Grupo 4

# Trabajo Práctico N°3

## Dinámica Molecular Dirigida por Eventos


- Banfi, Malena - 61008
- Caeiro, Alejo Francisco - 60692
- Fleischer, Lucas - 61153

# Introducción

# Introducción

- El objetivo de este trabajo práctico es explorar el funcionamiento de un sistema cuya dinámica molecular está regida por eventos con choques elásticos.

- Luego, se observarán los resultados mediante animaciones y gráficos con diferentes combinaciones de parámetros.

# Fundamentos matematicos

## Posición de una partícula

$$\boxed{\begin{aligned} y_i(t_c) &= y_i(0) + v_{y_i}.t_c \\ x_i(t_c) &= x_i(0) + v_{x_i}.t_c \end{aligned}}$$

# Fundamentos matematicos

## Tiempo de choque

Cálculo tiempo de choque ($t_c$) entre pared y particula

$$t_c = \begin{cases} \frac{(x_{p_2} - R - x(0))}{v_x} & si \;\; v_{x_i} > 0 \\ \frac{(x_{p_1} + R - x(0))}{v_x} & si \;\; v_{x_i} < 0 \\ \infty & si \;\; v_{x_i} = 0 \end{cases}$$

Cálculo tiempo de choque ($t_c$) entre dos particulas

$$t_c = \begin{cases} \infty & si & \Delta v.\Delta r \geq 0 \\ \infty & si & d < 0 \\ -\frac{\Delta v.\Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v.\Delta v} & en\ otro\ caso & \end{cases}$$

$$d = (\Delta v.\Delta r)^2 - (\Delta v.\Delta v)(\Delta r.\Delta r - \sigma^2)$$
$$\sigma = R_i + R_j$$
$$\Delta r = (x_j - x_i, y_j - y_i)$$
$$\Delta v = (vx_j - vx_i, vy_j - vy_i)$$

# Fundamentos matematicos

## Consecuencia del choque

Collision con pared horizontal o vertical

Particula con velocidad $(vx, vy)$

si choca con pared vertical $\rightarrow (-vx, vy)$

si choca con pared horizontal $\rightarrow (vx, -vy)$

Colision entre particulas

$$J_x = \frac{J\Delta x}{\sigma}, J_y = \frac{J\Delta y}{\sigma} \; donde \; J = \frac{2m_i m_j(\Delta v.\Delta r)}{\sigma(m_i + m_j)}$$

$$\boxed{\begin{aligned} vx_i^d &= vx_i^a + \frac{J_x}{m_i} \\ vx_j^d &= vx_j^a - \frac{J_x}{m_j} \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} vy_i^d &= vy_i^a + \frac{J_y}{m_i} \\ vy_j^d &= vy_j^a - \frac{J_y}{m_j} \end{aligned}}$$

