

# **Dinámica Molecular Dirigida por Eventos: Movimiento Browniano**

Grupo 7

Duffau, Teófilo Manuel

Lynch, Ezequiel



# Fundamentos



# Fundamentos

- El movimiento browniano es el movimiento aleatorio que se observa en las partículas que se hallan en un medio fluido (líquido o gas), como resultado de choques contra las moléculas de dicho fluido.
- Las partículas observadas tienen una masa y un radio superior al de las moléculas contra las que choca.



# Modelo Matemático



## Event driven simulation

Para este sistema, se utilizó un modelo dirigido por eventos, esto implica calcular el evento (en este caso choque entre partículas) más cercano y avanzar el sistema hasta ese punto. Luego calcular la colisión y repetir hasta la finalización de la simulación. Para ello, se requiere calcular el tiempo que falta para la próxima colisión en el momento dado.



# Ecuaciones

Para el chequeo de superposición de partículas se utiliza

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

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

Para el cálculo del tiempo entre colisiones se utiliza

$$\begin{aligned} d &= (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v)(\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2), \\ \Delta r &= (\Delta x, \Delta y), \\ \Delta v &= (\Delta vx, \Delta vy) \\ \sigma &= R_i + R_j \end{aligned}$$



# Ecuaciones

Para la evolución de las partículas se utilizan las funciones de MRU

$$\begin{aligned}x_i(t) &= x_i(0) + v_x t \\ y_i(t) &= y_i(0) + v_y t\end{aligned}$$

Para los choques con las paredes, se invierte el signo de la velocidad en una componente dependiendo de si la pared es vertical (y) u horizontal (x)

Para los choques entre partículas se calculan las nuevas velocidades con el operador de colisiones J

$$J_x = \frac{J\Delta x}{\sigma}, J_y = \frac{J\Delta y}{\sigma}, \text{ donde } J = \frac{2m_i m_j (\Delta v \cdot \Delta r)}{\sigma(m_i + m_j)}$$
$$\begin{aligned}vx_i^d &= vx_i^a + J_x/m_i & vx_j^d &= vx_j^a - J_x/m_j \\ vy_i^d &= vy_i^a + J_y/m_i & vy_j^d &= vy_j^a - J_y/m_j\end{aligned}$$



# Implementación





# Modelo

- **BrownParticle:** representa la partícula y tiene toda la información que la concierne.
- **SimulatorBrown:** es la simulación en sí. Con métodos para generar las partículas, calcular el siguiente paso de la simulación e imprimir a archivo cuando ella terminase.



# Implementación

La simulación cuenta con los siguientes pasos:

1. Generación de las partículas pequeñas uniformemente distribuidas con una velocidad en módulo menor a cierto valor definido.
2. Cálculo del tiempo de la próxima colisión entre partículas o entre partículas y paredes.
3. Evolución de las partículas por ese tiempo
4. Recálculo de las velocidades de la/s partícula/s que colisiona/n
5. Si la partícula grande colisionó con alguna pared o se simuló mayor tiempo de uno definido inicialmente se finaliza la simulación, si no se vuelve al paso 2.

# Pseudocódigo

Main():

```
    Simulator.simulate(n, maxVel)          //n: partículas, maxVel: max velocidad inicial
    generateParticles()                    //genera las n partículas
    while(true):
        time = calculateNextCollision()    // calcula el tiempo hasta la próxima colisión
        updateParticles(time)             // calcula las nuevas posiciones de las partículas
        if(collision1==bigPart && collision2==wall) //si la grande choca con una pared termina
            printToFile()
            return
        makeCollision()                   // se calcula el operador de colisión y se lleva a cabo (si es colisión part-part)
        saveCollision()                   // se guarda la colisión, o sea el tiempo y las partes involucradas
```



## Constantes

Las partículas se encuentran en una caja cerrada de  $0.5\text{m} \times 0.5\text{m}$ .

La partícula a analizar tiene un radio de  $0.05\text{m}$  y masa de  $100\text{g}$  y las pequeñas con las que colisiona tienen radio  $0.005\text{m}$  y masa  $0.1\text{g}$ .

La posición inicial de la partícula grande es en el centro de la caja.



