



Simulación de Sistemas

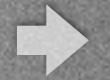
Clase Teórica 4:
Simulaciones dirigidas por el paso temporal



Dinámica Molecular

Definición: Simulación Dirigida por el Paso Temporal

- N partículas interactúan mediante fuerzas que en general dependen de la distancia entre partículas.
- Integración numérica de las ecuaciones de movimiento. El tiempo avanza en cantidades discretas Δt (el paso temporal !).
- Las interacciones pueden ser de largo o corto alcance. En cualquier caso los “choques” no son instantáneos sino que tienen una duración de varios pasos temporales.



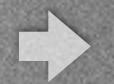
Dinámica Molecular

Definición: Simulación Dirigida por el Paso Temporal

Cuando es útil el enfoque de simulación “dirigida por paso temporal”?

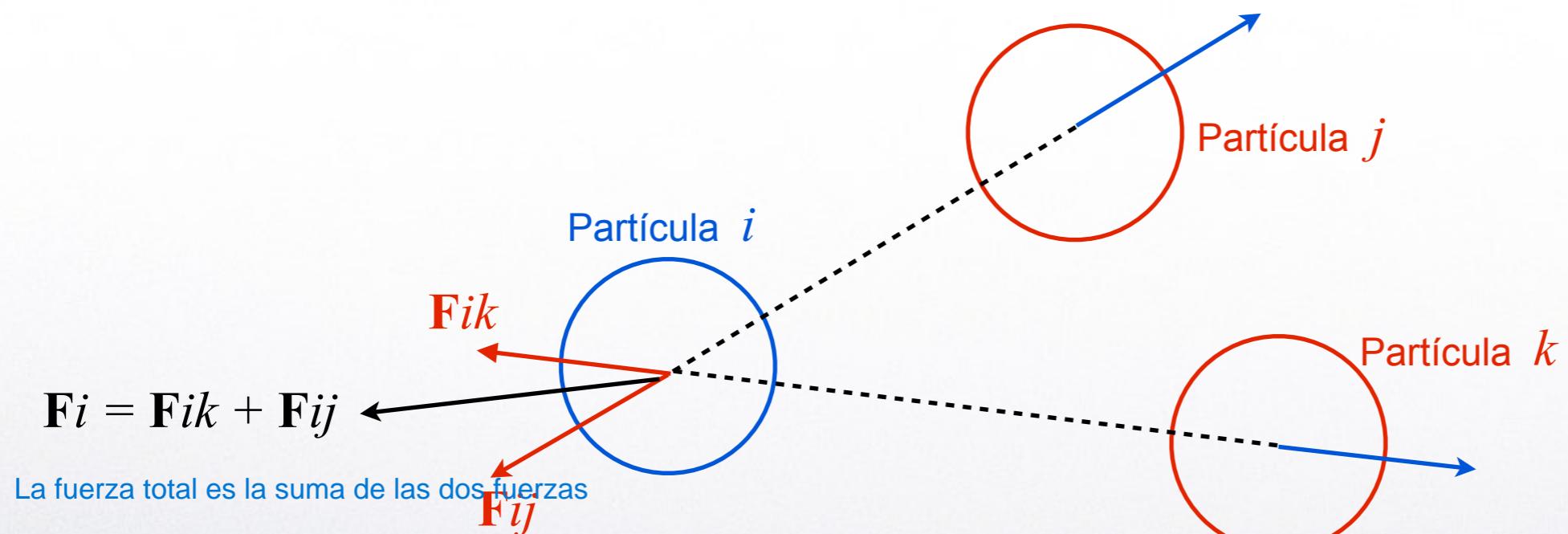
- Partículas en contacto la mayor parte del tiempo:
 - O bien interacciones largo alcance. (como por ejemplo gravitatorio)
 - O bien de corto alcance pero con alta densidad. (como por ejemplo rozamiento con mucha densidad, como un frasco con canicas que estan todo el tiempo en contacto)
- Tiempo de vuelo (entre choques) << duración del choque.

