TP3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos

Grupo 5
Tomás Álvarez Escalante (60127)
Lucas Agustín Ferreiro (61595)
Román Gómez Kiss (61003)

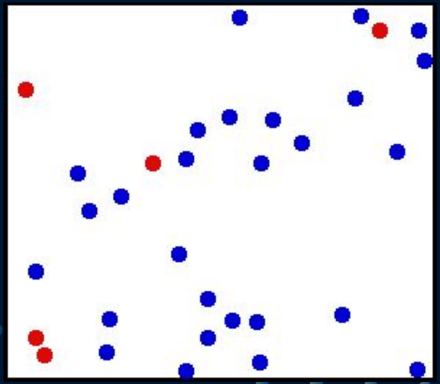
01

Introducción

Sistema real y fundamentos

Sistema real

Simular el movimiento de partículas que *colisionan* elásticamente → Estudiar la dinámica molecular de ciertos sistemas físicos, como la difusión de un gas en un recinto



Fundamentos

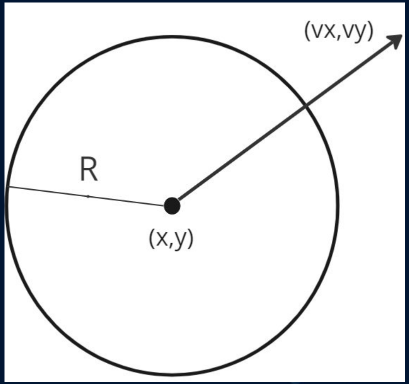
Todas las partículas se desplazan en trayectorias rectas a v constante

- Colisión entre partículas
- Colisión entre partícula y pared
- Colisión con vértices de uniones

Se define t_c → menor tiempo de colisión entre partículas y paredes

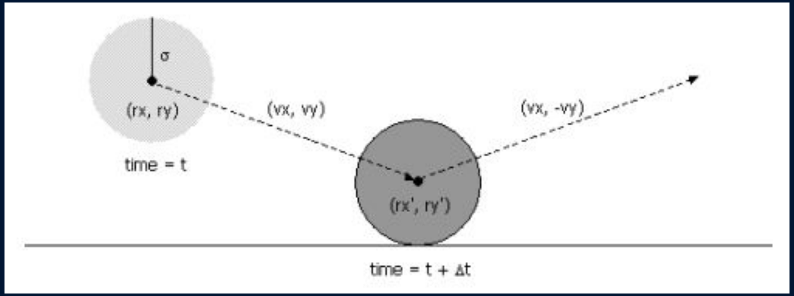
$$x_i(t_c) = x_i(0) + v_{x_i} t_c$$

$$y_i(t_c) = y_i(0) + v_{y_i} t_c$$



- R = σ → radio
- (x,y) → Posición
- (v_x,v_y) → Velocidad

Colisión entre partícula y pared



Paredes horizontales

$$t_c = \begin{cases} \infty & \text{si } v_x = 0 \\ \frac{x_{wall\_left\_p} + R - x_i}{v_x} & \text{si } v_x < 0 \\ \frac{x_{wall\_bottom\_p} - R - x_i}{v_x} & \text{si } v_x > 0 \end{cases}$$

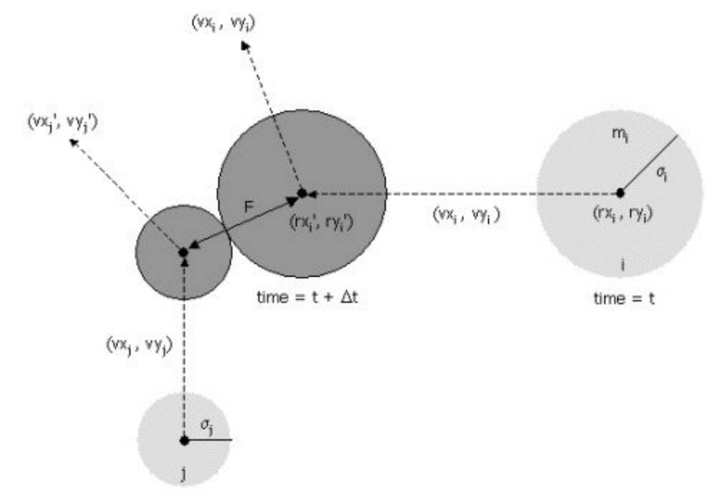
Se actualiza v a $(v_x, -v_y)$

Paredes verticales

$$t_c = \begin{cases} \infty & \text{si } v_y = 0 \\ \frac{y_{wall\_left\_p} + R - y_i}{v_y} & \text{si } v_y < 0 \\ \frac{y_{wall\_left\_p} - R - y_i}{v_y} & \text{si } v_y > 0 \end{cases}$$

