TP3 SS

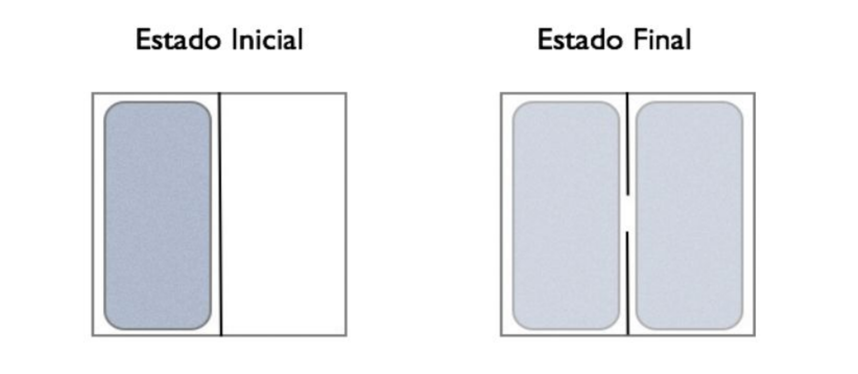
Dinámica Molecular Dirigida por Eventos:

Difusión de un gas 2D

Grupo 9:
Felipe Oliver 58439
Uriel Mihura 59039
Joaquin Battilana 57683

Introducción

Sistema a simular



Realizamos una simulación de un gas, basados en miles de partículas con distintas velocidades que se mueven hasta alcanzar el equilibrio.

Modelo matemático real

Tiempo de choque (Tc)

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

donde: $d = (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v)\,(\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2),$

siendo:

$$\begin{aligned} \sigma &= R_i + R_j \\ \Delta r &= (\Delta x,\ \Delta y) = (x_j - x_i,\ y_j - y_i) \\ \Delta v &= (\Delta vx,\ \Delta vy) = (vx_j - vx_i,\ vy_j - vy_i) \\ \Delta r \cdot \Delta r &= (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta v &= (\Delta vx)^2 + (\Delta vy)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta r &= (\Delta vx)(\Delta x) + (\Delta vy)(\Delta y). \end{aligned}$$

siendo:

$$\begin{aligned} \sigma &= R_i + R_j \\ \Delta r &= (\Delta x,\ \Delta y) = (x_j - x_i,\ y_j - y_i) \\ \Delta v &= (\Delta vx,\ \Delta vy) = (vx_j - vx_i,\ vy_j - vy_i) \\ \Delta r \cdot \Delta r &= (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta v &= (\Delta vx)^2 + (\Delta vy)^2 \\ \Delta v \cdot \Delta r &= (\Delta vx)(\Delta x) + (\Delta vy)(\Delta y). \end{aligned}$$

donde: $d = (\Delta v \cdot \Delta r)^2 - (\Delta v \cdot \Delta v)\,(\Delta r \cdot \Delta r - \sigma^2),$

Modelo matemático real

Si dos radios se chocan en un plano:

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

Transformación de velocidades:

$$vx_i^d = vx_i^a + J_x/m_i \qquad vx_j^d = vx_j^a - J_x/m_j$$

$$vy_i^d = vy_i^a + J_y/m_i \qquad vy_j^d = vy_j^a - J_y/m_j$$

El vuelo libre de partículas:

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

Colisión de partículas de distinta masa:

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

Modelo matemático real

Ley de gases ideales

- $PV = nRT$

Temperatura

- $T \sim <E_c>$
- $E_c = ½mv^2$

Datos (promedios de simulaciones) (x_i, y_i)

Ajuste modelo (lineal u otro cualquiera) $f(x_i, c)$

Error del Ajuste:

$$\boxed{E(c) = \sum_i [y_i - f(x_i, c)]^2}$$

Implementación

Cómo lo hicimos

1. Se definen los datos iniciales (dimensiones de la caja, N partículas con sus posiciones, velocidades, radios y masas iniciales)

2. Se calcula el tiempo hasta el siguiente choque (Tc)

3. Las partículas evolucionan según sus funciones de movimiento hasta dicho Tc

4. Se guarda el nuevo sistema, posiciones y velocidades

5. Se aplica el operador de colisiones solo para las partículas que chocaron
6. Se repite el ciclo

Pseudocódigo

```
Main():

    Sistema = Crear_Tablero(Apertura,Alto,Ancho)

    Sistema.Particulas(Cantidad, Velocidad, Radio)

    Vueltas = 0

    IF (NOT Sistema.Agregar_particulas == OK)
        {
        Error
        }

While (NOT Sistema.Equilibrado)
{
        Sistema.Calcular_TC()

        Sistema.Evolucionar_Particulas()

        Sistema.Sistema_Guardar_Posicion()

        Sistema.Resolver_Colisiones()

        Vuelta += 1
}

Resultados = Sistema.Imprimir_Resultados

Presion = Sistema.Calcular_Presion

Temperatura = Sistema.Calcular_Temperatura

Finish()
```