Es para sistemas donde las partículas estan mucho tiempo interactuando



Dinámica Molecular

Interacciones de a pares



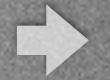
La fuerza total es la suma de las dos fuerzas



Dinámica Molecular

Desarrollo de Taylor

Todas las formas de aproximar las variables de interes estan basadas en los polinomios de taylor. Nosotros tenemos que integrar la fuerza para encontrar la posicion y velocidad en todo momento



Dinámica Molecular

Desarrollo de Taylor

Recordatorio de como es un desarrollo de taylor

$$f(x) \approx f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x - a) + \frac{f''(a)}{2!}(x - a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x - a)^3 + \dots$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n$$

Con infinitos terminos, llegamos a error 0

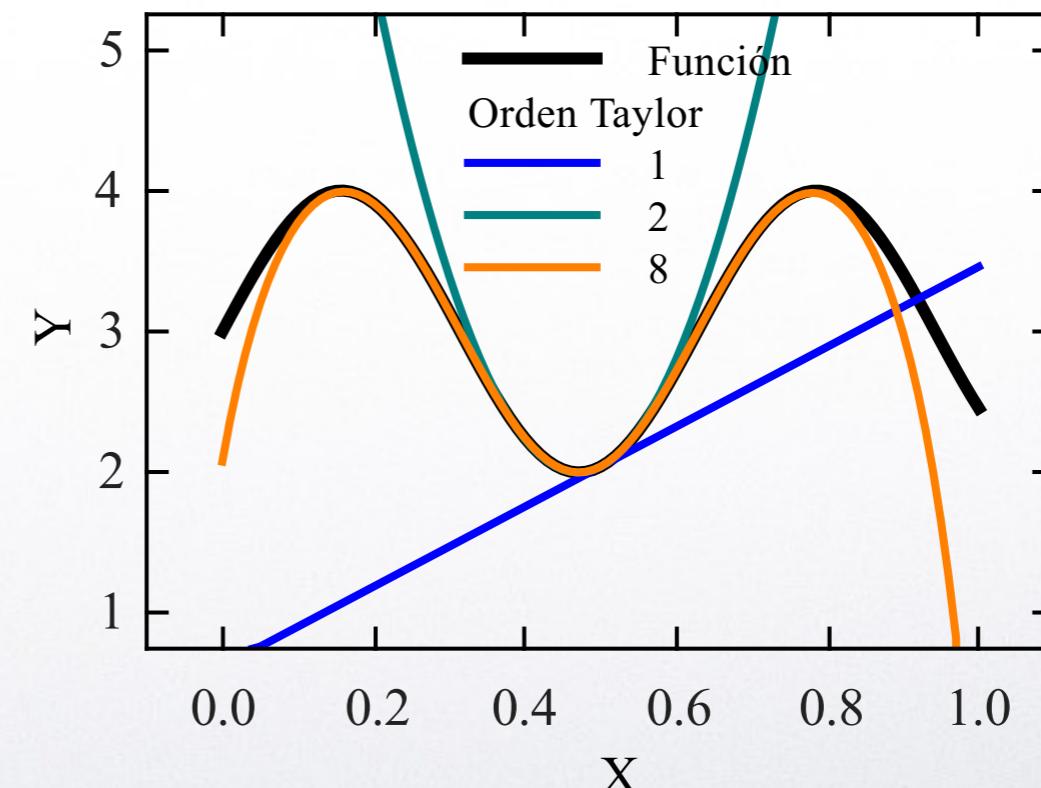
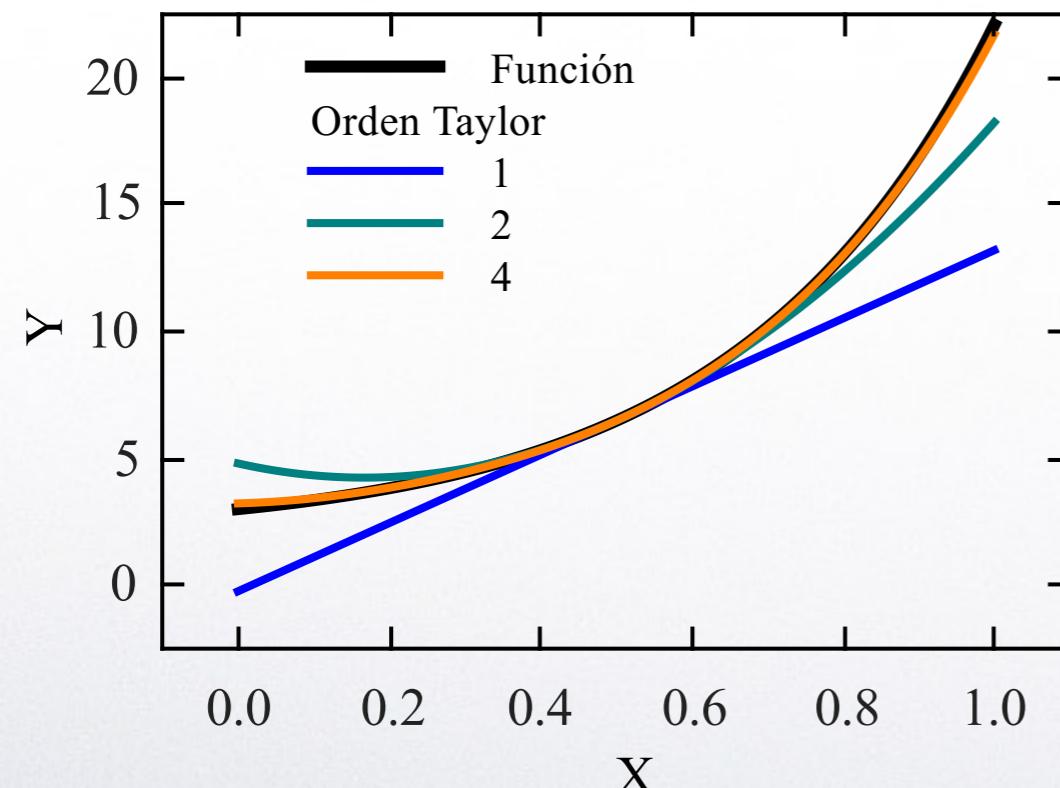