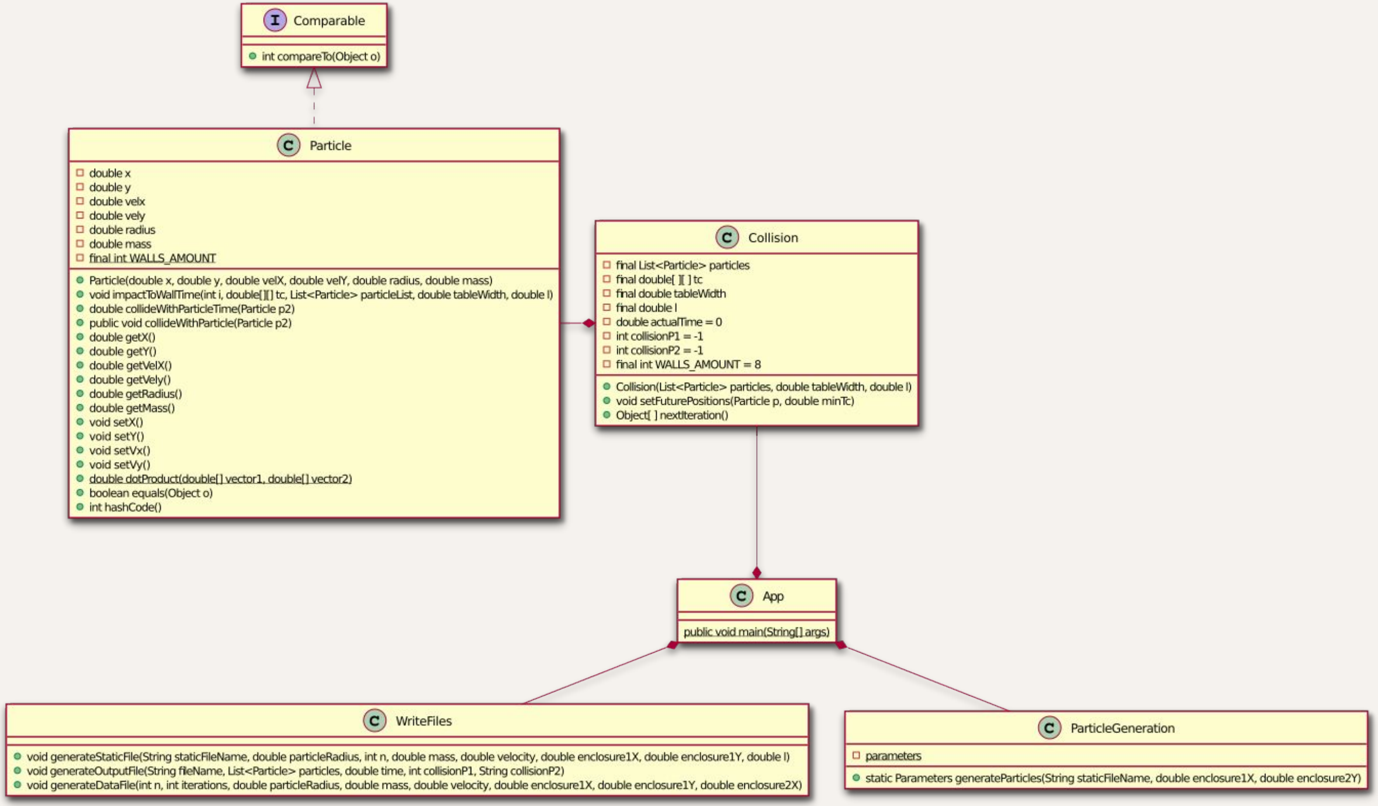
# Colisión entre partículas y vértices

- Este choque se calcula como un choque entre dos particulas explicado previamente.

- El vértice será contemplado como una partícula de:
  - Masa infinita
  - Radio y velocidad cero

# Implementación

# Diagrama UML



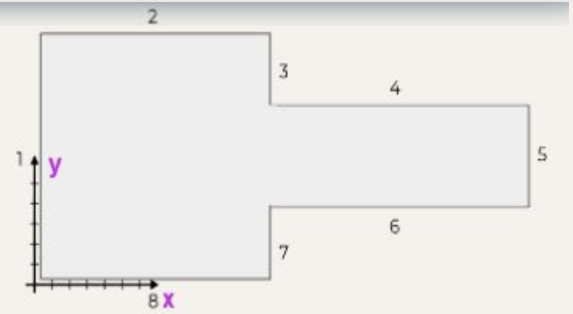
# Pseudocodigo

```
class Particle{

  double x, y
  double radius, mass
  double velX, velY
  final int WALLS_AMOUNT = 8

  void impactToWallTime(double[][] tc, List<Particle> particleList)

}
```




```
impactToWAllTime(double[]tc, List<Particle> particleList){

  tc[8] = calculateTcWall()

  for(wall = 0 ; i < wallsAmount ; i++){
    if(tc < 0) tc[i] = Infinity

    else{
      double futureX = this.getX() + this.getVx() * tc[wall];
      double futureY = this.getY() + this.getVy() * tc[wall];

      switch case (wall)
        case: 0 isGoingToCollide() ? tc[wall] : Infinity
        ...
        case: 8 isGoingToCollide() ? tc[wall] : Infinity

    }
  }

}
```

# Pseudocodigo

```
class Collision {

  List<Particle> particles
  double[][] tcMatrix

  nextIteration()
  setFuturePositions()

}
```

# Pseudocodigo

```
nextIteration(){

  tcMatrix = particles.foreach().collideTime()

  minTc = tcMatrix.getMinTc()
  minTcP1 = tcMatrix.getMinTcP1()
  minTcP2 = tcMatrix.getMinTcP2()

  particles.foreach().setFuturePosition(particle, minTc)


  if(impactWithWall){
    particles.get(MinTcP1).impactWall()

  }else{
    particles.get(MinTcP1).collideWithParticle(particles.get(minTcP2))
  }

}
```

```
setFuturePositions(Particle p, double minTc){
   p.setX(p.getX() + p.getVx()* minTc)
   p.setY(p.getY() + p.getVy()* minTc)
}
```

# Simulaciones

# Sistema a simular

- *N* partículas puntuales con una dirección variable de radio *r*, con un módulo de velocidad *v* y masa *m* constantes.
- Se mueven dentro de dos recintos unidos. El tamaño del primer recinto es de alto M y largo K y el tamaño del segundo recinto es de ancho J y alto L
- Paso temporal variable *dt*.

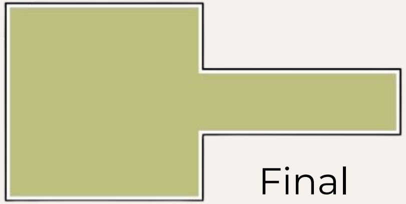
**Parametros fijos:**

- r = 0.0015m
- N = 400
- K = 0.09m
- M = 0.09m
- J = 0.09m
- v = 0.01 m/s
- m = 1.0kg
- Iteraciones = 30000

**Parametros variables:**

- L ∈ [0.03, 0.05, 0.07, 0.09]

Inicial



Final

# Observable

**Presión**

$$P = \frac{\Delta P}{L} = \frac{\Delta P.1}{\Delta t.L} = \frac{\sum_i (2.m_i.v_i)}{L_{recinto}\Delta t}$$

Siendo la presión el impulso transferido a las paredes por unidad de tiempo/longitud.

