

DINÁMICA MOLECULAR DIRIGIDA POR EVENTOS

MOVIMIENTO BROWNIANO

Grupo 4

Cavo - Sakuda - Vázquez

FUNDAMENTOS

HISTORIA Y USOS

- ▶ Estudia el comportamiento de algunas partículas microscópicas en medios fluídos
- ▶ Se basa en una partícula grande colisionando contra partículas más pequeñas.
- ▶ Corresponde la dinámica molecular regida por eventos
- ▶ Las interacciones son siempre elásticas

FÓRMULAS

Vuelo libre de las partículas - sin gravedad

$$y(t_c) = y(0) + t_c * v_y$$

$$x(t_c) = x(0) + t_c * v_x$$

Tiempo de choque partícula - pared

$$t_c = \frac{(x_{p1} + R - x(0))}{v_x}$$

$$t_c = \frac{(x_{p2} - R - x(0))}{v_x}$$

$$t_c = \frac{(y_{p1} + R - y(0))}{v_y}$$

$$t_c = \frac{(y_{p2} - R - y(0))}{v_y}$$

FÓRMULAS

Tiempo total a partir de las fórmulas anteriores

$$t_c = \begin{cases} \infty & \text{si } \Delta v \cdot \Delta r \geq 0 \\ \infty & \text{si } d < 0 \\ -\frac{\Delta v \cdot \Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v \cdot \Delta v} & \text{si no} \end{cases}$$

donde

$$d = (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v)(\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2) \quad \sigma = R_i + R_j$$

$$\Delta r = (\Delta x, \Delta y) = (x_j - x_i, y_j - y_i)$$

$$\Delta v = (\Delta v_x, \Delta v_y) = (v_{x_j} - v_{x_i}, v_{y_j} - v_{y_i})$$

FÓRMULAS

Choque de partículas

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

Las velocidades quedan

$$\begin{aligned} v_{x_j}^d &= v_{x_j}^a - \frac{J_x}{m_j} & v_{x_i}^d &= v_{x_i}^a + \frac{J_x}{m_i} \\ v_{y_j}^d &= v_{y_j}^a - \frac{J_y}{m_j} & v_{y_i}^d &= v_{y_i}^a + \frac{J_y}{m_i} \end{aligned}$$

FÓRMULAS

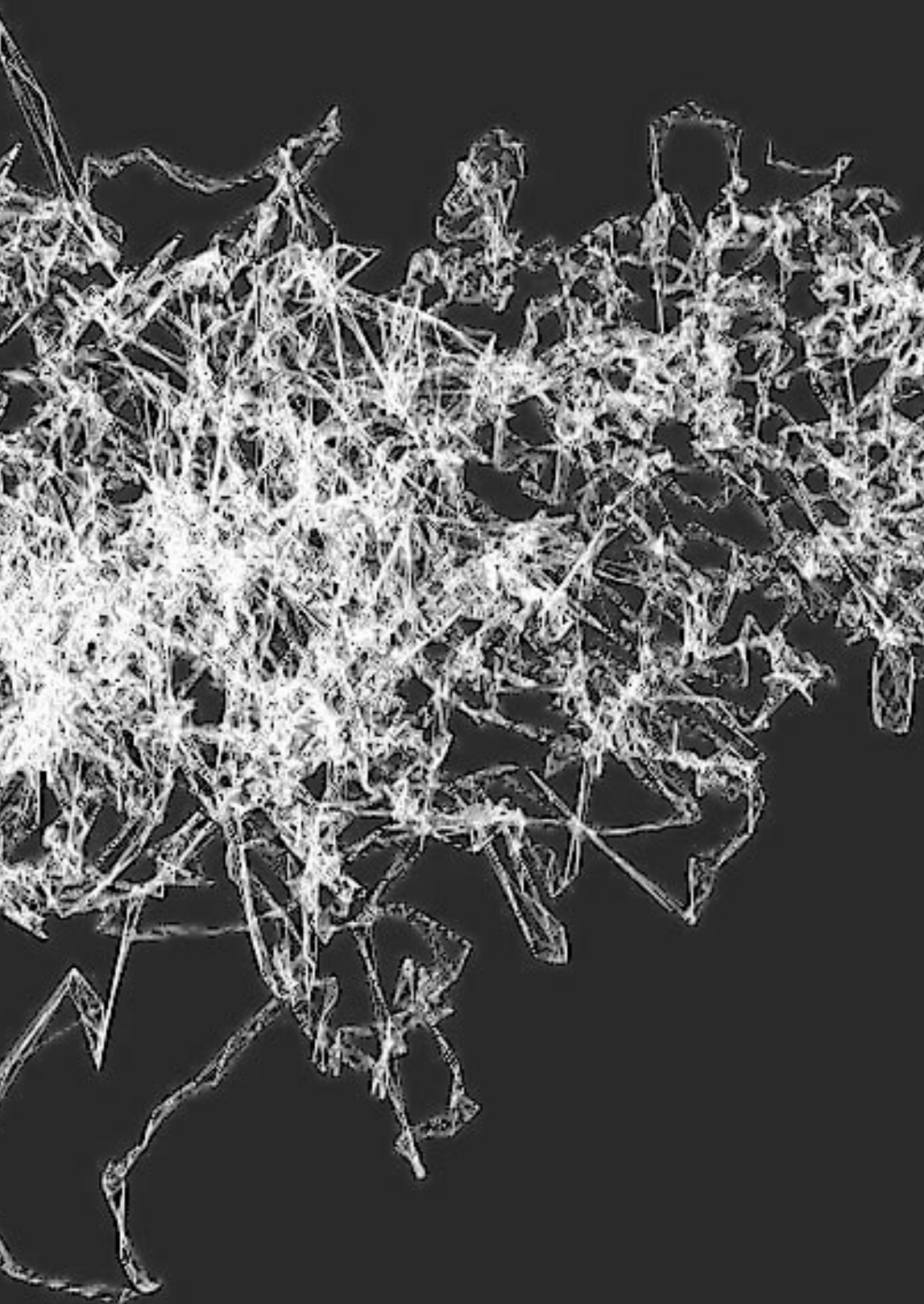
Energía cinética

$$K = \sum m_i \cdot |v_i|^2$$

IMPLEMENTACIÓN

PARÁMETROS

- ▶ bigRadius: radio de la partícula grande
- ▶ smallRadius: radio del resto de las partículas
- ▶ bigMass: masa de la partícula grande
- ▶ smallMass: masa de las partículas pequeñas
- ▶ L: longitud del lado del recinto contenedor
- ▶ minV: velocidad mínima
- ▶ maxV: velocidad máxima
- ▶ maxErrors: cantidad de intentos para asignar partículas
- ▶ N: cantidad de partículas



IMPLEMENTACIÓN

MODELOS

PARTICULA

Cuenta con las siguientes propiedades:

- ▶ id
- ▶ position
- ▶ velocity
- ▶ radius
- ▶ mass

PARTICULA

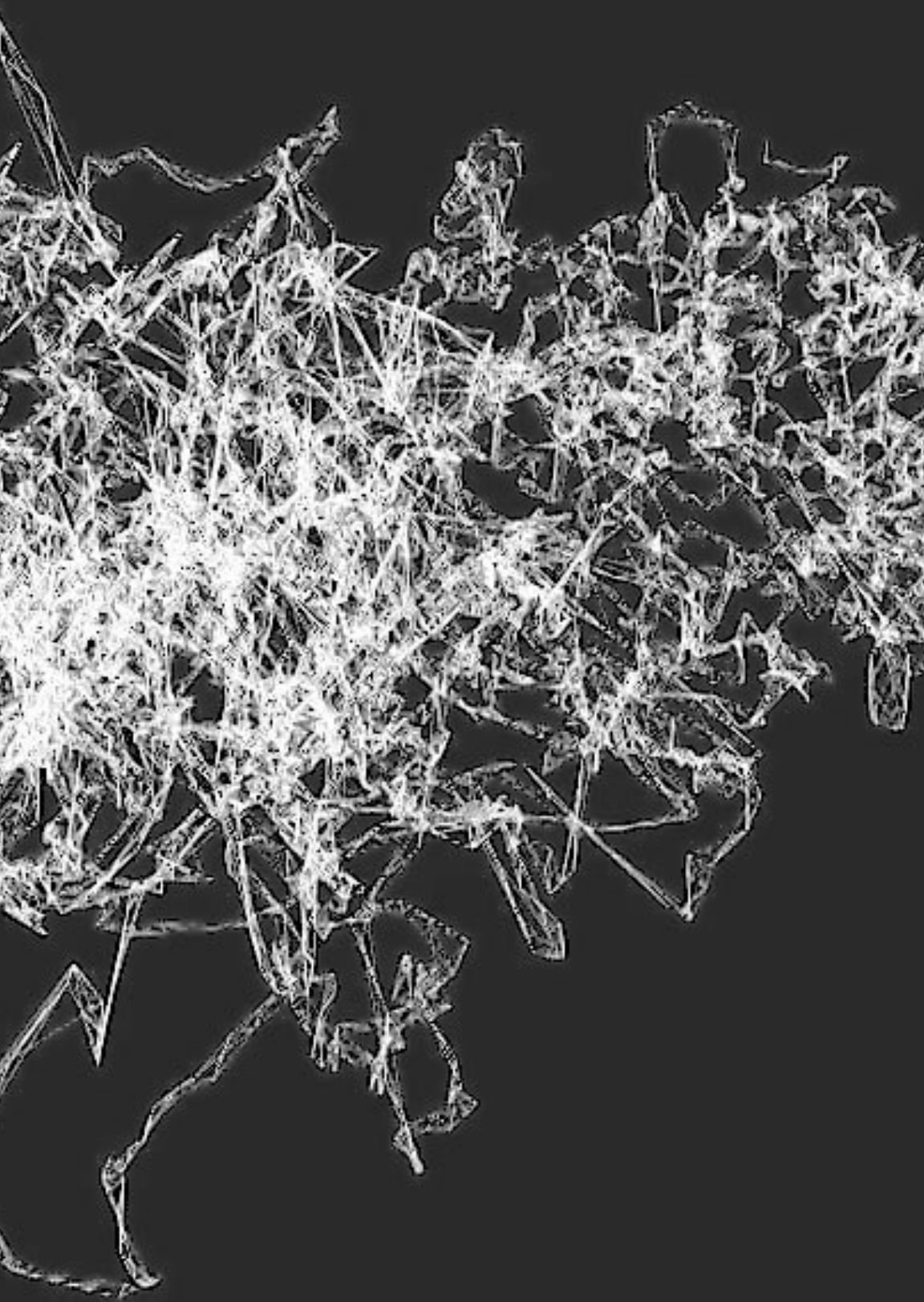
Algunos métodos:

- ▶ `public Particle(int id, double x, double y, double vx, double vy, double m, double r)`
- ▶ `public Particle(int id, double x, double y, double velAbs, double m, double r)`
- ▶ `public void move(double time)`
- ▶ `public static double timeToCollideVerticalWall(double xl, double xr, Particle p)`
- ▶ `public static double timeToCollideHorizontalWall(double yb, double yt, Particle p)`
- ▶ `public static double timeToCollide(Particle p, Particle q)`

BROWNIAN MOTION

- ▶ Usa una lista para modelar el conjunto de partículas
- ▶ Crea partículas:
 - ▶ Una cantidad fija: N
 - ▶ Cantidad de intentos: $< \text{maxError}$
- ▶ Calcular temperatura del sistema (K)

