

Dinámica Molecular Dirigida por Eventos

Difusión de un Gas y Movimiento Browniano

Grupo 4:

Nicolás Matías Margenat

Juan Burda

Bruno Enzo Baumgart

72.25 - Simulación de Sistemas

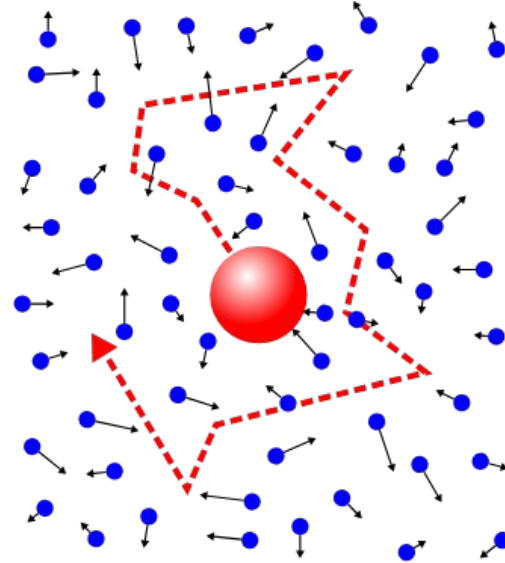
20 de septiembre, 2024
Instituto Tecnológico de Buenos Aires

Introducción

Gases ideales



Movimiento Browniano



- $x_i(t) = x_i(0) + v_{x_i} t$
- $t_c = \begin{cases} \infty & \text{si } \Delta v \cdot \Delta r \geq 0, \\ \infty & \text{si } d < 0, \\ \frac{-\Delta v \cdot \Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v \cdot \Delta v} & \text{en otro caso.} \end{cases}$

- Choque entre partículas

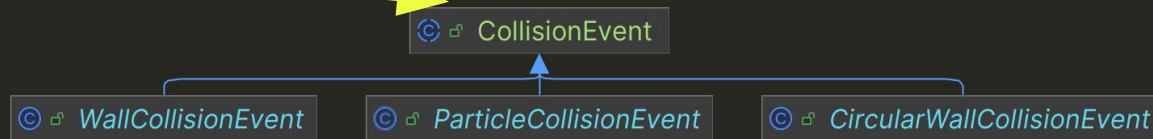
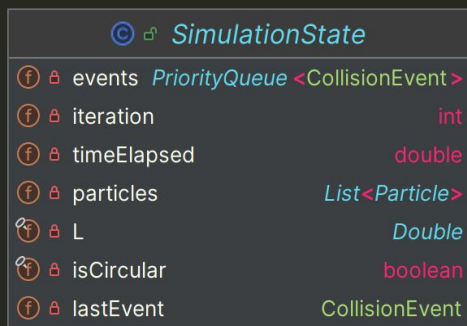
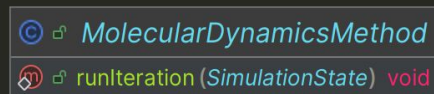
$$(v_{x_i}^d, v_{y_i}^d) = (v_{x_i}^a + J_x/m_i, v_{y_i}^a + J_y/m_i) \quad \text{donde} \quad J_x = \frac{J \Delta x}{\sigma}$$

$$(v_{x_j}^d, v_{y_j}^d) = (v_{x_j}^a - J_x/m_j, v_{y_j}^a - J_y/m_j) \quad J_y = \frac{J \Delta y}{\sigma} \quad \text{con } J = \frac{2m_i m_j (\Delta v \cdot \Delta r)}{\sigma(m_i + m_j)}$$

- Choque con paredes

$$v_n = -v_n$$

Implementación



```
partículas ← generarObstáculoCentral(parámetros)  
partículas ← generarPartículasRandom(parámetros)  
estadoSimulación ← generarEstadoSimulación(parámetros)
```

```
for t ← 0 to max_tiempo:
```

```
    correrIteración(estadoSimulación)
```

```
    guardarEstadoSistema()
```

```
end
```

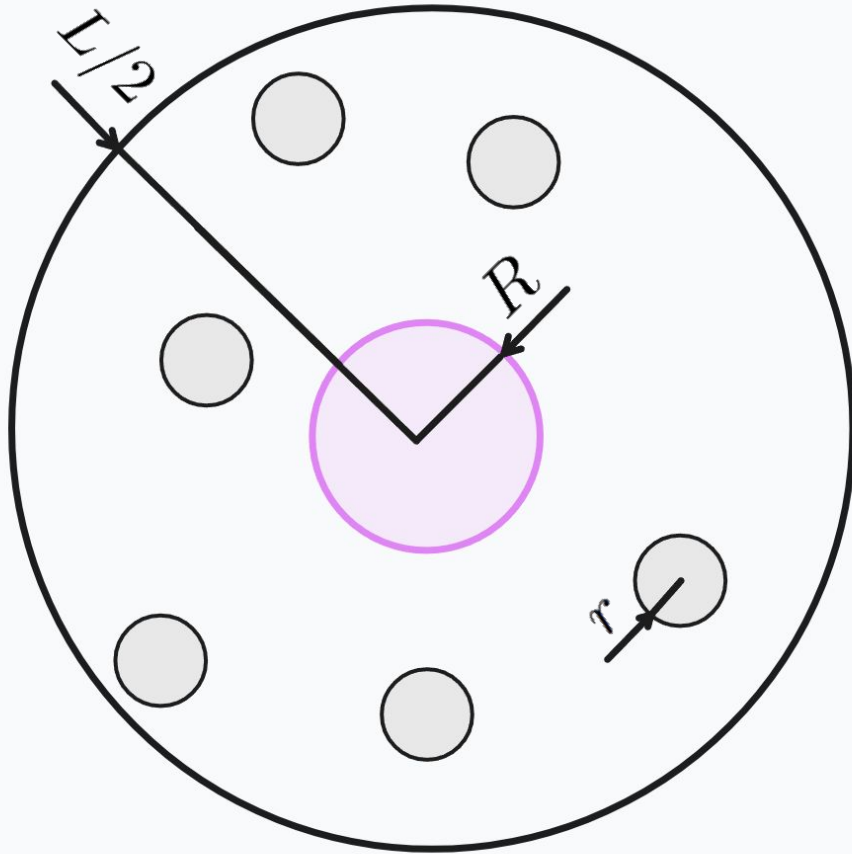
```
evento ← estadoSimulación.eventos.poll()
```

```
partículas ← actualizarPosiciónPartículas(evento.tiempo)
```

```
partículasColisión.velocidades ← actualizarVelocidades(evento.partículas)
```

```
estadoSimulación.eventos ← actualizarEventos(evento)
```

