

Event Driven Molecular Dynamics

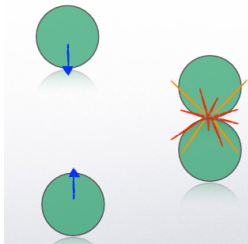
Grupo 5

ITBA

Gas ideal, sistema de partículas rígidas por eventos

Trayectoria recta, colisiones elásticas y sin gravedad

- N partículas en movimiento.
- Cada partícula con su movimiento, posición, radio y masa.
- Viajan sin fuerzas externas.
- Colisiones elásticas entre partículas.
- Simulación de un sistema de eventos.



Modelo Matemático

- Vuelo libre de las N partículas en un espacio 2D:
 - $x_i(t) = x_i(0) + v_{x_i} t$
 - $y_i(t) = y_i(0) + v_{y_i} t$
- Cálculo de tiempo de colisión contra paredes:
 - $t_c = \infty$ si $dv \cdot dr \geq 0$,
 - $t_c = \infty$ si $d < 0$, siendo:

$$d = (dv \cdot dr)^2 - (dv \cdot dv) \cdot (dr \cdot dr - \sigma^2),$$
 - $\sigma = r_i + r_j$
 - Colisión con paredes espejan la velocidad en la normal de colisión.

Modelo Matemático

- Cálculo de impulso y velocidades post-colisión de partículas:

- $J_x = J * dx / \sigma$

- $J_y = J * dy / \sigma$

- $J = \frac{2m_i m_j}{m_i + m_j} \cdot \frac{dv \cdot dr}{\sigma}$

- $vx_i^d = vx_i^a + J_x / m_i$

- $vy_i^d = vy_i^a + J_y / m_i$

- $vx_j^d = vx_j^a - J_x / m_j$

- $vy_j^d = vy_j^a - J_y / m_j$

- Coeficiente cuadrático medio: $\langle z^2 \rangle = 2Dt$

Implementación

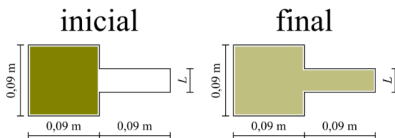
- Arquitectura del código.
- Pseudocódigo o UML.
- N partículas de radio r_i y masa m_i .
- Posición (x_i, y_i) y velocidad (v_{x_i}, v_{y_i}) .
- Colisiones elásticas entre partículas y paredes.
- Condiciones de frontera: Paredes rígidas.

Implementación de vértices

- Arquitectura del código.
- Pseudocódigo o UML.
- N partículas de radio r_i y masa m_i .
- Posición (x_i, y_i) y velocidad (v_{x_i}, v_{y_i}) .
- Colisiones elásticas entre partículas y paredes.
- Condiciones de frontera: Paredes rígidas.

Geometría del sistema y ubicaciones iniciales

Dos cajas A y B, conectadas por una abertura de tamaño L .



Las partículas se distribuyen uniformemente en la caja A al inicio de la simulación sin superponerse.

Parámetros de la simulación

Constantes

- Numero de partículas: 250.
- Dimensiones caja A: 0.09 m ancho x 0.09 m alto.
- Dimensiones caja B: 0.09 m ancho.
- Radio partículas: 0.0015 m.
- Masa partículas: 0.01 kg.
- Velocidad inicial: 0.01 m/s.
- EPS: $1e-12$.

Variables

- L puede tomar los valores de: 0.09 m, 0.07 m, 0.05 m y 0.03 kg.

Definición matemática de observables

Observables

- Presión en las cajas A y B.
- Calculándolas como la suma de los impulsos por colisiones contra la pared por unidad de tiempo.
- Se obtiene con la fórmula:

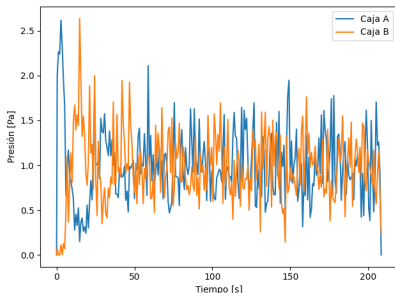
$$P = \frac{1}{A} \sum J_i \quad (1)$$

Animaciones

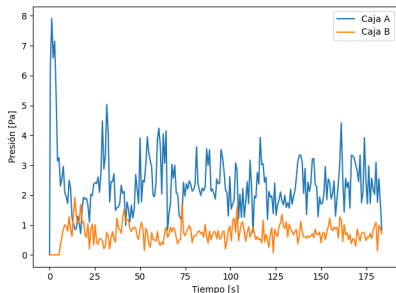
ejemplo.png

Evolución temporal del observable

Presión en función del tiempo para $L = 0.09$ m.



Presión en función del tiempo para $L = 0.07$ m.