RESULTADOS

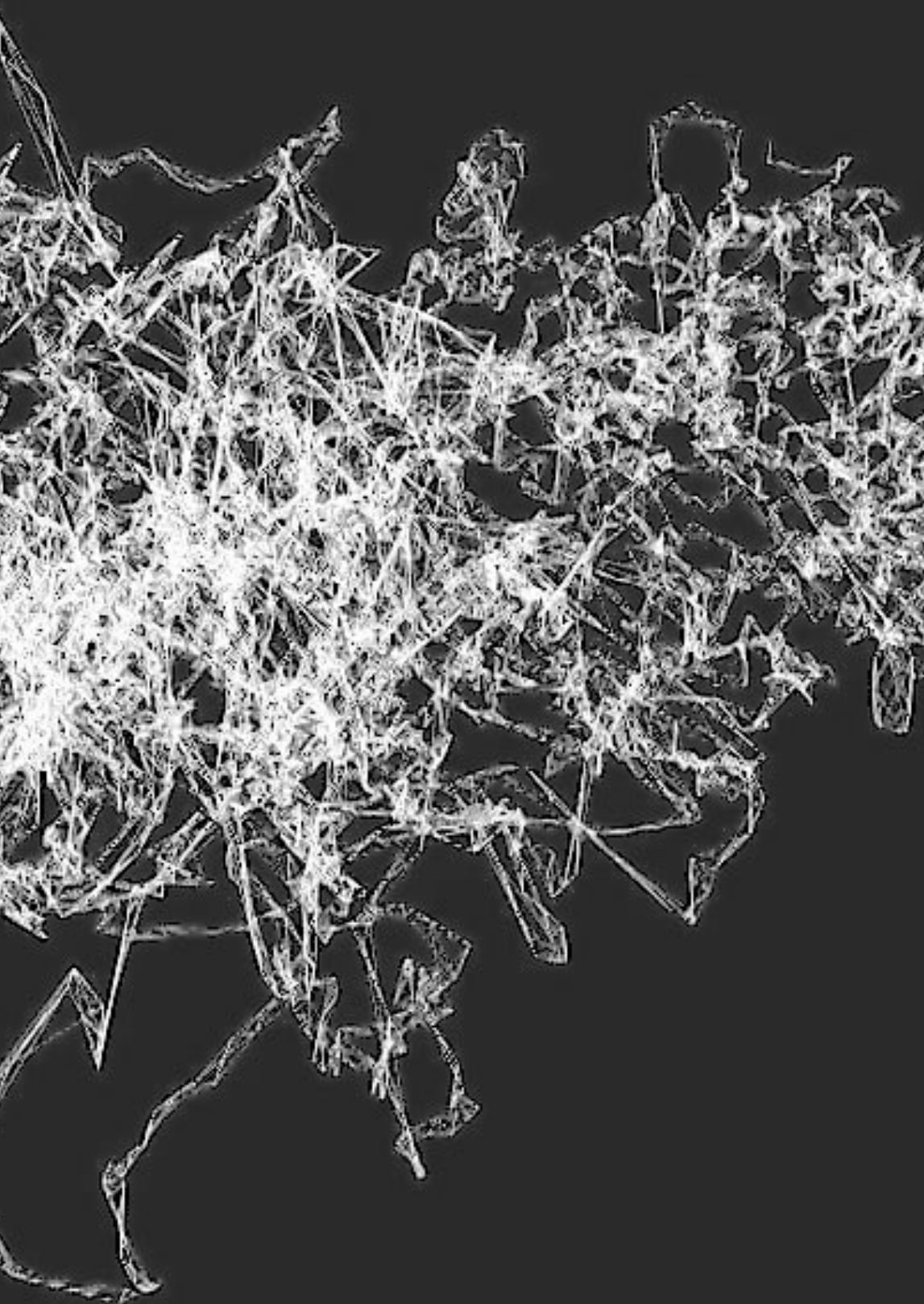


RESULTADOS

FRECUENCIA DE COLISIONES

FRECUENCIA DE COLISIONES POR SEGUNDO

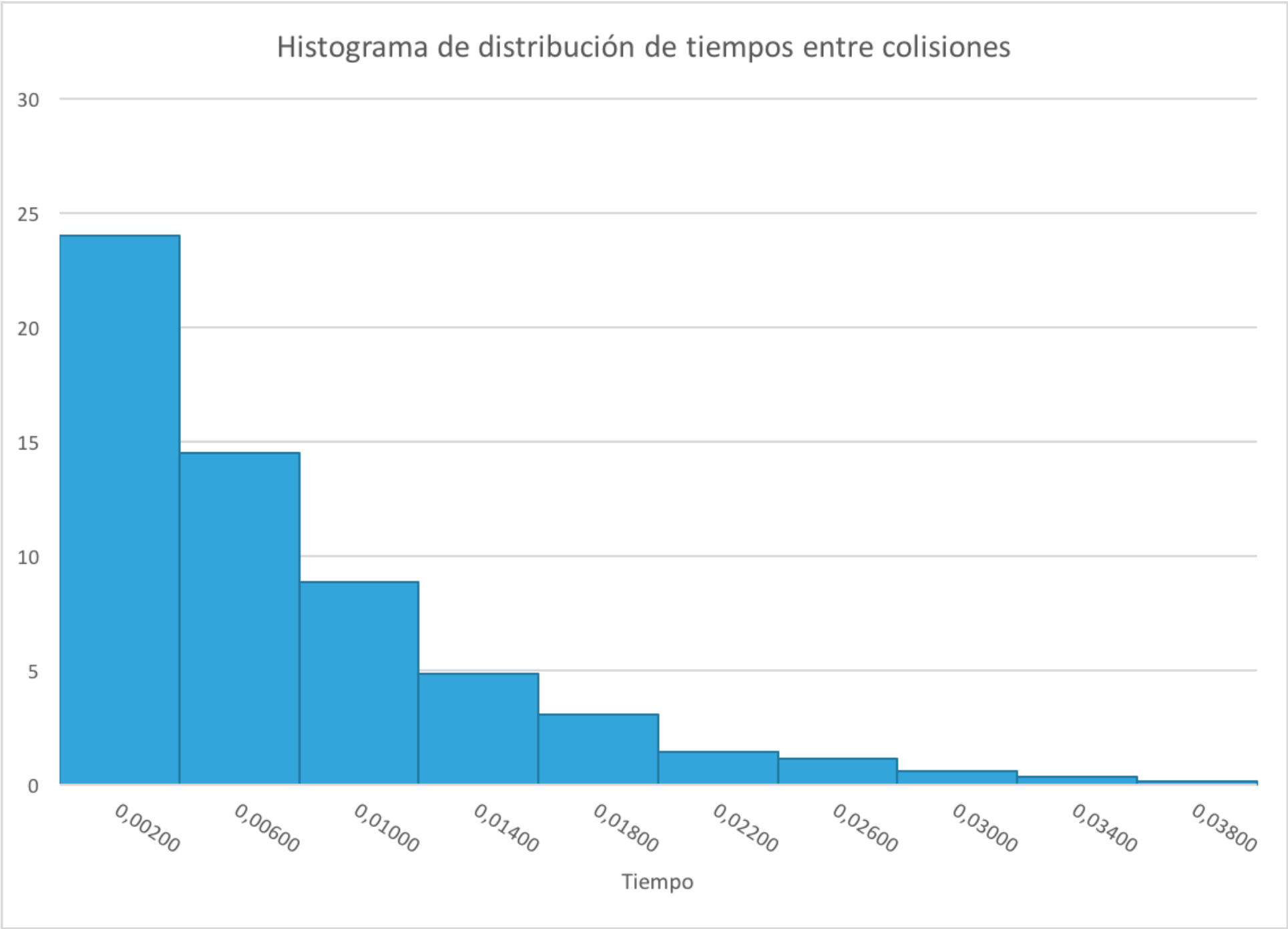
N						
100	150	200	250	300	350	400
48,05000	103,57500	198,75000	321,77500	478,20000	662,37500	890,60000



RESULTADOS

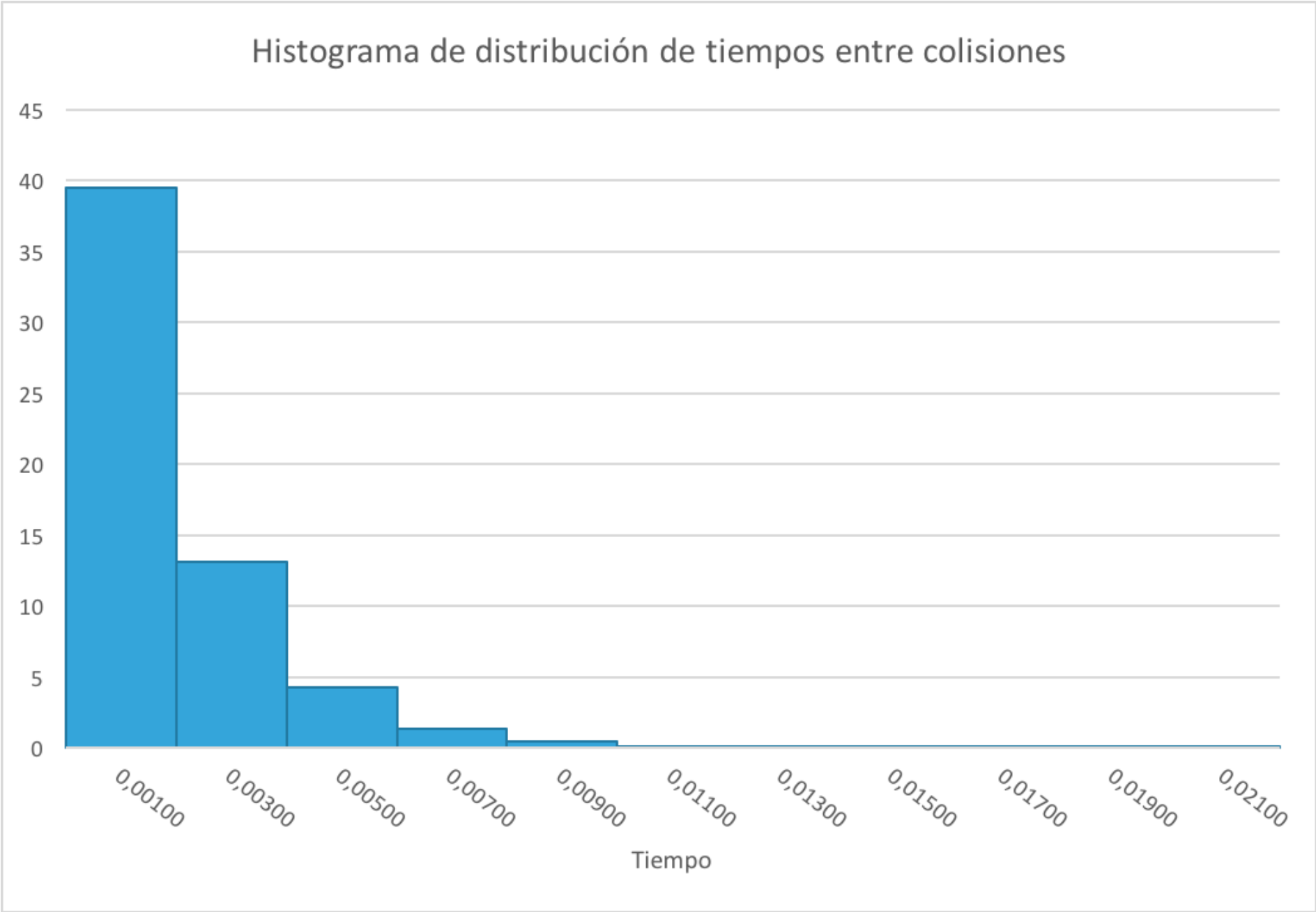
**DISTRIBUCIÓN DE
TIEMPOS ENTRE
COLISIONES**

DISTRIBUCION DE TIEMPOS ENTRE COLISIONES (N 200)