Dinámica Molecular

Desarrollo de Taylor

Ejemplos de desarrollos de taylor

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n$$



La linea negra es la función que me interesa, el resto son aproximaciones de Taylor con polinomios de distintos ordenes



Dinámica Molecular

Algoritmos Euler



Dinámica Molecular

Algoritmo de Euler

El más simple y menos preciso

Hago un desarrollo de taylor para la función r , que depende de t (que lo conozco), y Δt (que lo conozco). De esta forma puedo aproximar la posición luego de un tiempo en particular (teniendo datos iniciales)

Error de orden Δt^3

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \mathbf{f}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

Obtengo esta ecuación derivando la de arriba

$f/m = \text{aceleración} = 2\text{da derivada de } r = 1\text{ra derivada de } v$



Dinámica Molecular

Algoritmo de Euler Modificado

Modificar el algoritmo para que sea mas preciso. Damos vuelta el orden de las cuentas. Primero calculo la velocidad, y despues la posicion

Se usa la velocidad actualizada en vez de la del paso anterior.

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \mathbf{f}_i(t)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t + \Delta t) + \Delta t^2 \mathbf{f}_i(t) / 2m_i$$



Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Verlet



Dinámica Molecular

Algoritmos Euler

Se puede discretizar las ecuaciones de movimiento por su desarrollo de Taylor:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \, \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \, \mathbf{f}_i(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} \, \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Derivada 3ra de la posicion

Mas cosas (error)

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \mathbf{f}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{v}}_i(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} \dddot{\mathbf{v}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4).$$



Dinámica Molecular

Algoritmo de Verlet

A la posicion le hacemos desarrollo de taylor en t mas y menos delta t . En el menos, todos los terminos impares quedan en negativo, y los terminos pares en positivo. Si sumamos ambas ecuaciones y despejamos, la posicion en el tiempo t mas delta t el orden me queda de delta t a la cuarta porque el que estaba a la tercera se cancela. Lo malo de este algoritmo es que necesito dos pares de posicion, velocidad de condicion inicial.