Simulaciones



Parámetros Fijos

- $R = 0.005$ m
- $M = 3$ kg
- $r = 0.001$ m
- $m = 1$ kg
- $L = 0.1$ m
- $N = 300$

Parámetros Variables

- $v \in \{1, 3, 6, 10\} \text{ (m/s)}$
- $t \in [1, 20](s)$

- $P = \frac{F}{S} = \frac{\Delta p}{\Delta t \cdot S}$ donde $\Delta p = m \cdot \Delta v$

- $T \approx v^2$

- $\langle z^2 \rangle = 2Dt$

- Cantidad de colisiones con el obstáculo

- $m = \frac{Q \cdot \sum_{i=1}^Q x_i y_i - \sum_{i=1}^Q x_i \sum_{i=1}^Q y_i}{Q \cdot \sum_{i=1}^Q x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^Q x_i\right)^2}$
- $\bar{m} = \frac{\sum_{i=1}^5 m_i}{5}$

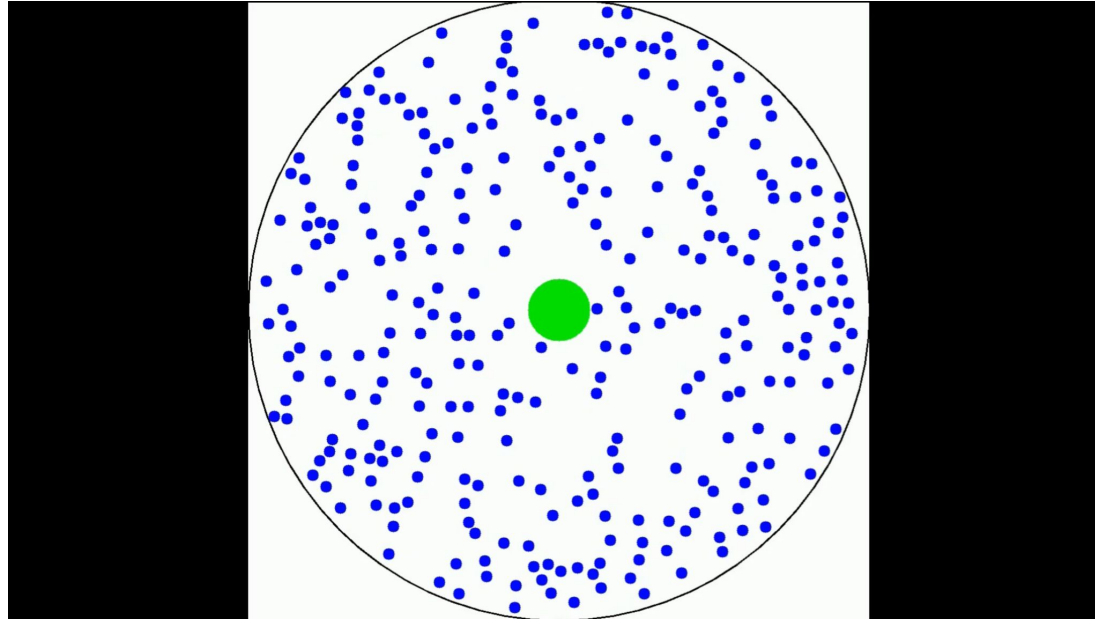
- Cantidad de colisiones únicas con el obstáculo

- $\bar{t}_{50\%} = \frac{\sum_{i=1}^5 t_{i_{50\%}}}{5}$ donde $t_{i_{50\%}}$ es el tiempo que tarda el 50% de las partículas de la simulación i en colisionar con el obstáculo por primera vez.