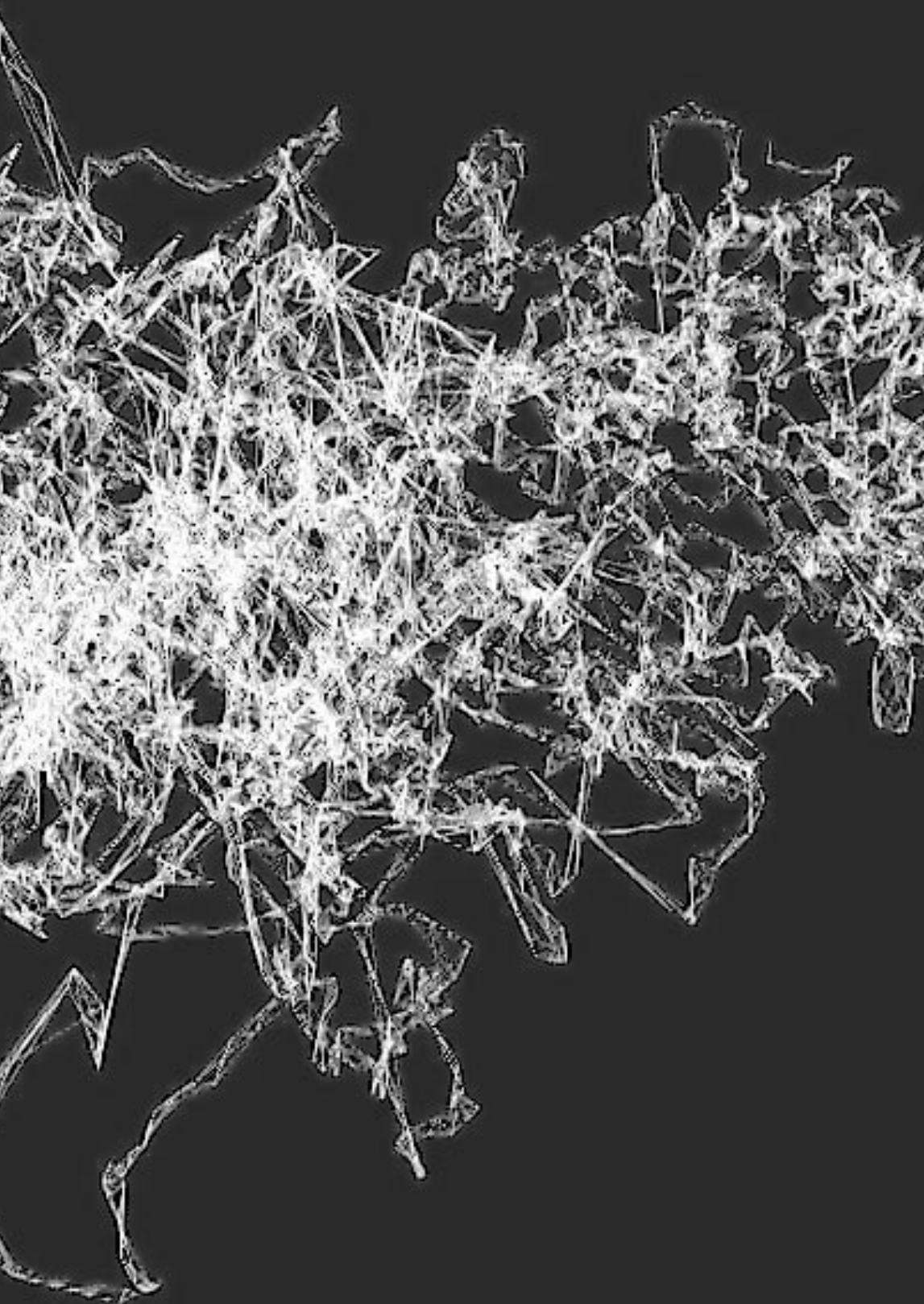


bigRadius: 0.05
smallRadius: 0.005
bigMass: 0.1
smallMass: 0.0001
L: 0.5
minV: 0
maxV: 0.1
N: 300
Tiempo: 40

DISTRIBUCION DE TIEMPOS ENTRE COLISIONES (N 200)



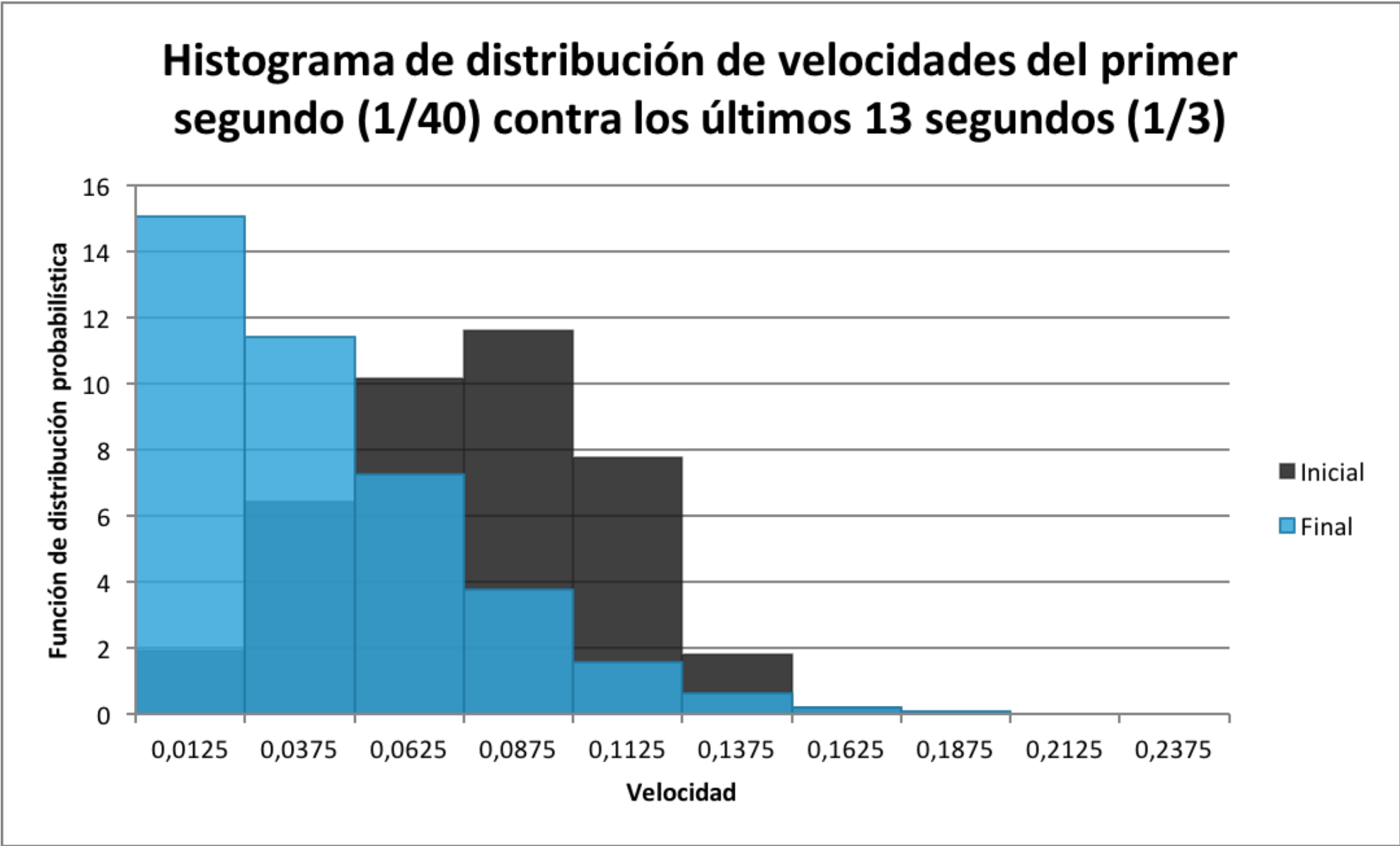
bigRadius: 0.05
smallRadius: 0.005
bigMass: 0.1
smallMass: 0.0001
L: 0.5
minV: 0
maxV: 0.1
N: 200
Tiempo: 40