Vi es la componente normal de la velocidad.

**Desplazamiento cuadrático medio**

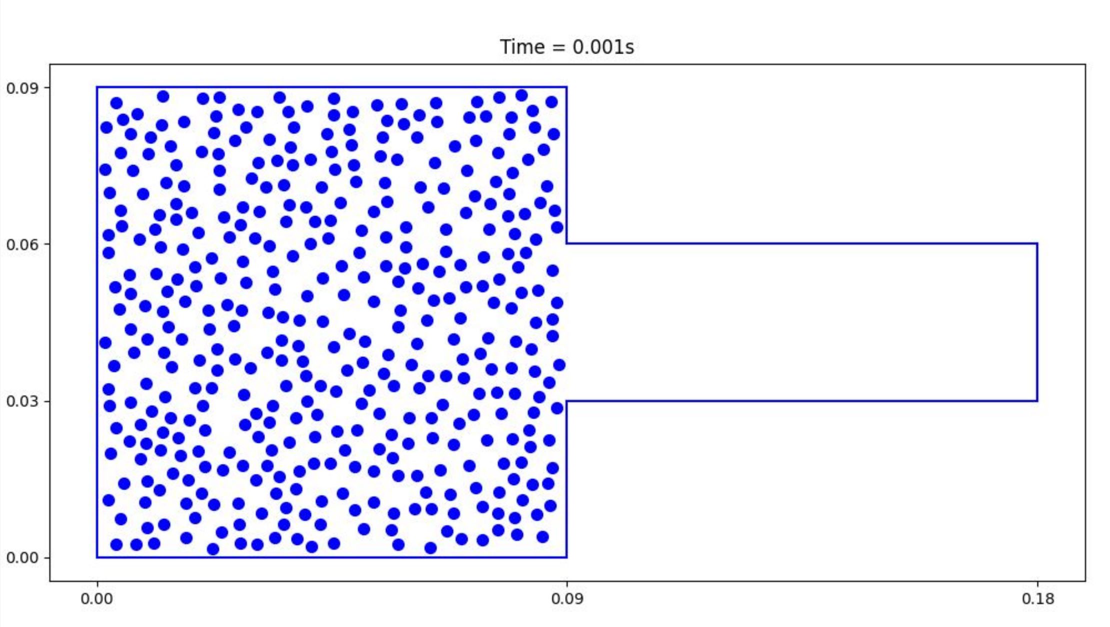
$$< z^2 >= 4Dt = \frac{\sum_i^N ||p_t^i - p_{te}^i||^2}{N}$$

- $p^i_t$ : posición de la partícula i en el tiempo t
- $p^i_{te}$: posición de la partícula i en el tiempo que se estabilizó el sistema