Considero el desarrollo de Taylor para Δt y $-\Delta t$:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

+

Sumando MAM
y despejando

$$\mathbf{r}_i(t - \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) - \frac{\Delta t^3}{3!} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

⇒

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{m_i} \mathbf{f}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$



Dinámica Molecular

Algoritmo de Verlet

- Notar que usando el algoritmo de Verlet no es necesario computar las velocidades para obtener las trayectorias.
- Sin embargo las velocidades son necesarias si se quiere calcular, por ejemplo, la energía cinética del sistema.
- Para el primer paso es necesario estimar las posiciones y velocidades anteriores lo cual puede hacerse con Euler evaluado en $-\Delta t$.



Dinámica Molecular

Algoritmo de Verlet

Para calcular la velocidad, en vez de sumar los dos desarrollos los restamos. La velocidad me va a quedar en función de las posiciones posterior y anterior. El error es de delta t al cubo (es menor que el delta t al cuadrado de antes). En resumen, verlet es más preciso tanto para posiciones como velocidades que con taylor

Considero el desarrollo de Taylor para Δt y $-\Delta t$:

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) + \frac{\Delta t^3}{3!} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

Restando MAM
y despejando

$$\mathbf{r}_i(t - \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m_i} \mathbf{f}_i(t) - \frac{\Delta t^3}{3!} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$



$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$



Dinámica Molecular

Variaciones del Algoritmo de Verlet: “Leap-Frog”

$$\mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \frac{\Delta t}{m_i} \mathbf{f}_i(t),$$
$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}).$$

La velocidad actual puede calcularse como:

El problema aca es que nos quedan desfasadas las velocidades con las posiciones, entonces hacemos la suma de abajo para interpolar

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \mathbf{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2})}{2}.$$



Dinámica Molecular

Variaciones del Algoritmo de Verlet: “Velocity-Verlet”

Provee posiciones y velocidades en el mismo paso temporal

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{m_i} \mathbf{f}_i(t) + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\Delta t}{2m_i} (\mathbf{f}_i(t) + \mathbf{f}_i(t + \Delta t)) + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Paso intermedio 1) $\mathbf{v}(t + \Delta t/2) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)(\Delta t/2)$

Paso intermedio 2) $\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t + \Delta t/2) + \mathbf{a}(t + \Delta t)(\Delta t/2)$

Esta variante es muy estable y preserva los volúmenes en el espacio de fases (es un “symplectic integrator”).



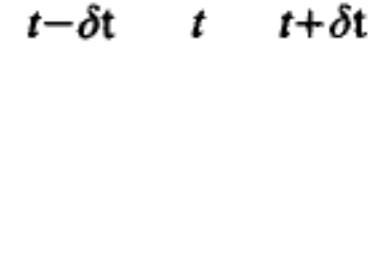
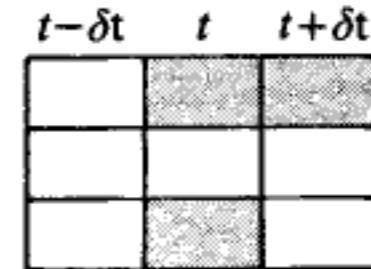
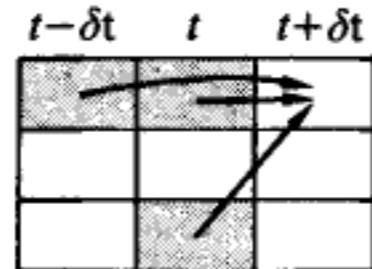
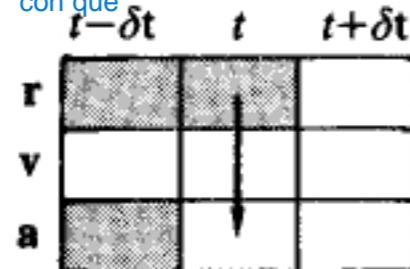
Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Verlet

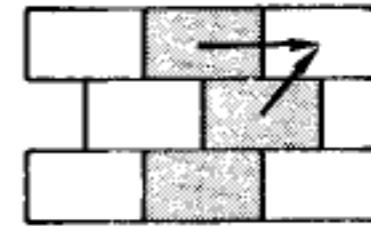
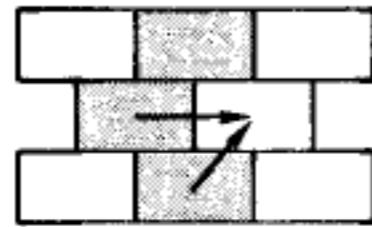
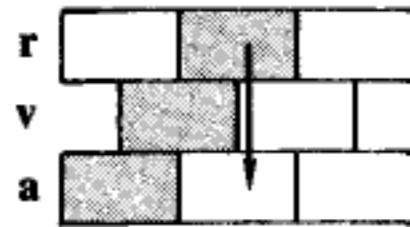
Esquema de integración de las 3 variantes presentadas