UML

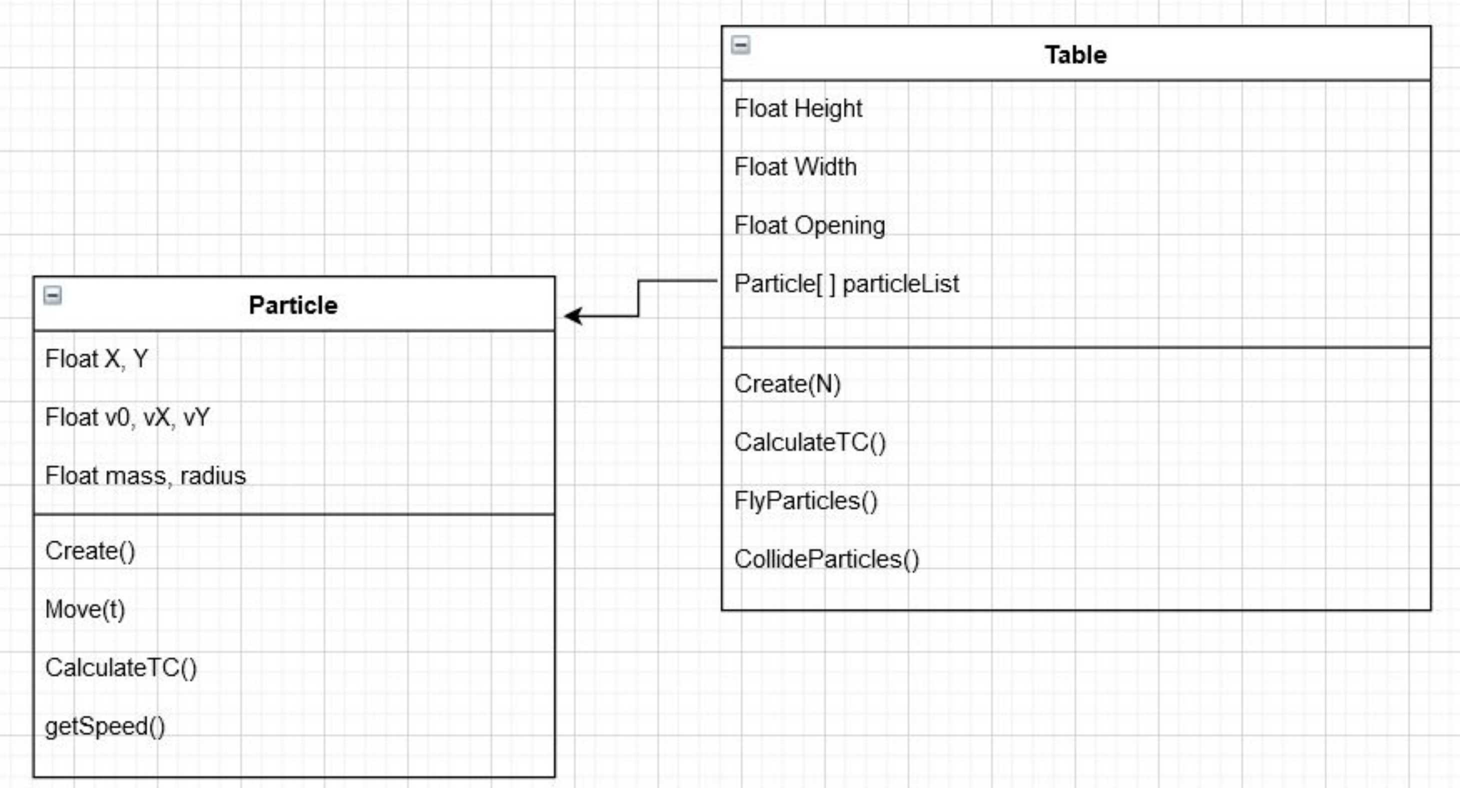


Table
Float Height
Float Width
Float Opening
Particle[ ] particleList
Create(N)
CalculateTC()
FlyParticles()
CollideParticles()
Particle
Float X, Y
Float v0, vX, vY
Float mass, radius
Create()
Move(t)
CalculateTC()
getSpeed()

Decisiones tomadas

- Colisión entre partículas y los vértices de los tabiques:
  - Los muros centrales actúan como muros verticales y si golpean perfectamente abajo, rebotan para abajo.

- Equilibrio es cuando el lado izquierdo tiene menos del 55% de las partículas.

- Para variar la temperatura había que variar la velocidad inicial de las partículas.

Simulaciones

Parámetros Variables

En número de partículas (N), la apertura (D) y la velocidad inicial de las partículas(V).

Parámetros

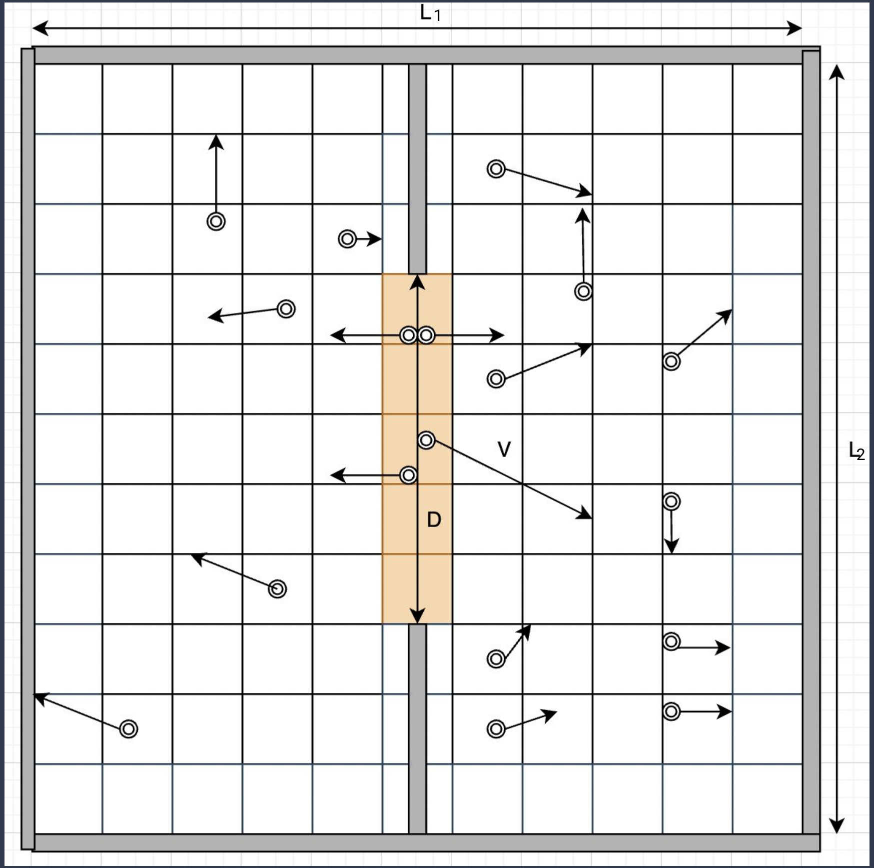
El tamaño total de cuadrado (LxL) y el radio de las partículas (R).

