Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos

Simulación de Sistemas (72.25)

Grupo 2

- Máximo Chiatellino
- Federico Agustín Etchegorry
- Franco Morroni

Introducción

Introducción

Trayectorias rectas (sin gravedad)

Desplazamiento de la partícula i

- $x_i(t) = x_i(0) + vx_i(t)$
- $y_i(t) = y_i(0) + vy_i(t)$

Tiempo de choque (t_c) con paredes verticales

Sean $x_{p1} < x_{p2}$ las coordenadas de las paredes

- Si $vx_i > 0 : (x_{p2} - R) = x(0) + vx\ t$

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

- Si $vx_i < 0 : (x_{p1} - R) = x(0) + vx\ t$

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

(idem para paredes horizontales y coordenada *y*)

Introducción

Trayectorias rectas (sin gravedad)

Tiempo de choque (t_c) entre partículas

- $(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 = (R_i + R_j)^2$

Reemplazando y simplificando:

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

$$siendo: \quad \sigma = R_i + R_j$$

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

Introducción

Trayectorias rectas (sin gravedad)

Colisión entre partículas (choque elástico)

Conservación del impulso (J_x , J_y)

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

m_i y m_j masas de las partículas

Luego las velocidades quedan

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

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

Colisión con "Partícula-Paredes" verticales y horizontales

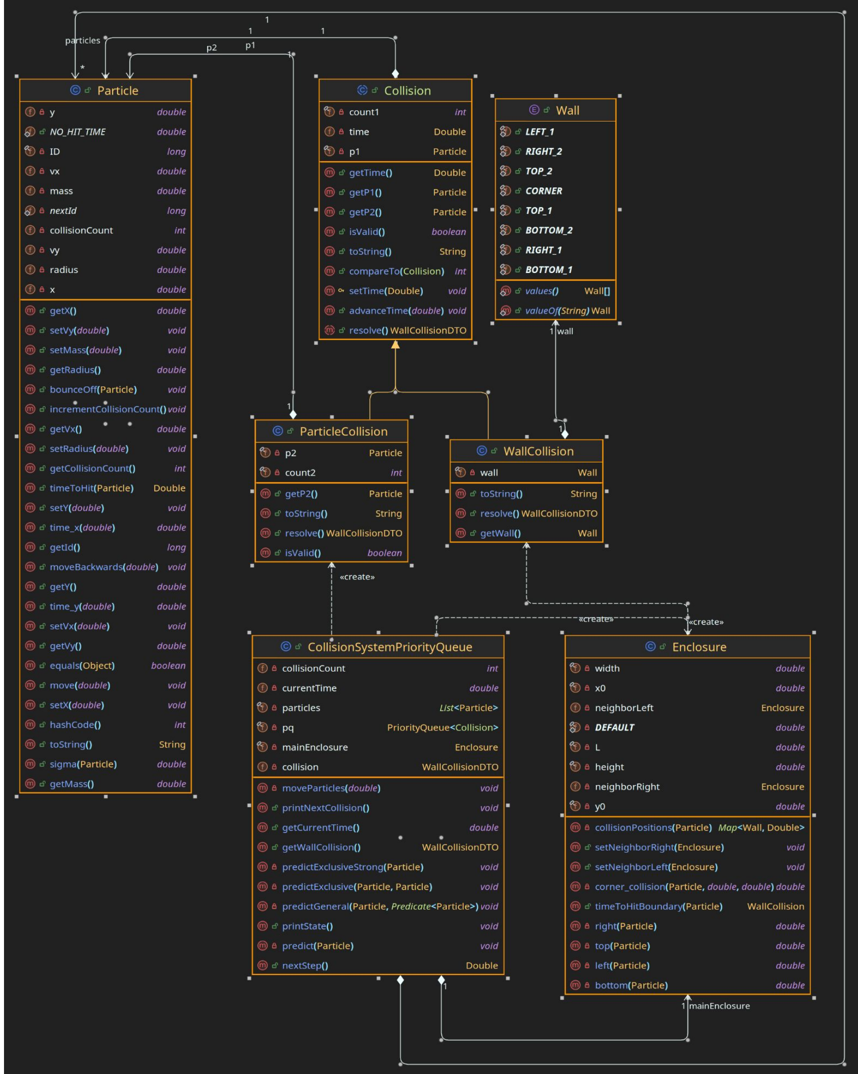
Partícula con velocidad (vx, vy)

- Si choca con pared Vertical ➔ (-vx, vy)
- Si choca con pared Horizontal ➔ (vx, -vy)
- Si choca con vértice interno ➔ (-vx, -vy)
- Si choca con vértice externo ➔ igual que choque con partícula

Implementación

Implementación

UML



Implementación

Flujo

Cada partícula predice sus próximas colisiones:

- ParticleCollision
- WallCollision

Colisiones encoladas en Priority Queue, ordenadas por tiempo.

El flujo principal:

- Saca la colisión más próxima de la queue.
- Avanza las partículas a ese tiempo.
- Resuelve la colisión.
- Las partículas involucradas recalculan sus colisiones y estas se insertan en la cola.

Cada partícula tiene un contador de colisiones:

Cada evento en la queue guarda la “foto” de este contador.