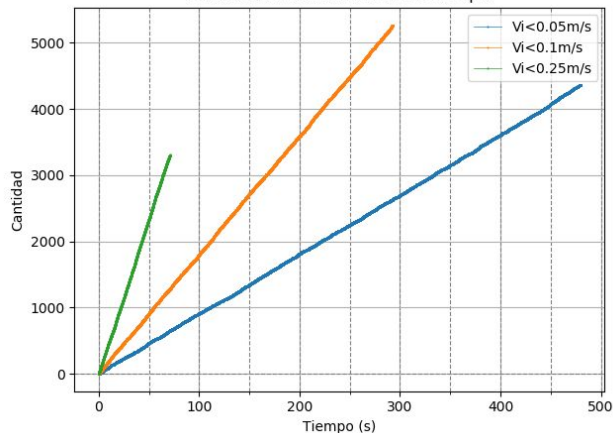
# Resultados



# Colisiones

# Colisiones

Cantidad de colisiones sobre tiempo



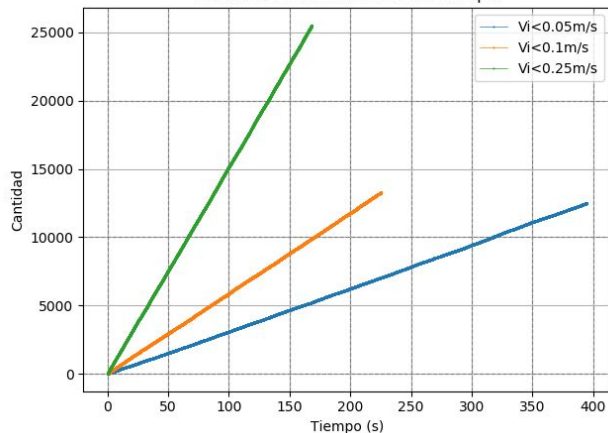
**N=50**

Pendiente  $V_i < 0.05 \sim 10.2 \text{ Hz}$

Pendiente  $V_i < 0.1 \sim 17.1 \text{ Hz}$

Pendiente  $V_i < 0.25 \sim 44.4 \text{ Hz}$

Cantidad de colisiones sobre tiempo



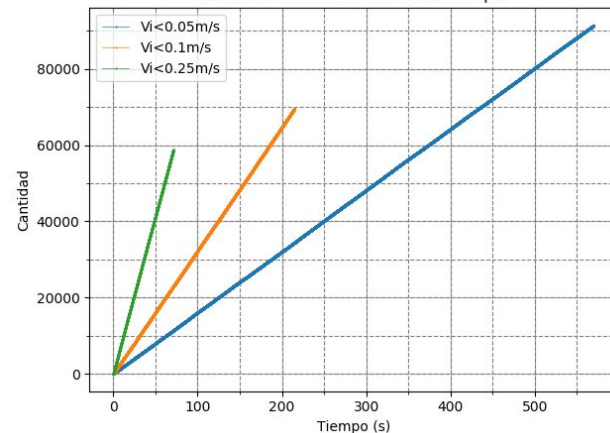
**N=100**

Pendiente  $V_i < 0.05 \sim 33.2 \text{ Hz}$

Pendiente  $V_i < 0.1 \sim 61.2 \text{ Hz}$

Pendiente  $V_i < 0.25 \sim 158.4 \text{ Hz}$

Cantidad de colisiones sobre tiempo



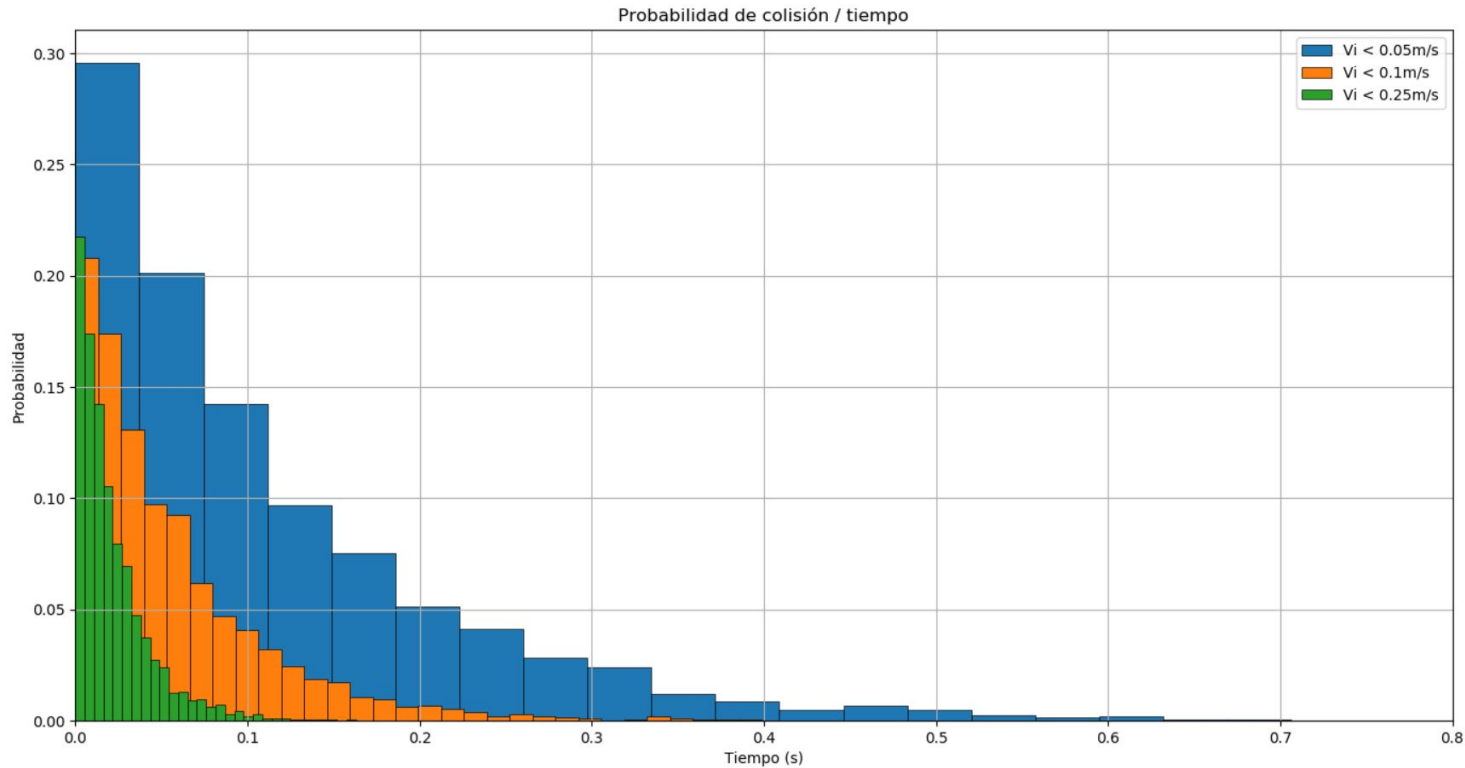
**N=250**

Pendiente  $V_i < 0.05 \sim 159.2 \text{ Hz}$

Pendiente  $V_i < 0.1 \sim 330.6 \text{ Hz}$

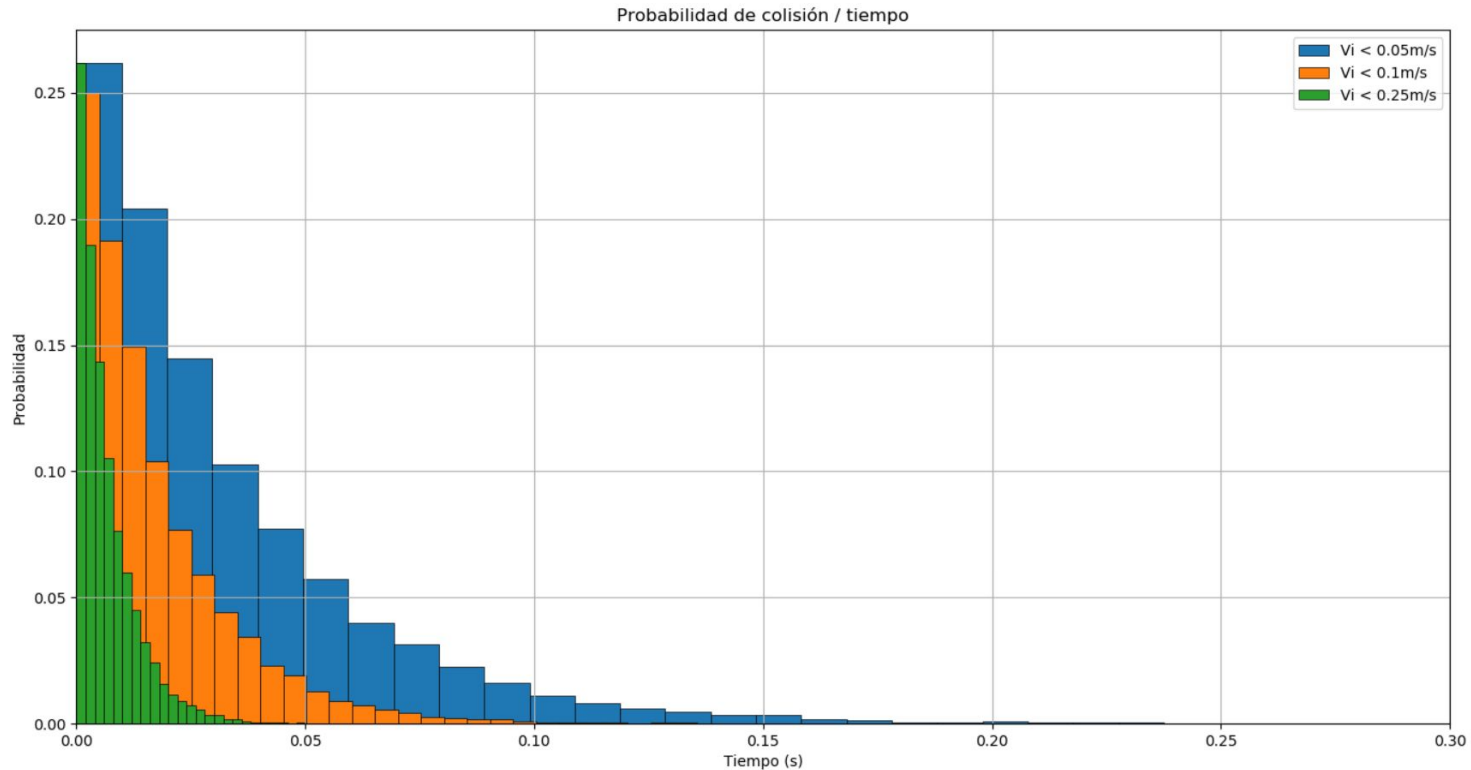
Pendiente  $V_i < 0.25 \sim 838.8 \text{ Hz}$

