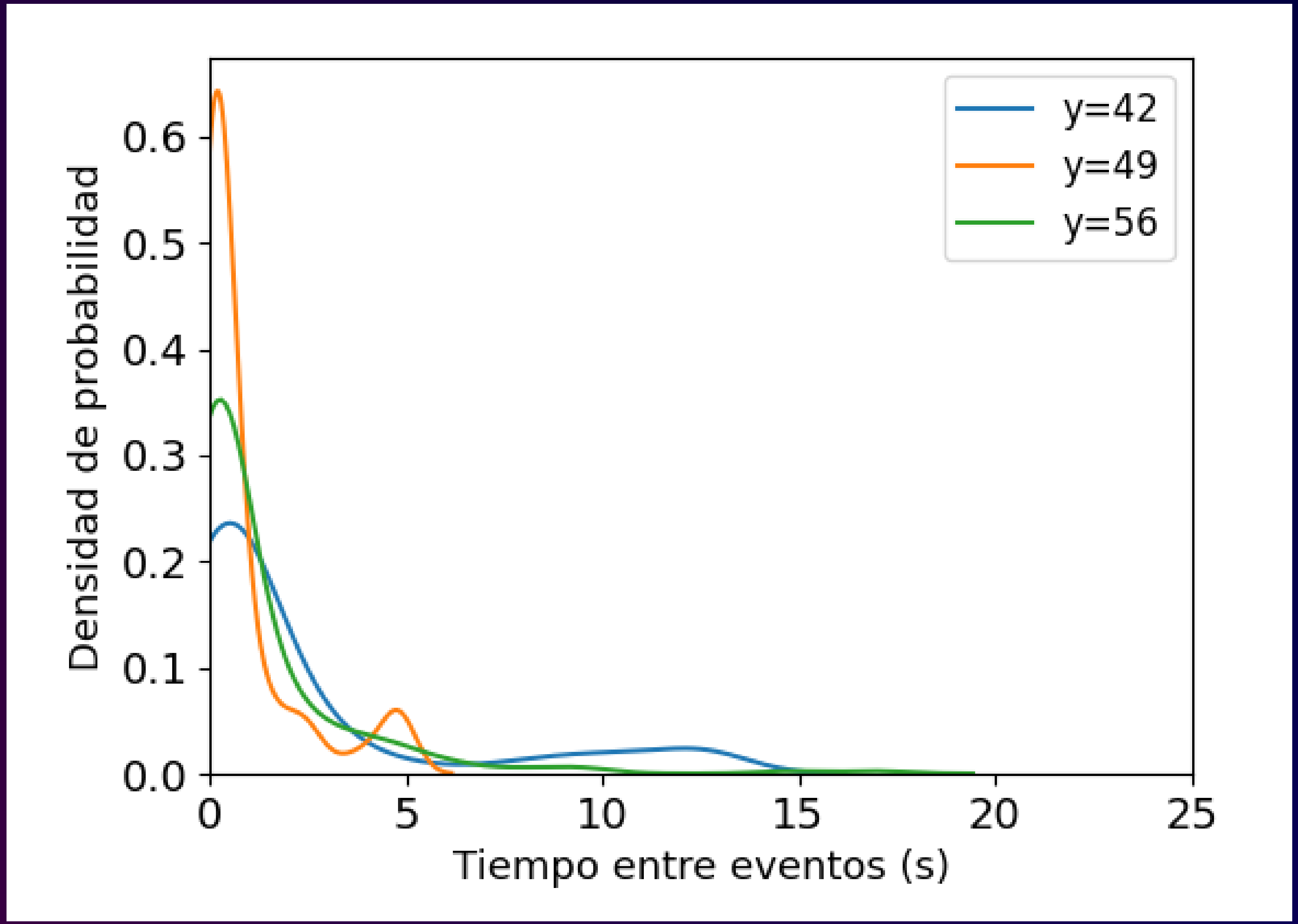
- v = 2.0 m/s
- ε = 0.0003m

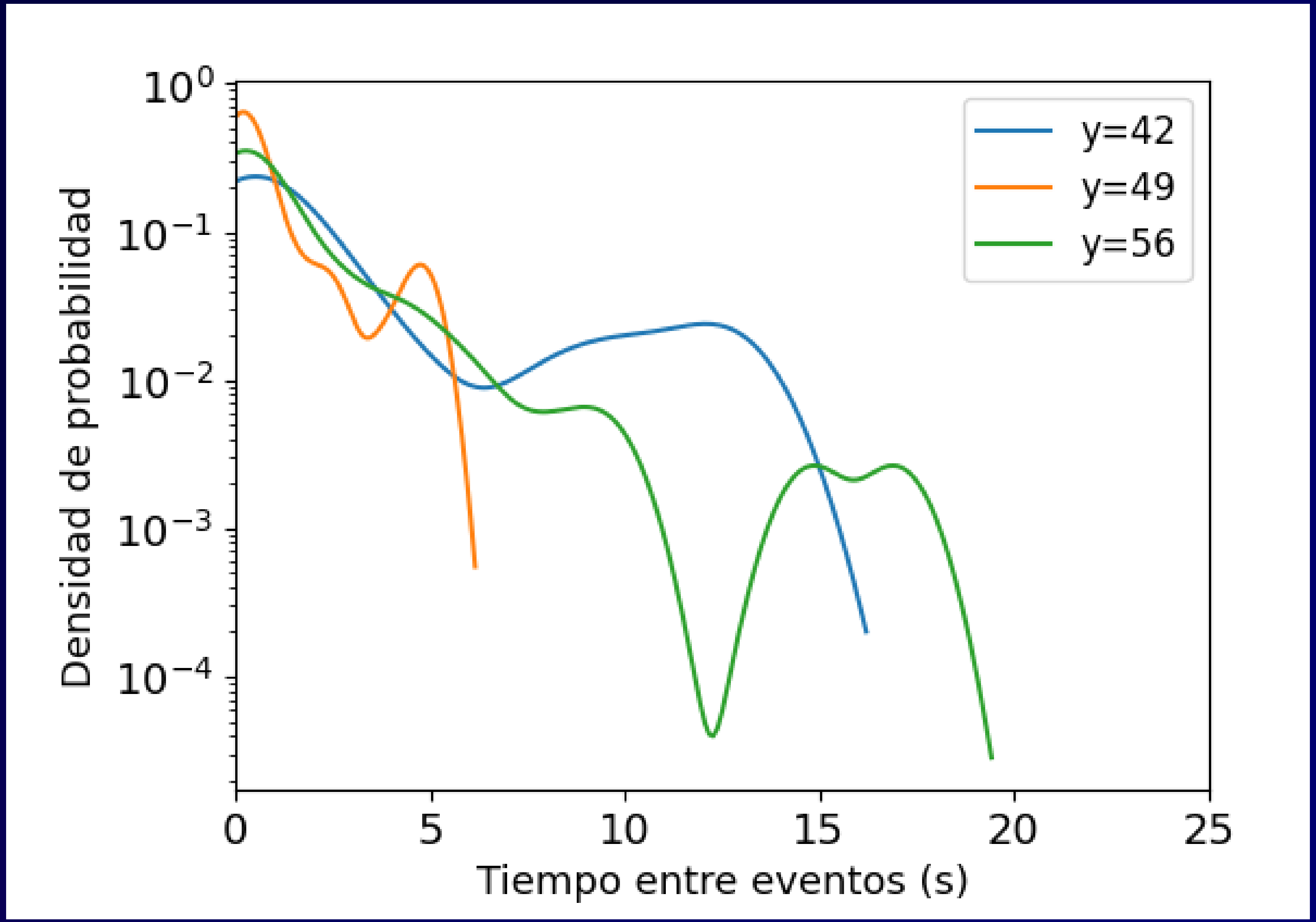
500 iteraciones



Distribución de tiempos entre eventos

Variación de altura inicial (v0 = 2m/s, ε variable, 500 iteraciones)