Resultados

Resultados

Obstáculo Fijo

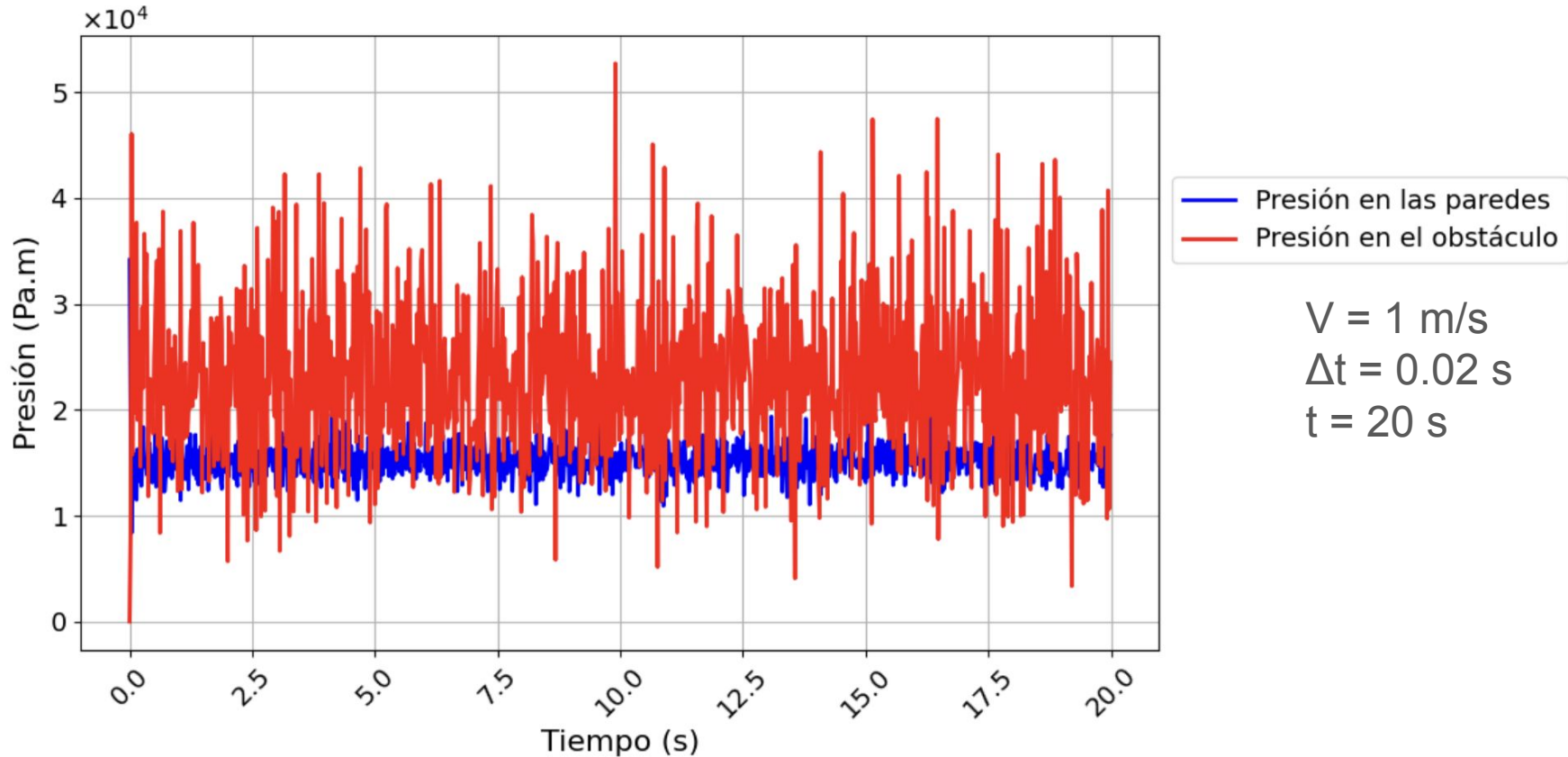


$V = 1 \text{ m/s}$
 $\Delta t = 0.02 \text{ s}$
 $t = 20 \text{ s}$

https://youtu.be/1cz_iLgJvDg

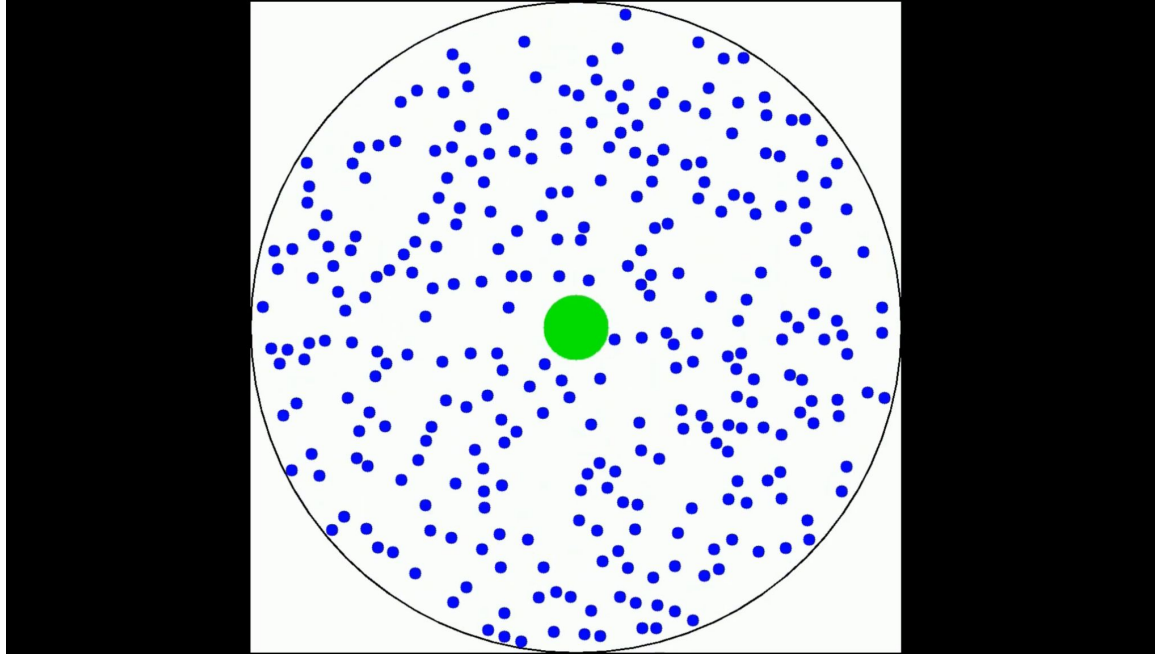
Resultados

Análisis de presión vs Tiempo



Resultados

Obstáculo Fijo



