

Movimiento Browniano

Trabajo Practico Nro. 3

Badi Leonel, Buchhalter Nicolás Demián y Meola Franco
Román

16 de abril de 2016

Grupo 3

Fundamentos

Introducción

- Movimiento Browniano
- Dinámica molecular dirigida por eventos con choques elásticos
- Las partículas siguen un movimiento rectilíneo uniforme entre colisiones

Fundamentos

Variables relevantes

- N : número de partículas
- Dominio cuadrado de $0,5m$ de lado
- **N partículas pequeñas**
 - $R_1 = 0,005m$
 - $m_1 = 1kg$
- **Una partícula grande**
 - $R_2 = 0,05m$
 - $m_2 = 100kg$

Implementación

Generación de los agentes

- Posiciones (x, y) aleatorias para todas las partículas evitando la superposición de las mismas
- $-0,1 \frac{m}{s} < v_0 < 0,1 \frac{m}{s}$ en x e y para las partículas chicas
- $v_0 = 0$ para la partícula grande
- Todas las paredes son rígidas

Simulación

Variables relevantes

- *dt* intrínseco variable
- *dt2* constante
- **time** : Tiempo en segundos a visualizar
- **frameRate** : Número de frames por segundo

Implementación

```
public double timeToNextCollision(){
    Double t = Double.MAX_VALUE;
    for(int i = 0; i < N; j++){
        Particle particle = getParticle(i);
        Double calculatedTime = timeToBorder(particle, t);
        if(calculatedTime < t){
            t = calculatedTime;
        }
        for(int j = i+1 ; j < N; j++){
            Particle particle2 = getParticle(j);
            if(!particle.equals(particle2)) {
                if (calculateD(particle, particle2) >= 0) {
                    if (calculatedTime(particle, particle2) < t) {
                        colParticle1 = particle;
                        colParticle2 = particle2;
                        t = calculatedTime;
                    }
                }
            }
        }
    }
    return t;
}
```

Código 1: Función para obtener el tiempo de la próxima colisión.

Implementación

```
public void simulate(double time, double frameRate){  
    writeFrame();  
    while(time > 0){  
        accumulatedTime += timeToNextCollision();  
        if(accumulatedTime < frameRate) {  
            moveSystem(timeToNextCollision);  
            collide(particle1, particle2); //particle2 == null cuando es borde  
        } else {  
            moveSystem(frameRate - (accumulatedTime - timeToNextCollision));  
            writeFrame();  
            time -= frameRate;  
            for(j=2*frameRate; j<accumulatedTime && time> 0; j+=frameRate) {  
                time -= frameRate;  
                moveSystem(frameRate);  
                writeFrame();  
            }  
            moveSystem(accumulatedTime - (j - frameRate));  
            accumulatedTime = 0;  
        }  
    }  
}
```

Código 2: Algoritmo de simulación del sistema.

Implementación

Problemas encontrados

- Precisión del double: Al colisionar con bordes obtuvimos `timeToNextCollision` negativos
- Utilización de una heurística: Cell Index Method resultó muy costoso, aumentando el tiempo necesario para la simulación

Implementación

Visualización

- La simulación y la visualización son independientes
- El algoritmo de simulación escribe un archivo .tsv con los siguientes datos:
 - (x, y)
 - r
 - Color RGB para indicar las velocidades, donde R es la componente en el eje Y y G es la componente en eje X
- Por último, se carga en Ovito el archivo de salida .tsv para realizar la visualización

Resultados

Tiempo promedio para el cálculo de la simulación para distintos valores de N

N	t
10	342 ms
100	4 seg
250	1 min 12 seg
500	18 min
1000	?
10000	?
100000	?

Tabla: Tiempo promedio para el cálculo de la simulación para distintos valores de N .

Resultados

Gráfico Frecuencia de colisiones

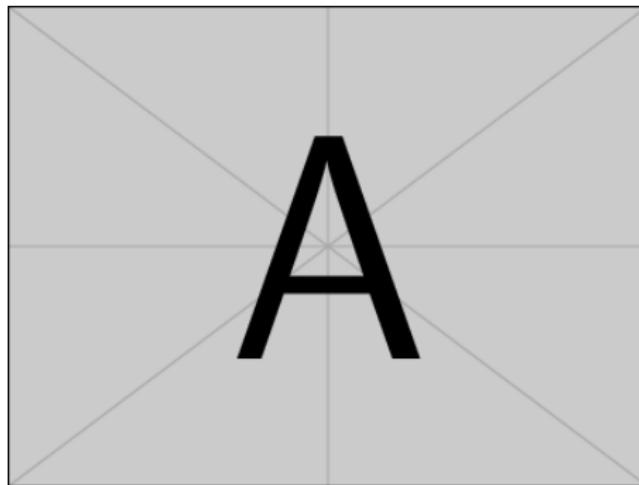


Grafico: Gráfico de la frecuencia de colisiones por unidad de tiempo

Resultados

Gráfico de la distribución de velocidades

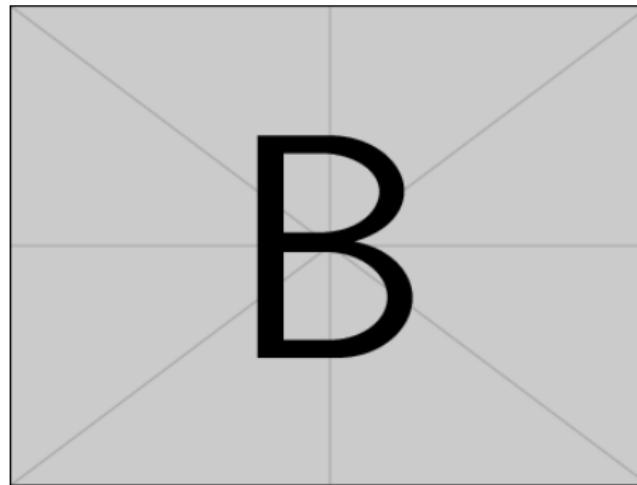


Grafico: Gráfico de la distribución de velocidades en el último tercio de la simulación

Resultados

Gráfico de la trayectoria de la partícula grande

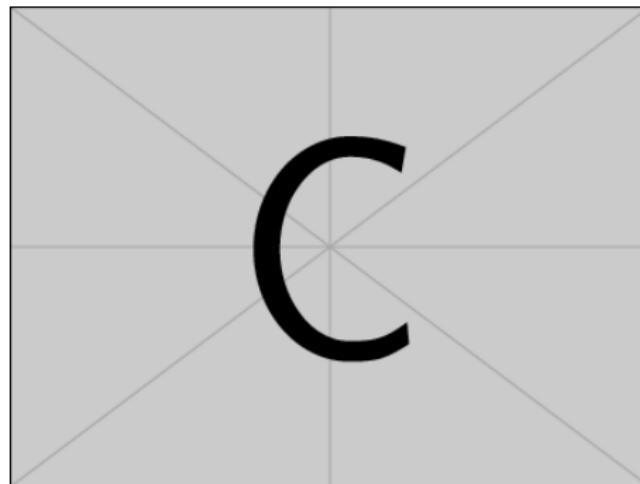


Grafico: Gráfico de la trayectoria de la partícula grande para las distintas temperaturas

Resultados

Animación de la simulación para $N = 100$

Resultados

Animación de la simulación para $N = 500$

Conclusiones

- Lorem
- ipsum
- dolor

Gracias