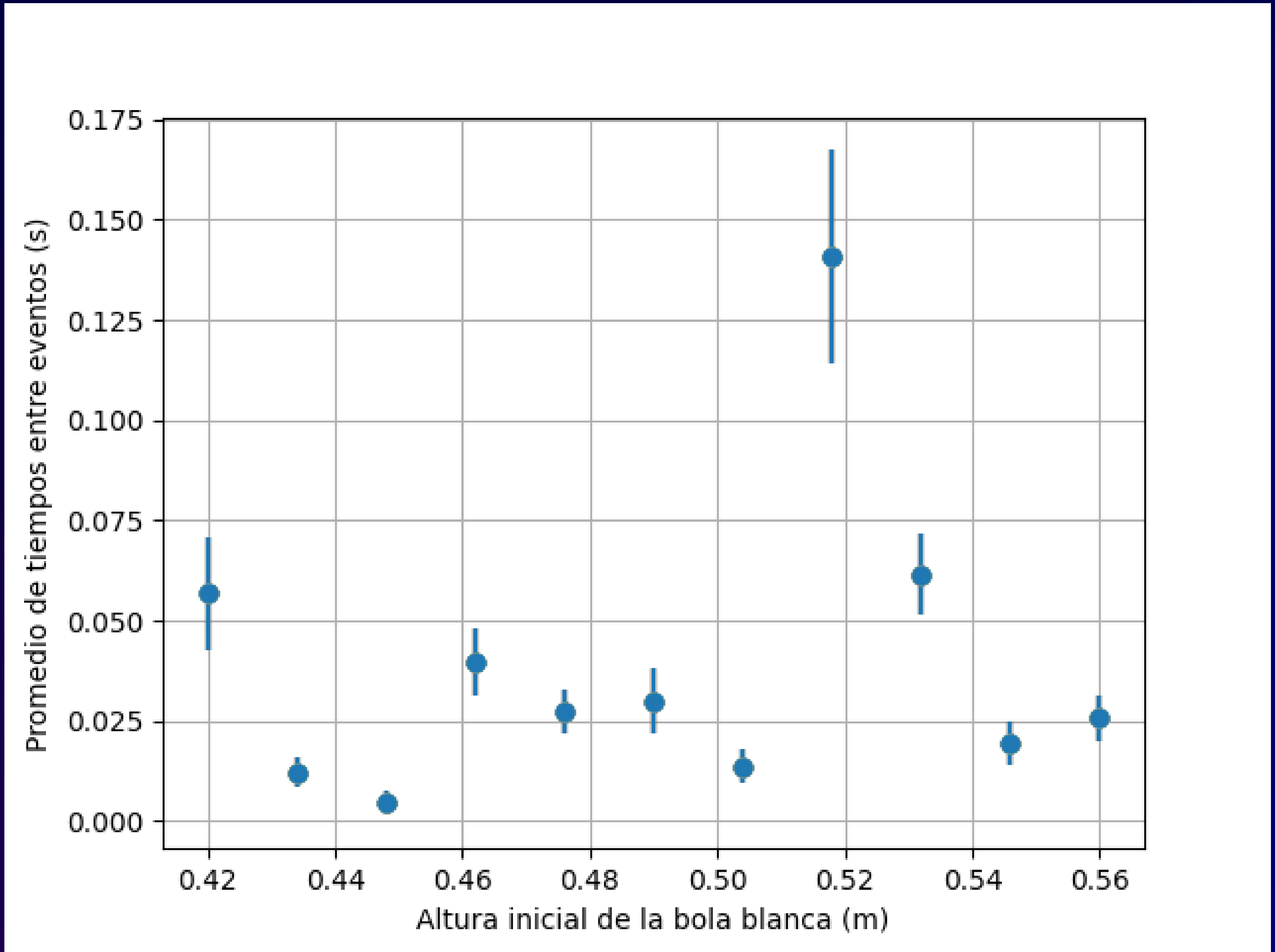


Promedio de tiempos entre eventos en función de la altura inicial

Condiciones fijas