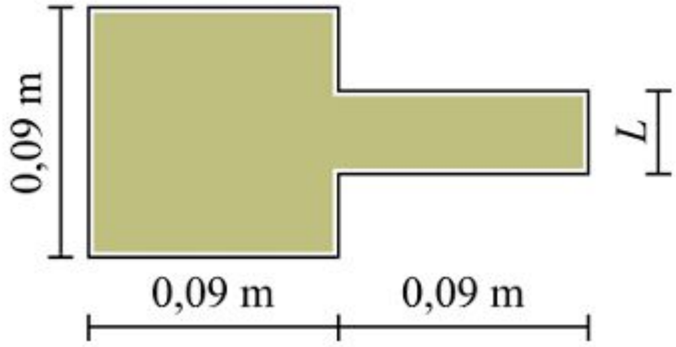
Si al sacar la colisión el contador cambió, el evento se descarta (ya es obsoleto).

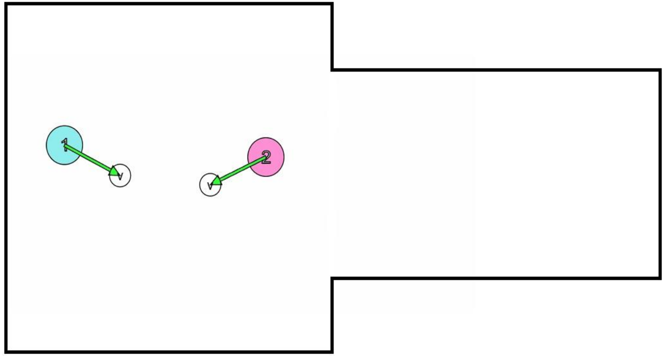
Simulaciones

Simulaciones

Geometría

El dominio de la simulación:
Dos recintos unidos





Simulaciones

Parámetros fijos

N = 300 (Cantidad de partículas) con:

- Radio (r) = 0.0015 m
- Masa (m) = 1kg
- Velocidad (v) con |v| = 0,1 m/s
- Posiciones y direcciones aleatorias dentro de recinto izquierdo

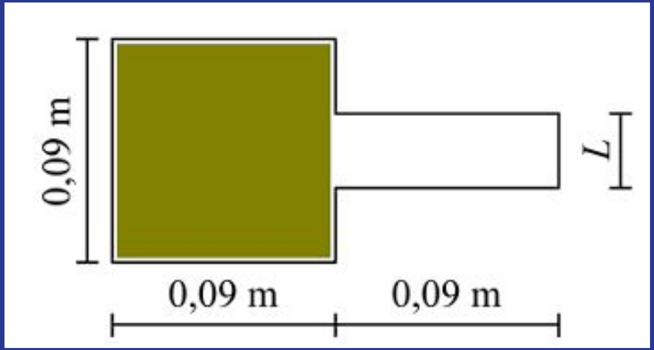
Longitud paredes (excepto las que dependen de L) = 0.09 m

Inputs

$L \in \{0{,}03; 0{,}05; 0{,}07; 0{,}09\}$ m

Outputs

Colisiones con paredes
Estado del Sistema



Simulaciones

Observables Temporales

Presión

Módulo de la Fuerza(*|F|*) por unidad de longitud ejercida por las partículas contra las paredes.

Para *i* colisiones en perímetro τ :

$$P = \frac{|F|}{\tau} = \frac{dp}{dt}\frac{1}{\tau} = \frac{|\Delta p|}{\Delta t \tau} = \sum_i \frac{\Delta p_i}{\Delta T \tau} = \sum_i \frac{2m|v_c|}{\Delta T \tau}$$

v_c componente de la velocidad normal a la pared
p la cantidad de movimiento

Desplazamiento cuadrático medio

Desplazamiento medio de una partícula.

$$MSD = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}(\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x_i}(0))^2$$

$\mathbf{x_i(t)}$ = posición de partícula *i* luego de *t* segundos

Simulaciones

Observables Escalares

Coeficiente de difusión (*D*)