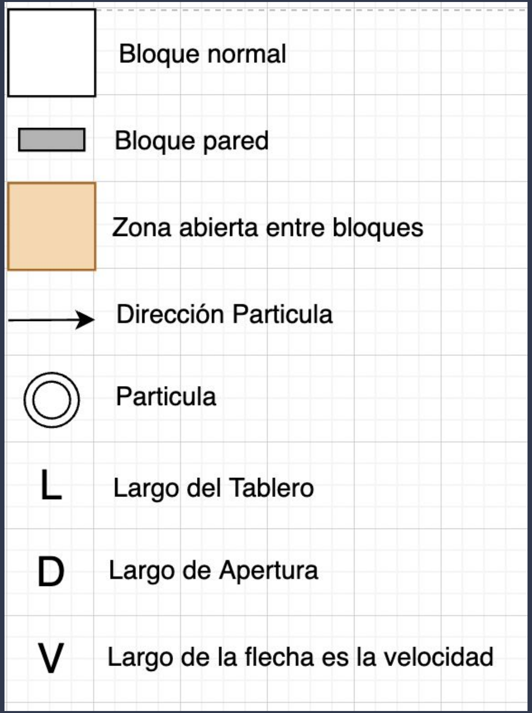
Observables

Tiempo de equilibrio (el promedio luego de realizar 5 repeticiones)

Presión del sistema en equilibrio (P)

Ilustración de Esquema





Información sobre las simulaciones y animaciones

- Se calculaban 5 repeticiones y de ellas se sacaba el promedio.
- El error se sacaba de aquellas 5 repeticiones y el promedio.
- La P se calculó como el promedio de los momentos disipados hacia los muros en 100 Δt de 1 segundo.
- Su error es la desviación estándar del conjunto de estos datos.

Resultados

Caso 1 (“original”)

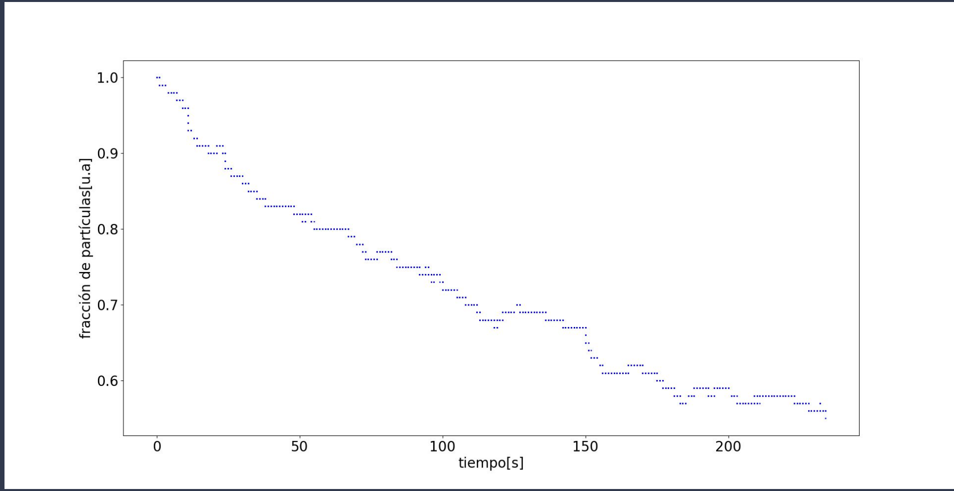
V = 0.01

Apertura = 0.01

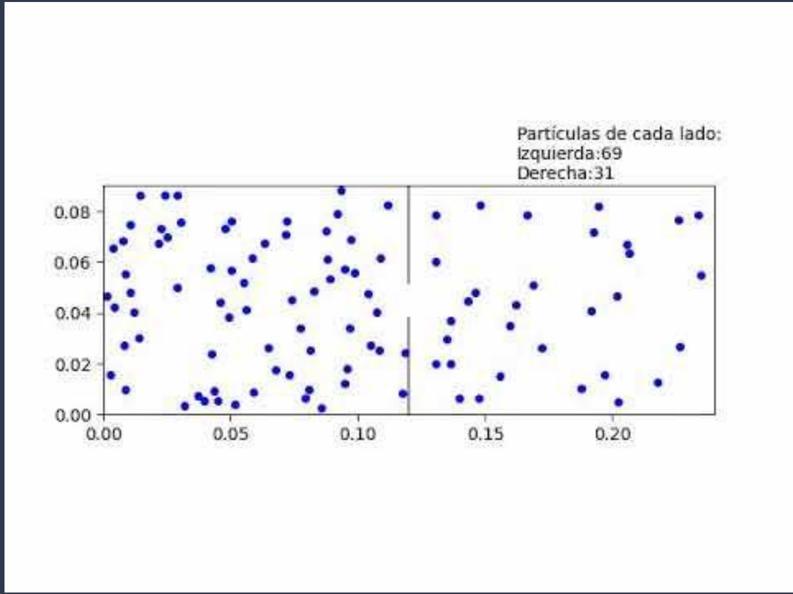
N = 100

Fracción de partículas vs T

Gráfico Fp(y) vs T(x) (evolución en el tiempo de un caso característico)