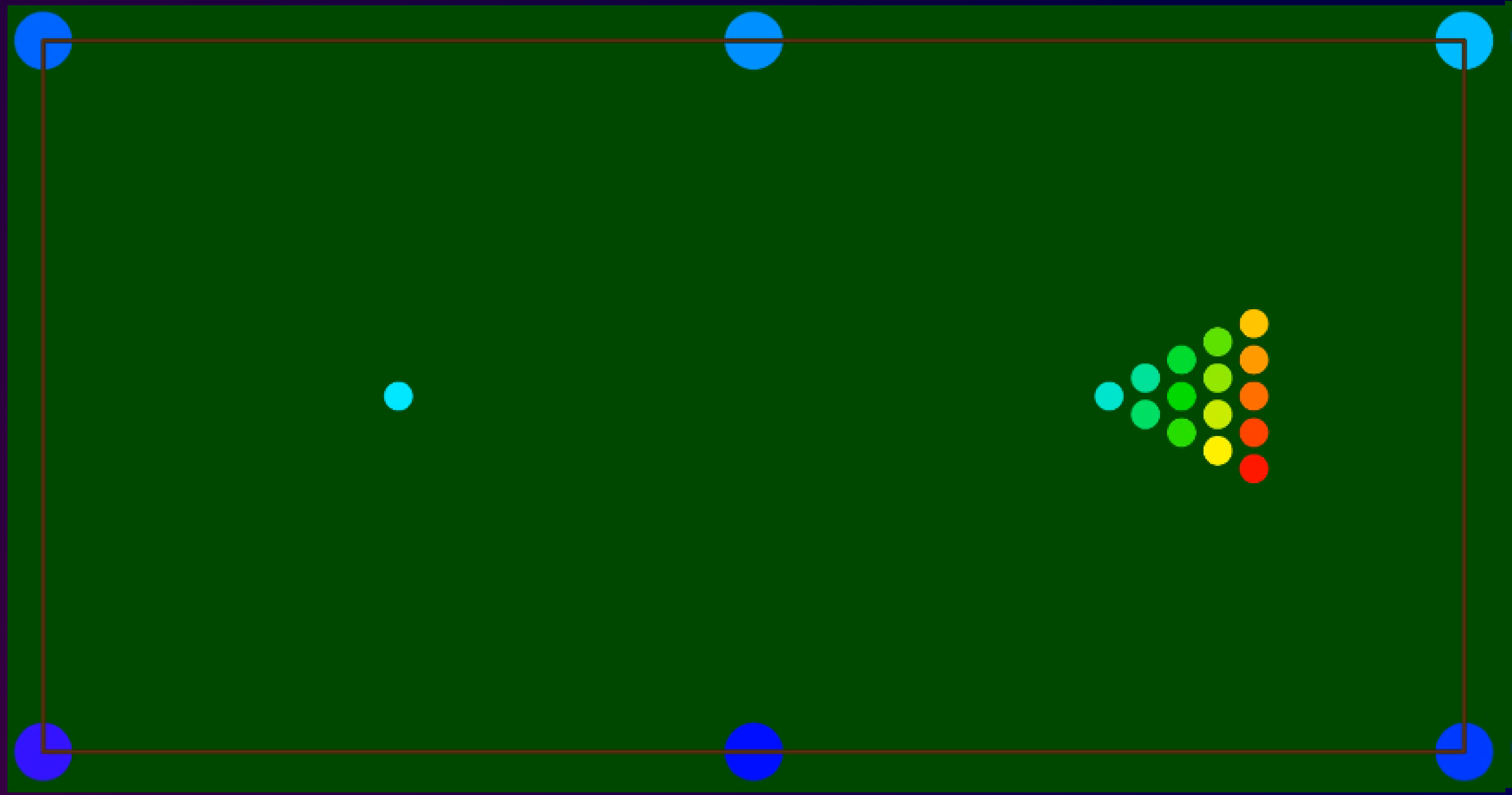
- v = 2.0 m/s
- ε = 0.0003m

500 iteraciones



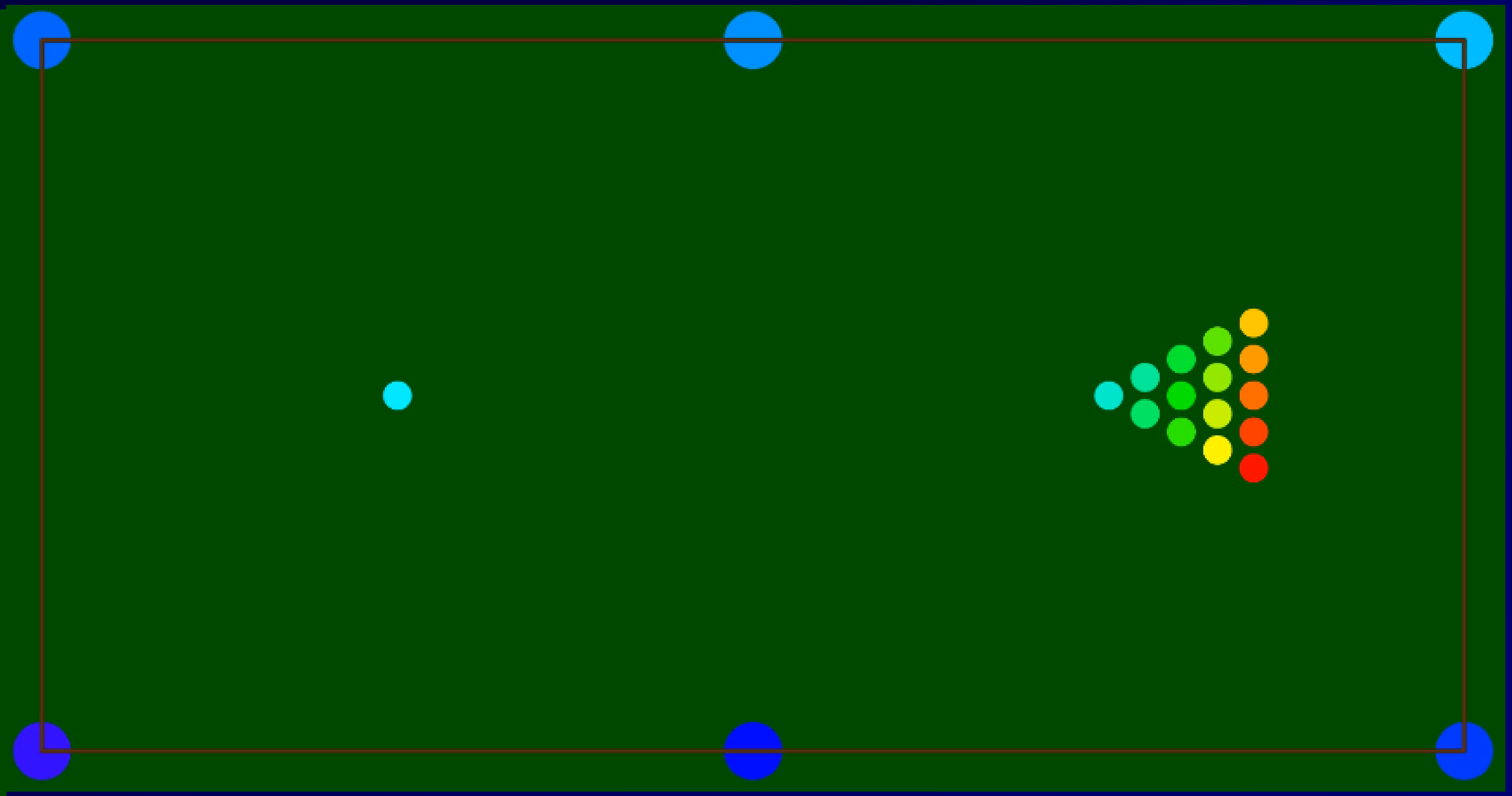
Determinismo y precisión