Se actualiza v a $(-v_x, v_y)$

Colisión entre partículas



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

- $d = (\Delta v . \Delta r)^2 - (\Delta v . \Delta v)(\Delta r . \Delta r - \sigma^2)$
- $\sigma = R_i + R_j$
- $\Delta r = (\Delta x, \Delta y) = (x_j - x_i, y_j - y_i)$
- $\Delta v = (\Delta v_x, \Delta v_y) = (v_{x_j} - v_{x_i}, v_{y_j} - v_{y_i})$
- $\Delta r . \Delta r = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2$
- $\Delta v . \Delta v = (\Delta v_x)^2 + (\Delta v_y)^2$
- $\Delta v . \Delta r = (\Delta v_x)(\Delta x) + (\Delta v_y)(\Delta y)$

Colisión entre partículas

Actualización de las velocidades mediante conservación del impulso

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

$$v_{x_i}^d = v_{x_i}^a + \frac{J_x}{m_i} \quad , \quad v_{y_i}^d = v_{y_i}^a + \frac{J_y}{m_i}$$

$$v_{x_j}^d = v_{x_j}^a - \frac{J_x}{m_j} \quad , \quad v_{y_j}^d = v_{y_j}^a - \frac{J_y}{m_j}$$

Colisión contra vértices

Se considera como una colisión de partículas

Se toma a los vértices como:

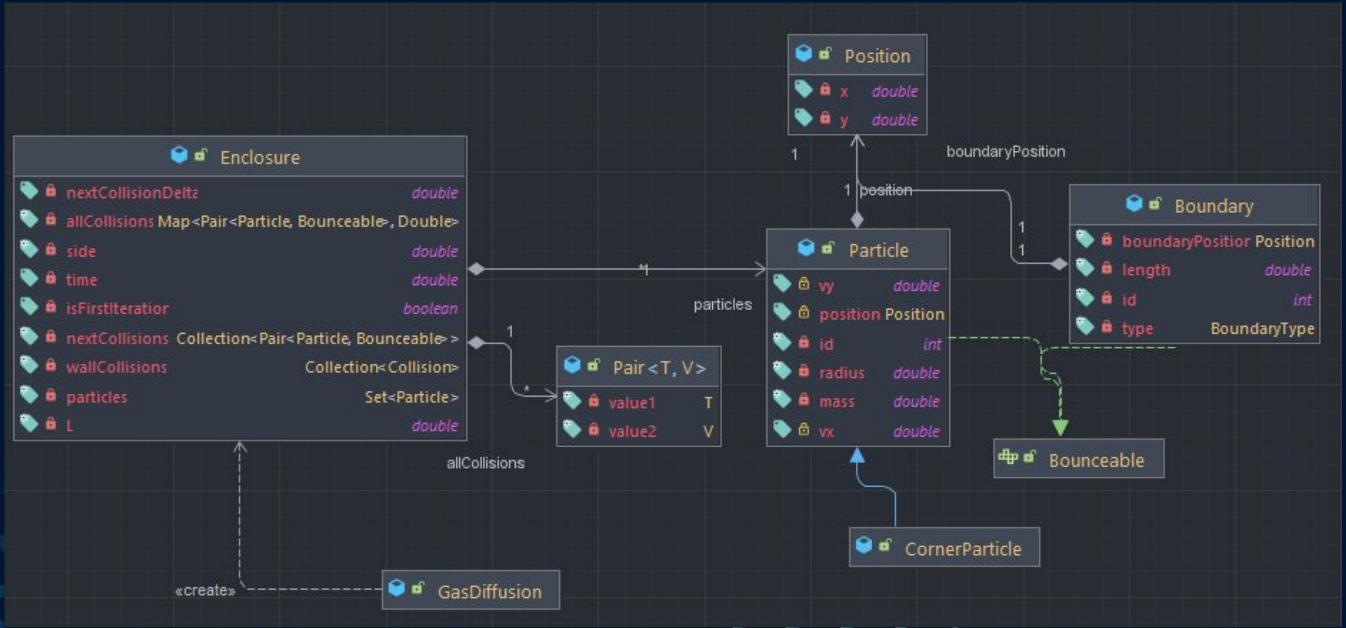
- **Partículas de R=0 y v=0**
- **Posición correspondiente según L**