Animación



Link

Caso variación de N

V = 0.01

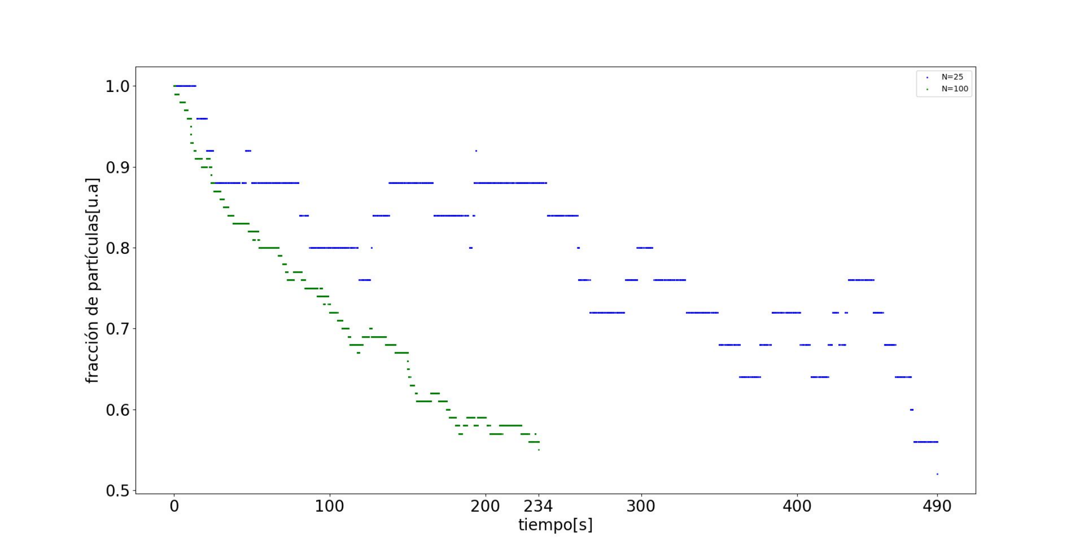
Apertura = 0.01

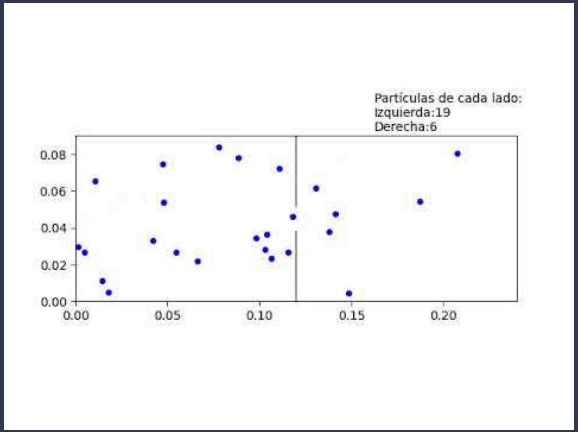
N = 25 y 100

Variando N

Animaciones

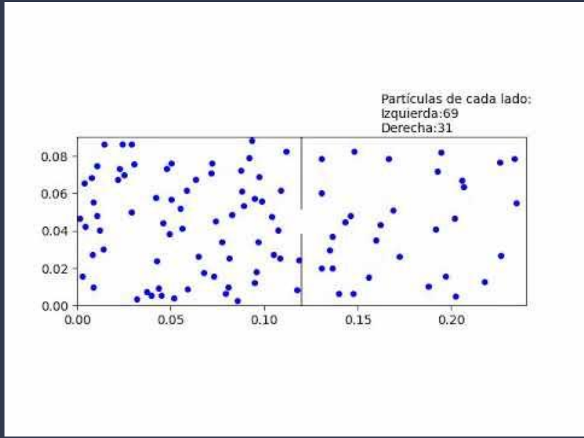
Gráfico Fp(y) vs T(x) (evolución en el tiempo de un caso característico)