Condiciones: $v0 = 2m/s$, $y0 = 0.56m$, $\varepsilon = 0.0003m$



10 ordenes de magnitud

https://youtu.be/80csa3Fft9A



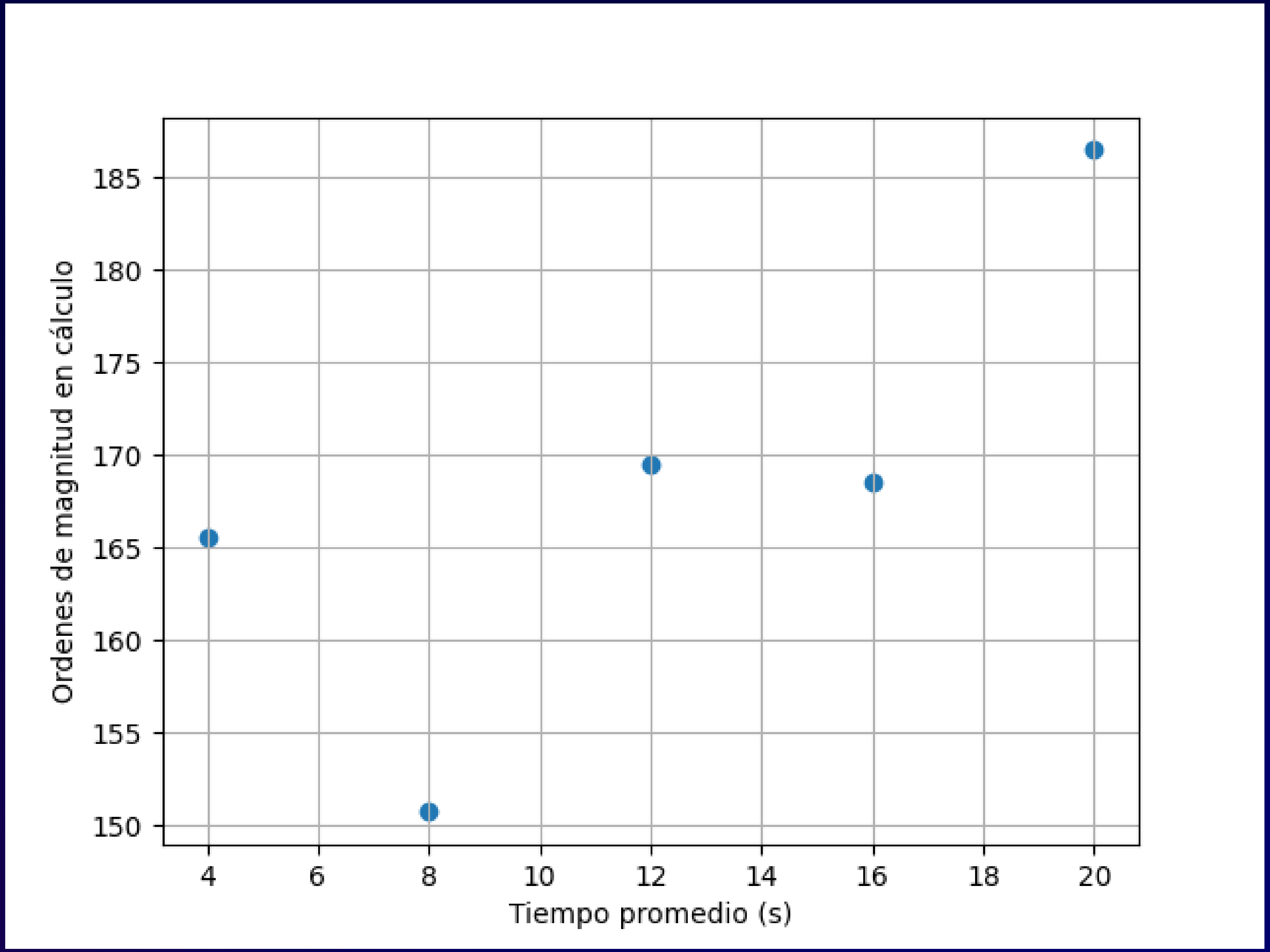
4 ordenes de magnitud

https://youtu.be/WXqx32lKrH8

Variación de tiempos promedio en función de la precisión

Condiciones iniciales:

- $v0 = 2m/s$
- $y0 = 0.56m$
- $\varepsilon = 0.0003m$

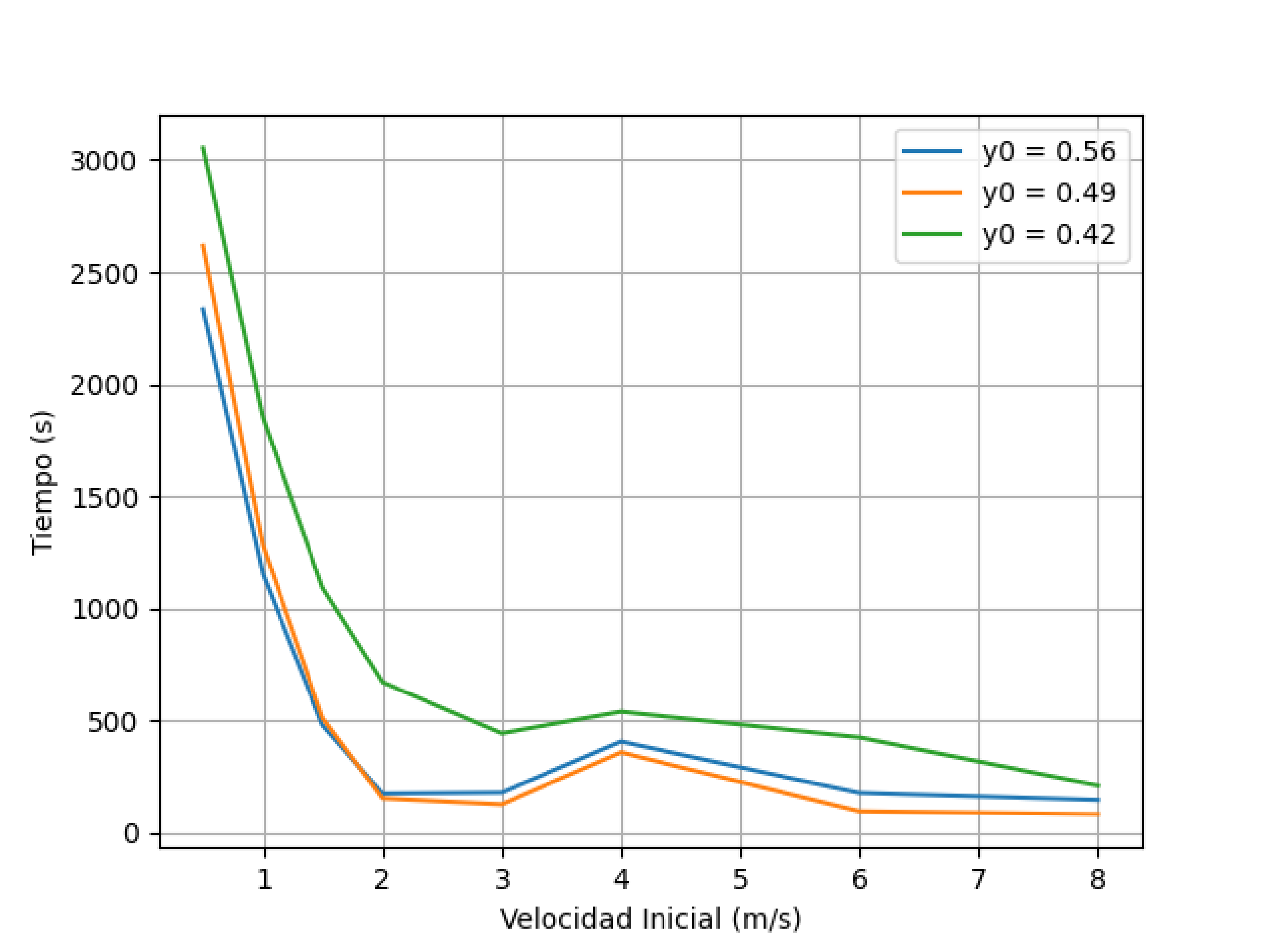


Tiempo total en función de la velocidad inicial

Condiciones iniciales:

- 3 alturas iniciales: 0.56m, 0.49m, 0.42m
- ε = 0.0003m

Se tomaron velocidades iniciales de [0.5, 1, 1.5, 2, 4, 6, 8]



6. Conclusiones

Conclusiones

- *No se observa un comportamiento determinado respecto al cambio de la posición inicial de la bola blanca.*
- *La altura inicial $y = 0.518m$ da un tiempo promedio significativamente mas alto que el resto de las alturas.*
- *El tiempo entre eventos es de corta duración en el comienzo de la simulación, extendiendose hacia el final.*
- *La precisión numérica utilizada en el sistema altera el tiempo de finalización.*
- *Se observa que, a mayor velocidad inicial, menor es el tiempo de finalización en lineas generales.*

FIN

¡Gracias!