02

Implementación

Arquitectura y algoritmo

Arquitectura



Algoritmo

Algorithm 1: Algoritmo del modelo Gas Diffusion

Generar partículas con (x,y) y v aleatorias en el 1.er recinto sin superposición;

for *iteracion* **do**

- Calcular el tiempo t_c hasta la primera colision;
- Mover todas las particulas con MRU hasta dicho tiempo;
- Guardar el estado del sistema;
- Actualizar las velocidades de las particulas involucradas en la colision;

03

Simulaciones

Parámetros fijos, observable y variables a estudiar

Consideraciones

- Simulación dirigida por eventos (colisiones).
- Generación de partículas con posiciones y velocidades aleatorias, sin superposición.
- Interacciones elásticas en las colisiones, sin fricción ni rotación.
- No hay fuerzas externas que actúen sobre las partículas.
- Las partículas viajan en línea recta con MRU.

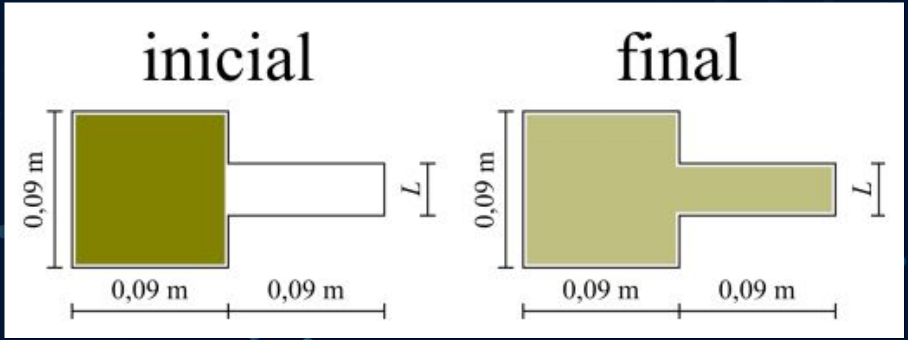
Parámetros

- Cantidad de partículas N
- Alto del segundo recinto L

L ∈ {0.03 m, 0.05 m, 0.07 m, 0.09 m}

Variables fijas

- Velocidad = 0.01 m/s
- Masa = 1 kg
- Radio = 0.0015 m
- 0.09 m alto y ancho primer recinto
- 0.09 m ancho segundo recinto



Observable

Presión (P)

↓

Impulso transferido a las paredes por unidad de tiempo y por unidad de longitud.

$$P = \frac{\Delta F}{L} = \frac{\Delta P}{\Delta t} \cdot \frac{1}{L}$$

- ΔP cambio en el momento lineal de la partícula debido a la colisión
- Δt tiempo desde la última colisión
- L perimetro del recinto

Variables a estudiar

- Presión de ambos recintos en función del tiempo
- Promedio de la presión en función de L
- Ajuste lineal de P vs. A^{-1}
- Con L= 0.09 m → coeficiente de difusión de las partículas (D)

$$\langle z^2 \rangle = 4.D.t = \sum_{i}^{N} [(x_i(t) - x_i(0)^2 + (y_i(t) - y_i(0)^2]\,\frac{1}{N}$$

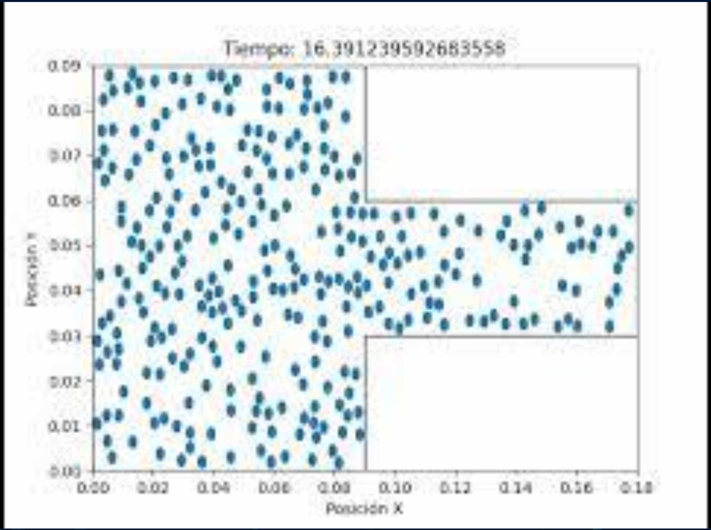
$<z^2>$ → desplazamiento cuadrático medio