N
25

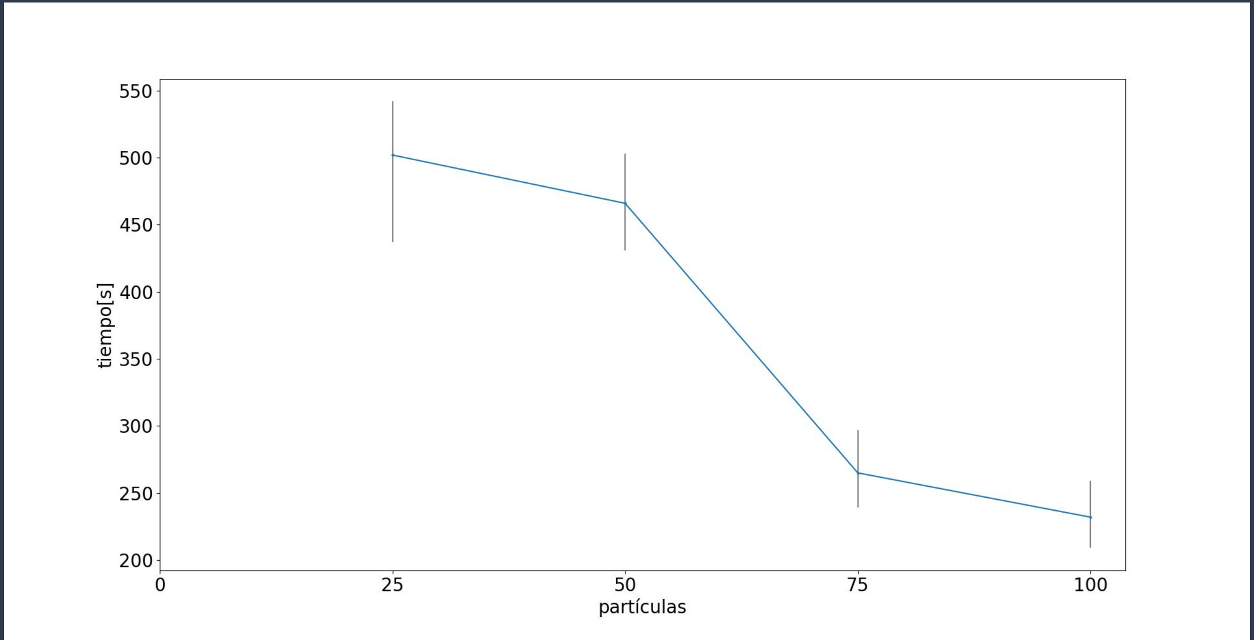
Link



N
100

Variando N

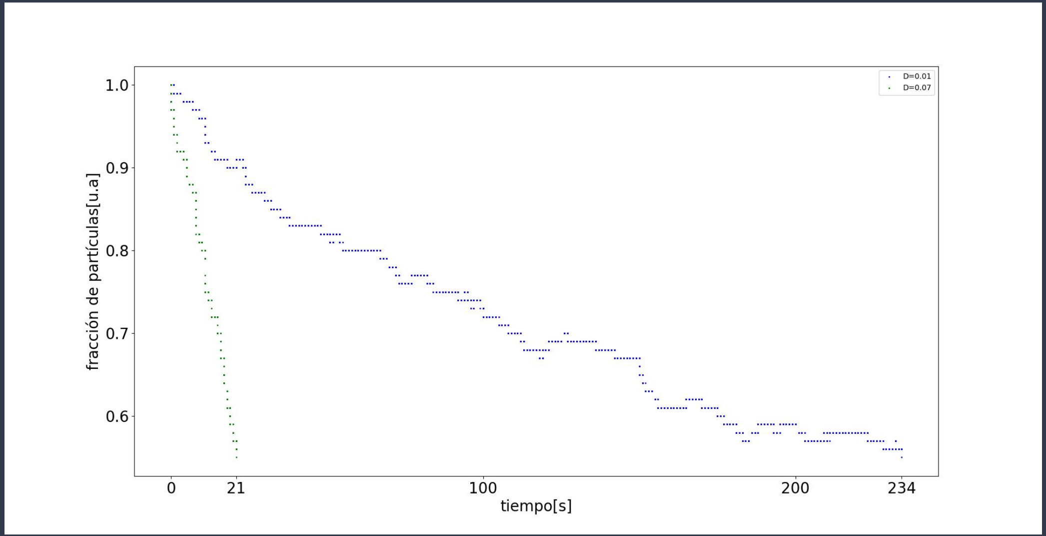
Input vs observable



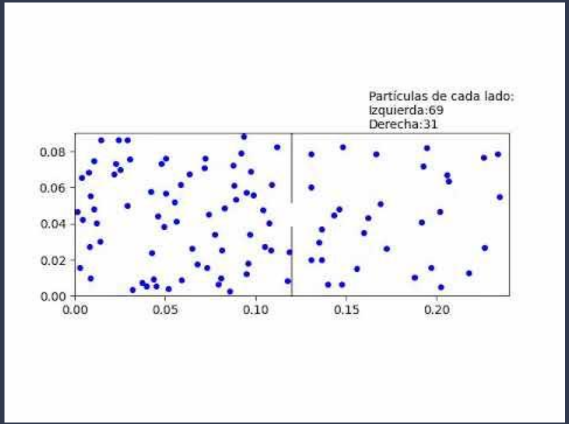
Caso variación de D
V=0.01
Aperturas = 0.001 y 0.07
N = 100

Variando ancho de la apertura

Gráfico Fp(y) vs T(x) (evolución en el tiempo de un caso característico)