# Resultados

# Animación 1

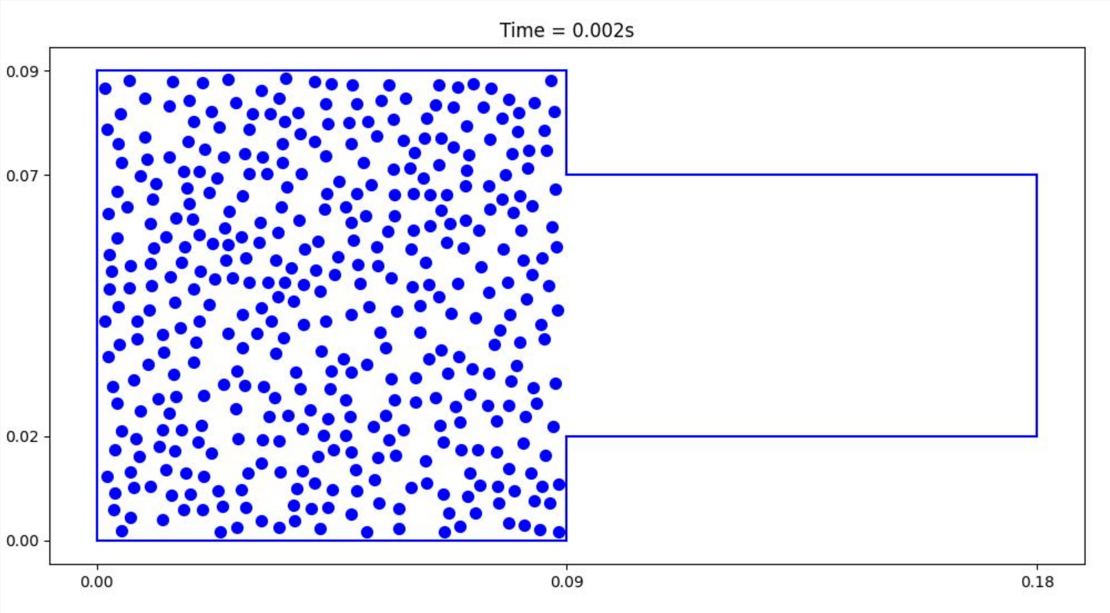
L = 0.03




Clic para ver video en  youtube

# Animación 2

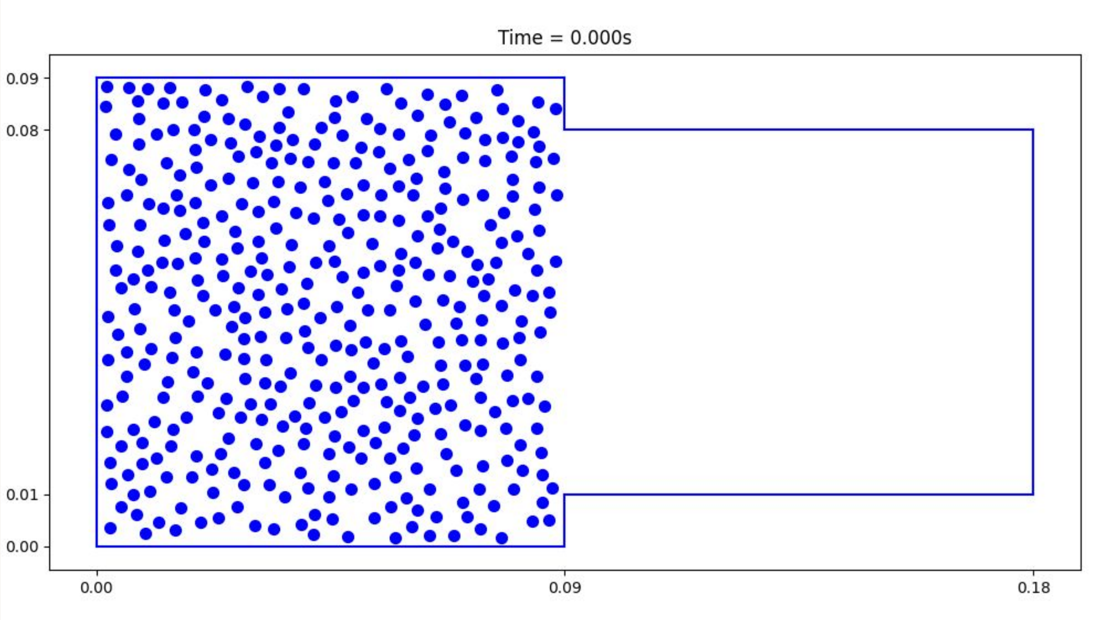
L = 0.05




Clic para ver video en youtube

# Animación 3

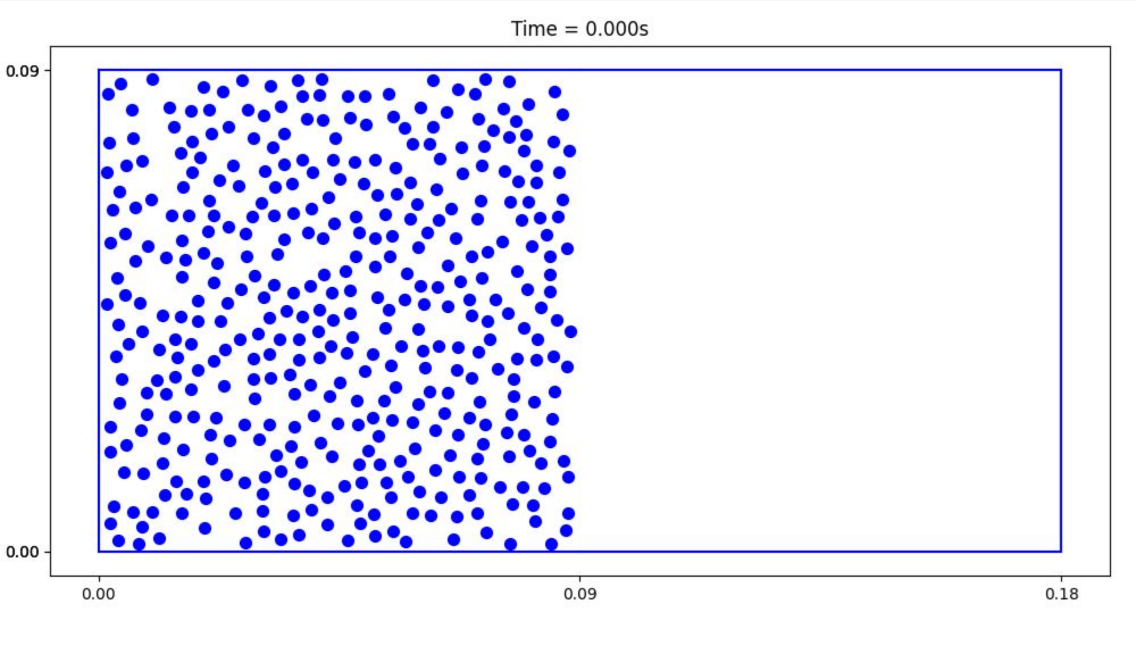