# Colisiones - 50 Partículas

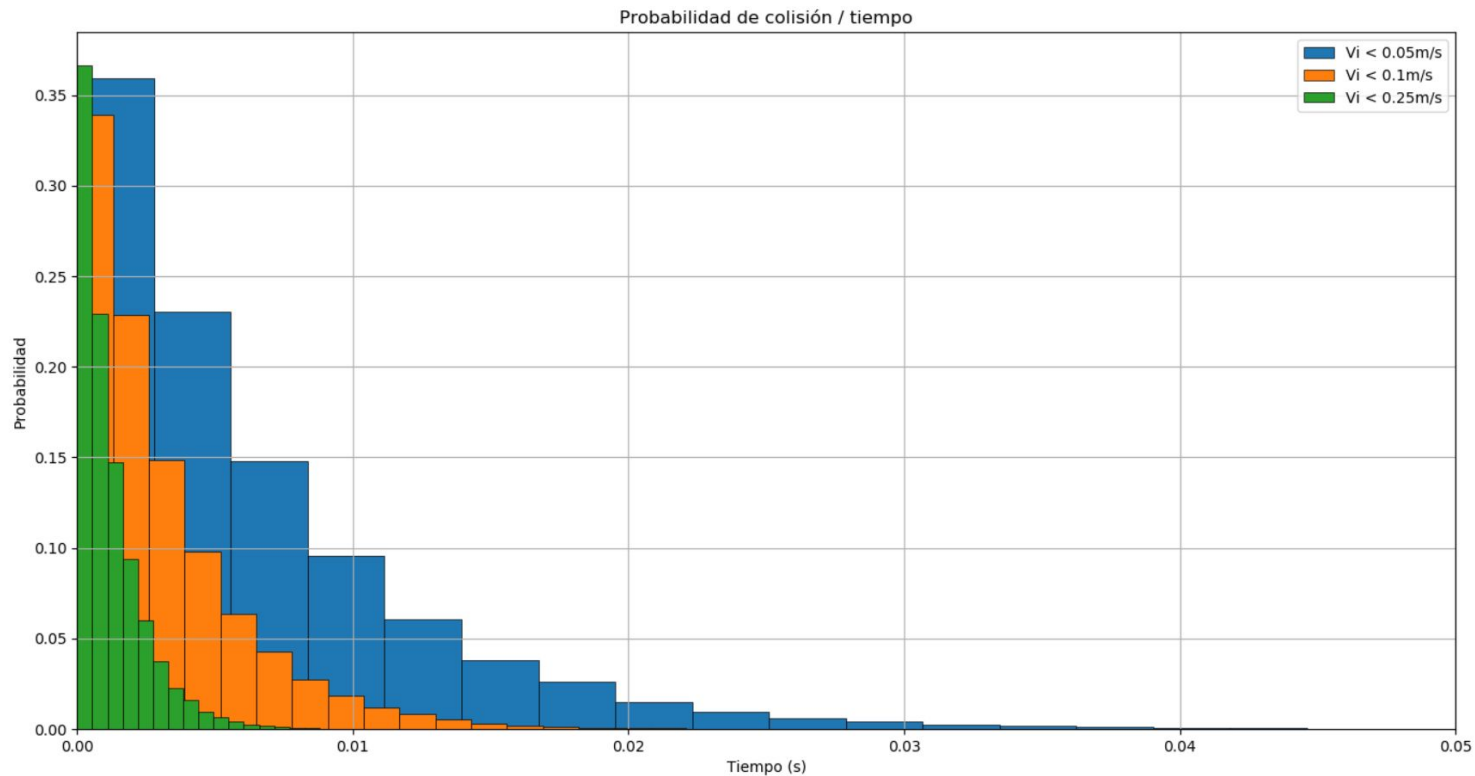




# Colisiones - 100 Partículas



# Colisiones - 250 Partículas

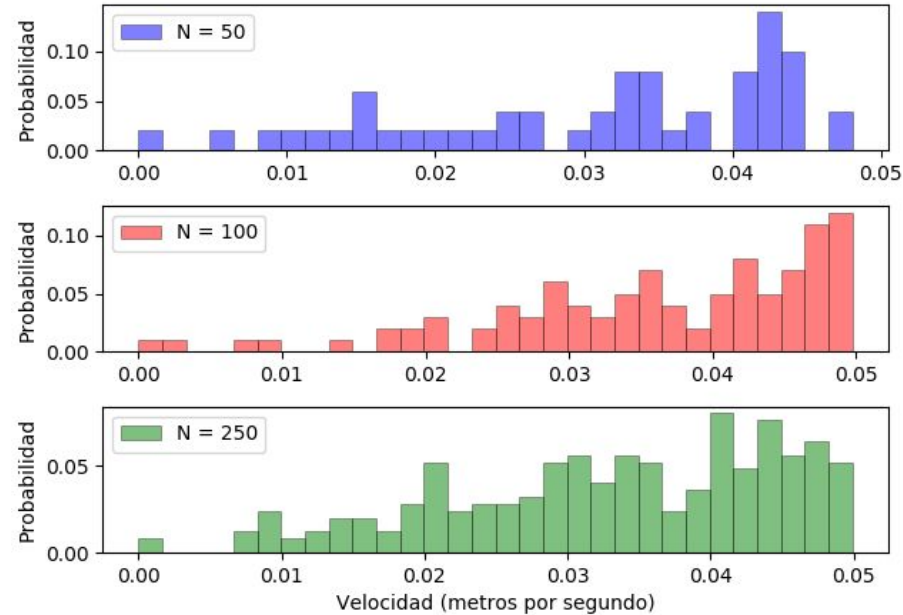




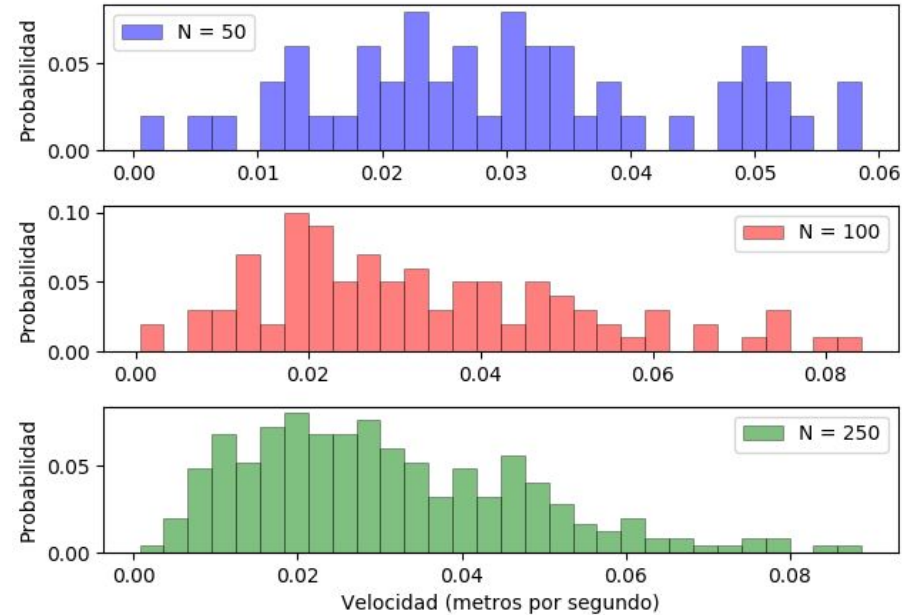
# Velocidades

# Velocidades - $|V_i| < 0.05$ m/s

Probabilidad de velocidad en el comienzo.

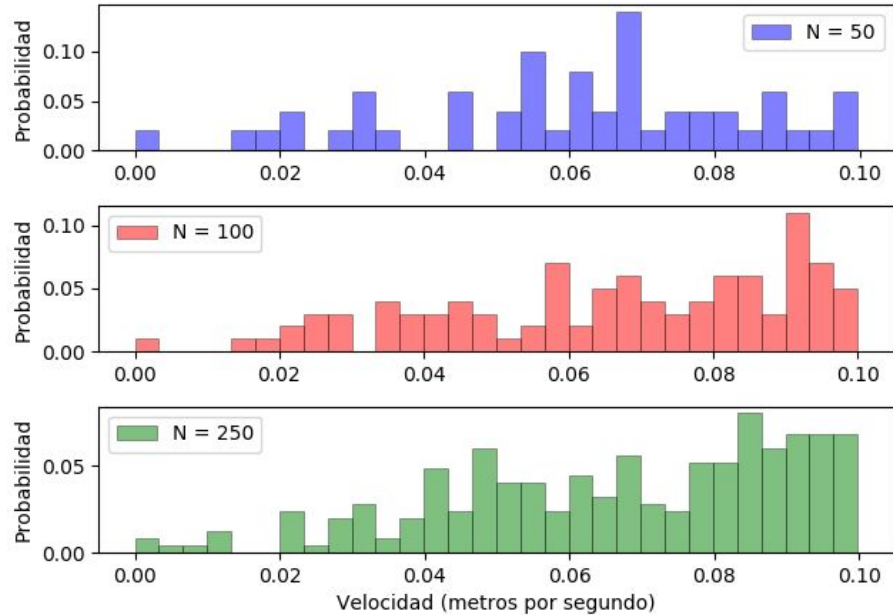


Probabilidad de velocidad en el ultimo tercio.

