

Dinâmica Molecular

Objetivo

Utilizar o método de Euler para resolver o problema de N corpos.

O Problema

Vocês já conhecem.

Roteiro e Análise

- 1) Apresentar o código para os cálculos de dinâmica molecular com N corpos. São 3 códigos, um para o código burro (sem otimização), um para o código semi-burro (otimizado para só avaliar a força quando $r < 4$) e outro para o código com listas.
- 2) Resolver o problema para 100 corpos e mostrar a evolução temporal da temperatura nos dois códigos. Use $t=[0,10]$ e avalie qual o melhor dt a ser utilizado.
- 3) Repita o passo 2 para diferentes valores de “temperatura” inicial.
- 4) Faça um histograma para a distribuição de velocidades, em diferentes instantes. Dê preferência para os instantes iniciais, onde a temperatura não chegou ao equilíbrio.
- 5) Rode a sua simulação para diferentes valores de N e meça o tempo computacional de cada simulação. Faça um gráfico do tempo de computação em função de N para os 3 códigos.