$$< z^2 > \propto Dt$$

$$< z^2 > = 4Dt$$

$<z^2>$ es el Desplazamiento Cuadrático Medio
D es el Coeficiente de Difusión

2 dimensiones

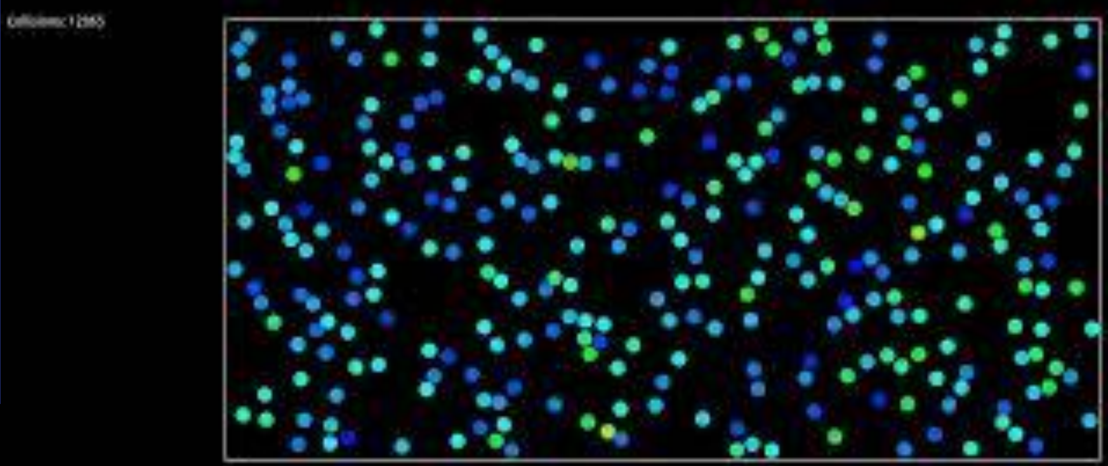
Presión promedio: $< P >$

Se promedia la presión ($<P>$) entre el tiempo estacionario y t_{max}

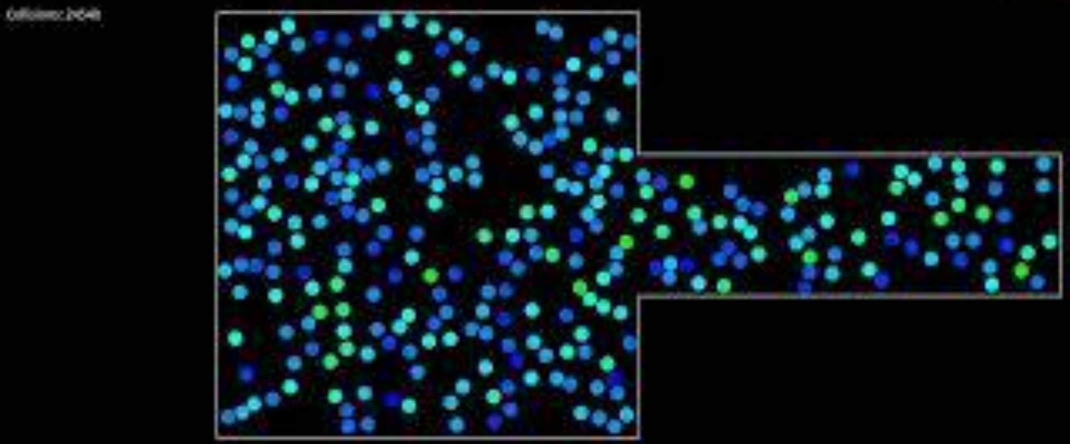
Resultados

Resultados