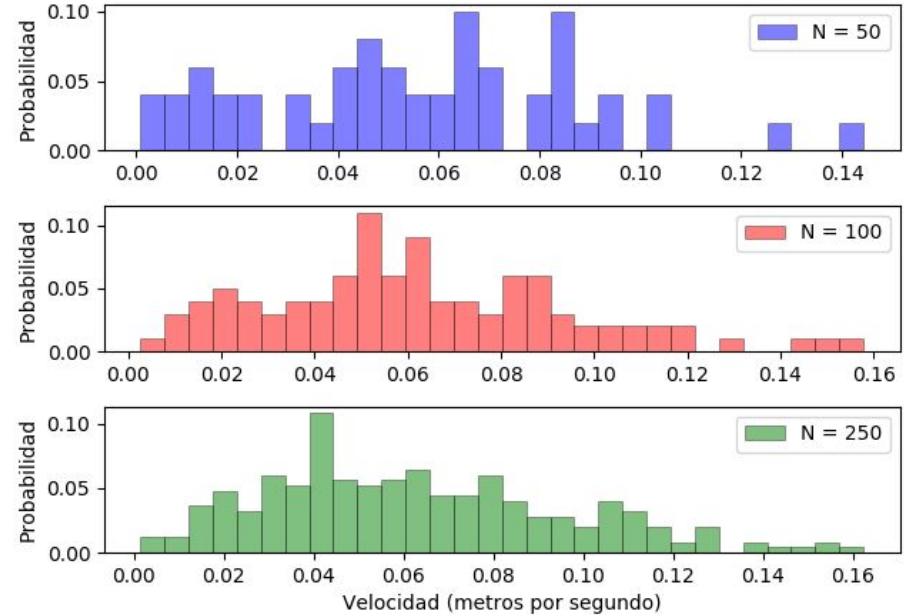


# Velocidades - $|V_i| < 0.1 \text{ m/s}$

Probabilidad de velocidad en el comienzo.

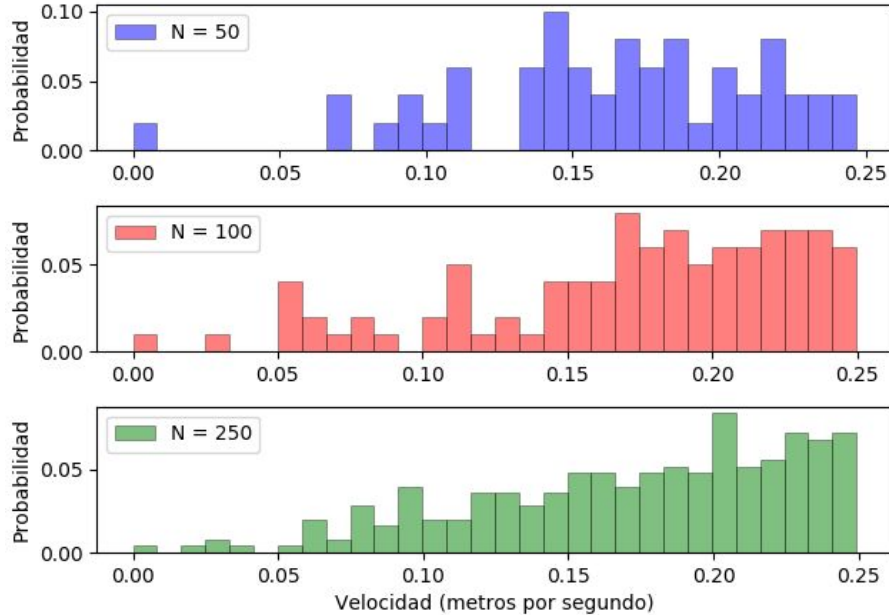


Probabilidad de velocidad en el ultimo tercio.

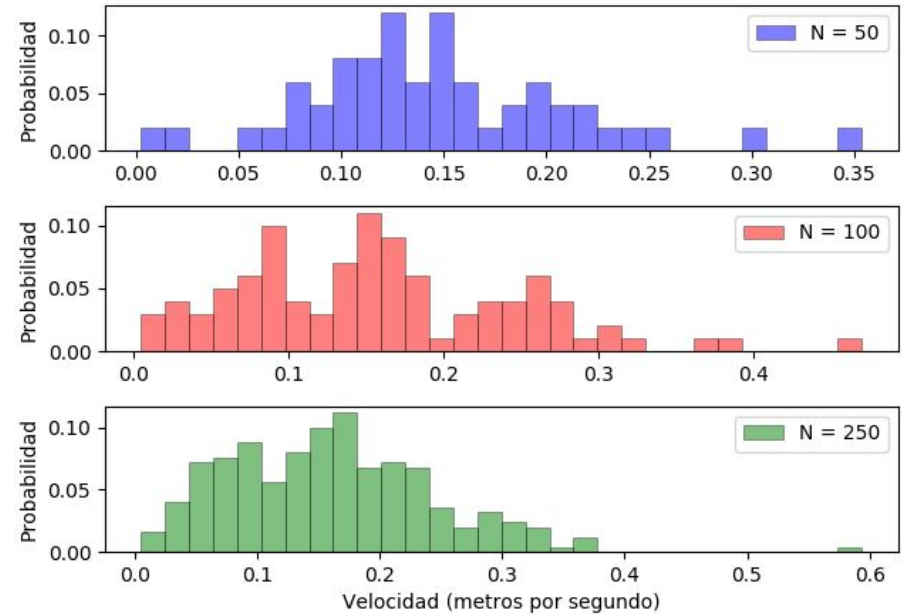


# Velocidades - $|V_i| < 0.25$ m/s

Probabilidad de velocidad en el comienzo.



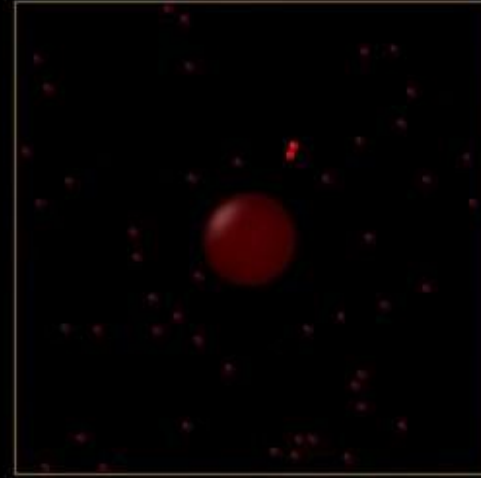
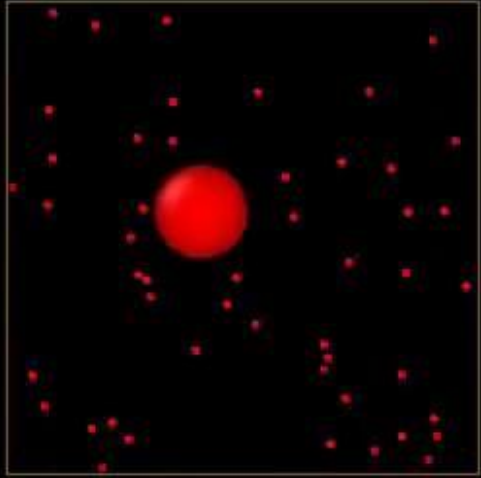
Probabilidad de velocidad en el ultimo tercio.