En gris lo que
conozco, y la flecha lo
que puedo calcular y
con que

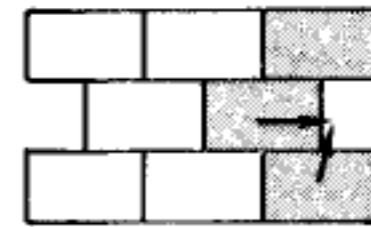
Verlet Original

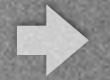


“Leap-frog”



“Velocity-Verlet”





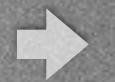
Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Verlet

Algoritmo de Beeman

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)(\Delta t) + \frac{2}{3}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\mathbf{a}(t - \Delta t)\Delta t^2$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{3}\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t + \frac{5}{6}\mathbf{a}(t)\Delta t - \frac{1}{6}\mathbf{a}(t - \Delta t)\Delta t$$



Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Verlet

En los algoritmos previos, podia calcular una posicion/velocidad siguiente sin saber la velocidad actual.

Primero predigo la velocidad en el futuro, y despues la corrijo. Para corregirla, utilizo la formula original. Donde tengo que poner la aceleracion en $t+\Delta t$, pongo la posicion y velocidad evaluadas en $t+\Delta t$

Algoritmo de Beeman para fuerzas que dependen de la velocidad

Beeman's algorithm [1] is a method for numerically integrating ordinary differential equations, generally position and velocity, which is closely related to Verlet integration.

In its standard form, it produces the same trajectories as the Verlet algorithm, but the velocities are more accurate:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \left(\frac{2}{3}a(t) - \frac{1}{6}a(t - \Delta t)\right)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

Estas dos lineas son Beeman 'convencional'

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \left(\frac{1}{3}a(t + \Delta t) + \frac{5}{6}a(t) - \frac{1}{6}a(t - \Delta t)\right)\Delta t + O(\Delta t^3)$$

where x is the position, v is the velocity, a is the acceleration, t is time, and Δt is the time-step.

De aca para abajo se muestra Beeman predictor-corrector

A predictor-corrector variant is useful when the forces are velocity-dependent:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{2}{3}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}a(t - \Delta t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4).$$

Uso la formula original de Beeman para calcular la posicion futura

The velocities at time $t = t + \Delta t$ are then calculated from the positions.

$$v(t + \Delta t)_{(\text{predicted})} = v(t) + \frac{3}{2}a(t)\Delta t - \frac{1}{2}a(t - \Delta t)\Delta t + O(\Delta t^3)$$

Estimo la velocidad futura cambiando la formula de Beeman original (no conozco la aceleracion futura entonces solo uso la actual y la anterior)

The accelerations at time $t = t + \Delta t$ are then calculated from the positions and predicted velocities.

$$v(t + \Delta t)_{(\text{corrected})} = v(t) + \frac{1}{3}a(t + \Delta t)\Delta t + \frac{5}{6}a(t)\Delta t - \frac{1}{6}a(t - \Delta t)\Delta t + O(\Delta t^3)$$

Calculo la velocidad futura, pudiendo ahora calcular la aceleracion futura (usando el valor predecido del paso anterior)



Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Predictor-Corrector



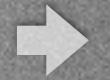
Dinámica Molecular

Algoritmos Tipo Predictor-Corrector

Estos métodos tienen 3 pasos: Predicción, evaluación y corrección. En particular si se tienen la posición $\mathbf{r}_i(t)$ y la velocidad $\mathbf{v}_i(t)$ los pasos son:

- 1- Predecir la posición $\mathbf{r}_i(t+\Delta t)$ y velocidad $\mathbf{v}_i(t+\Delta t)$ en el paso siguiente.
- 2- Evaluar las Fuerzas $\mathbf{f}_i(t+\Delta t)$ usando las predicciones hechas en 1.
- 3- Corregir las predicciones usando una combinación de los valores previos y los predichos.