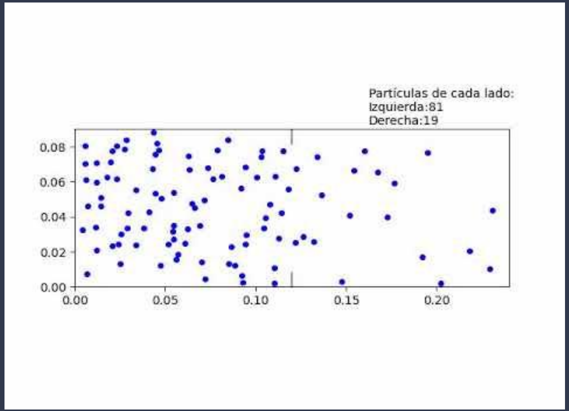


Animaciones



Apertura 0.001

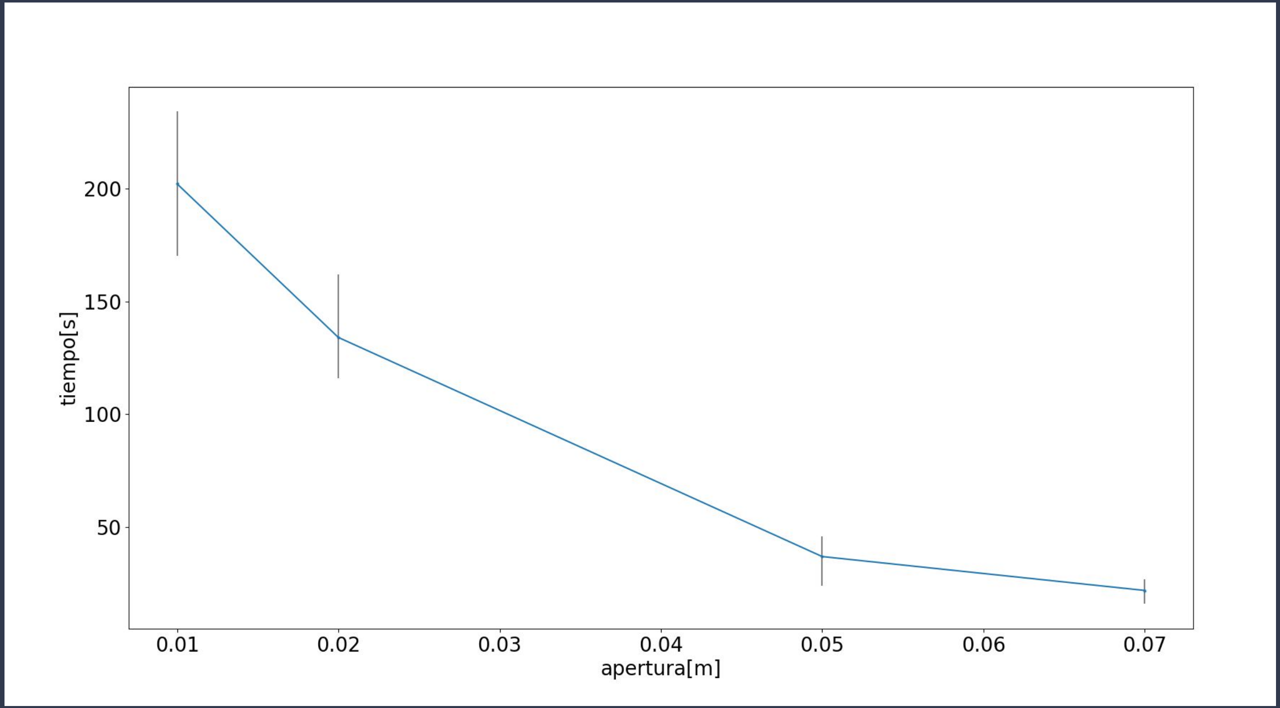
Link



Apertura 0.07

Variando ancho de la apertura

Input vs observable

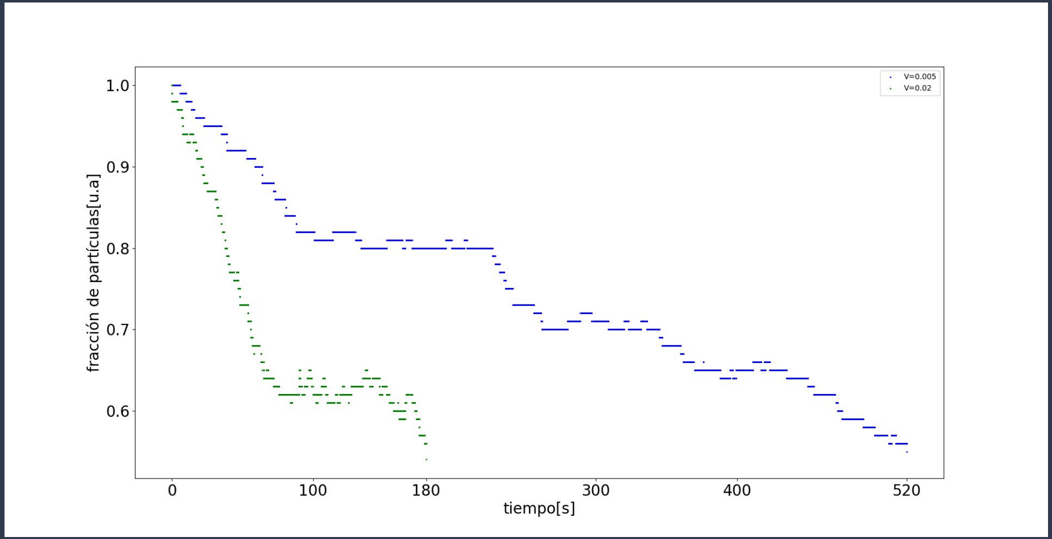


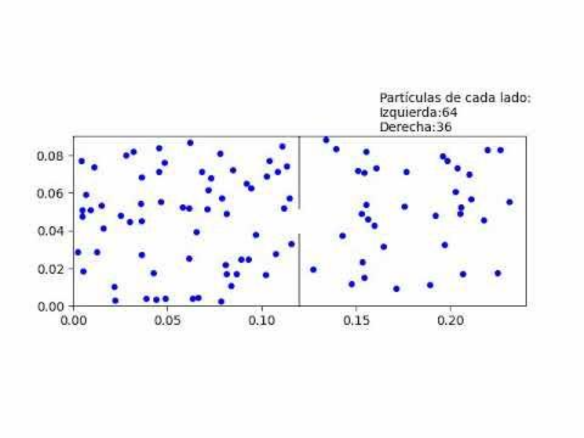
Caso variación V
V = 0.005 y 0.02
Apertura = 0.01
N = 100