RESULTADOS

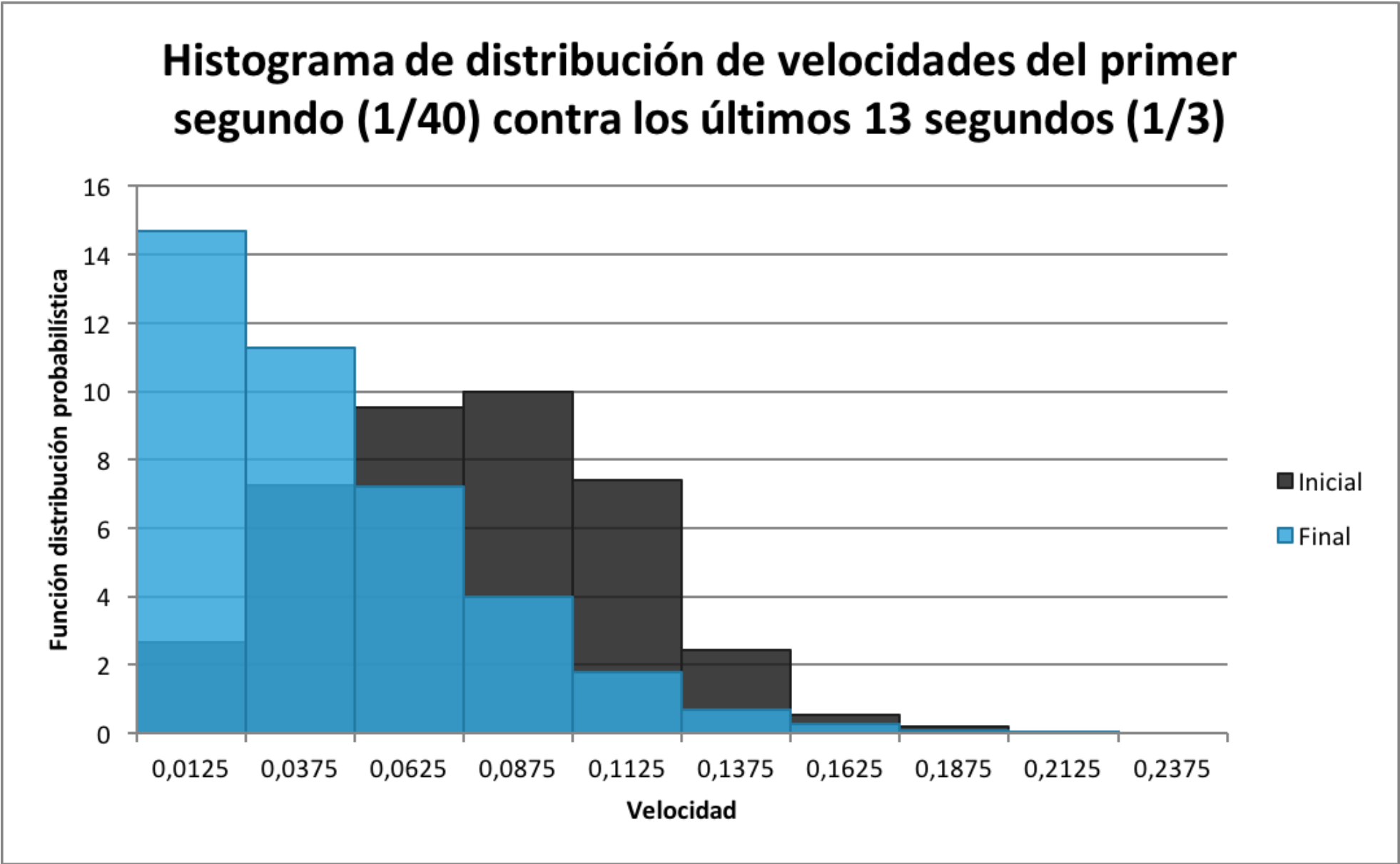
**DISTRIBUCIÓN DE
VELOCIDADES EN EL ÚLTIMO
TERCIO DE LA SIMULACIÓN**

DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES EN EL ÚLTIMO TERCIO DE LA SIMULACIÓN (N = 200)

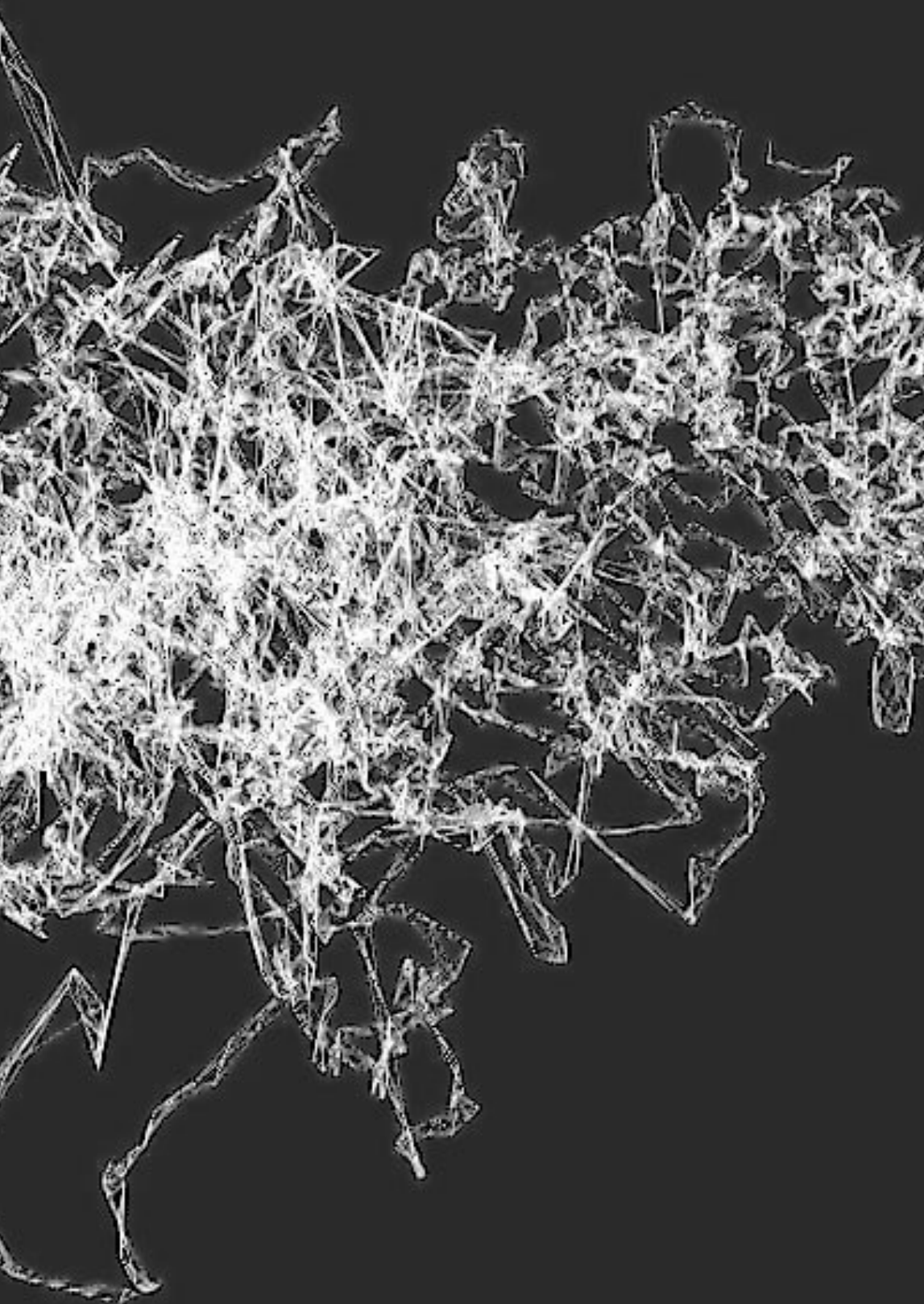


bigRadius: 0.05
smallRadius: 0.005
bigMass: 0.1
smallMass: 0.0001
L: 0.5
minV: 0
maxV: 0.1
N: 200
Tiempo: 40

DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDADES EN EL ÚLTIMO TERCIO DE LA SIMULACIÓN (N = 300)