L=0.09



L=0.03



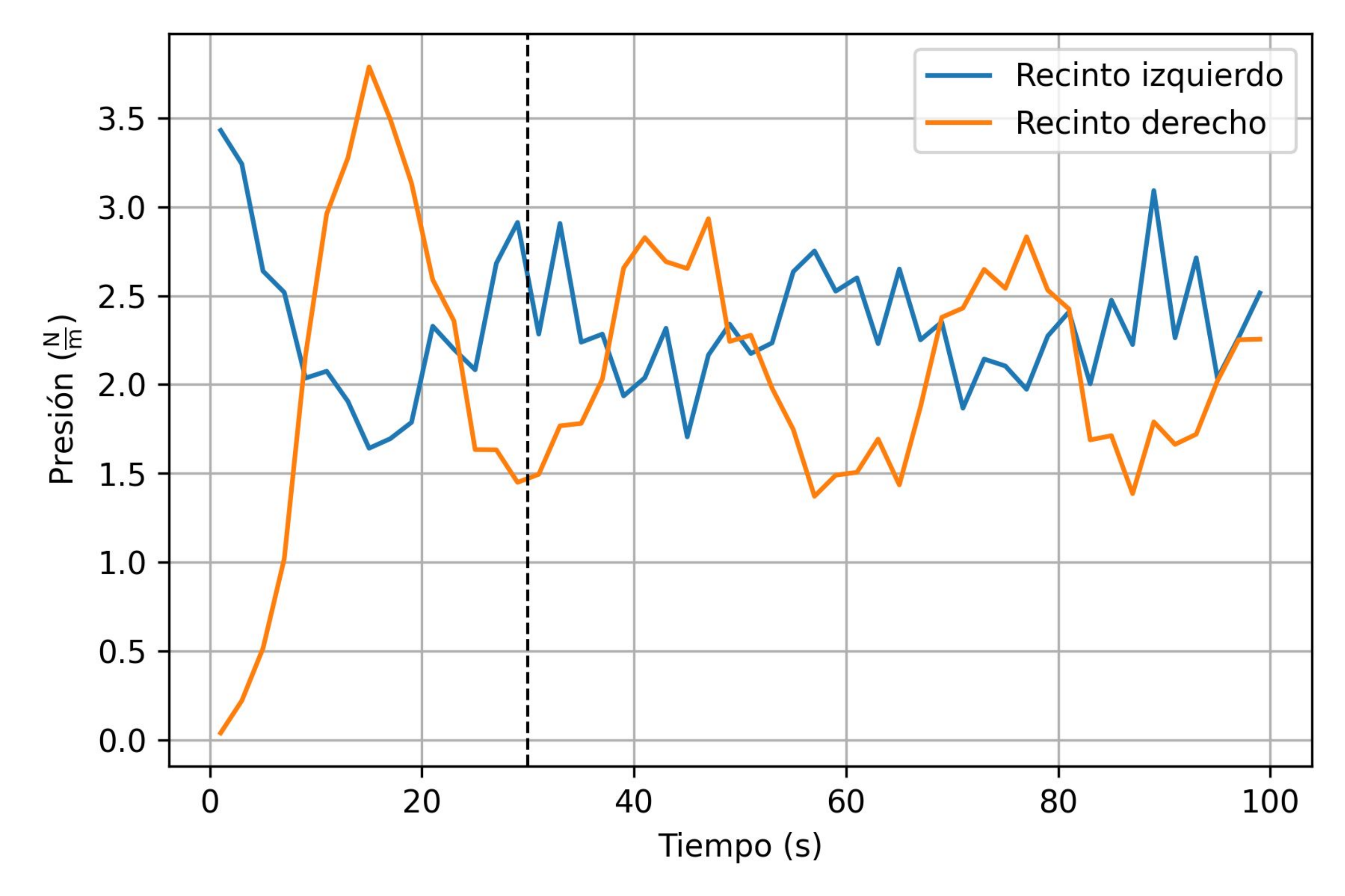
https://youtu.be/ipwSF2M4pAY

https://youtu.be/4367M5zXpqo

Resultados

Observable Primario: *P* vs. *t* variando *L*

1.1)

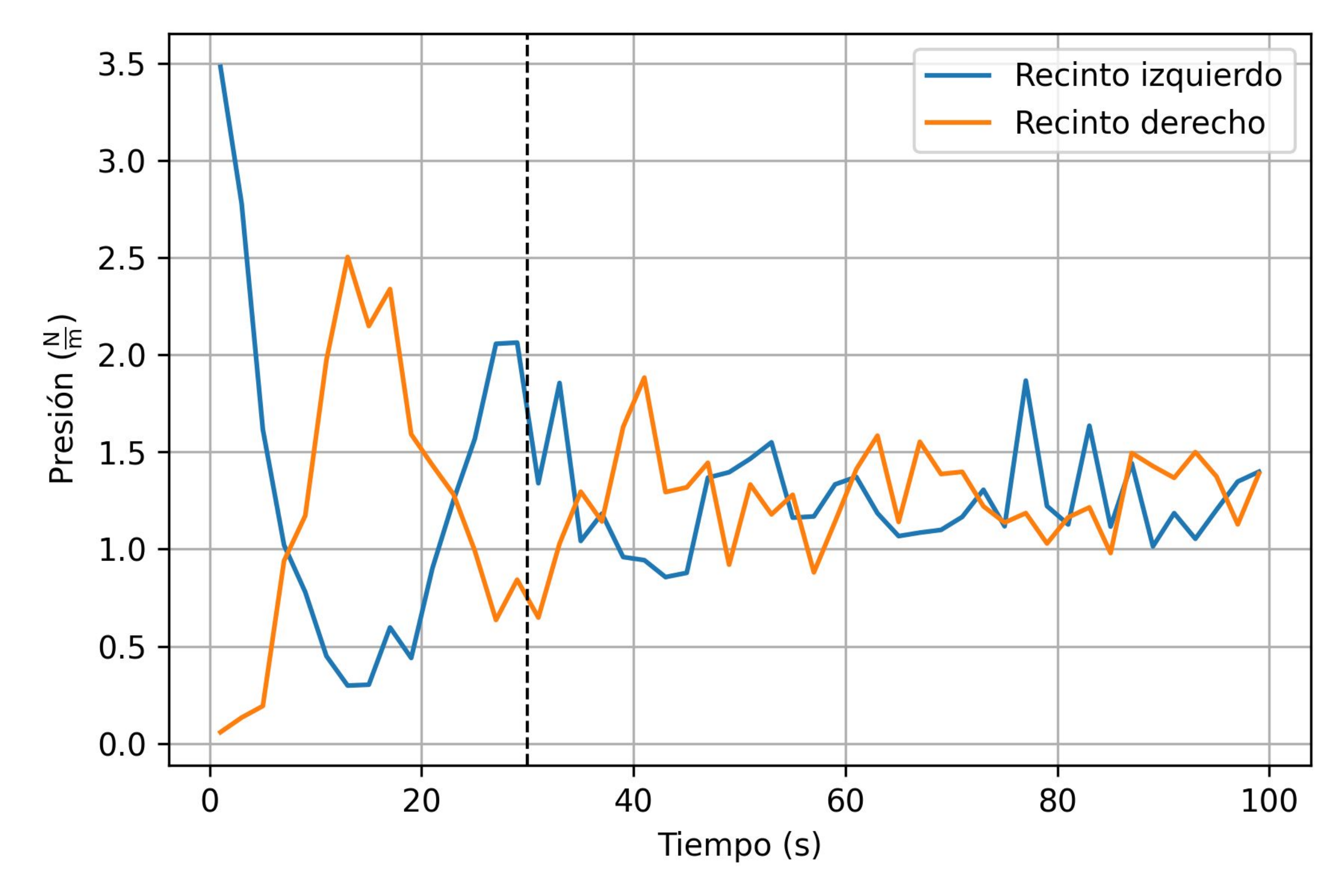


L = 0.03m
Δt = 2 s

Estacionario
a ojo

Resultados
Observable Primario: *P* vs. *t* variando *L*

1.1)