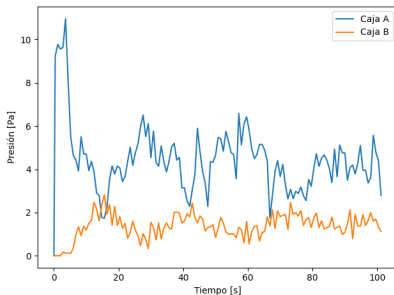


Podemos tomar estacionario a partir de los 20 segundos. Con: $N = 250$, $r = 0.0015$ m, $m = 0.01$ kg.

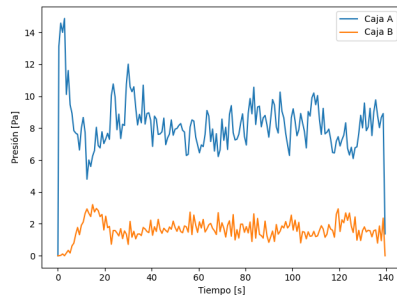
Primer estudio: Presión vs A^{-1}

Evolución temporal del observable

*Presión en función del tiempo para
 $L = 0.05$ m.*



*Presión en función del tiempo para
 $L = 0.03$ m.*



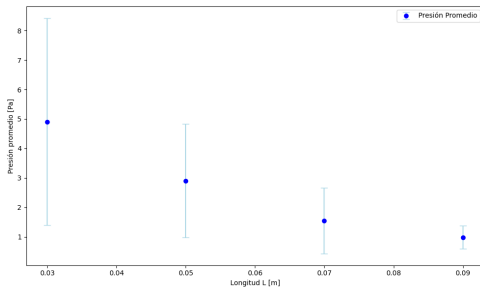
Podemos tomar estacionario a partir de los 20 segundos. Con: $N = 250$, $r = 0.0015$ m, $m = 0.01$ kg.



Input vs Observable

Input

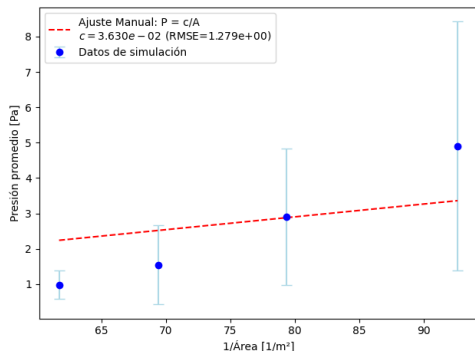
- $L = 0.09$ m, 0.007 m, 0.05 m, 0.03 m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 0.01 kg.
- Número de partículas = 250.



Input vs Observable

Input

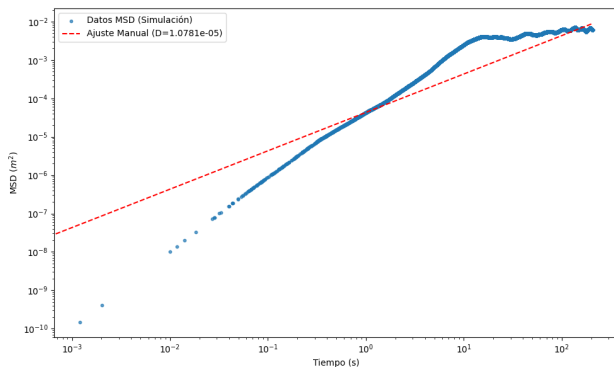
- $L = 0.09$ m, 0.007 m, 0.05 m, 0.03 m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 0.01 kg.
- Número de partículas = 250.



Coeficiente de difusión

Input

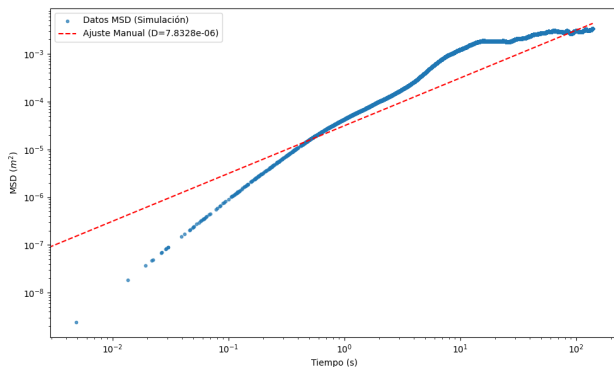
- $L = 0.09$ m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 0.01 kg.
- Número de partículas = 250.



Coeficiente de difusión

Input

- $L = 0.03$ m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 0.01 kg.
- Número de partículas = 250.



Conclusiones

Primer estudio: Presión vs A^{-1}

- Cuanta mayor area, menor es la presión.
- Luego de 10 segundos, todas las presiones entran en un régimen estacionario.
- NO se cumple la ley de los gases ideales ya que P no es cte.

Segundo estudio: Coeficiente de difusión

- Falta este análisis.

¡Gracias por su atención!