

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos (Enunciado publicado en CAMPUS el 05/09/2022)

Elegir uno de los 3 sistemas que se detallan más abajo para simular, animar y presentar. Se deberá utilizar la técnica de dinámica molecular regida por eventos con choques elásticos. Los sistemas no tienen campos externos por lo tanto las partículas siguen en movimiento rectilíneo uniforme entre colisiones. El máximo número de partículas  $N$  se debe elegir de manera que las simulaciones se completen en tiempos de cómputo razonables.

Las simulaciones tendrán un  $dt$  intrínseco variable que dependerá de cuando sucedan los eventos. Imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) en cada uno de estos  $dt$  (o cada un número entero de ellos) para luego realizar animaciones y los correspondientes análisis. Como la duración promedio de los tiempos de choque dependerá de la densidad del sistema, encontrar el rango de densidades de partículas que permita realizar las simulaciones de manera eficiente.

Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma la velocidad de la animación no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

Los entregables del T.P. son:

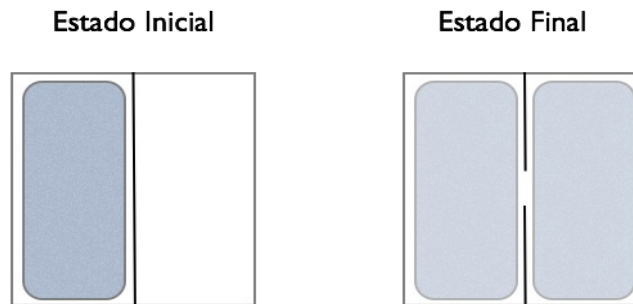
- a- Presentación oral de 13 minutos de duración con las secciones indicadas en el documento ".../material didáctico/00\_GuiasFormato/Formato\_Presentaciones.pdf". Durante la presentación oral se podrá solicitar una demostración en vivo del funcionamiento del código.
- b- Links a youtube o vimeo de las animaciones generadas (NO enviar archivos de animaciones por medio de links ni subirlos a campus).
- c- El documento de la presentación en formato pdf.
- d- El código fuente implementado.

#### Fecha y Forma de Entrega:

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser presentados **a través de campus**, antes del día 19/09/2022 a las 10 hs. Los archivos deben nombrarse de la siguiente manera: **"SdS\_TP3\_2022Q2GXX\_Presentación"** y **"SdS\_TP3\_2022Q2GXX\_Codigo"**, donde **XX** es el número de grupo.

## Sistema 1) Difusión de un gas 2D

Sea un dominio de simulación de 0.24 m de ancho x 0.09 m de alto contiene dos recintos iguales separados por un tabique con una apertura central de 0.01 m como se muestra en la Fig. 1.



**Figura 1:** Esquema del sistema a simular: Evolución de un gas inicialmente confinado en el recinto izquierdo.

Considerar inicialmente  $N$  partículas de 0.0015 m de radio ubicadas en el lado izquierdo con velocidades de modulo 0.01 m/s y con direcciones al azar. Las masas de las partículas son todas iguales a 1 kg.

1.1) Calcular la fracción de partículas ( $fp$ ) en ambos lados en función del tiempo y usar como criterio de corte de la simulación, cuando  $fp \sim 0.5$ . Detallar como considera la colisión entre las partículas y los vértices de las tabiques que separan los recintos.

1.2) Luego usando los resultados de la simulación. Graficar la evolución de  $fp$  y registrar el tiempo en que se llega al equilibrio para distintas (al menos 3) configuraciones del sistema, variando el ancho de la apertura y el número de partículas  $N$ . Para cada configuración, simular varias realizaciones y presentar de manera adecuado los resultados.

1.3) Verificar si, en el equilibrio, se cumple la ley de gases ideales ( $P.V \sim T$ ), generando una curva de  $P$  vs  $T$ . El volumen ( $V$ ) es fijo. La presión ( $P$ ) se calcula como el impulso transferido a las paredes por unidad de tiempo y por unidad de longitud. Cómo se cambia la temperatura del sistema? (No es necesario calcular esta temperatura en grados, solo interesan cambios relativos de temperatura dados por alguno de los inputs del sistema).

1.4) Realizar el ajuste de un modelo ( $P.V \sim T$ ) que corresponda a los datos  $P$  vs  $T$  utilizando el método genérico visto en la Teórica 0.

## Sistema 2) Barrera en fluido 2D

Considerar un dominio rectangular de 1 m de ancho x 0.5 m de alto y con una barrera vertical de largo  $L < 0.2$  m, en  $x=0.2$  (similar al mostrado en la diapositiva 38 de la Teórica 2).