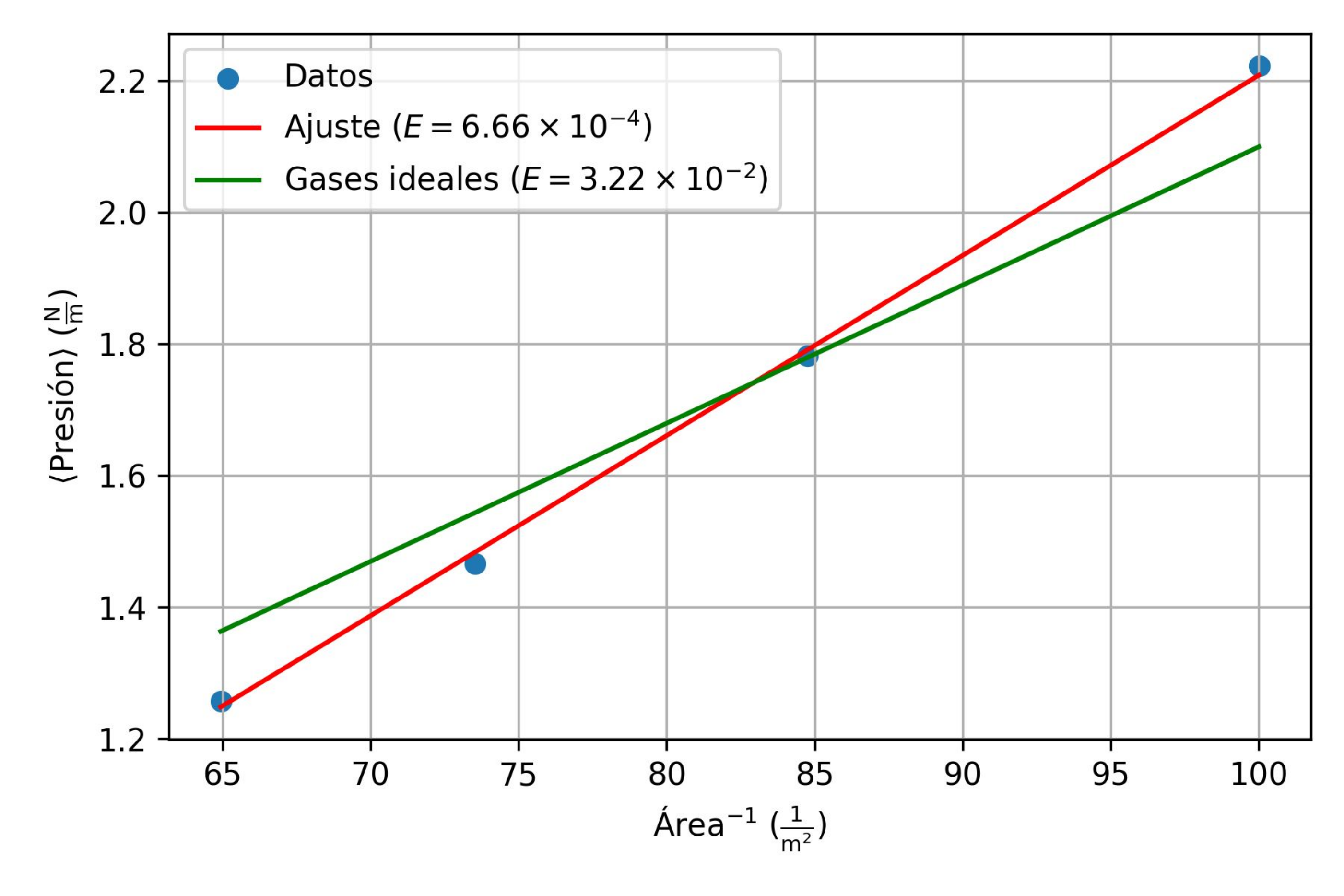
L = 0.09 m
Δt = 2 s

Estacionario a ojo

Resultados

Observable Escalar: <*P*> vs. A^{-1}

1.2)