Variando velocidad

Animaciones

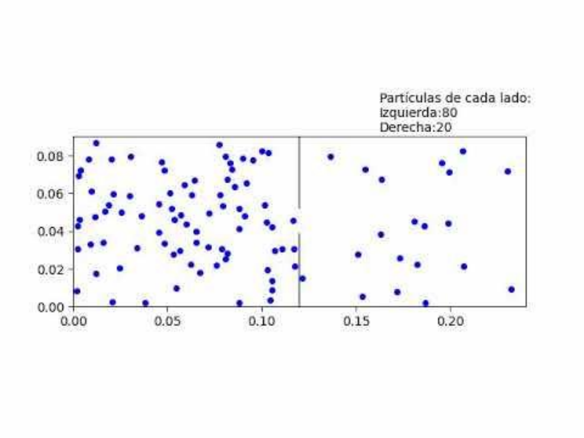
Gráfico Fp(y) vs T(x) (evolución en el tiempo de un caso característico)





V 0.005

[Link]

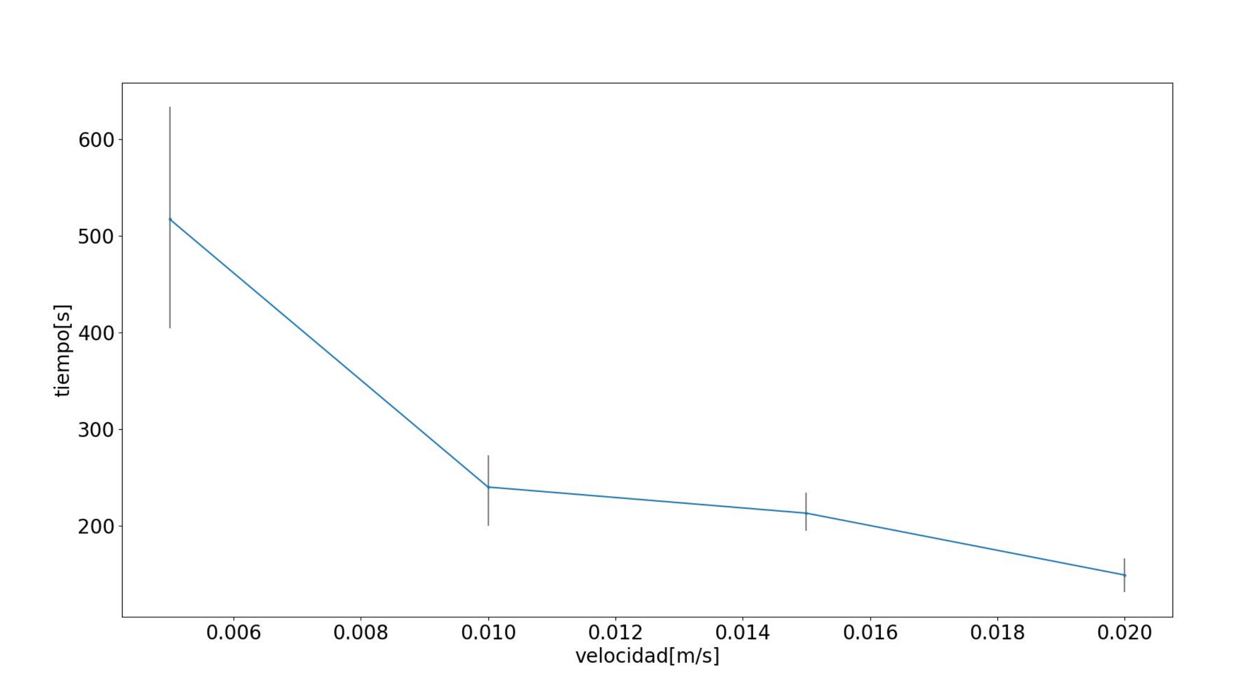


V 0.02

Variando velocidad

Input vs observable

Gráfico V(x) vs tiempo(y)