$$V = 10 \text{ m/s}$$

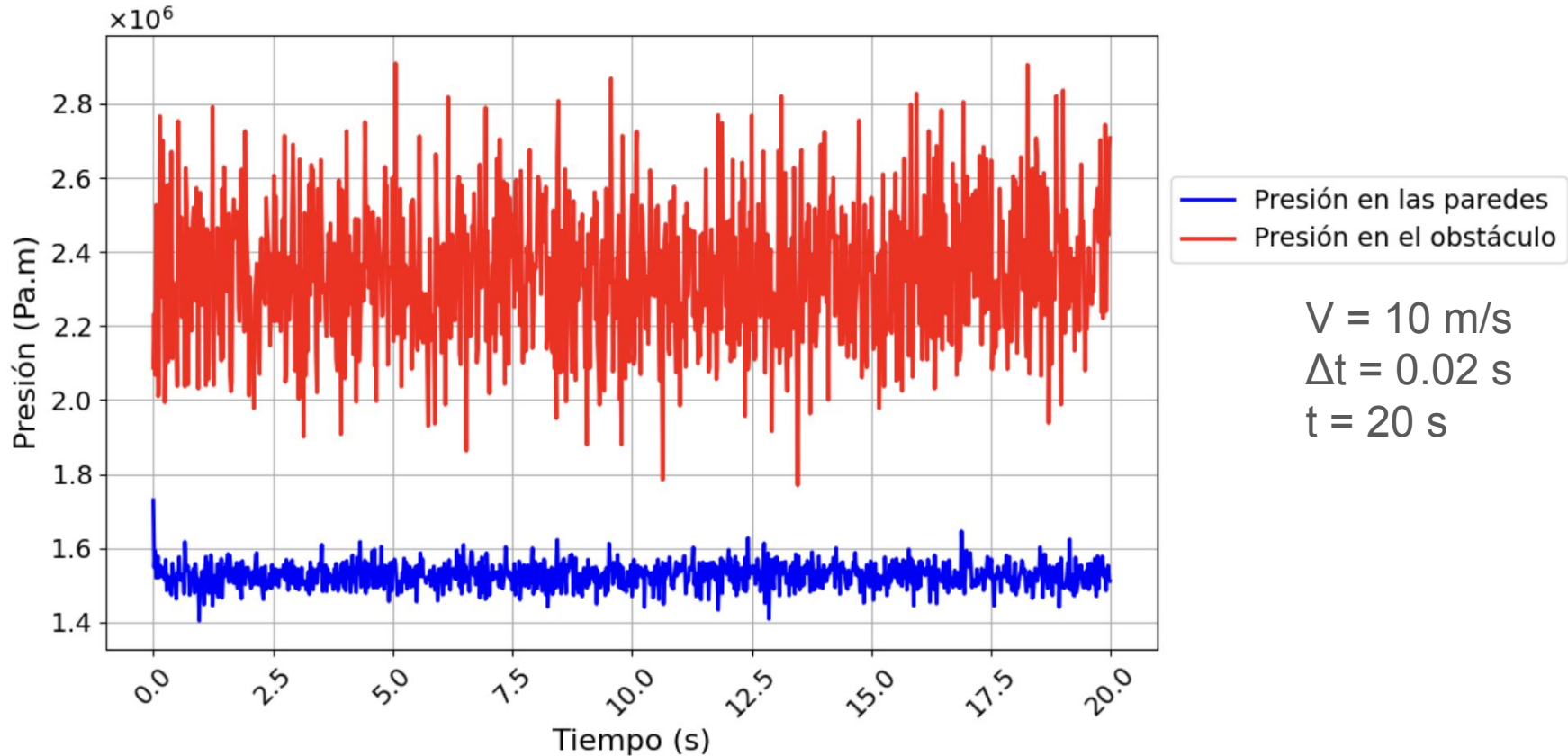
$$\Delta t = 0.02 \text{ s}$$

$$t = 20 \text{ s}$$

<https://youtu.be/syR6csZRg88>

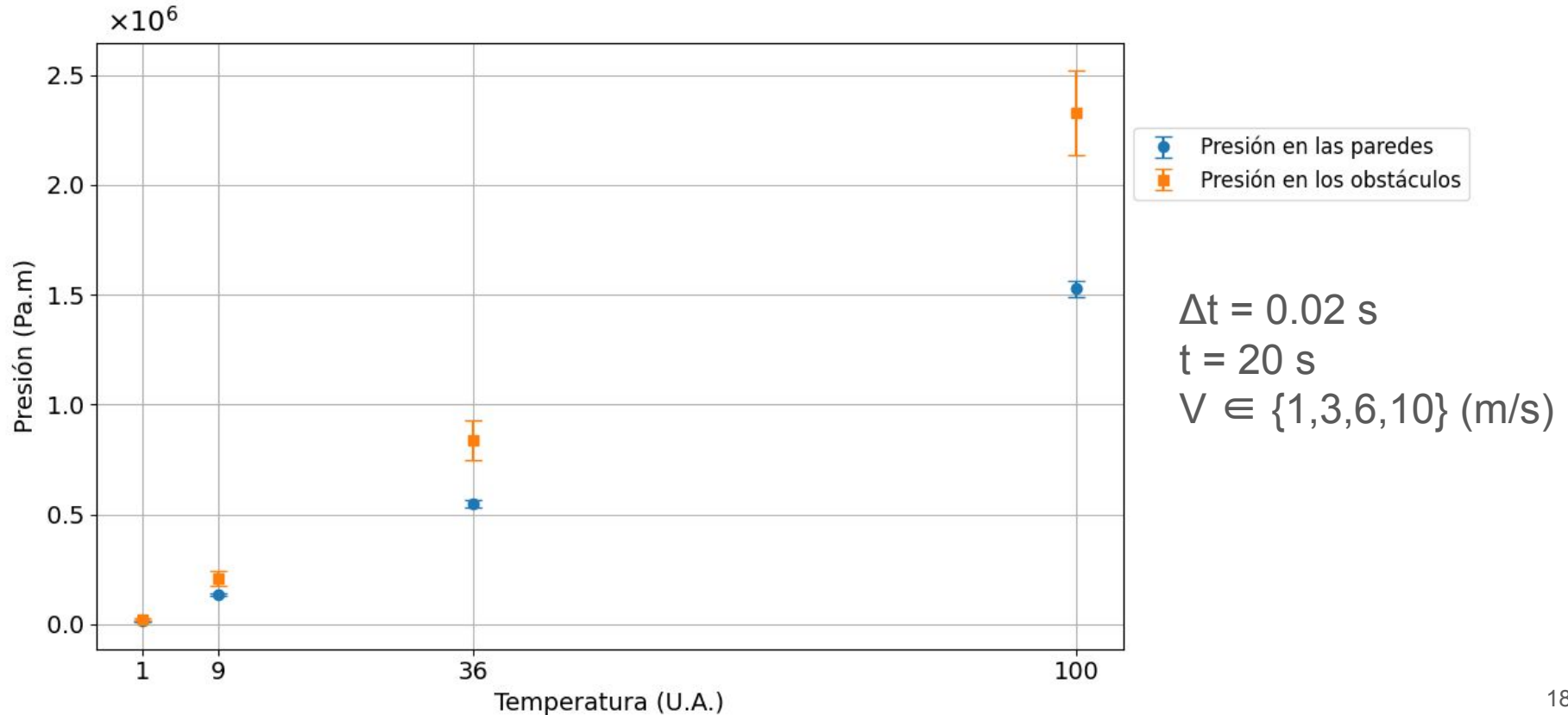
Resultados

Análisis de presión vs Tiempo



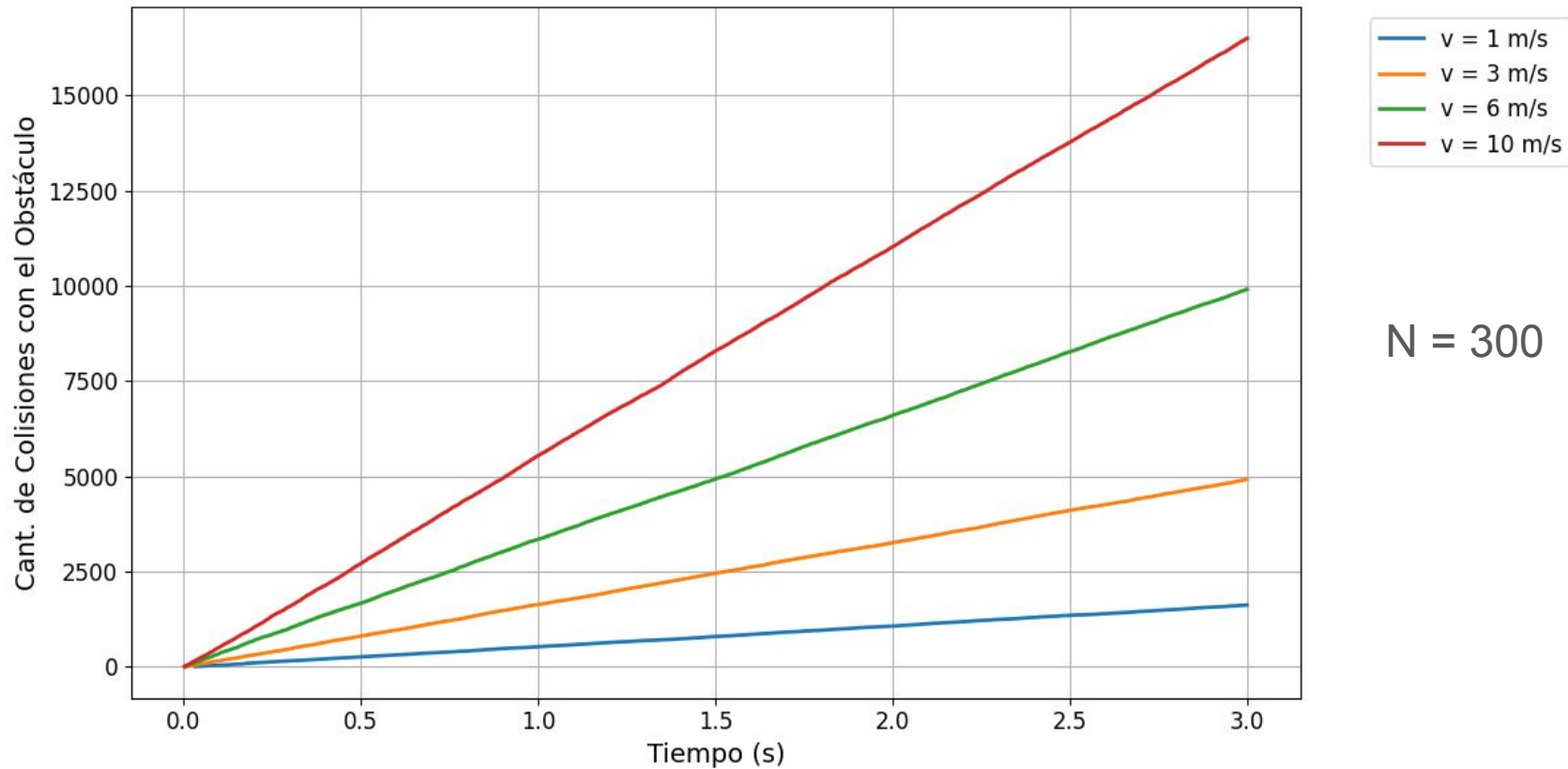
Resultados

Análisis de presión vs Temperatura



