SIMULACIÓN DE SISTEMAS

MOVIMIENTO BROWNIANO

GRUPO 3

FUNDAMENTOS

DEFINICIÓN DEL SISTEMA

- Una cantidad de partículas N en movimiento.
- Se define la posición, radio, masa y velocidad de cada partícula.
- Las interacciones entre partículas y su entorno son colisiones elásticas.
- Entre colisiones, las partículas viajan en línea recta.

DINÁMICA MOLECULAR REGIDA POR EVENTOS

- 1. Se definen radios y tamaño de la caja y se generan las partículas aleatoriamente.
- 2. Se calcula el tiempo hasta el primer evento (t_c) .
- 3. Se mueven las partículas que no participan del evento linearmente.
- 4. Para las partículas que chocaron se determinan sus nuevas velocidades.
- 5. Se vuelve a 2.

IMPLEMENTACIÓN

IMPLEMENTACIÓN

1. Se generan partículas aleatoriamente definiendo sus parámetros entre los establecidos por el enunciado, verificando que no se superpongan con las existentes utilizando la fórmula:

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

Se utilizaron los parámetros iniciales:

$$m_i = 0.0001Kg$$

$$M_i = 0.1Kg$$

$$-0.1\frac{m}{s} \le v_i \le 0.1\frac{m}{s}$$

$$V_i = 0\frac{m}{s}$$

$$R_i = 0.05m$$

- 2. Se calcula el tiempo hasta el primer evento de choque buscando colisiones:
 - Entre pared y partícula:

Si $X_{p1} < X_{p2}$ son las coordenadas en x de las paredes verticales.

$$vx_i > 0 \Rightarrow t_c = \frac{(x_{p2} - R - x(0))}{vx}$$
 $vx_i < 0 \Rightarrow t_c = \frac{(x_{p1} - R - x(0))}{vx}$

Análogo para las paredes horizontales.

Entre partículas:

$$f(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } \Delta v \Delta r \ge 0, \\ \infty & \text{si } d < 0, \\ -\frac{\Delta v \Delta r + \sqrt{d}}{\Delta v \Delta v} & \text{sino} \end{cases}$$

Donde
$$d = (\Delta v \Delta r)^2 - (\Delta v \Delta v)(\Delta r \Delta r - \sigma^2)$$