# Trayectoria de partícula

# Animación - 50 Partículas - $|V_i| < 0.1\text{m/s}$

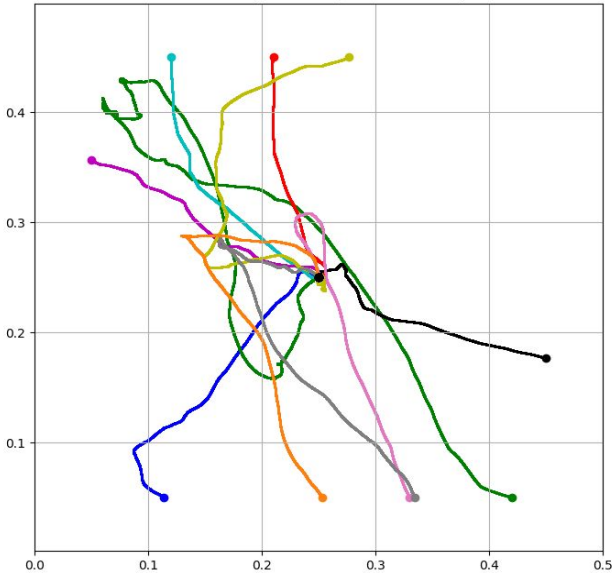




# Trayectoria partícula grande - 50 Partículas

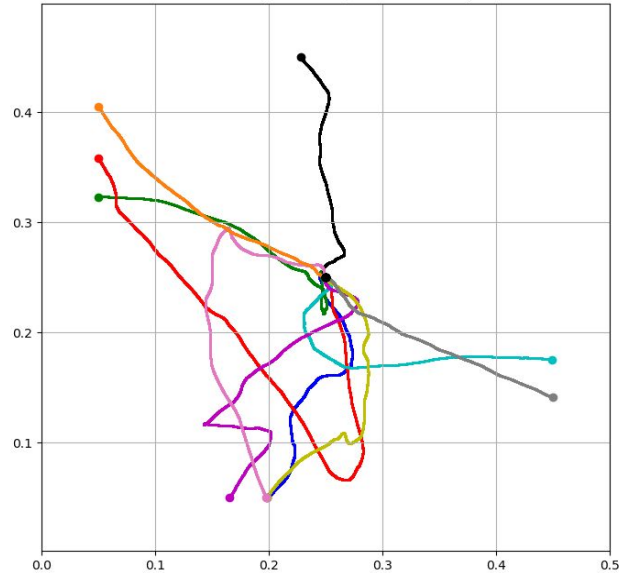


Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



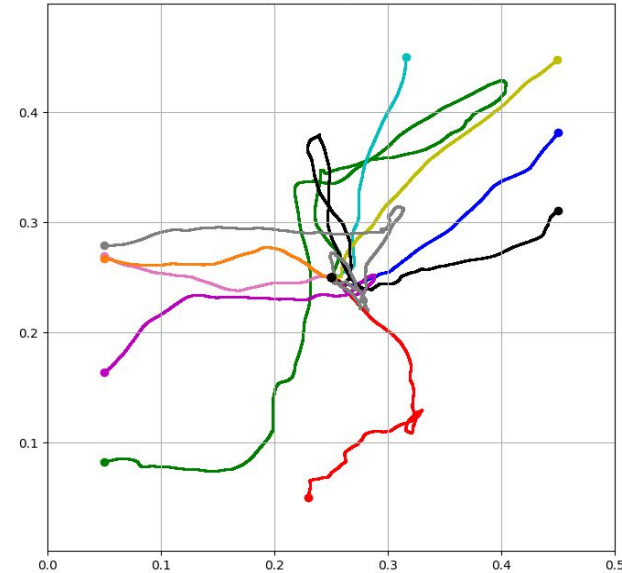
**0.05V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



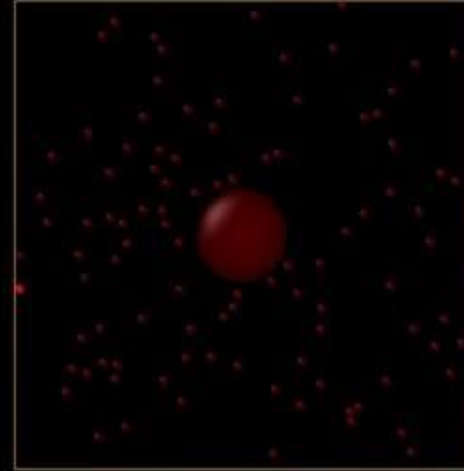
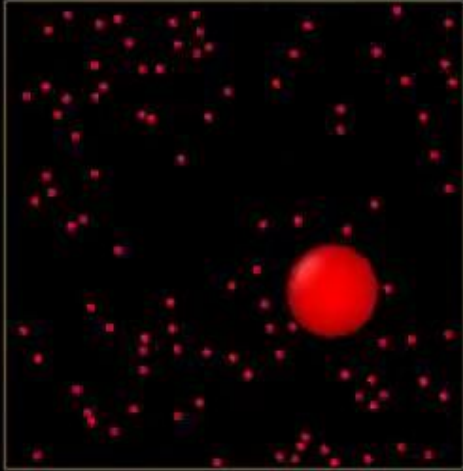
**0.1V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



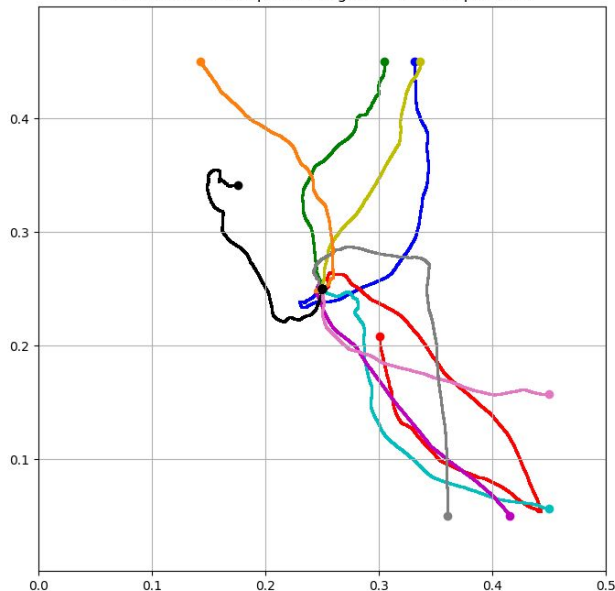
**0.25V**

# Animaciones - 100 Partículas - $|V_i| < 0.1\text{m/s}$



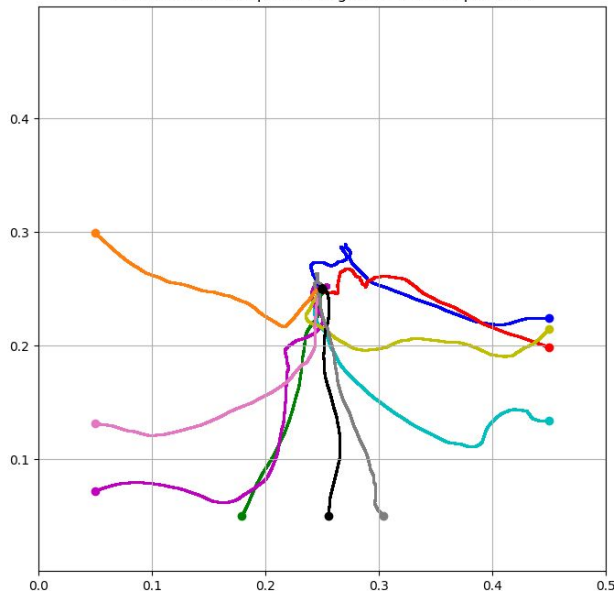
# Trayectoria partícula grande - 100 Partículas

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



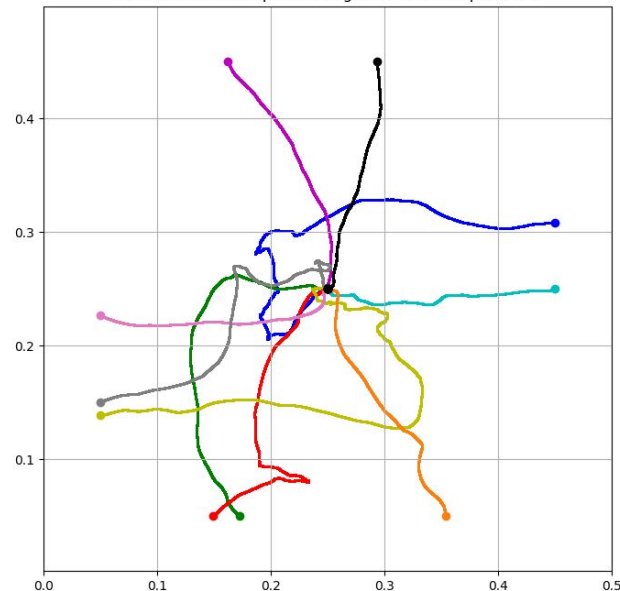
**0.05V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