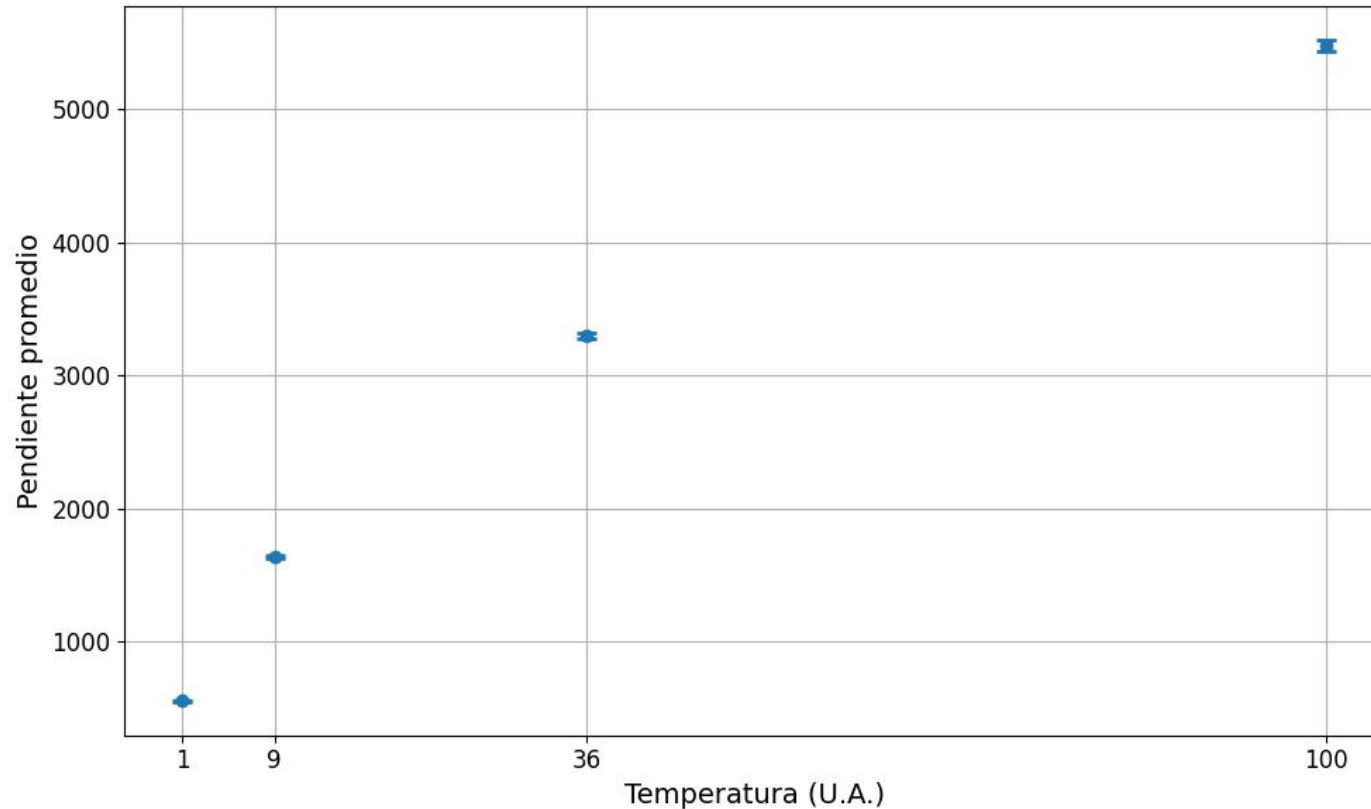
Resultados

Colisiones con el obstáculo



Resultados

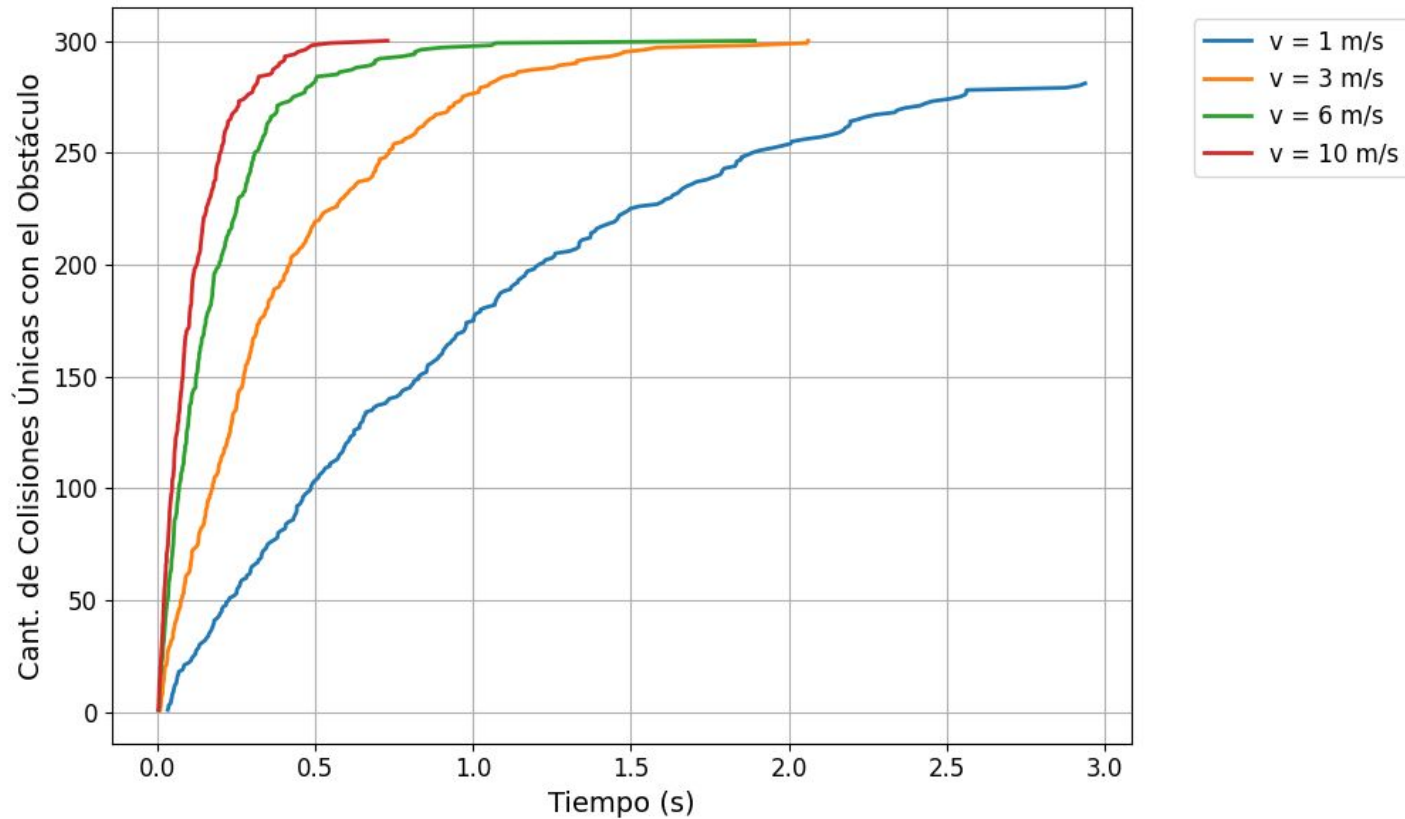
Colisiones con el obstáculo



N = 300
5 realizaciones

Resultados

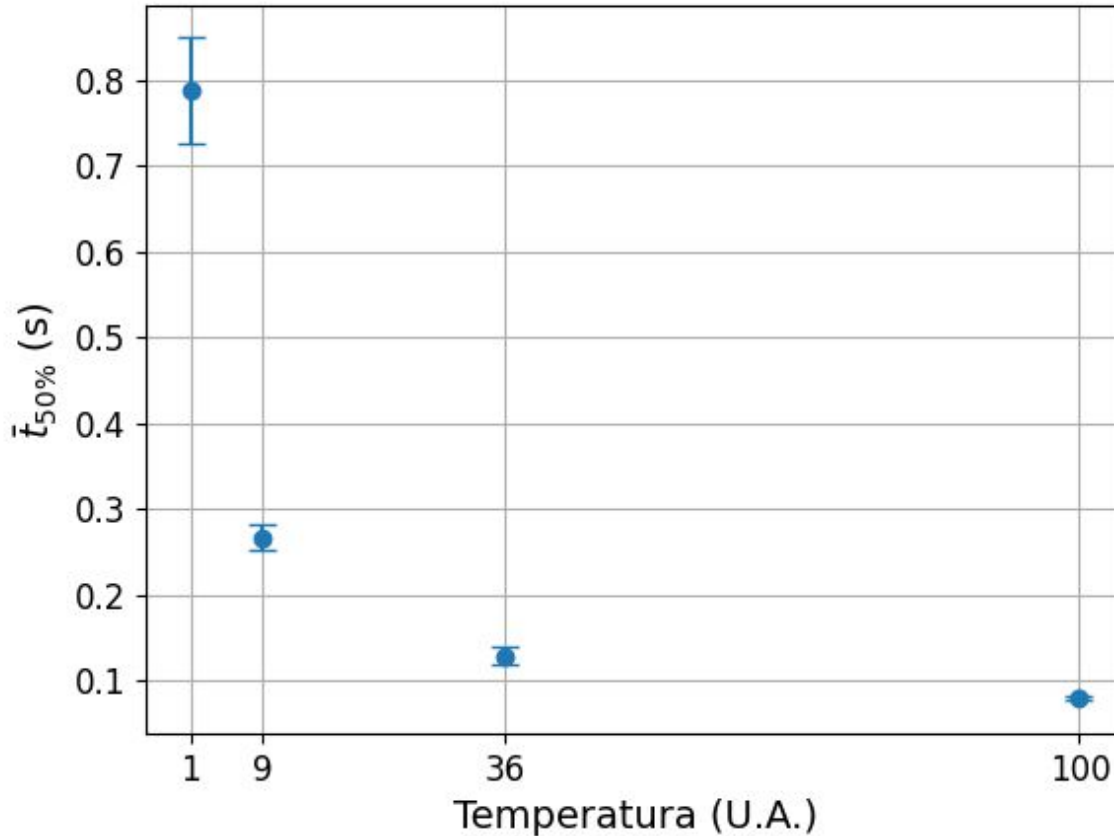
Colisiones únicas con el obstáculo



$N = 300$

Resultados