Condiciones Iniciales:

$N$  Partículas de 0.005 m de radio colocadas al azar con distribución uniforme en el dominio. Las velocidades de las partículas también deben tener una distribución uniforme en los rangos:  $0 < v_x < 0.1$  m/s y  $-0.1$  m/s  $< v_y < 0.1$  m/s. Las masas de las partículas son todas iguales a 1 g.

Condiciones de Contorno:

En la dirección  $y$  (vertical) considerar paredes rígidas. Las partículas colisionan con los límites inferior y superior del dominio.

En la dirección  $x$  (horizontal) considerar que las partículas que salen del sistema por el lado derecho ( $x = 1$  m) son eliminadas. Y por el lado izquierdo ( $x = 0$  m) ingresa un caudal de partículas con velocidad  $v_x = 0.05$  m/s,  $v_y = 0$ . Este caudal debe ser igual al caudal de salida de forma tal de

mantener el nro. total de partículas del sistema constante.

2.1) Realizar simulaciones considerando  $L = 0.05, 0.1, 0.2$  m y crear animaciones para cada caso. La duración de la simulación será tal que el sistema se estabilice en cuanto a los patrones de flujo observados. Detallar como considera la colisión entre las partículas y los vértices del tabique.

2.2) Definir un observable que mida el grado de turbulencia del sistema. Graficarlo en función de distintos  $N$  y valores iniciales de  $v_x$ .

2.3) Generar el Histograma o Distribución de Probabilidades de tiempos de vuelo (entre colisiones) para cada caso teniendo en cuenta todas las colisiones.

2.4) Calcular el coeficiente de difusión del sistema. Para ello se deberá computar el desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo de varias partículas testigo. Para las cuales, solo se deben considerar trayectorias hasta que choquen con alguna de las paredes. Luego realizar el ajuste de  $D$ , con el método genérico visto en la Teórica 0. Además, se debe describir como se eligen los tiempos en los cuales se calcula el DCM, dado que el estado del sistema fue guardado con  $dt$  no uniformes debido a los eventos.

### Sistema 3) Movimiento Browniano

Considerar un dominio cuadrado de lado  $L = 6$  m. En su interior colocar  $100 < N < 150$  partículas pequeñas de radio  $R_1 = 0.2$  m y masa  $m_1 = 0.9$  kg y una partícula grande de radio  $R_2 = 0.7$  y masa  $m_2 = 2$  kg.

Condiciones Iniciales:

Las posiciones de todas las partículas deben ser al azar con distribución uniforme dentro del dominio. Las partículas pequeñas deben tener velocidades con una distribución uniforme en el rango:  $|\mathbf{v}| < 2$  m/s. La partícula grande debe tener velocidad inicial  $\mathbf{v}_2 = 0$  y su posición inicial en  $x=L/2, y=L/2$ .

Condiciones de Contorno:

Sistema confinado, es decir, todas las paredes son rígidas.

Simular la evolución del sistema y calcular:

3.1) ¿Cuál es el valor promedio de la frecuencia de colisiones (Nro. de colisiones totales dividido el tiempo total de la simulación)?; Calcular el promedio de tiempos de colisión y graficar la distribución de probabilidades de dichos tiempos (o alternativamente, PDF). No estudiar ni graficar evolución temporal de esta cantidad. Considerar al menos 3 valores de  $N$ .

3.2) Distribución de probabilidades (o alternativamente, PDF) del módulo de las velocidades solo de las partículas pequeñas en el último tercio de la simulación. Comparar con la PDF del estado inicial del sistema (a  $t = 0$ ). Considerar al menos 3 valores de  $N$ .

3.3) Graficar la trayectoria de la partícula grande para distintas temperaturas. Cómo se cambia la temperatura en el sistema simulado? (No es necesario calcular esta temperatura en grados, solo interesan cambios relativos de temperatura dados por alguno de los inputs del sistema).

3.4) Para el máximo valor de  $N$  usado en los puntos anteriores, estimar el coeficiente de difusión de la partícula grande, primero, y de las pequeñas después, calculando el desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo. Luego realizar el ajuste del coeficiente de difusión ( $D$ ), con el método genérico visto en la Teórica 0. Además, se debe describir como se eligen los tiempos en los cuales se calcula el DCM, dado que el estado del sistema fue guardado con  $dt$  no uniformes debido a los eventos.

Para las partículas que se estudien, solo se deben considerar la segunda mitad de sus trayectorias, teniendo en cuenta que la misma solo es válida hasta que choque con alguna de las paredes.