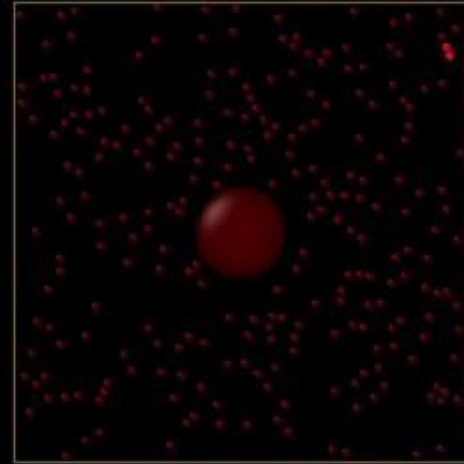
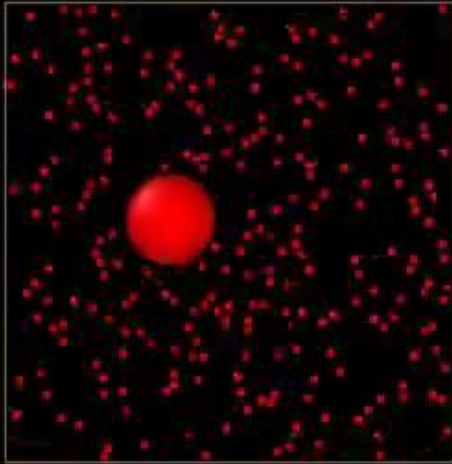
**0.1V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



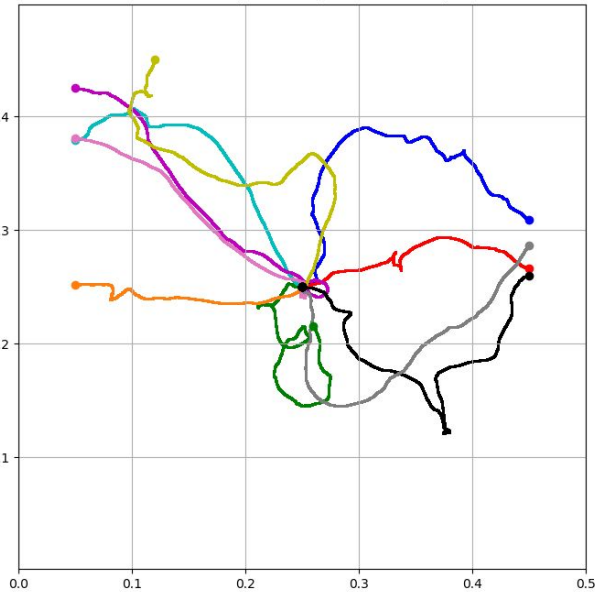
**0.25V**

# Animaciones - 250 Partículas - $|V_i| < 0.1\text{m/s}$



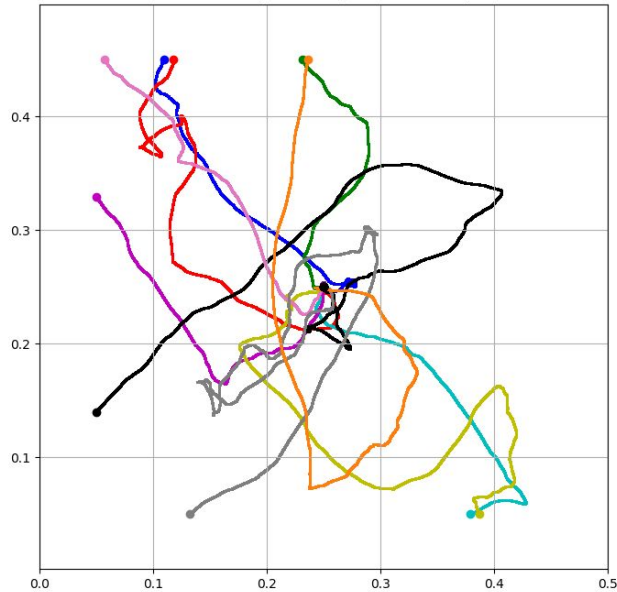
# Trayectoria partícula grande - 250 Partículas

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



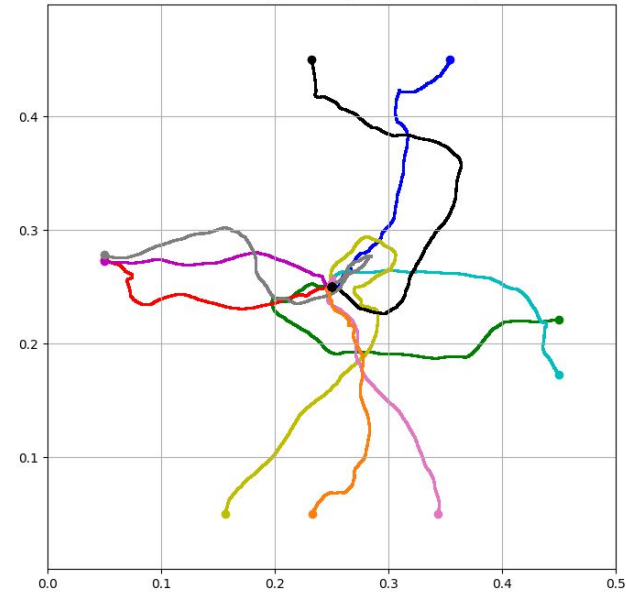
**0.05V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



**0.1V**

Movimiento de las partículas grandes en el espacio 2D



**0.25V**



# Coeficiente de Difusión



## Cálculo

Para el cálculo del coeficiente de difusión se tiene que el desplazamiento cuadrático medio es

$$DCM(t) \approx Dt$$

siendo D el coeficiente a calcular, por lo tanto se calculó el DCM de la siguiente forma (si alguna simulación no tiene más puntos de datos se toma la distancia final):

$$DCM(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (d_n(t) - d_n(0))^2$$

$d_n(t)$  : distancia al centro de la simulación n al tiempo t



## Cálculo

Luego se aproximó calculando el D que menor error diera

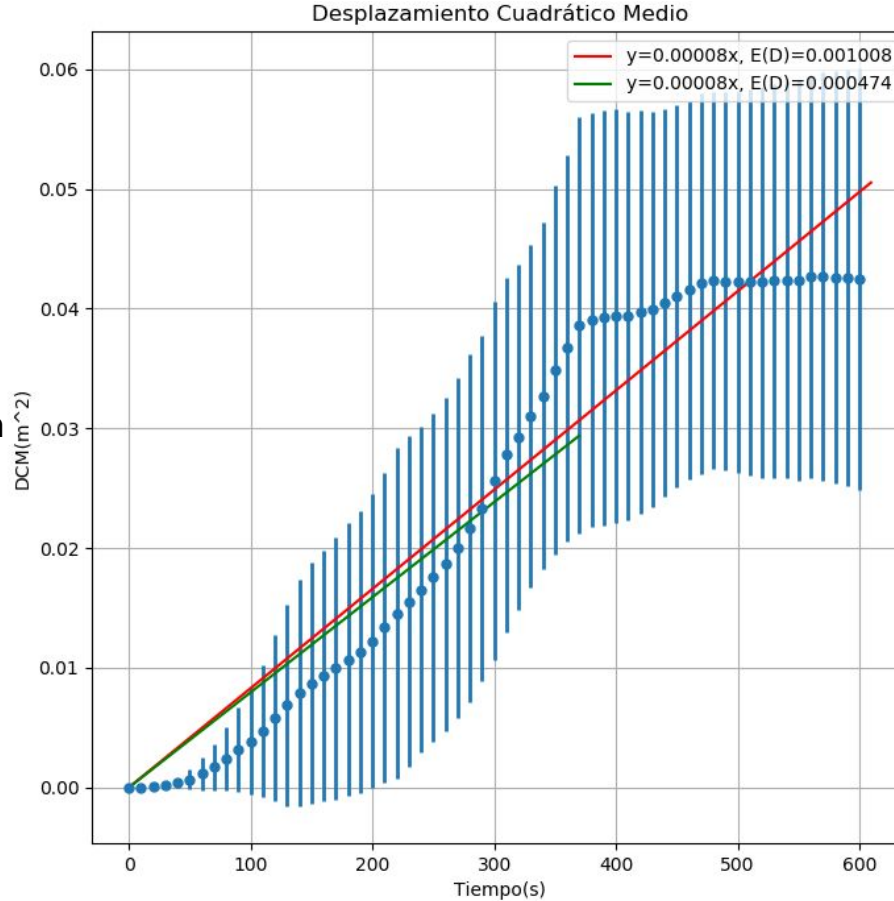
$$E(D) = \sum_t (DCM(t) - t * D)^2$$

Para la partícula grande, se utilizaron 10 simulaciones para N=250, y con velocidades iniciales máximas de 0.05m/s, 0.1m/s y 0.25m/s.