Veamos un ejemplo...



Dinámica Molecular

Algoritmo Euler Predictor-Corrector

1) Predecir :

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^p(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{a}_i(t)\Delta t \\ \mathbf{r}_i^p(t+\Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t\end{aligned}$$

2) Evaluar :

$$\mathbf{f}_i(\mathbf{r}_i^p, \mathbf{v}_i^p) \Rightarrow \mathbf{a}_i(t+\Delta t)$$

3) Corregir :

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{a}_i(t+\Delta t)\Delta t \\ \mathbf{r}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t+\Delta t)\Delta t\end{aligned}$$



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

1) Predecir:

Predictor-corrector de orden 5.
Voy a describir a la posición
como una aproximación de
orden 5

$$\text{notación: } \mathbf{r}_q = \frac{d^q \mathbf{r}}{dt^q}$$

$$\mathbf{r}^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{r}_1(t)(\Delta t) + \mathbf{r}_2(t) \frac{(\Delta t)^2}{2!} + \mathbf{r}_3(t) \frac{(\Delta t)^3}{3!} + \mathbf{r}_4(t) \frac{(\Delta t)^4}{4!} + \mathbf{r}_5(t) \frac{(\Delta t)^5}{5!}$$

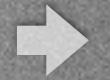
$$\mathbf{r}_1^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}_1(t) + \mathbf{r}_2(t)(\Delta t) + \mathbf{r}_3(t) \frac{(\Delta t)^2}{2!} + \mathbf{r}_4(t) \frac{(\Delta t)^3}{3!} + \mathbf{r}_5(t) \frac{(\Delta t)^4}{4!}$$

$$\mathbf{r}_2^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}_2(t) + \mathbf{r}_3(t)(\Delta t) + \mathbf{r}_4(t) \frac{(\Delta t)^2}{2!} + \mathbf{r}_5(t) \frac{(\Delta t)^3}{3!}$$

$$\mathbf{r}_3^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}_3(t) + \mathbf{r}_4(t)(\Delta t) + \mathbf{r}_5(t) \frac{(\Delta t)^2}{2!}$$

$$\mathbf{r}_4^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}_4(t) + \mathbf{r}_5(t)(\Delta t)$$

$$\mathbf{r}_5^p(t + \Delta t) = \mathbf{r}_5(t)$$



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

2) Evaluar:

Evalúo la Fuerza($t+\Delta t$) con las variables predichas y obtengo la aceleración $\mathbf{a}(t+\Delta t)$, luego defino:

$$\Delta \mathbf{a} = \Delta \mathbf{r}_2 = \mathbf{a}(t+\Delta t) - \mathbf{a}^p(t+\Delta t) = \mathbf{r}_2(t+\Delta t) - \mathbf{r}_{2p}(t+\Delta t)$$

$$\Delta \mathbf{R2} = \frac{\Delta \mathbf{a}(\Delta t)^2}{2!}$$

Esto va a ser un factor de corrección que voy a aplicar para corregir las variables



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

3) Obtengo las variables corregidas: \mathbf{r}_q^c

notación: $\mathbf{r}_q = \frac{d^q \mathbf{r}}{dt^q}$

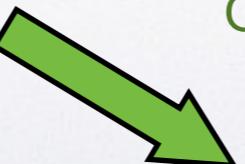
$$\mathbf{r}^c = \mathbf{r}^p + \alpha_0 \Delta \mathbf{R2}$$

$$\mathbf{r}_1^c = \mathbf{r}_1^p + \alpha_1 \Delta \mathbf{R2} / (\Delta t)$$

....

$$\mathbf{r}_q^c \frac{(\Delta t)^q}{q!} = \mathbf{r}_q^p \frac{(\Delta t)^q}{q!} + \alpha_q \Delta \mathbf{R2}$$

O despejando:



$$\mathbf{r}_q^c = \mathbf{r}_q^p + \alpha_q \Delta \mathbf{R2} \frac{q!}{(\Delta t)^q}$$



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

Los α_q son los coeficientes del predictor Gear. Para el caso $\mathbf{r}_2 = f(\mathbf{r})$, i.e.: las fuerzas solo dependen de las posiciones.