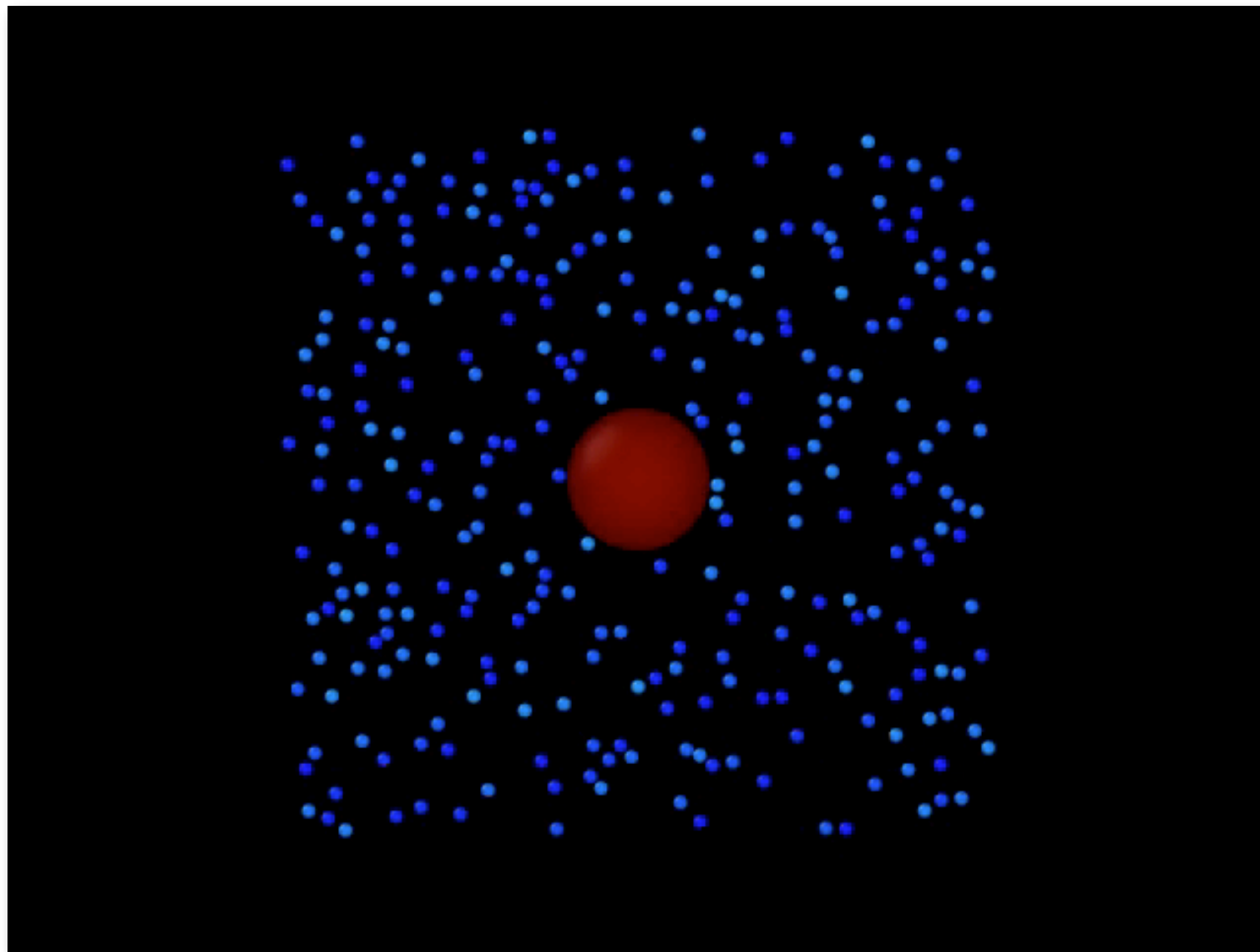
bigRadius: 0.05
smallRadius: 0.005
bigMass: 0.1
smallMass: 0.0001
L: 0.5
minV: 0
maxV: 0.1
N: 300
Tiempo: 40



RESULTADOS

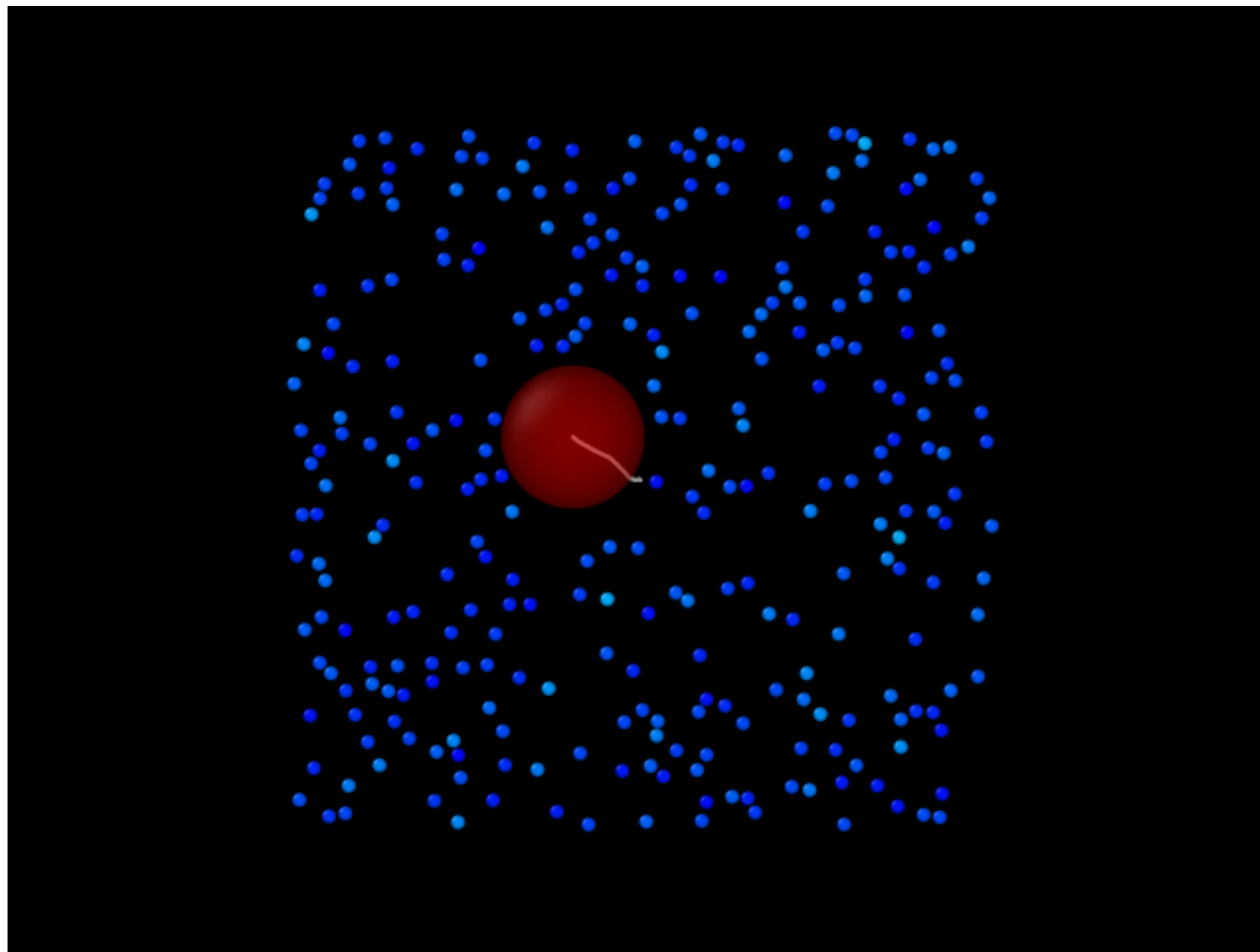
TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A DISTINTAS TEMPERATURAS