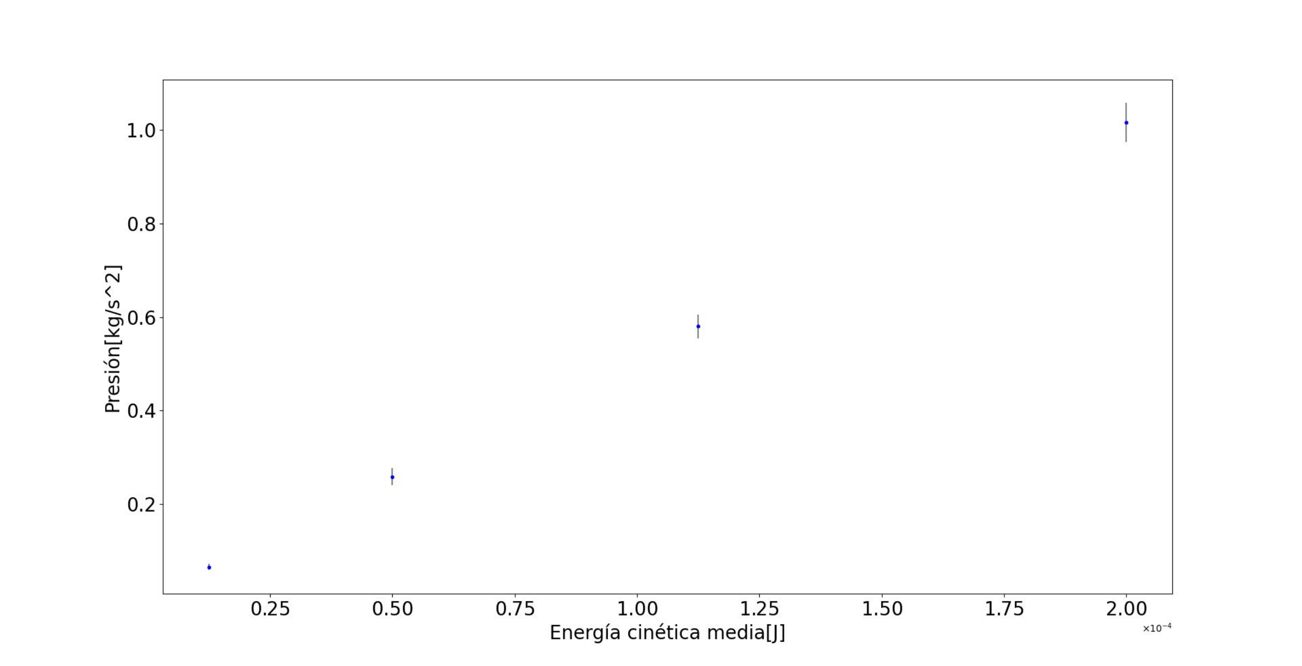


Caso 5

Ley de gases ideales
Ajuste de un modelo

P.V ~ T

T es proporcional a la energía cinética media
V es constante



aclaración sobre unidades de la presión: es en 2D

Ajuste de un modelo en base a los datos obtenidos (lineal)

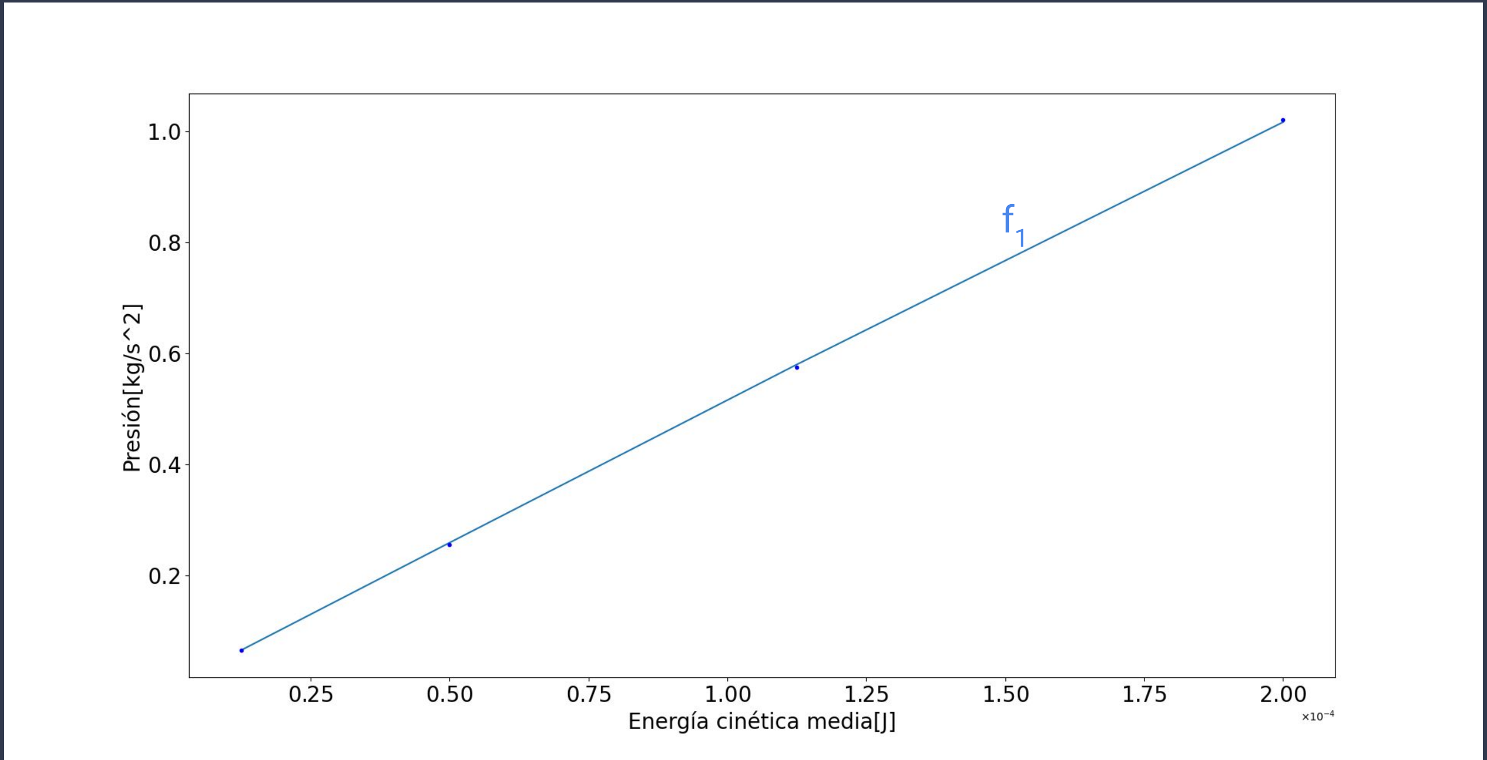
Tomando los datos anteriores,
Se halla la función f_1 lineal con menor error para representar el modelo
P ~ T

$$f_1(T): 5103.41\,T + 0 = P$$

Con un V constante de 0.24m x 0.09m = $0.0216m^2$
Se halla la función f_2 lineal con menor error para representar el modelo
PV ~ T

$$f_2(T): 110.23\,T + 0 = PV$$

Gráfico P vs Energía cinética, mostrando nuestro ajuste hallado



Conclusiones

Mayor apertura -> Menor tiempo a equilibrio

Mayor N -> Menor tiempo a equilibrio

Mayor Temperatura -> Menor tiempo a equilibrio

Muchas gracias