Orden	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5
2	0	1	1			
3	1/6	5/6	1	1/3		
4	19/120	3/4	1	1/2	1/12	
5	3/20	251/360	1	11/18	1/6	1/60

Esta tabla solo sirve si las fuerzas dependen solo de la posición y no de la velocidad



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

Los α_q son los coeficientes del predictor Gear. Para el caso $\mathbf{r}_2 = f(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, i.e.: las fuerzas dependen de las posiciones y las velocidades.

Orden	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5
2	0	1	1			
3	1/6	5/6	1	1/3		
4	19/90	3/4	1	1/2	1/12	
5	3/16	251/360	1	11/18	1/6	1/60

Si las fuerzas dependen de la velocidad, se cambian algunos valores de la tabla



Dinámica Molecular

Algoritmo Gear Predictor-Corrector

El predictor corrector NO es reversible temporalmente
(aunque a nosotros no nos importa)

El primer paso de integración.

Las derivadas de la posición de orden mayores a 2 se obtienen derivando la expresión de la Fuerza. Por ejemplo en el caso de 1 partícula con fuerza elástica $\mathbf{F} = m \mathbf{r}_2 = -k (\mathbf{r}-\mathbf{r}^0)$ serán (S.E.U.O.):

Este ejemplo es para el oscilador armónico

$$\mathbf{r}_2 = -k/m (\mathbf{r}-\mathbf{r}^0)$$

$$\mathbf{r}_3 = -k/m \mathbf{r}_1 ;$$

$$\mathbf{r}_4 = -k/m \mathbf{r}_2 = (k/m)^2 (\mathbf{r}-\mathbf{r}^0);$$

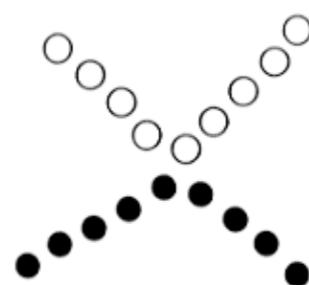
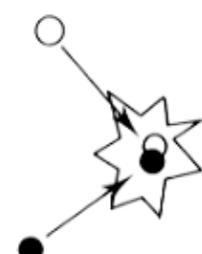
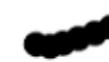
$$\mathbf{r}_5 = -k/m \mathbf{r}_3 = (k/m)^2 \mathbf{r}_1$$

En los casos de fuerzas más complejas, se puede inicializar las derivadas superiores en cero.



Dinámica Molecular

Elección del paso temporal



Demasiado corto. Simulación innecesariamente lenta.

Demasiado largo. Errores por las aproximaciones.
Explosiones!

Justo. Errores aceptables y máxima velocidad.



Dinámica Molecular

Elección del paso temporal

Diferenciar entre:

Paso Δt de la simulación

Paso Δt_2 para guardar el
estado del sistema

$$\Delta t_2 = k \Delta t, \quad \text{con } k \in \mathbb{N}$$

Ejemplo:

$$t = \sum \Delta t \quad (\text{El tiempo total})$$

```
if   (t / Δt2) = round (t / Δt2)
    guardo estado sistema.
end
```



Dinámica Molecular

Verificación del Error



Dinámica Molecular

Verificación del Error

- Caso simple. Comparar con la solución analítica.
- Caso realista. Si el sistema es conservativo:
Conservación de la Energía para todo el sistema:

$$E_{\text{cinética}} + E_{\text{potencial}} = \text{Cte.}$$

- Sistemas no conservativos: Repetir simulaciones con dt cada vez menores hasta que los resultados cambien menos que un dado error.

Si tengo diferencias significativas en los resultados del sistema cada vez que achico el dt , entonces todavía mis dt son muy grandes



Dinámica Molecular

Casos de Estudio



Dinámica Molecular

Casos de Estudio

Sólo una partícula. Comparar con la solución analítica.