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA BAJA



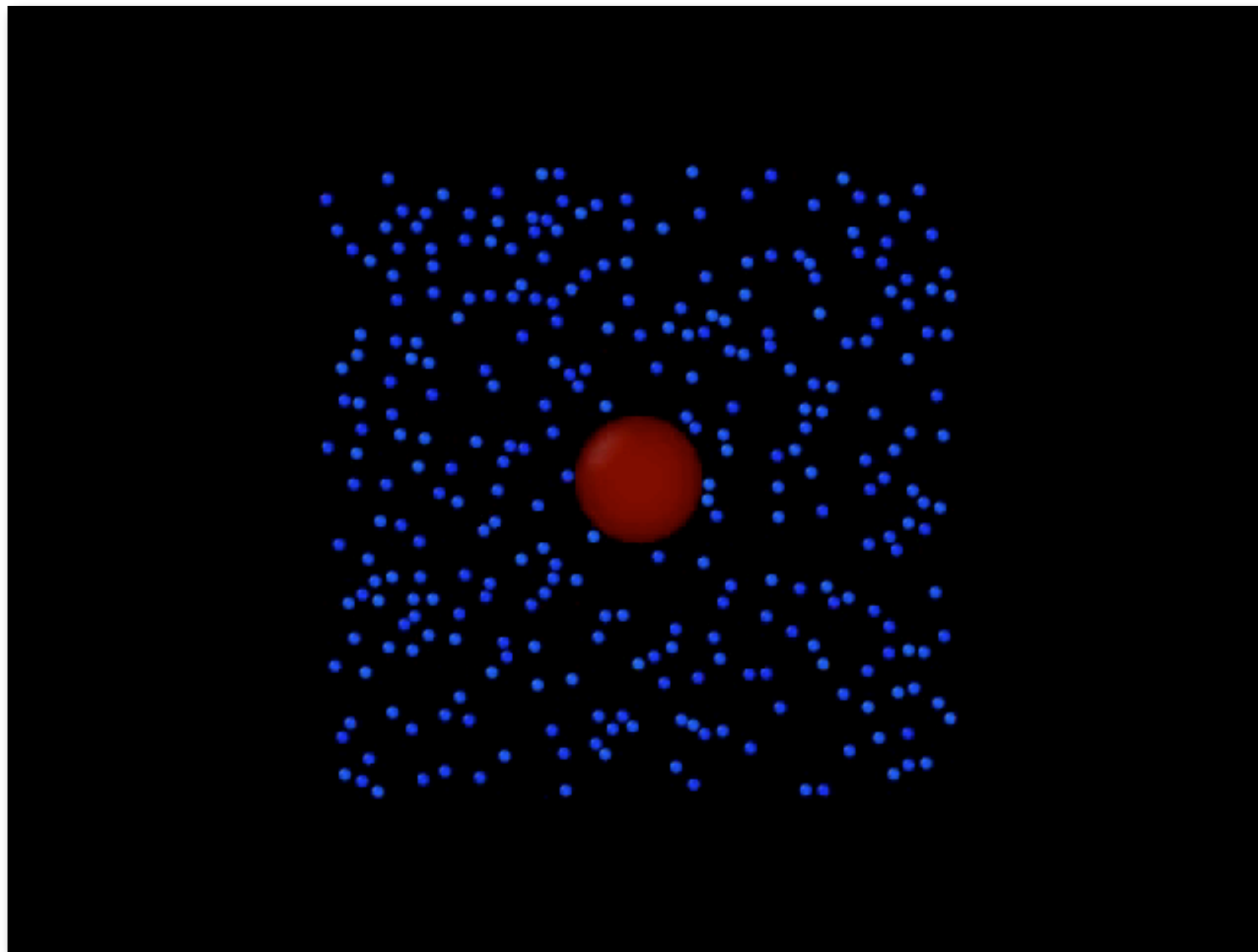
bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	0
maxV:	0.1
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	4.75288 E-5

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA BAJA



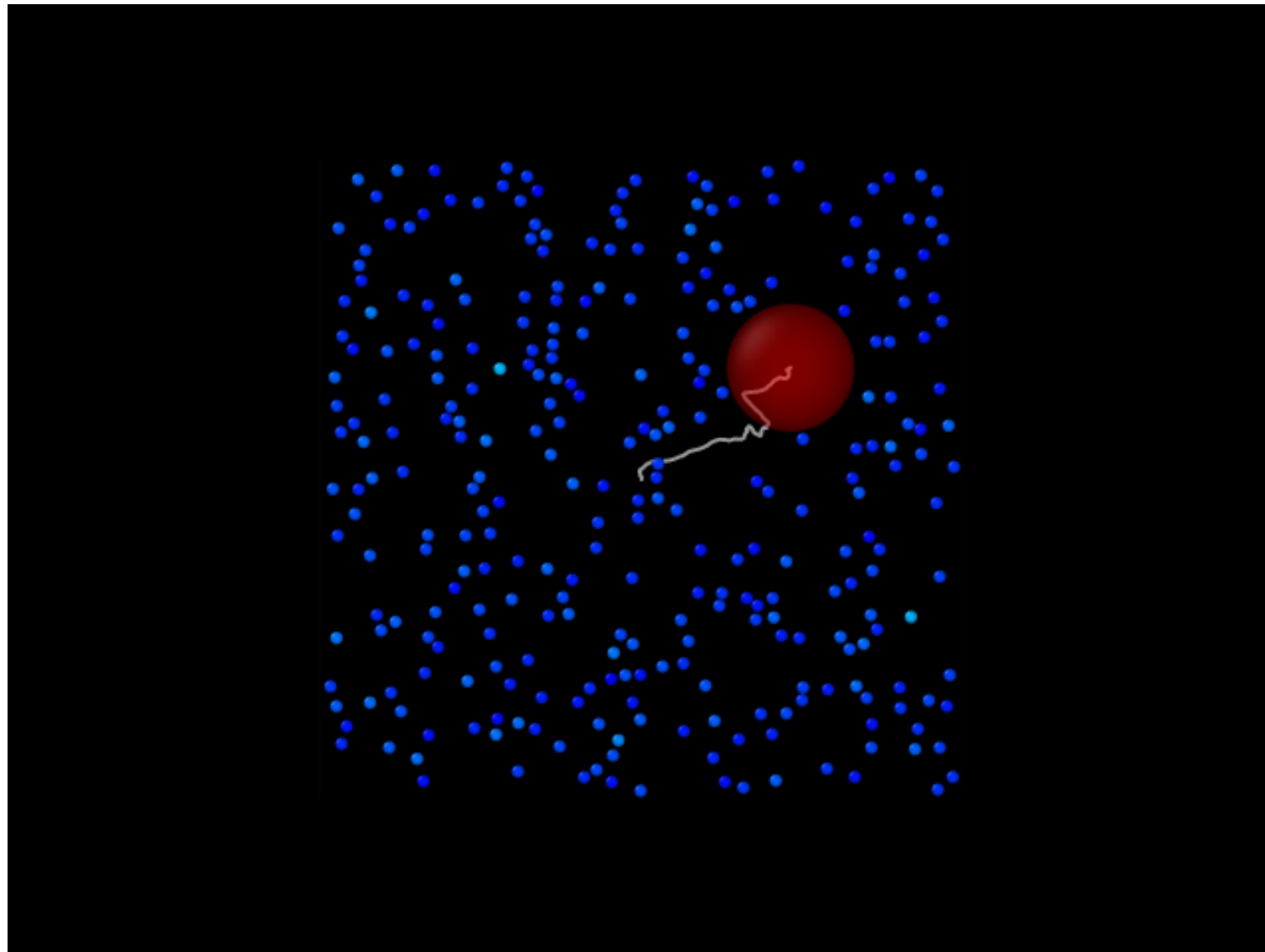
bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	0
maxV:	0.1
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	4.75288 E-5

