

Event Driven Molecular Dynamics

Grupo 5

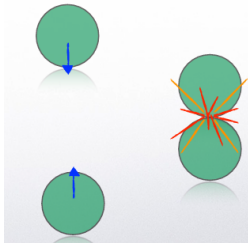
ITBA

Integrantes: MARTINA SCHVARTZ TALLONE, PATRICK LUCA
TORLASCHI y SERGIO SMIRNOFF

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

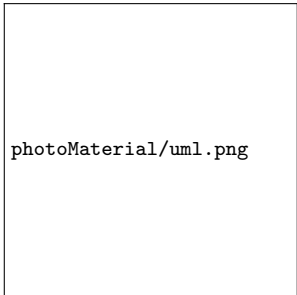
- Vuelo libre de las N partículas en un espacio 2D:
 - $x_i(t) = x_i(0) + v_{x_i} t$
 - $y_i(t) = y_i(0) + v_{y_i} t$
- Cálculo de tiempo de colisión contra paredes:
 - $t_c = \infty$ si $dv \cdot dr \geq 0$,
 - $t_c = \infty$ si $d < 0$, siendo:

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

Modelo Matemático

- Cálculo de impulso y velocidades post-colisión de partículas:
 - $J_x = J * dx / \sigma$
 - $J_y = J * dy / \sigma$
 - $J = \frac{2m_i m_j}{m_i + m_j} \cdot \frac{dv \cdot dr}{\sigma}$
 - $vx_i^d = vx_i^a + J_x / m_i$
 - $vy_i^d = vy_i^a + J_y / m_i$
 - $vx_j^d = vx_j^a - J_x / m_j$
 - $vy_j^d = vy_j^a - J_y / m_j$

Implementación



photoMaterial/uml.png

Estructura del código y elementos importantes:

- Main(maxIter, nombreArchivo, L)
- runSimulation → realiza las iteraciones separadas en:
 - initialization() → Se inicializan las partículas.
 - inicialCollisions() → Se calculan las colisiones iniciales.
 - findNextEvent() → Encuentra el próximo evento.
 - advanceTime() → Avanza el tiempo y actualiza las posiciones de las partículas.
 - processEvent() → Procesa el evento.
- Clase Particle
- Clase Colisions

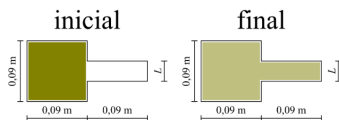
Implementación de vértices

- Rime to horizontal wall = time to vertical wall = vertice.
- Se tienen 1 partícula en cada vertice.
- Características:
 - Radio = 0.
 - Masa = ∞ .
- Espejan las velocidades en el choque a 45° .
- Espejan una de las velocidades en los distintos choques.
- No se mueven.

Geometría del sistema y parámetros de simulación

Geometría:

- 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.



Constantes:

- Número de partículas: 250.
- Dimensiones caja A: $0.09 \text{ m} \times 0.09 \text{ m}$.
- Dimensiones caja B: 0.09 m ancho.
- Radio partículas: 0.0015 m .
- Masa partículas: 1 kg .
- Velocidad inicial: 0.01 m/s .

Variables:

- $L \in \{0.09, 0.07, 0.05, 0.03\}$

Definición matemática de observables

Observables

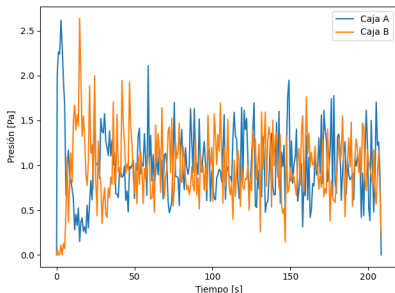
- Presión en las cajas A y B.
- Calculándolas como la suma de los impulsos por colisiones contra la pared por unidad de tiempo.
- Se obtiene con la fórmula: $P = \frac{1}{A} \sum J_i$ siendo A el área de la pared y J_i el impulso de cada colisión.
- $J_i = 2 * v_n$ siendo v_n la velocidad de la partícula.
- Coeficiente cuadrático medio: $\langle z^2 \rangle = 2Dt$