Para una partícula pequeña se utilizó una sola corrida y con los mismos parámetros que para la grande



# Partícula grande - $|V_i| < 0.05 \text{ m/s}$



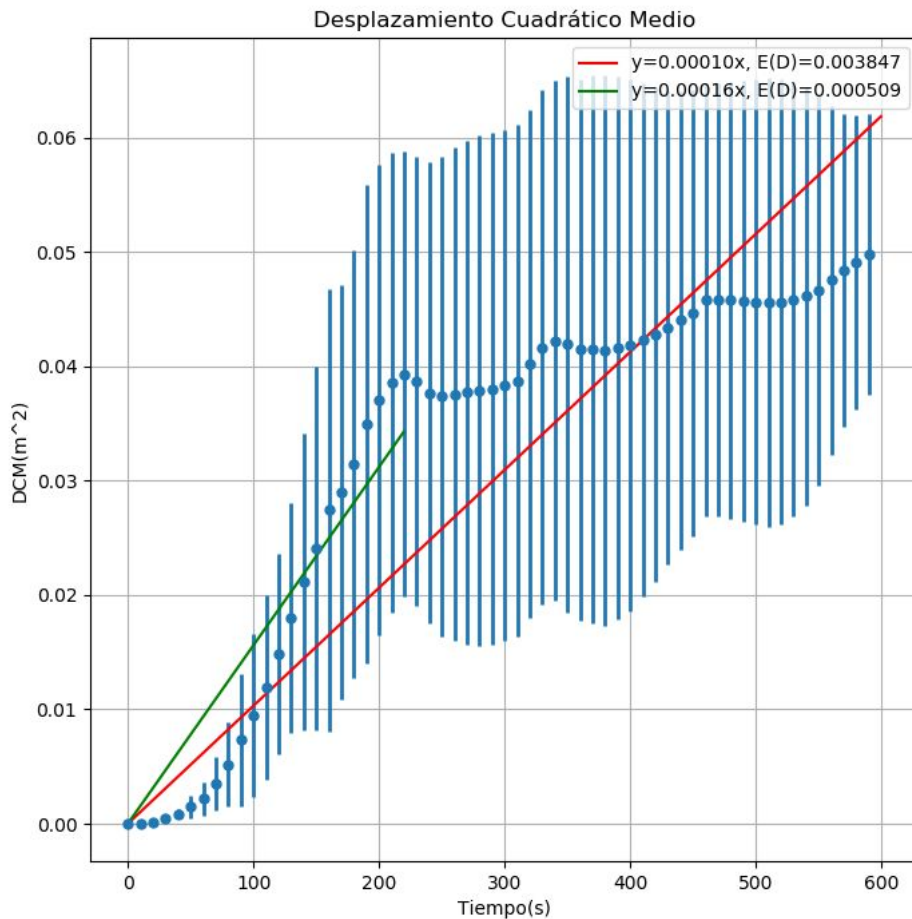
La recta roja es la regresión lineal de todos los datos, con las simulaciones que terminan antes.

La recta verde es la regresión lineal con datos hasta el segundo 370, que es alrededor de donde termina la mayoría de las simulaciones.

$$D_{\text{verde}} = 7.94 \text{e-}5 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_{\text{rojo}} = 8.29 \text{e-}5 \text{ m}^2/\text{s}$$

# Partícula grande - $|V_i| < 0.1 \text{ m/s}$



$$D_{\text{verde}} = 1.56 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$$

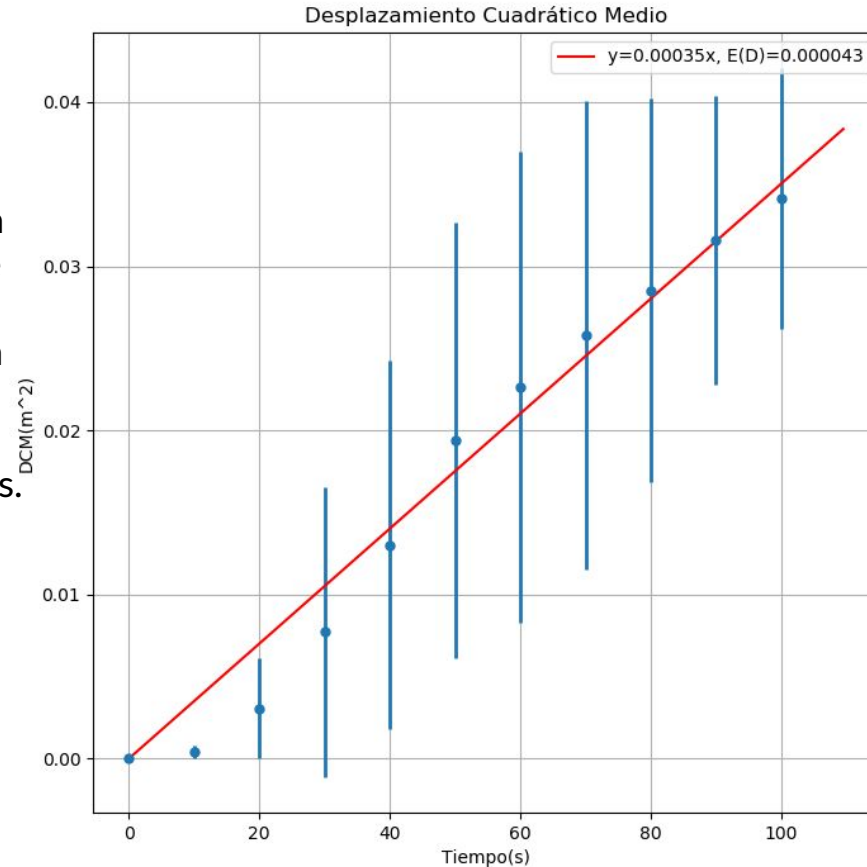
$$D_{\text{rojo}} = 1.03 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$$

La recta roja es la regresión lineal de todos los datos, con las simulaciones que terminan antes.

La recta verde es la regresión lineal con datos hasta el segundo 220, que es alrededor de donde termina la mayoría de las simulaciones.