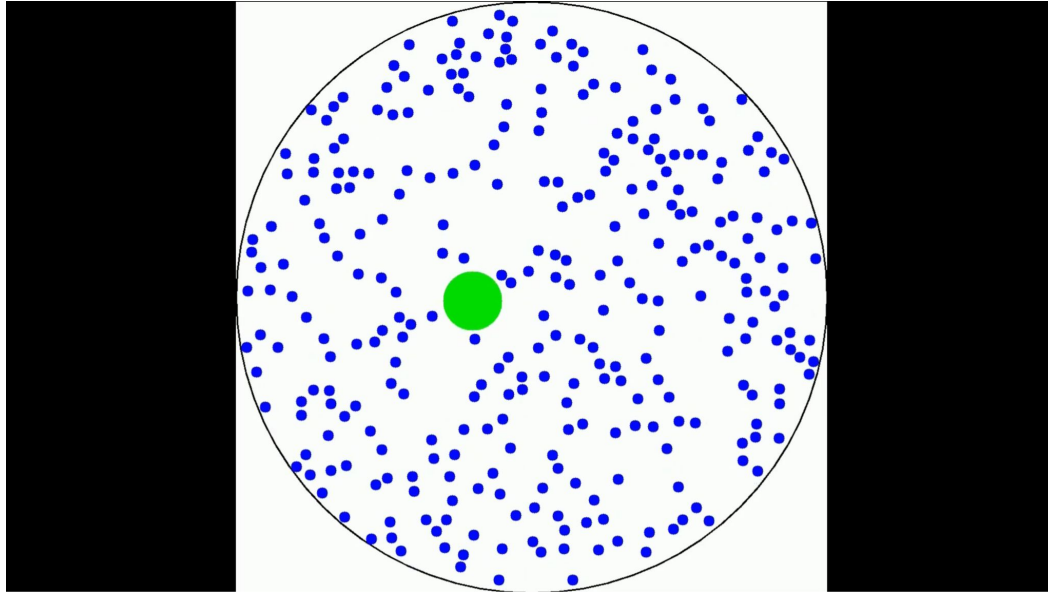
Colisiones únicas con el obstáculo



N = 300
5 realizaciones

Resultados

Obstáculo en movimiento



$$V = 1 \text{ m/s}$$

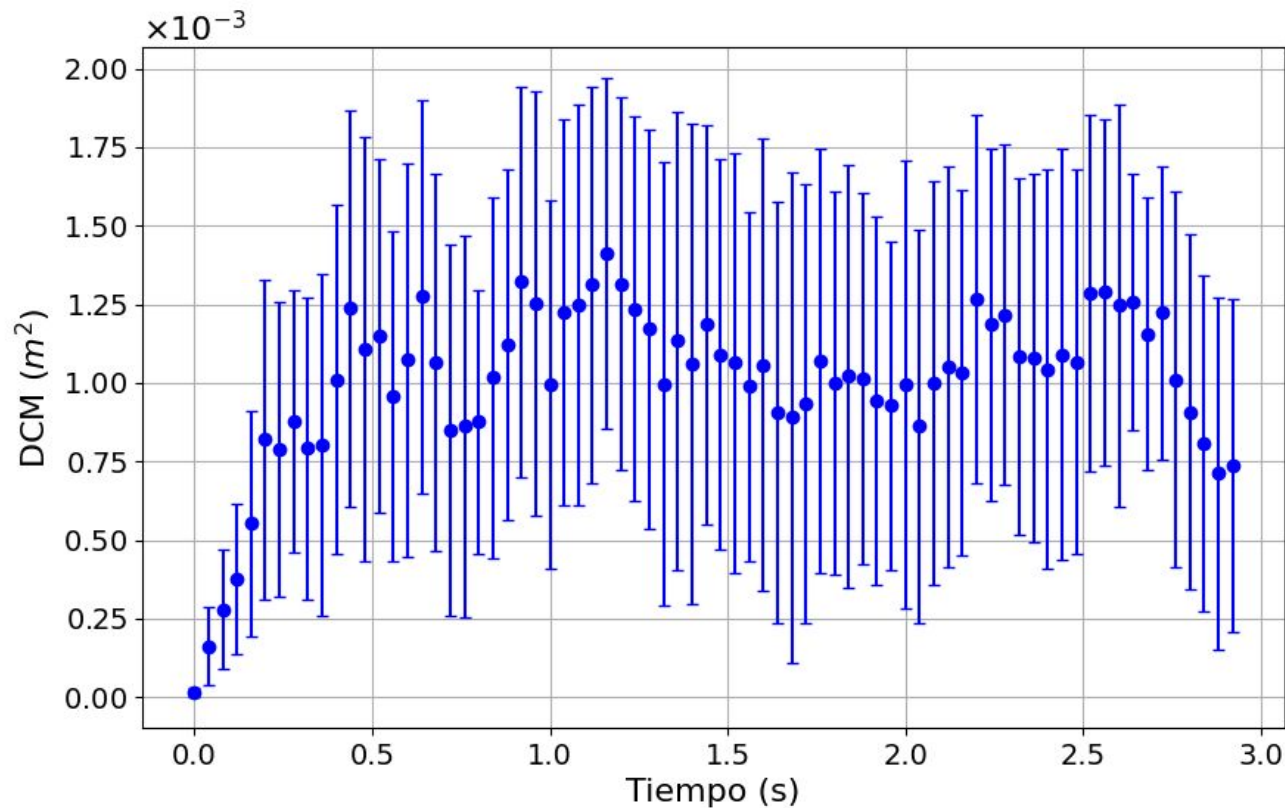
$$\Delta t = 0,0625 \text{ s}$$

$$t = 3 \text{ s}$$

$$M = 3 \text{ kg}$$

<https://youtu.be/l3SlthqPBek>