L = 0.07




Clic para ver video en youtube

# Animación 4

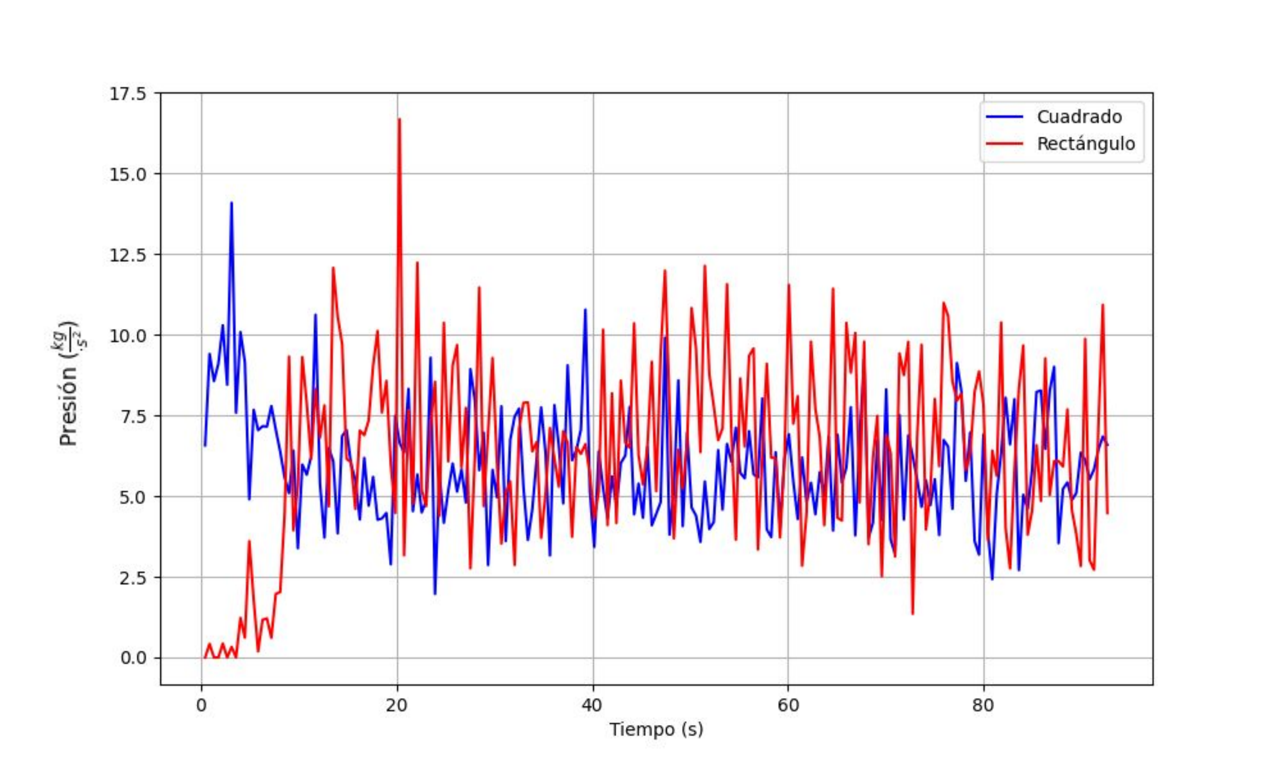
L = 0.09




Clic para ver video en  youtube

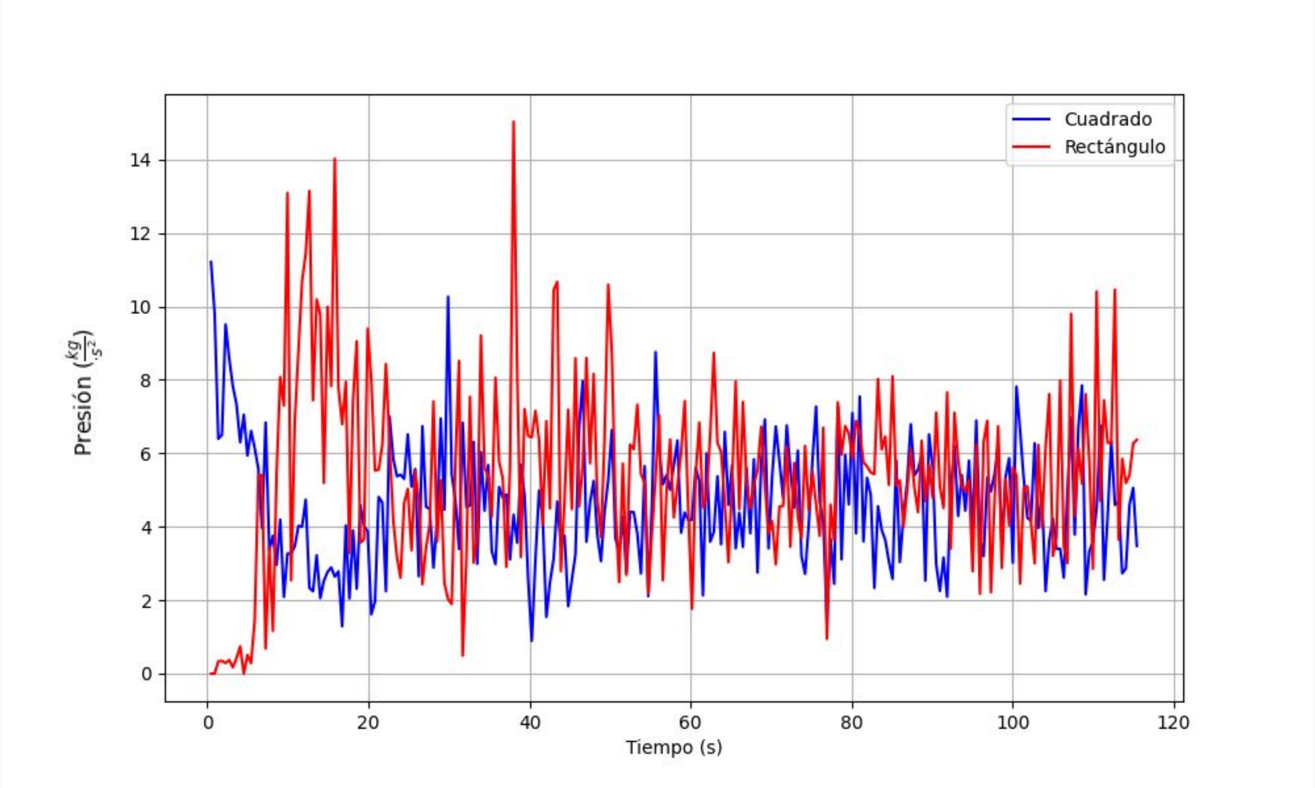
# Gráfico de la Presión respecto al tiempo