IMPLEMENTACIÓN

3. Se actualizan las posiciones de las partículas hasta t_c con las siguientes ecuaciones:

$$x_i(t_c) = x_{i-1} + v_x t_c$$

 $y_i(t_c) = y_{i-1} + v_y t_c$

4. Se actualizan las velocidades de la/s partículas que participan de la colisión:

Partícula contra pared

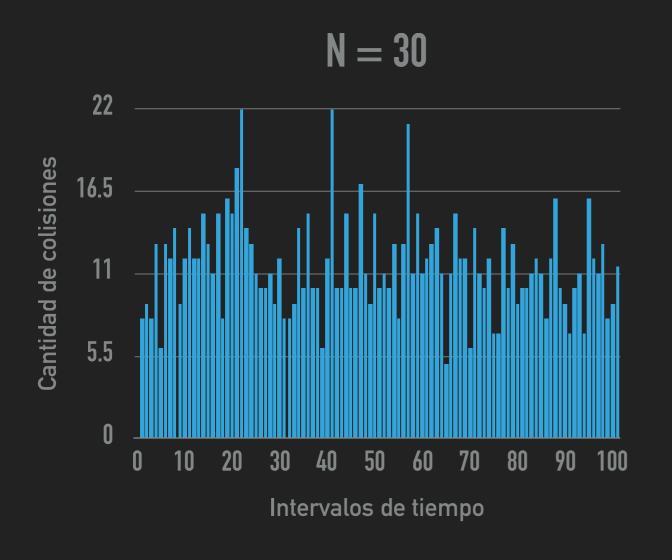
Partícula contra partícula

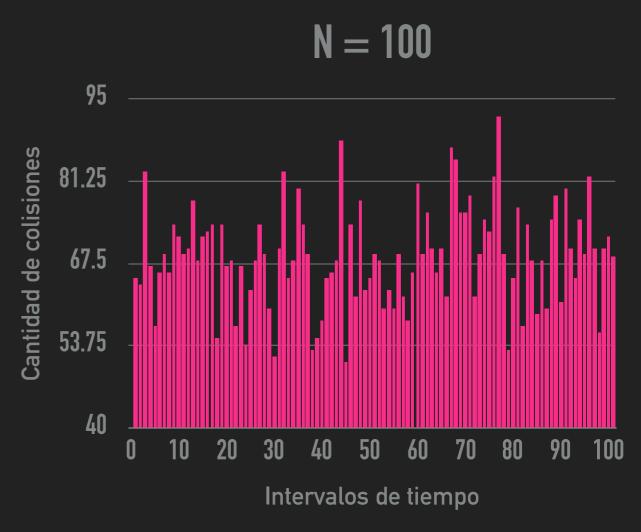
Vertical
$$(-v_x,v_y)$$

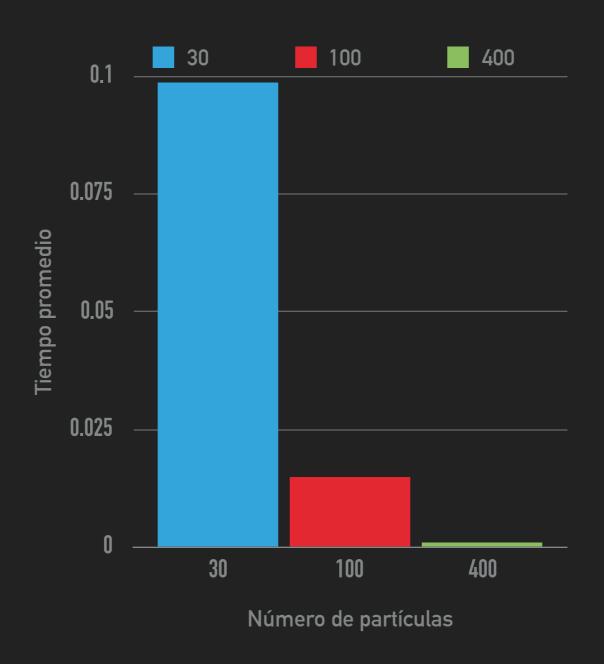
Horizontal $(v_x,-v_y)$

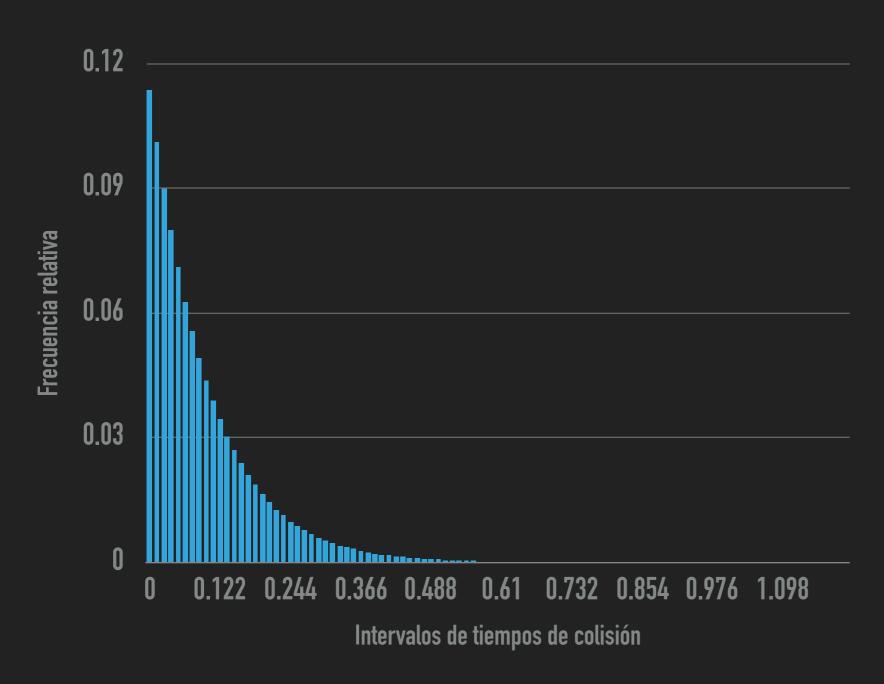