04

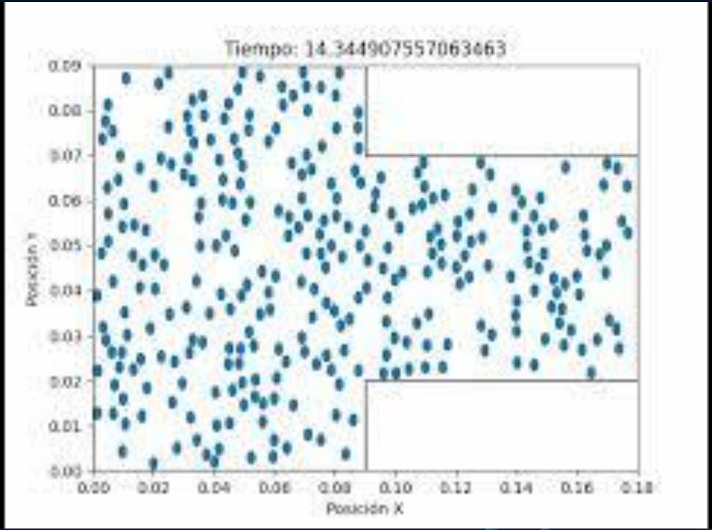
Resultados

Animaciones y gráficos

Animaciones

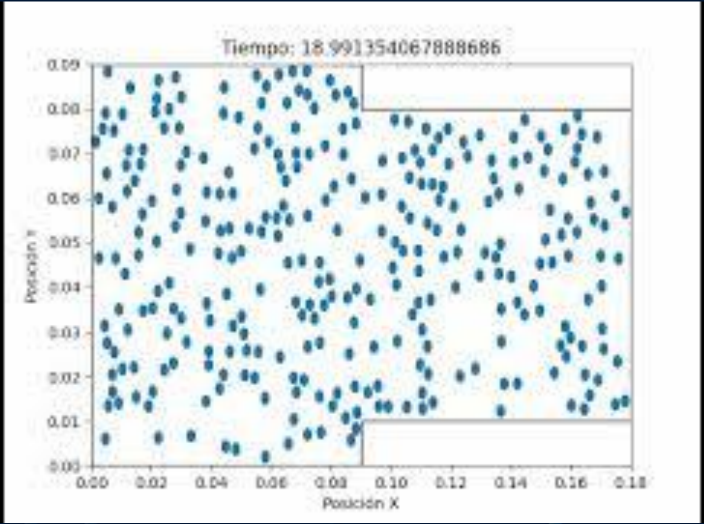


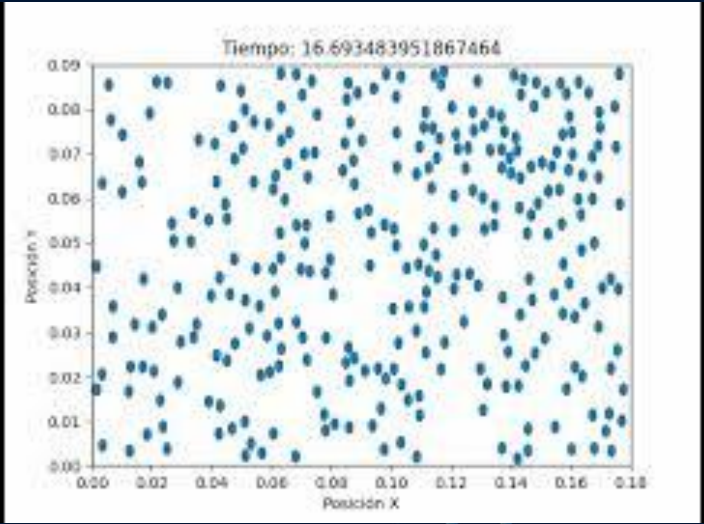
N=300, L= 0.03 m



N=300, L= 0.05 m

Animaciones

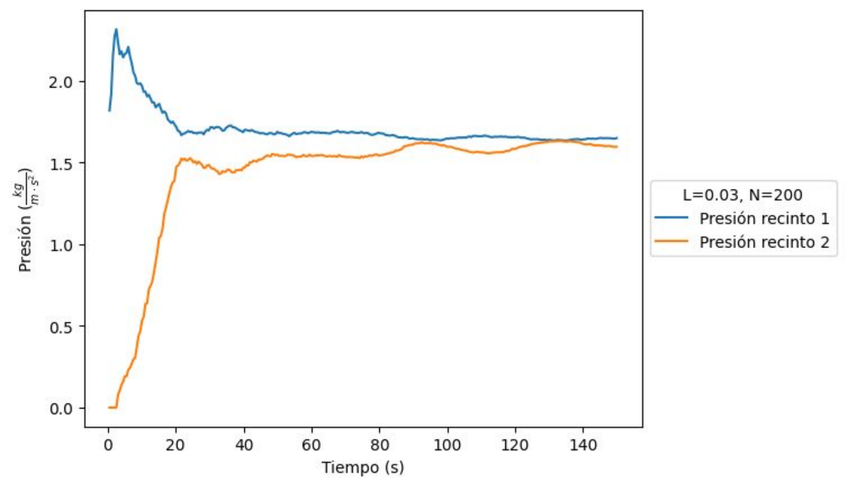


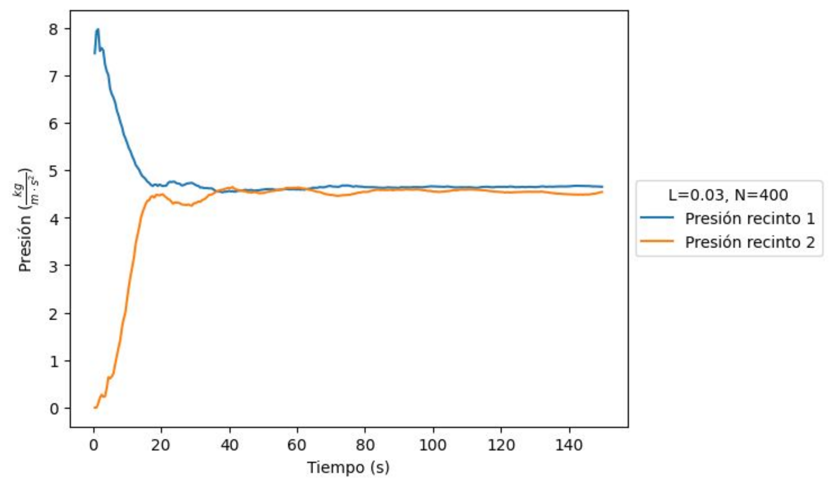


N=300, L= 0.07 m