L = 0.03



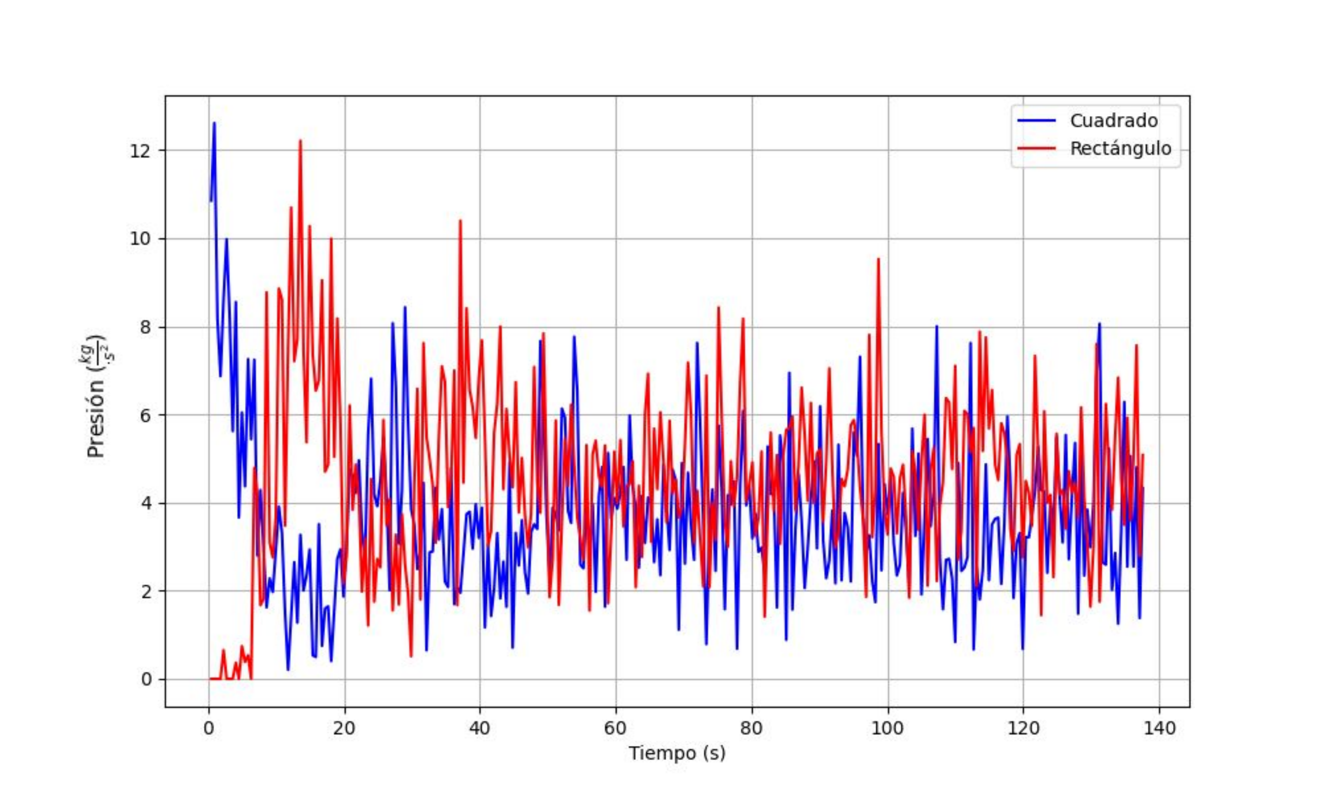
# Gráfico de la Presión respecto al tiempo