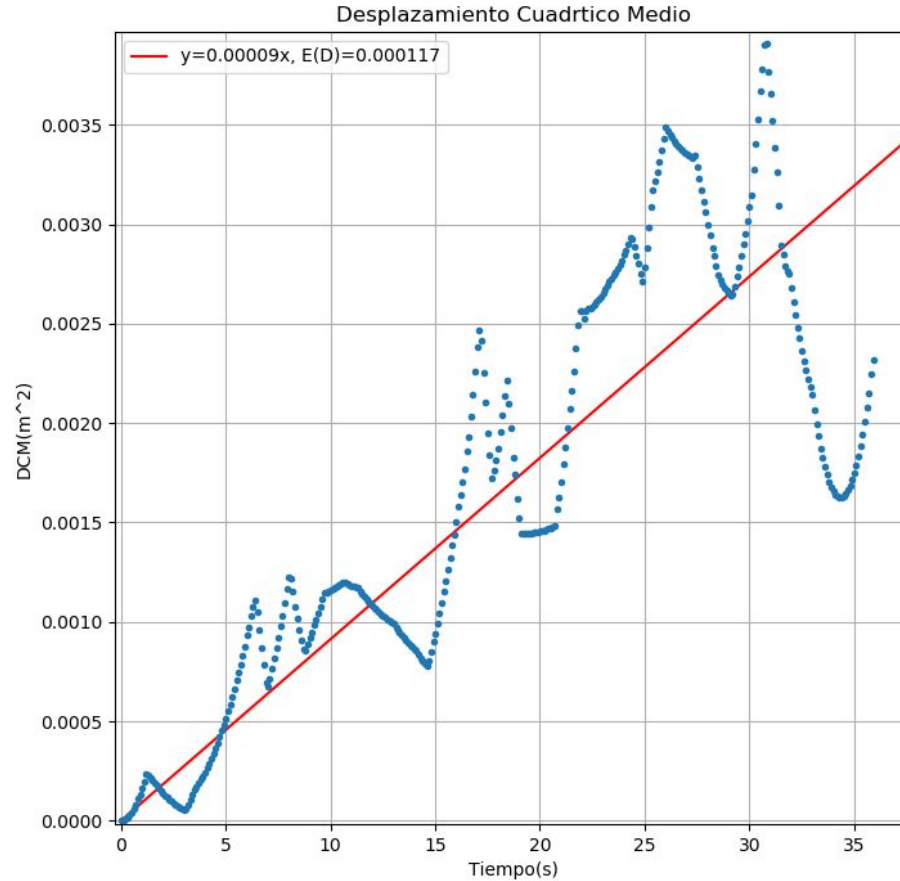
# Partícula grande - $|V_i| < 0.25 \text{ m/s}$

Observación: Dada la gran cantidad de colisiones que se generaban en estas simulaciones, éstas fueron cortadas a los 100 segundos en vez de a los 600 como en las anteriores.



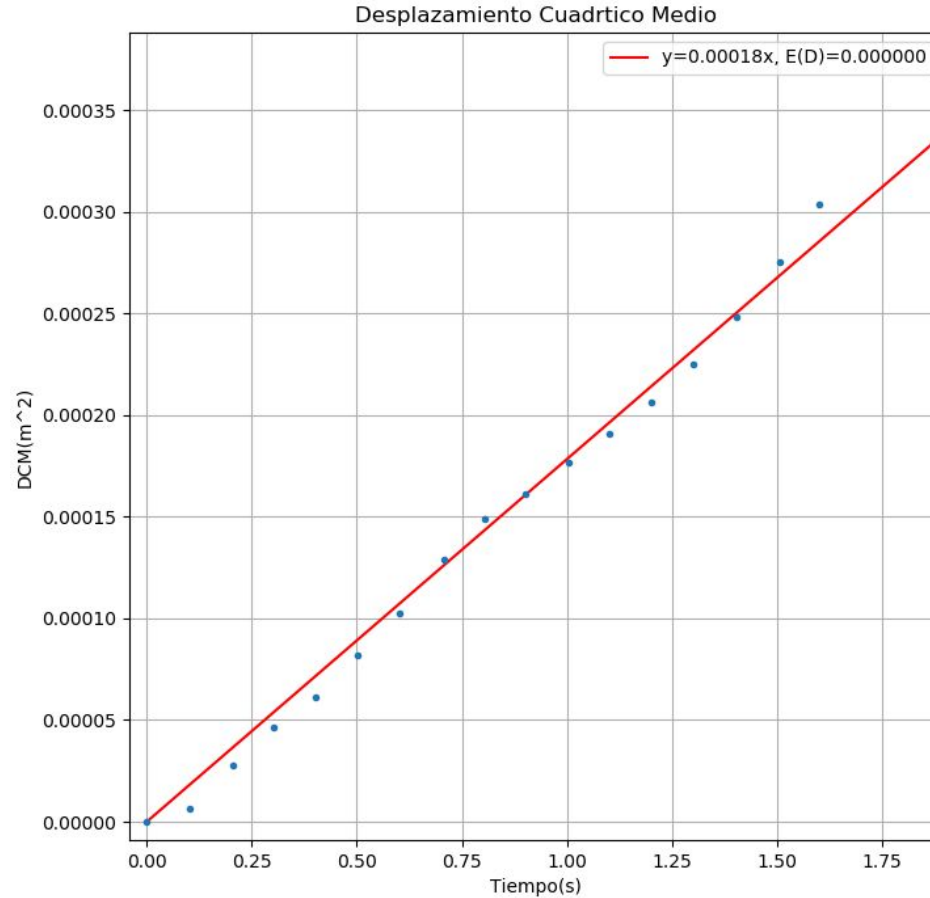
$$D = 3.50 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$$

# Partícula chica - $|V_i| < 0.05 \text{ m/s}$



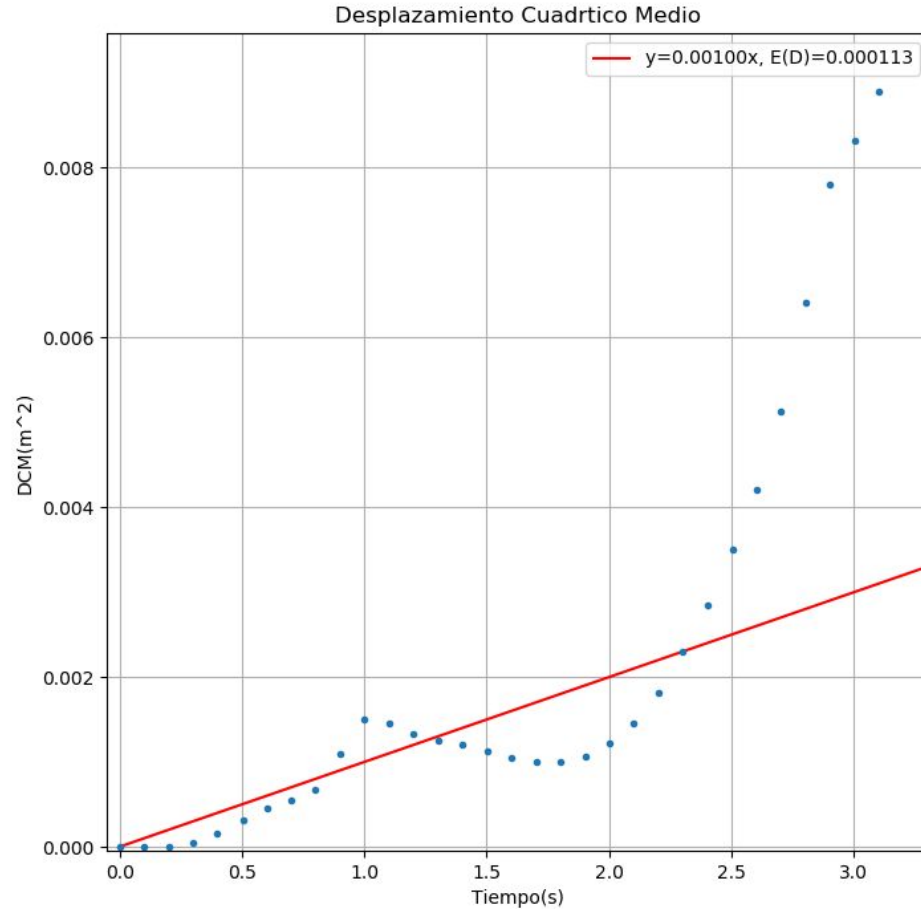
$$D=9.12\text{e-}5 \text{ m}^2/\text{s}$$

# Partícula chica - $|V_i| < 0.1 \text{ m/s}$



$$D=1.78\text{e-}4 \text{ m}^2/\text{s}$$

# Partícula chica - $|V_i| < 0.25 \text{ m/s}$



$$D=1.00\text{e-}3 \text{ m}^2/\text{s}$$



# Conclusiones



## Conclusiones

- A mayor densidad, menor es el tiempo entre colisiones
- Las frecuencias de colisiones son homogéneas a lo largo del tiempo y aumentan junto con la cantidad de partículas y la velocidad (temperatura) de la mismas.
- A medida que avanza el tiempo, el promedio de velocidades disminuye, llegando a una distribución de Maxwell-Boltzmann
- A medida que las velocidades iniciales máximas aumentan, el coeficiente de difusión también