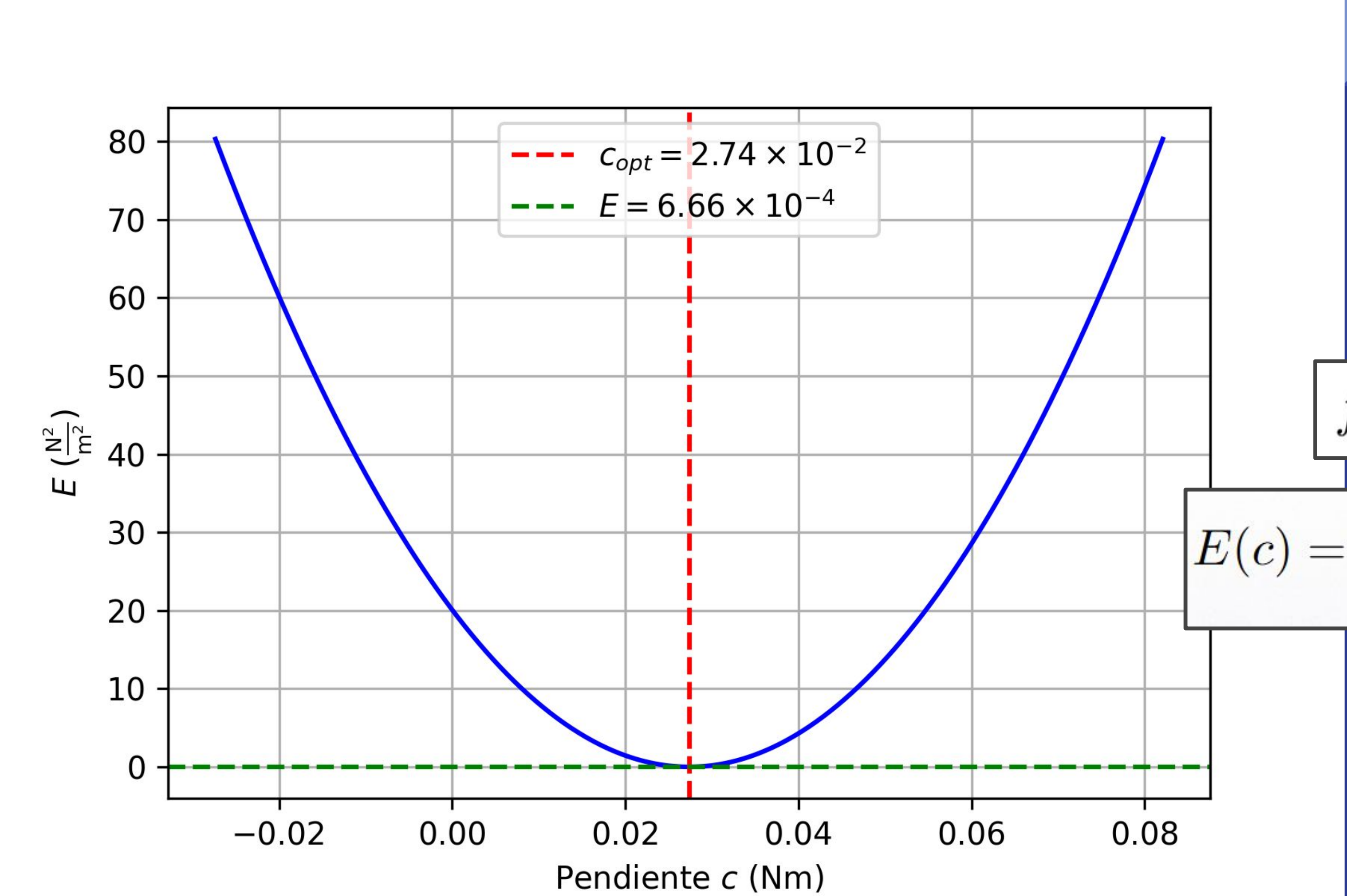


$L \in \{$
0,03;
0,05;
0,07;
0,09
$\}$ m

$T_{max} = 100$ s

Resultados Error del Ajuste: <P> vs. A^{-1}

1.2)



Con b constante extrapolando el primer y último punto.