L = 0.05



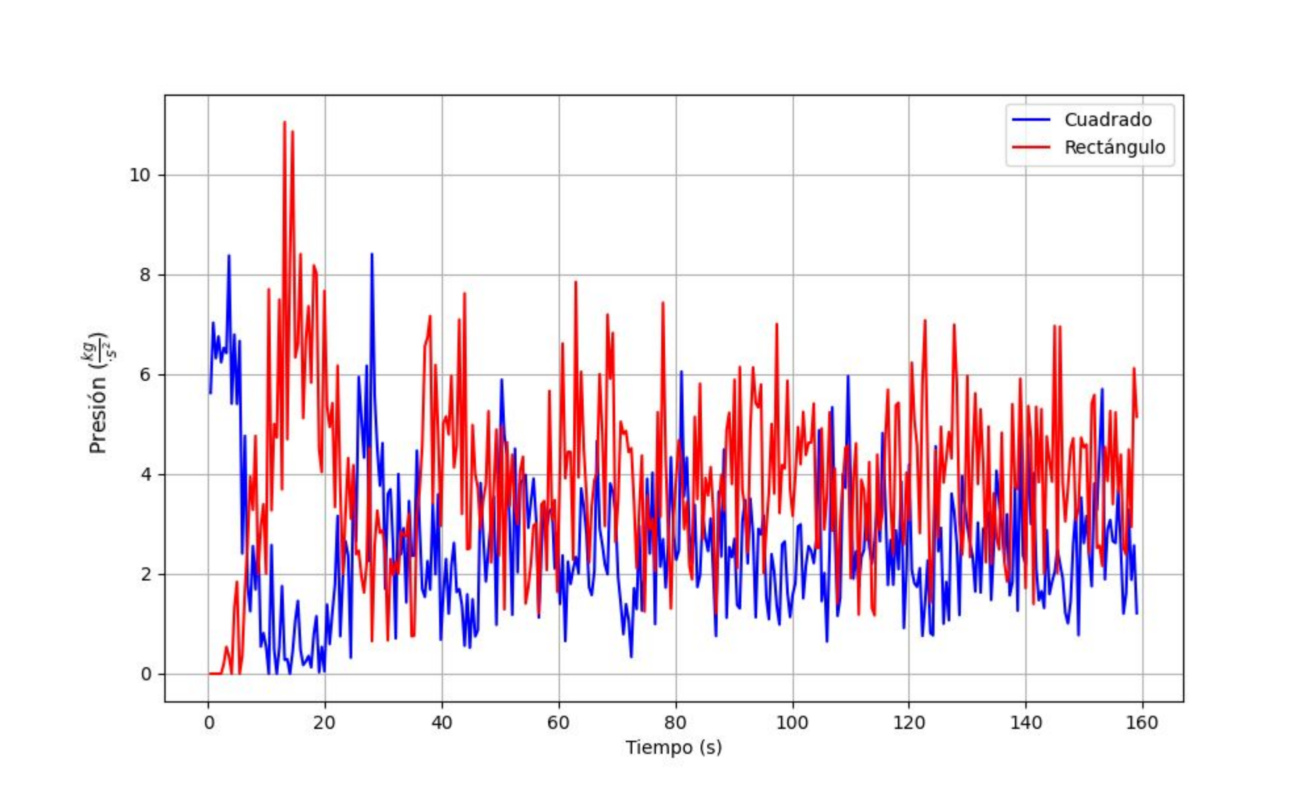
# Gráfico de la Presión respecto al tiempo