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA MEDIA



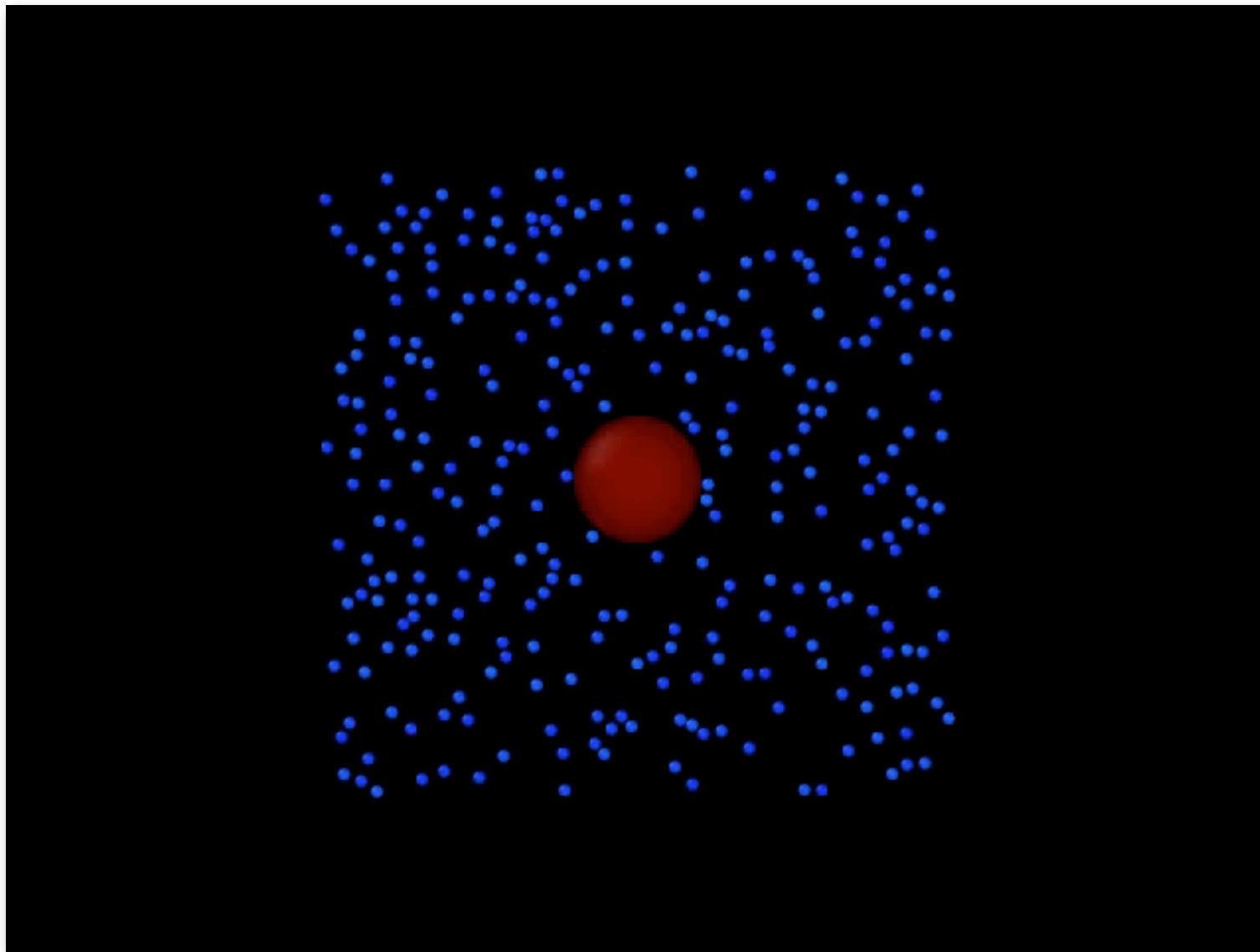
bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	0.2
maxV:	0.5
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	0.00189

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA MEDIA



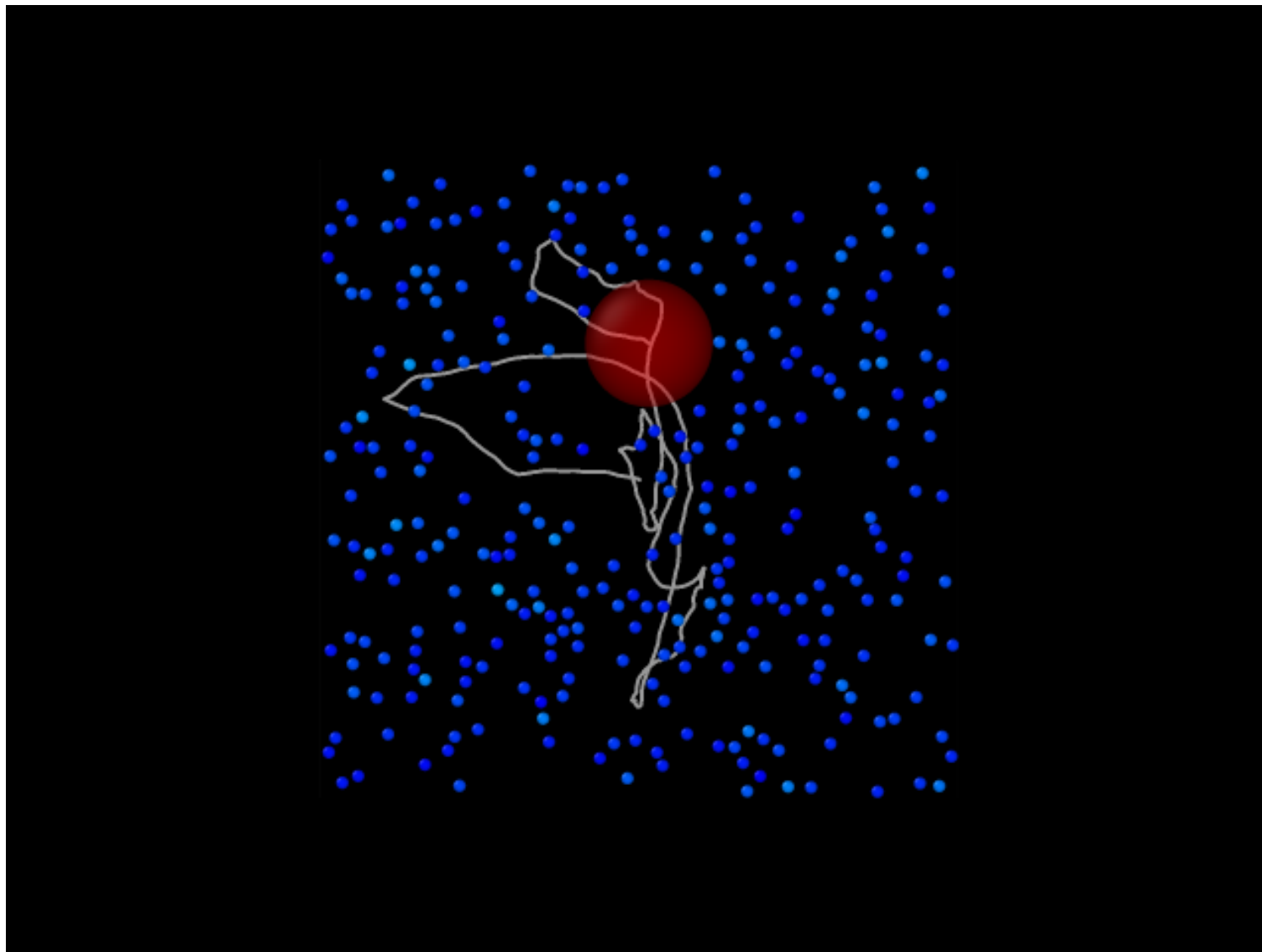
bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	0.2
maxV:	0.5
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	0.00189

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA ALTA



bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	0.2
maxV:	0.5
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	0.00189

TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE A TEMPERATURA ALTA



bigRadius:	0.05
smallRadius:	0.005
bigMass:	0.1
smallMass:	0.0001
L:	0.5
minV:	1
maxV:	2
N:	300
Tiempo:	40
Frames/sec:	40
Nth frames:	2
K:	0.03413

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- ▶ Observamos que la distribución de los tiempos entre colisiones se asemejan a una distribución exponencial.
- ▶ Pareciera que no depende de N la distribución de las velocidades.
- ▶ A mayor temperatura, mayor fue la trayectoria recorrida por la partícula mayor.