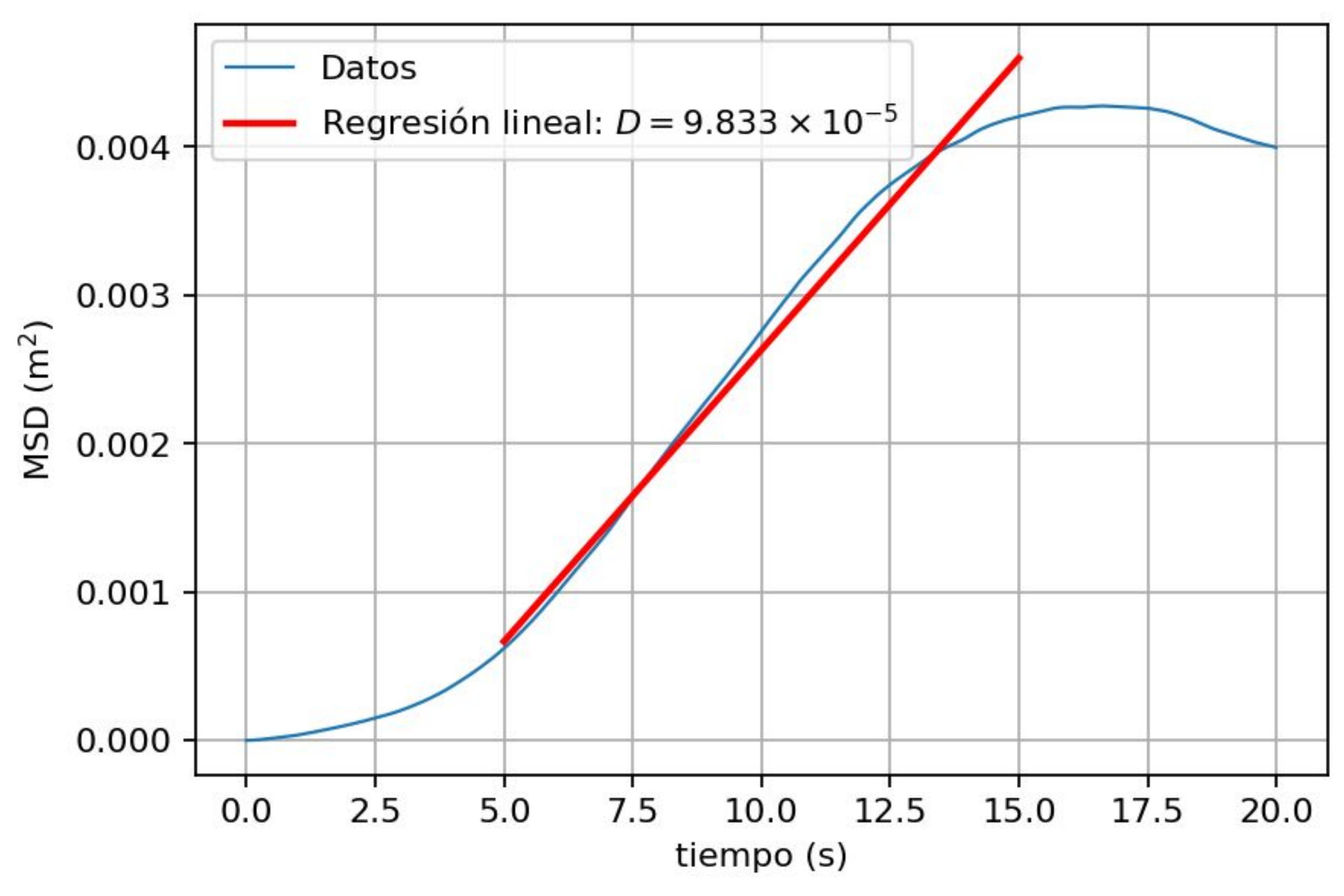
$$f(x, c) = cx + b$$

$$E(c) = \sum_i [y_i - f(x_i, c)]^2$$

Resultados

Observable Primario: MSD vs t.
Escalar: Coeficiente de Difusión

1.4)

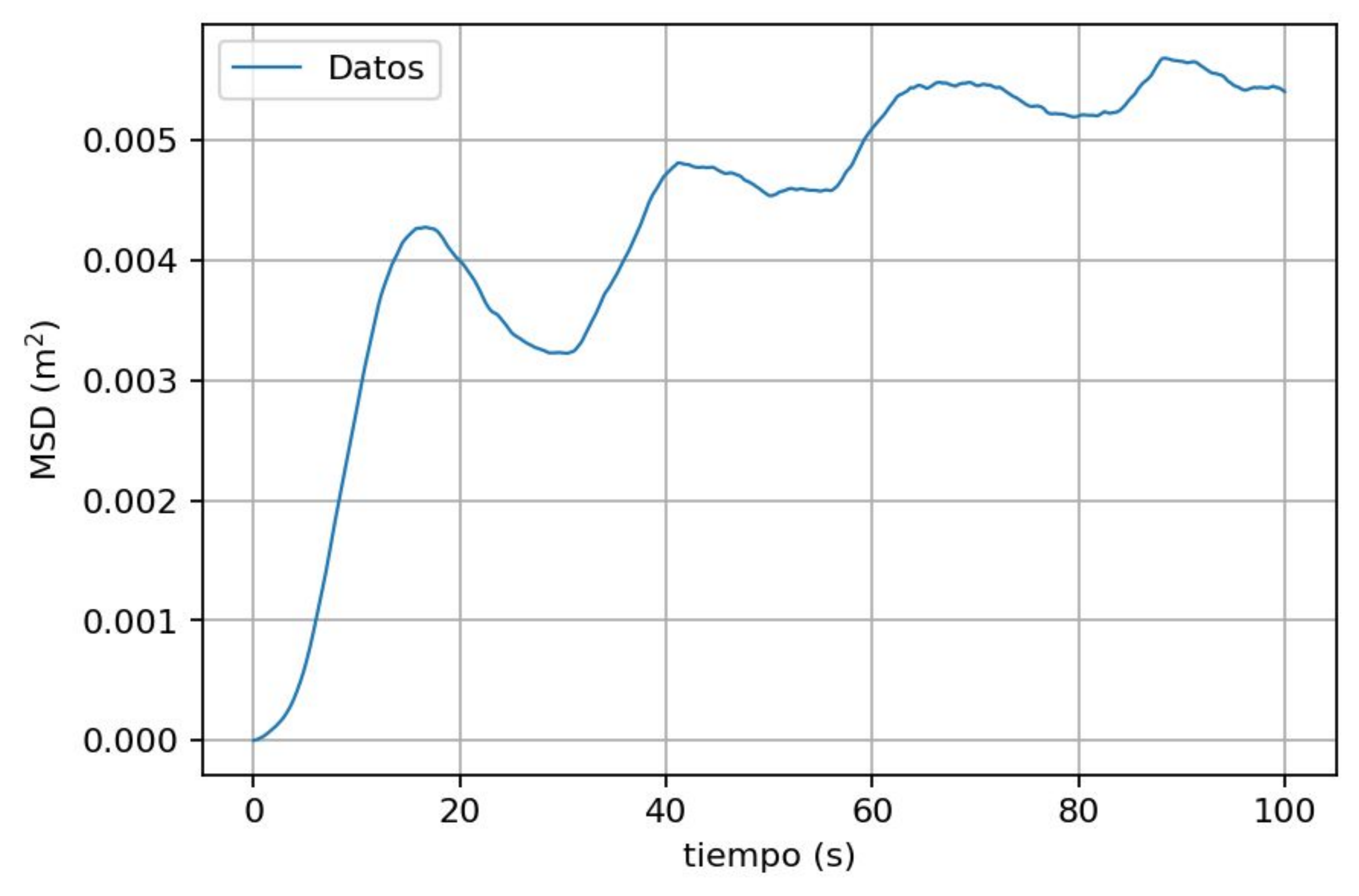


L = 0.09 m

Resultados

Observable Primario: MSD vs t.
Escalar: Coeficiente de Difusión

1.4)