Animaciones

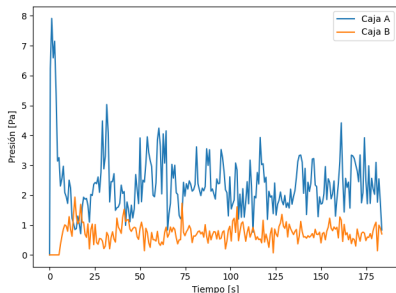
ejemplo.png

Evolución temporal del observable

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



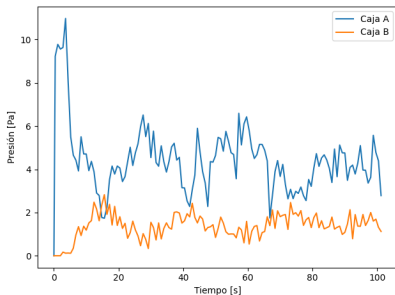
Presión en función del tiempo para $L = 0.07$ m.



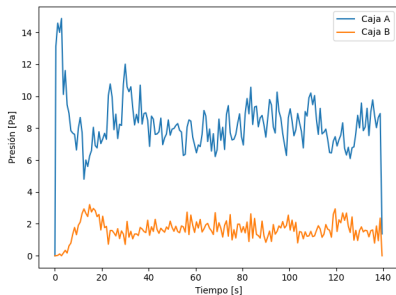
Podemos tomar estacionario a partir de los 20 segundos. Con: $N = 250$, $r = 0.0015$ m, $m = 1$ kg.

Evolución temporal del observable

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



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

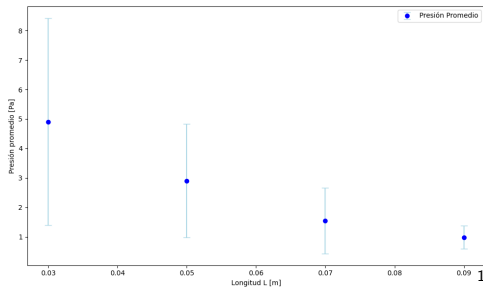
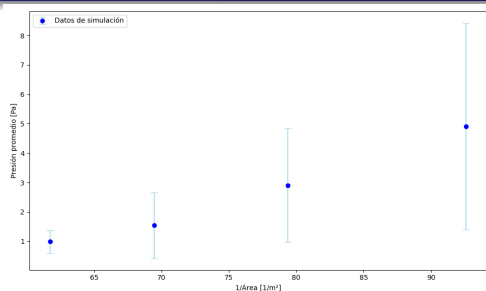


Podemos tomar estacionario a partir de los 20 segundos. Con: $N = 250$, $r = 0.0015$ m, $m = 1$ kg.

Primer estudio: Presión vs A^{-1}

Input

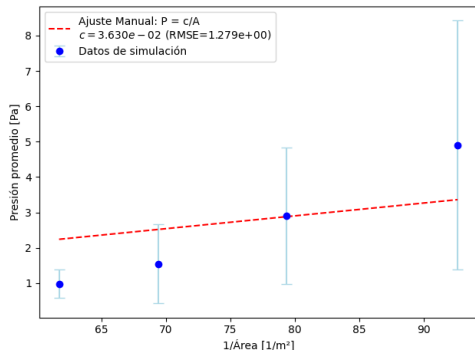
- $L = 0.09$ m, 0.007 m, 0.05 m, 0.03 m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 1 kg.
- Número de partículas = 250 .



Primer estudio: Presión vs A^{-1}

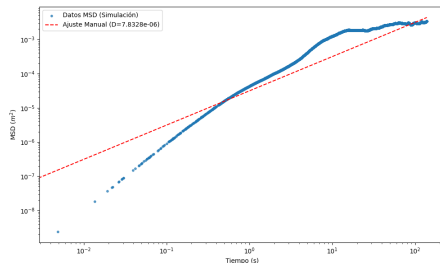
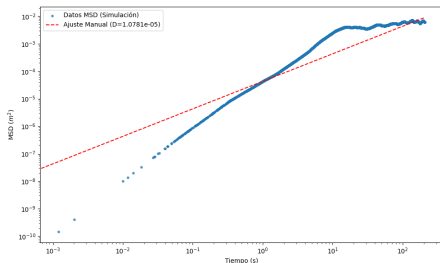
Input

- $L = 0.09$ m, 0.007 m, 0.05 m, 0.03 m.
- Velocidad inicial = 0.01 m/s.
- Radio partículas = 0.0015 m.
- Masa partículas = 1 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 = 1 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!