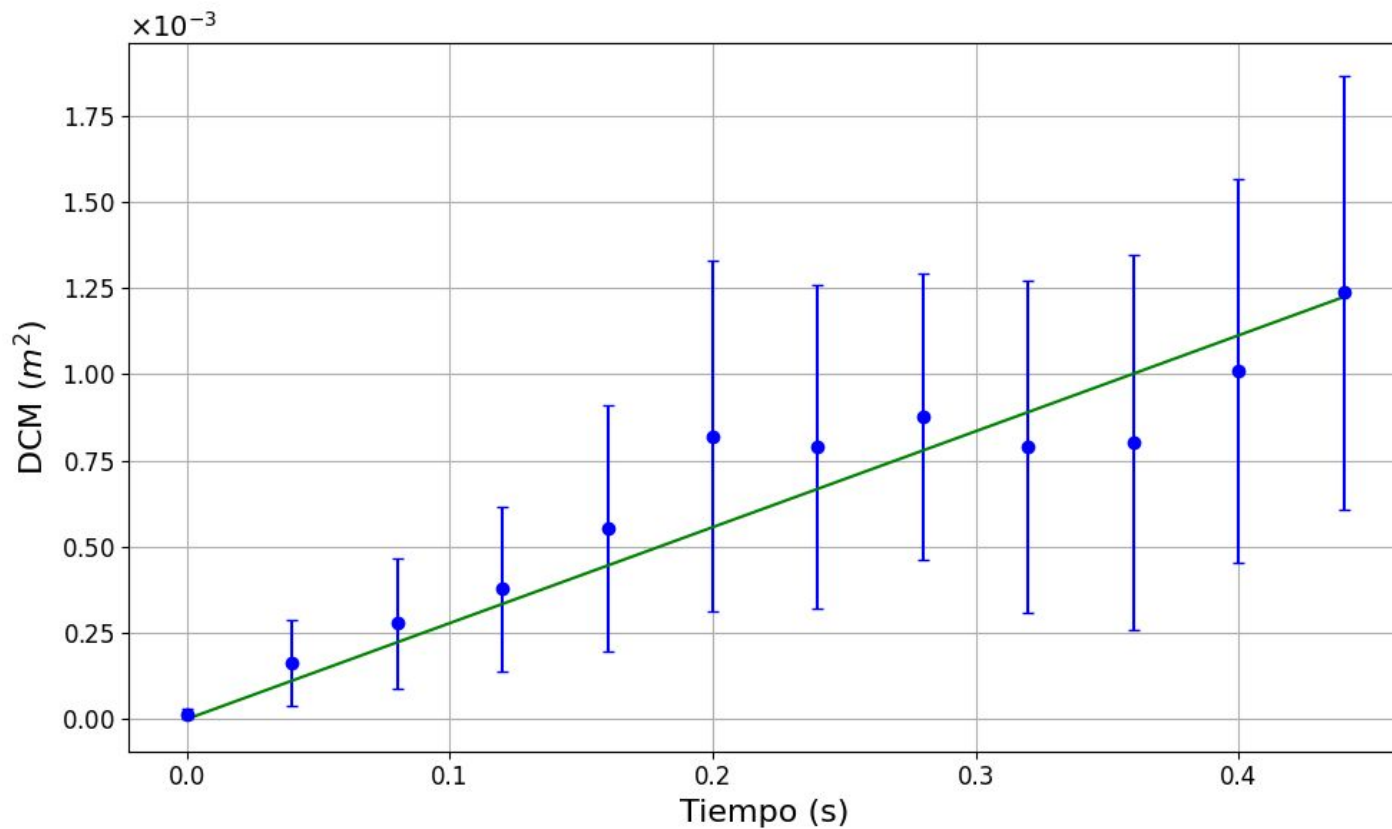
Desplazamiento Cuadrático Medio



10 realizaciones

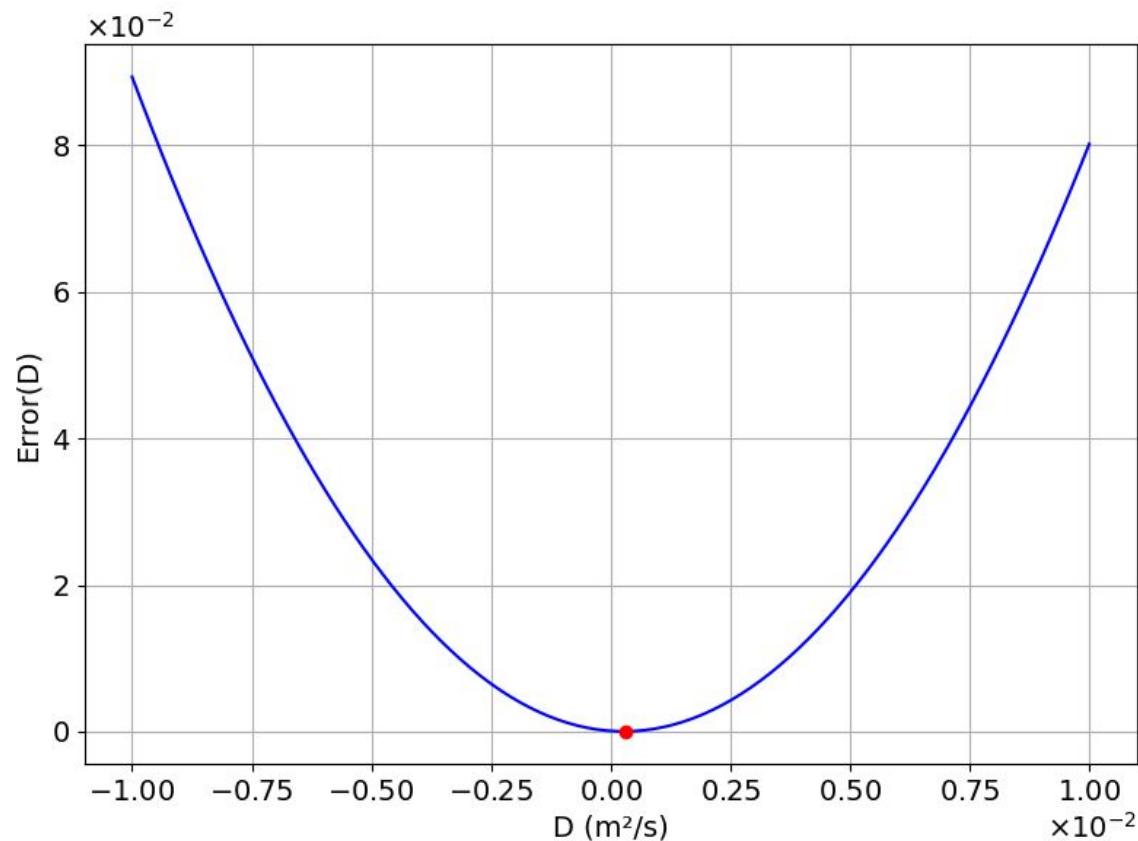
Resultados

Desplazamiento Cuadrático Medio



10 realizaciones

Desplazamiento Cuadrático Medio



• D óptimo = $3.03 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

10 realizaciones

Conclusiones

- La presión parece ser mayor en el obstáculo que en las paredes.
- Ley de gases ideales se cumple
- Mayor temperatura \Rightarrow Mayor cantidad de choques con el obstáculo
- El DCM crece linealmente y luego entra a un estado estacionario

¡Gracias por su atención!