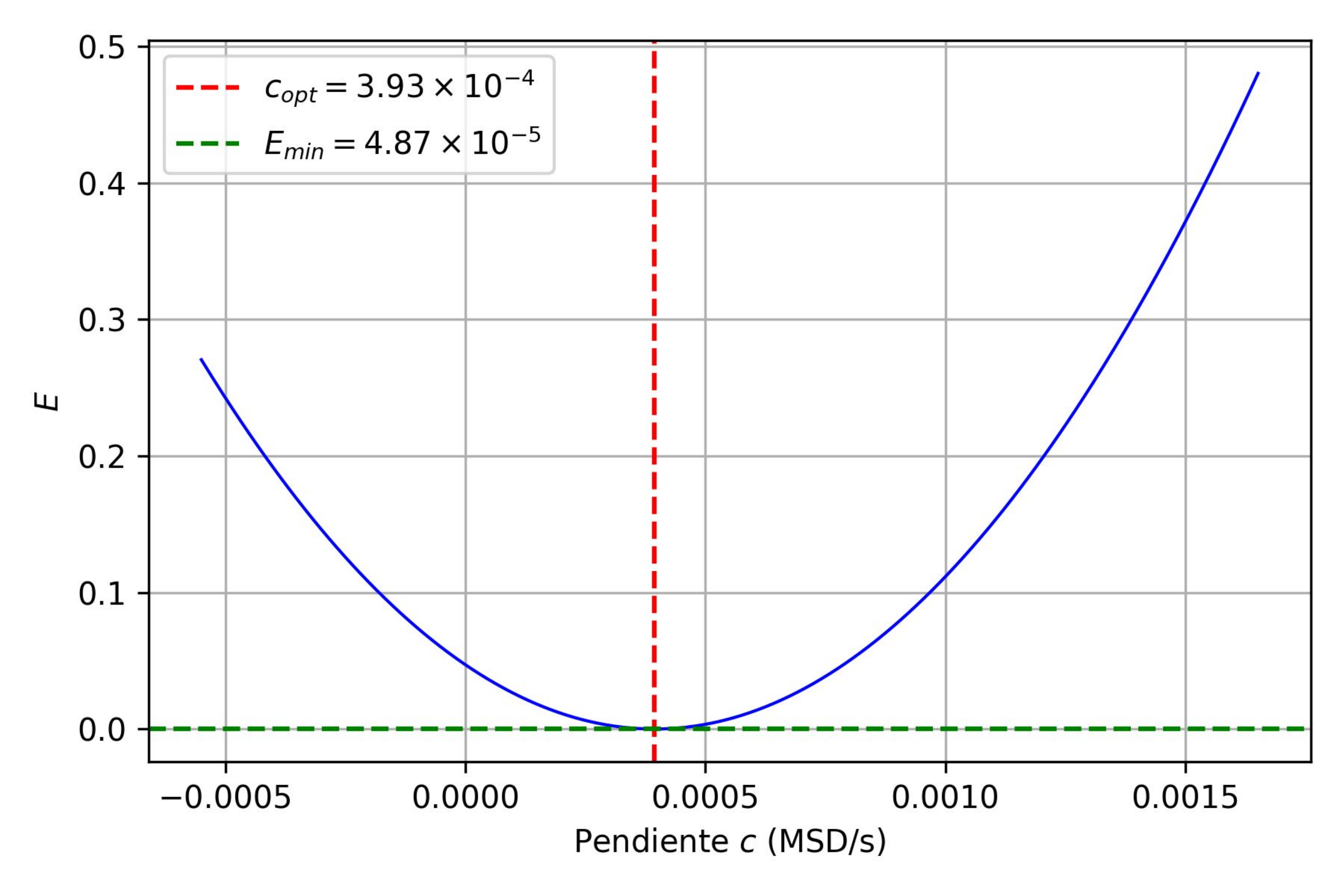


L = 0.09 m

Resultados

Error del ajuste: MSD vs t.

1.4)



Con b = -0.0013

Conclusiones

Conclusiones

- Ley de gases ideales: al aumentar *L* crece el área disponible y la presión disminuye. El gráfico *<P>* vs. A^{-1} muestra una relación casi lineal aunque no cumple Ley de gases ideales.
- Difusión normal: el MSD crece linealmente con el *t* estudiado permitiendo estimar *D* con ajuste lineal.
- Consistencia global: *<P>* vs. A^{-1} y *MSD* muestran lo mismo:
  más espacio efectivo ⇒ menos choques por longitud por tiempo ⇒ menor presión.

Fin.