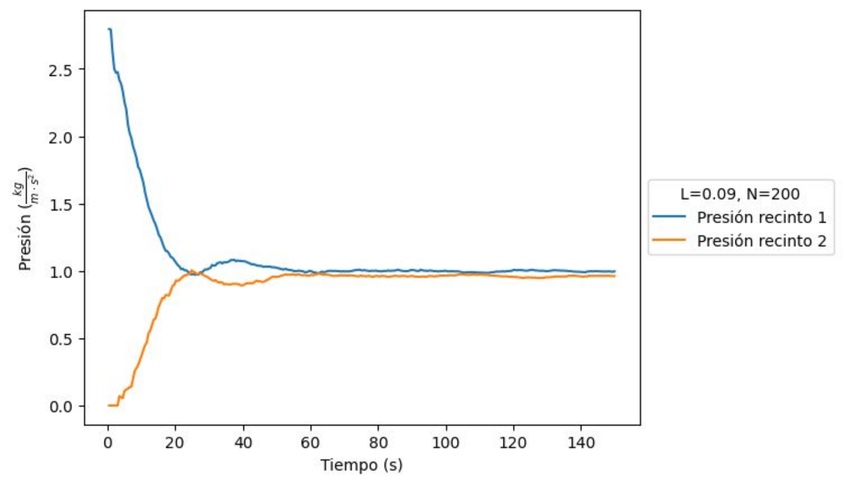
N=300, L= 0.09 m

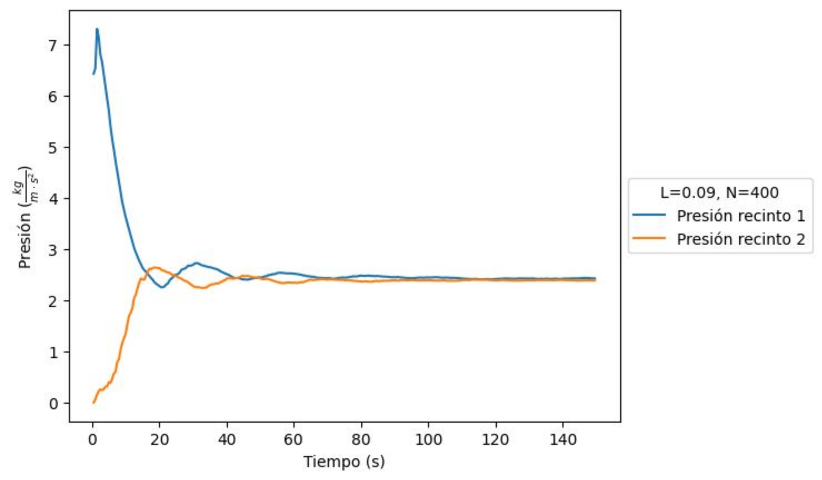
Evolución de P en el tiempo



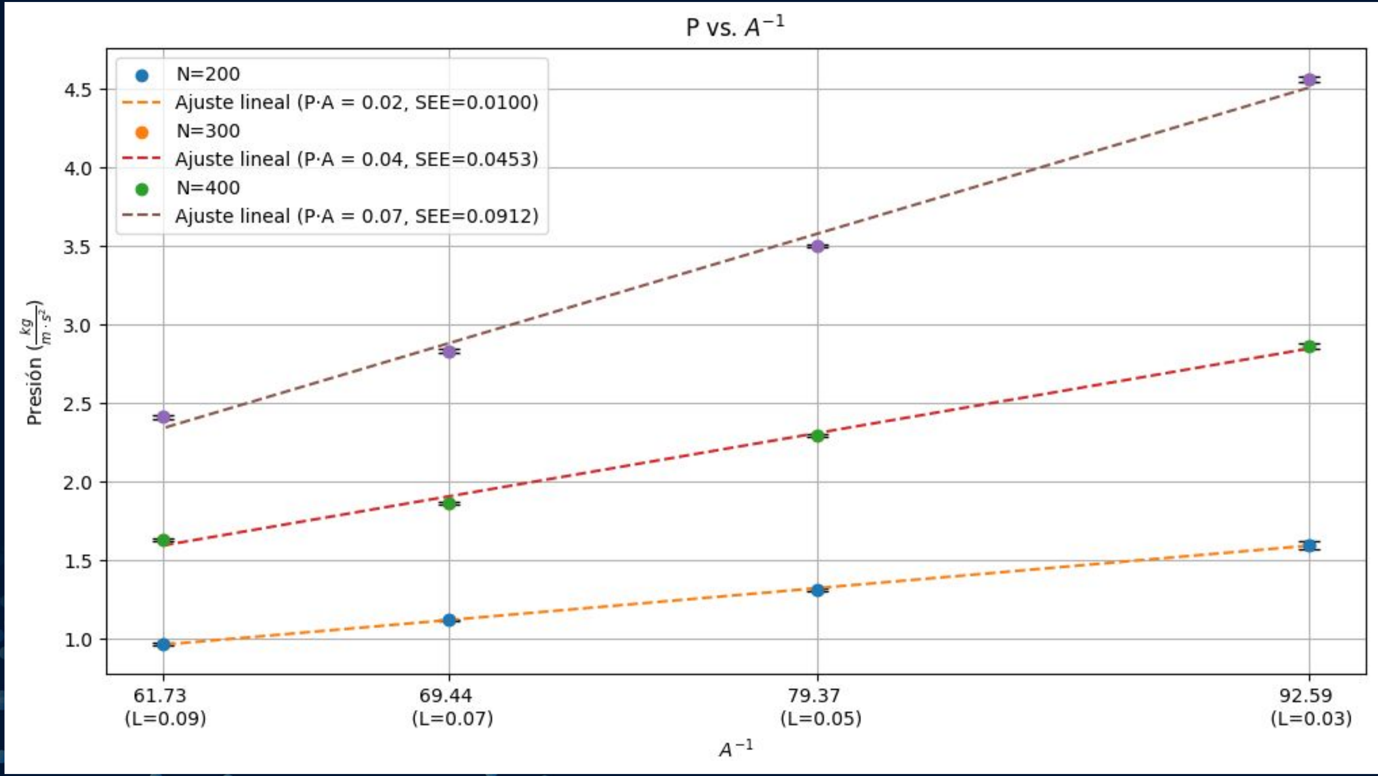


Evolución de P en el tiempo

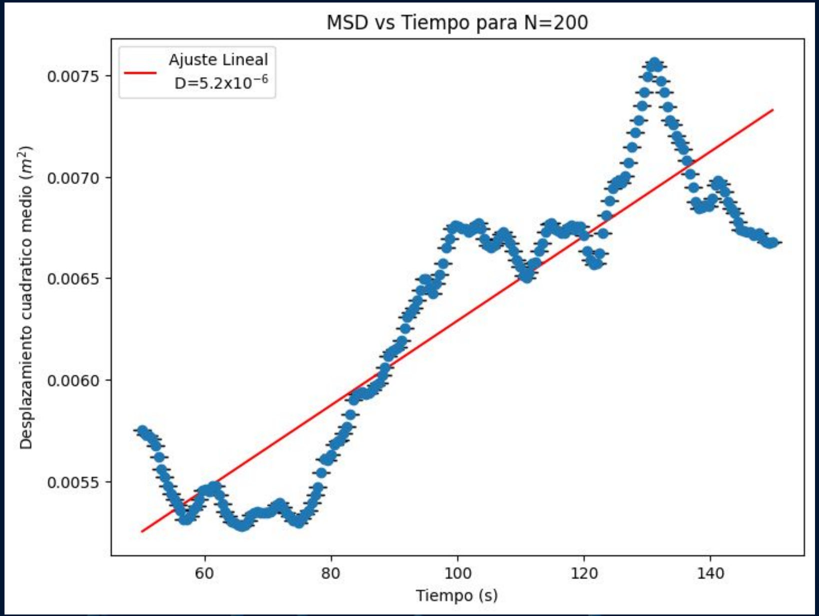


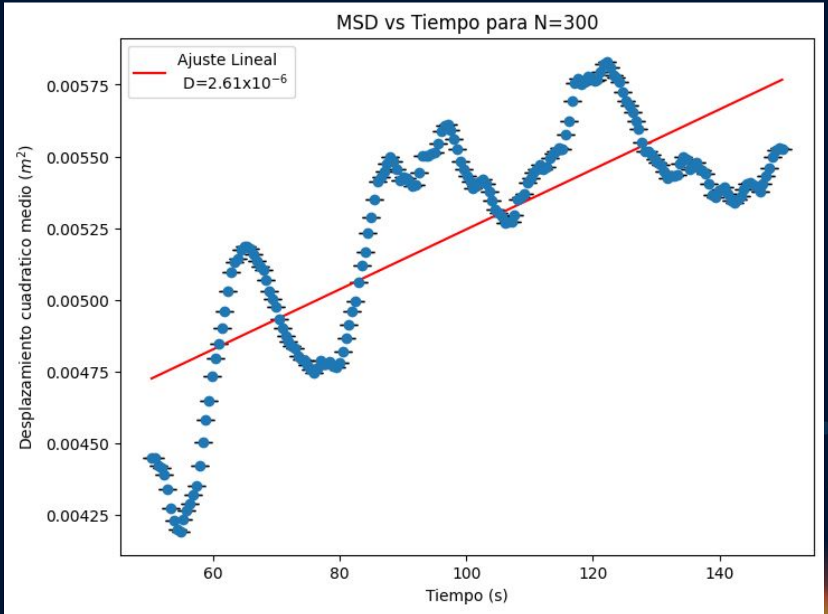


Promedio de P en función de A^{-1}



MSD en función del tiempo





L= 0.09 m

05

Conclusiones

1. La presión total del sistema es menor a medida que el tamaño del segundo recinto aumenta.
2. La presión total del sistema aumenta a medida que aumenta el número de partículas.
3. Las presiones en ambos recintos se asemejan más entre sí a medida que aumenta el tamaño de L.
4. El tiempo de estabilización del sistema es similar en todas las posibles variaciones de los parámetros.
5. Se verifica la ley de gases ideales, y el valor de la constante es mayor a mayor cantidad de partículas.
6. A medida que se tiene un mayor número de partículas, se reduce el coeficiente de difusión.