Conservación del impulso

RESULTADOS



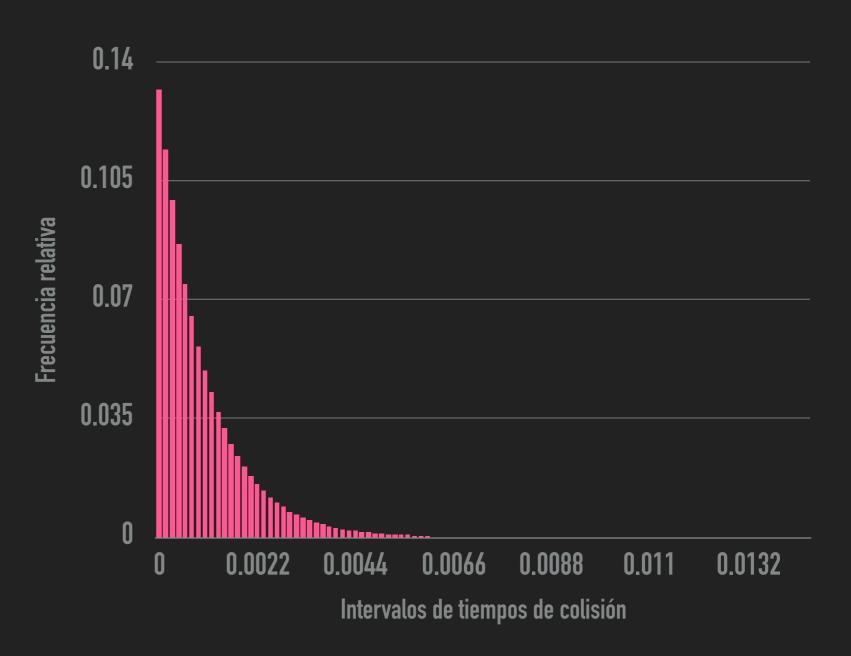


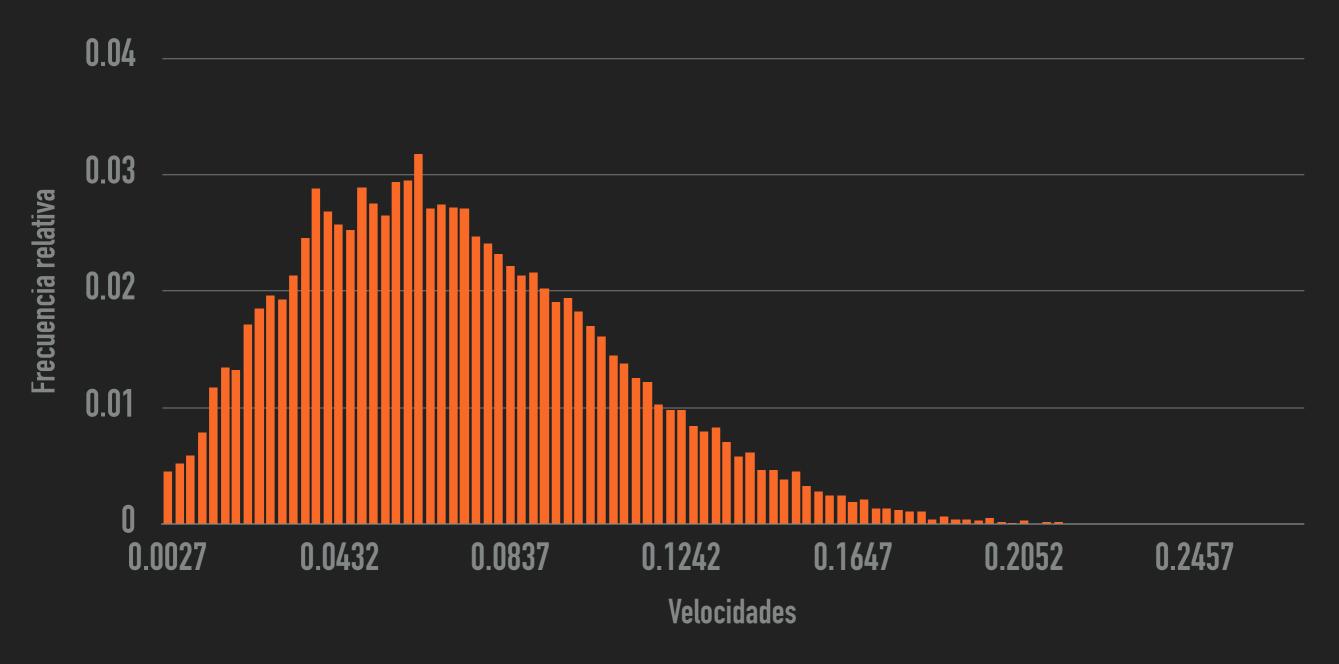




250000 COLISIONES N = 30100 INTERVALOS IGUALES 10 SIMULACIONES

250000 COLISIONES N = 400100 INTERVALOS IGUALES 10 SIMULACIONES

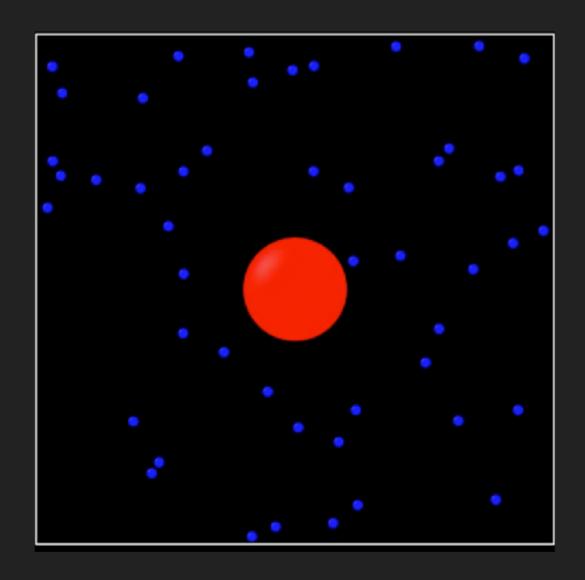




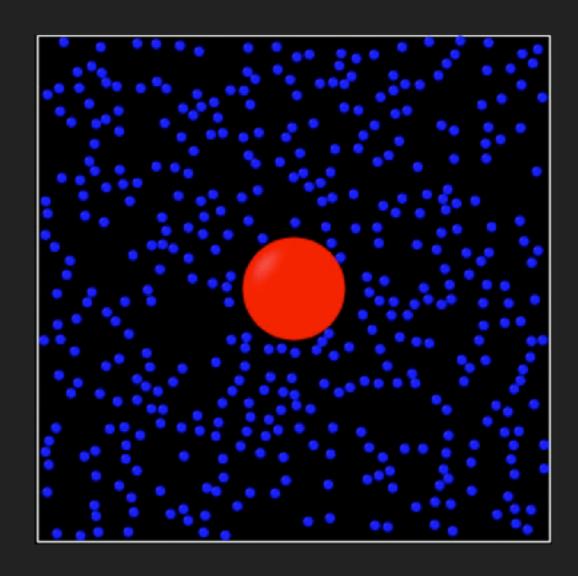
150 SEGUNDOS, DT = 0.09S 6 SIMULACIONES

N = 100

ANIMACIONES

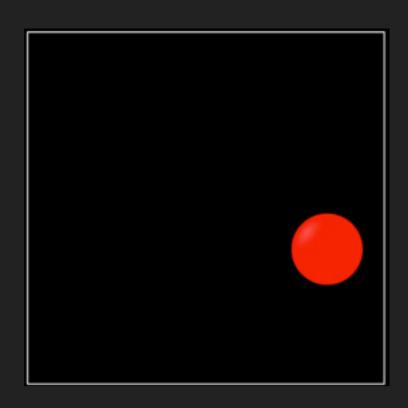


50 PARTÍCULAS

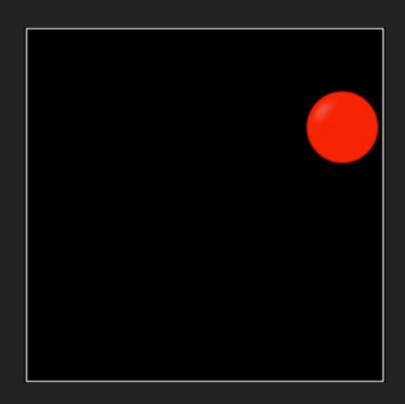


400 PARTÍCULAS