L = 0.07

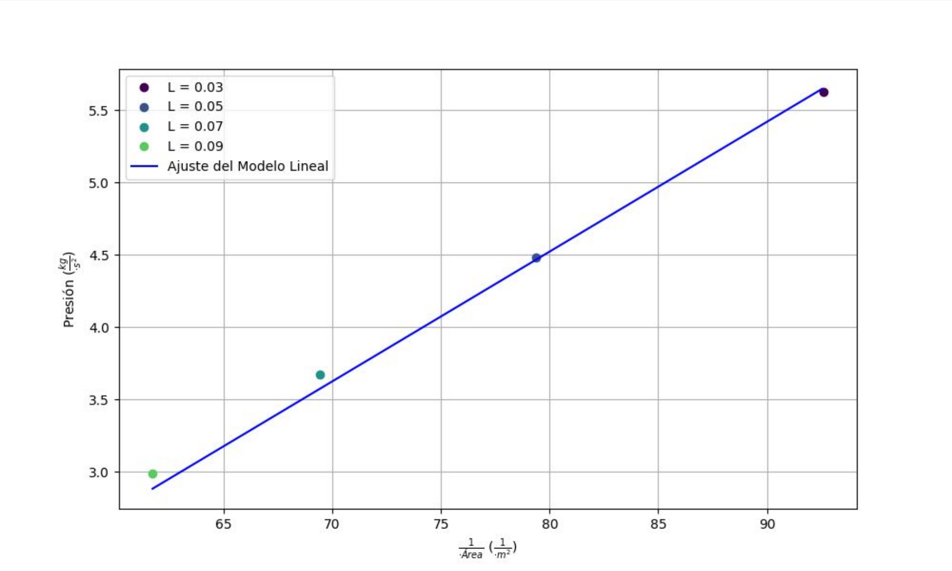


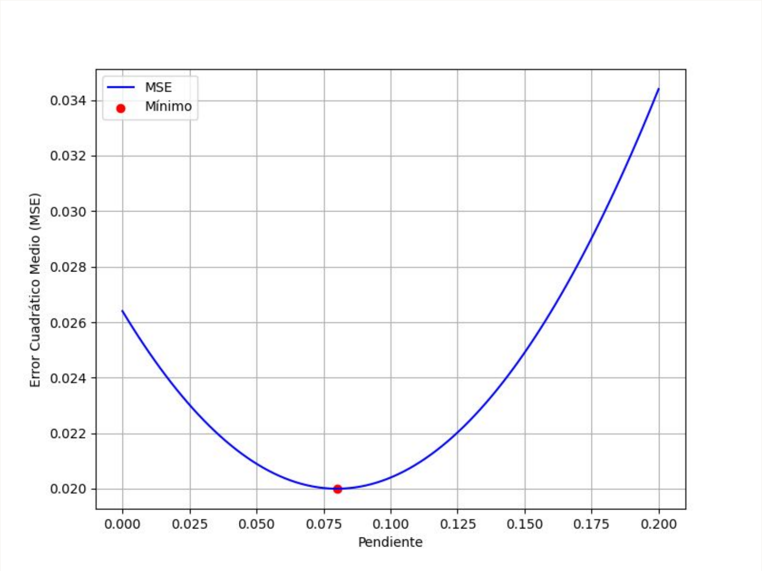
# Gráfico de la Presión respecto al tiempo

L = 0.09



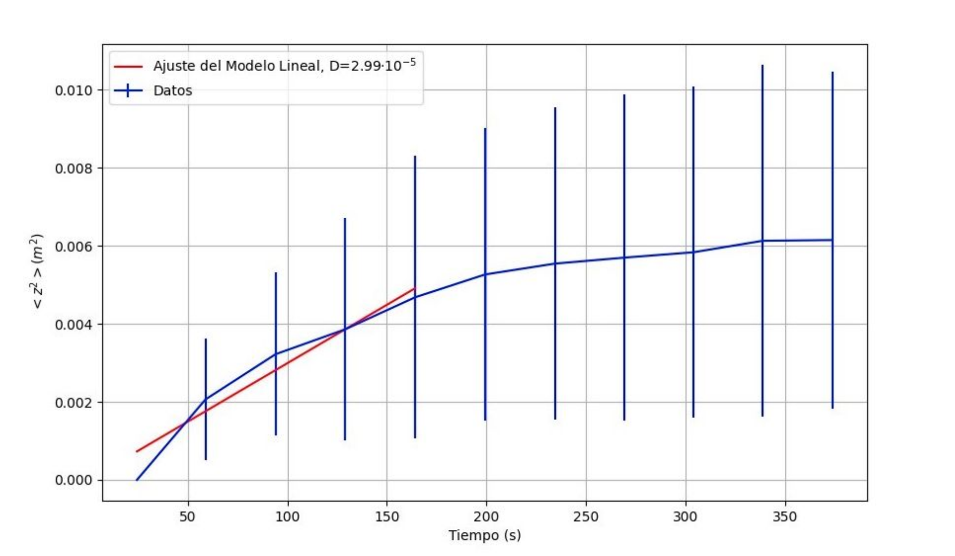
# Gráfico de Presión vs 1/área

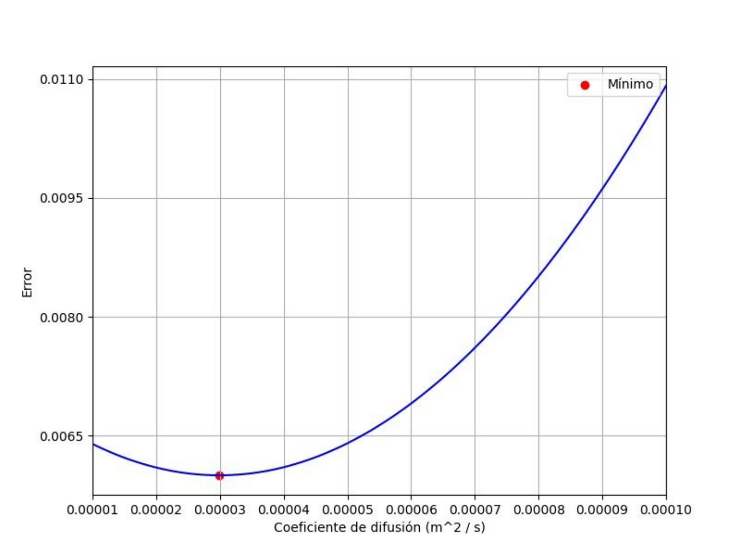


# Gráfico de desplazamiento cuadrático medio vs tiempo

A partir
de t=40s
L=0.09



# Conclusiones

# Conclusiones

- A medida que el L del recinto a derecha aumenta, la presión disminuye.
- A medida que el L crece, las presiones en ambos recintos son más parecidas.
- A mayor L se llega a un estado estacionario sin tanta variación de la presión.
- Se concluye que no se cumple la ley de gases ideales.
- Previo al alcance del estado estacionario, el desplazamiento cuadrático medio es proporcional al tiempo.

# Fin

Muchas gracias