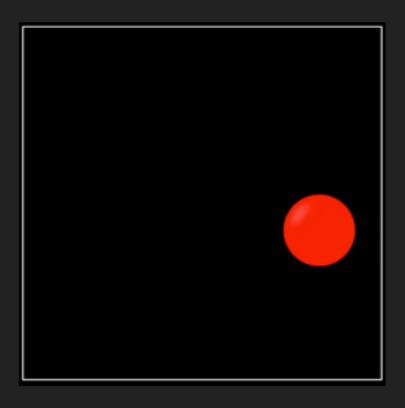
ANIMACIÓN DE LA TRAYECTORIA DE LA PARTÍCULA GRANDE



 $K_T = 0.000132, V \sim U (-0.1, 0.1)$



 $K_T = 0.002347, V \sim U (-0.4, 0.4)$



 $K_T = 0.012858, V \sim U (-1.0, 1.0)$

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- LA FRECUENCIAS DE COLISIONES ESTÁN DISTRIBUIDAS HOMOGÉNEAMENTE A TRAVÉS DEL TIEMPO.
- LA TEMPERATURA ES CONSTANTE A LO LARGO DEL TIEMPO.
- AL AUMENTAR LA DENSIDAD DEL SISTEMA, DISMINUYE EL TIEMPO DE COLISIÓN ENTRE LAS PARTÍCULAS.

GRACIAS. THANKS. MERCI. DANKE. 感謝. TAKK. 心.