1) Oscilador Amortiguado

Parámetros
 $m = 70 \text{ kg}; k = 10^4 \text{ N/m};$
 $\gamma = 100 \text{ kg/s}; t_f = 5 \text{ s}$

$$f = ma = mr_2 = -kr - \gamma r_1$$

r_1 =velocidad (primera derivada de la posición)
 r_2 =aceleración (segunda derivada de la posición)

Solución

Condiciones Iniciales
 $r(t=0) = 1 \text{ m};$
 $v(t=0) = -A\gamma/(2m) \text{ m/s};$

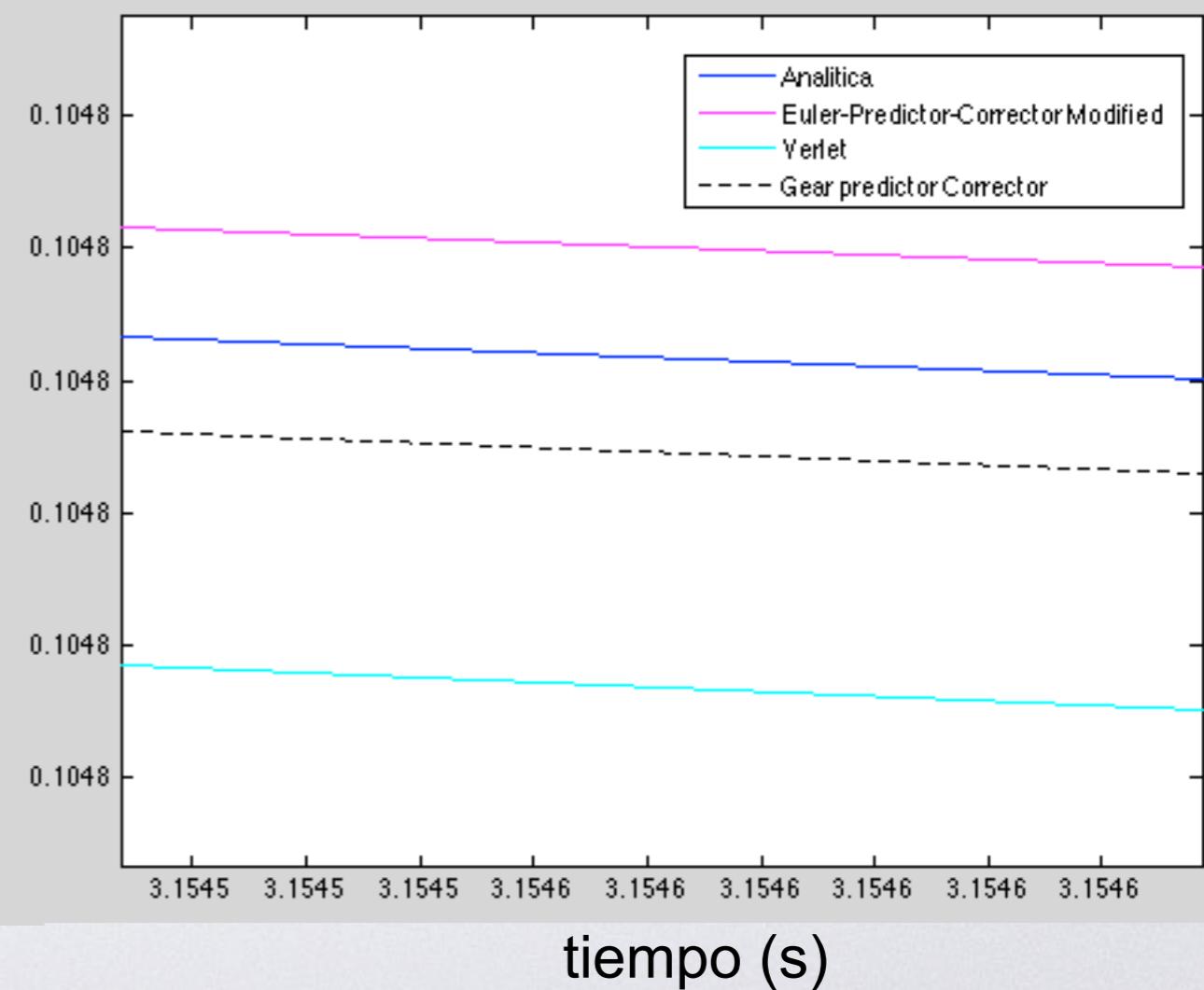
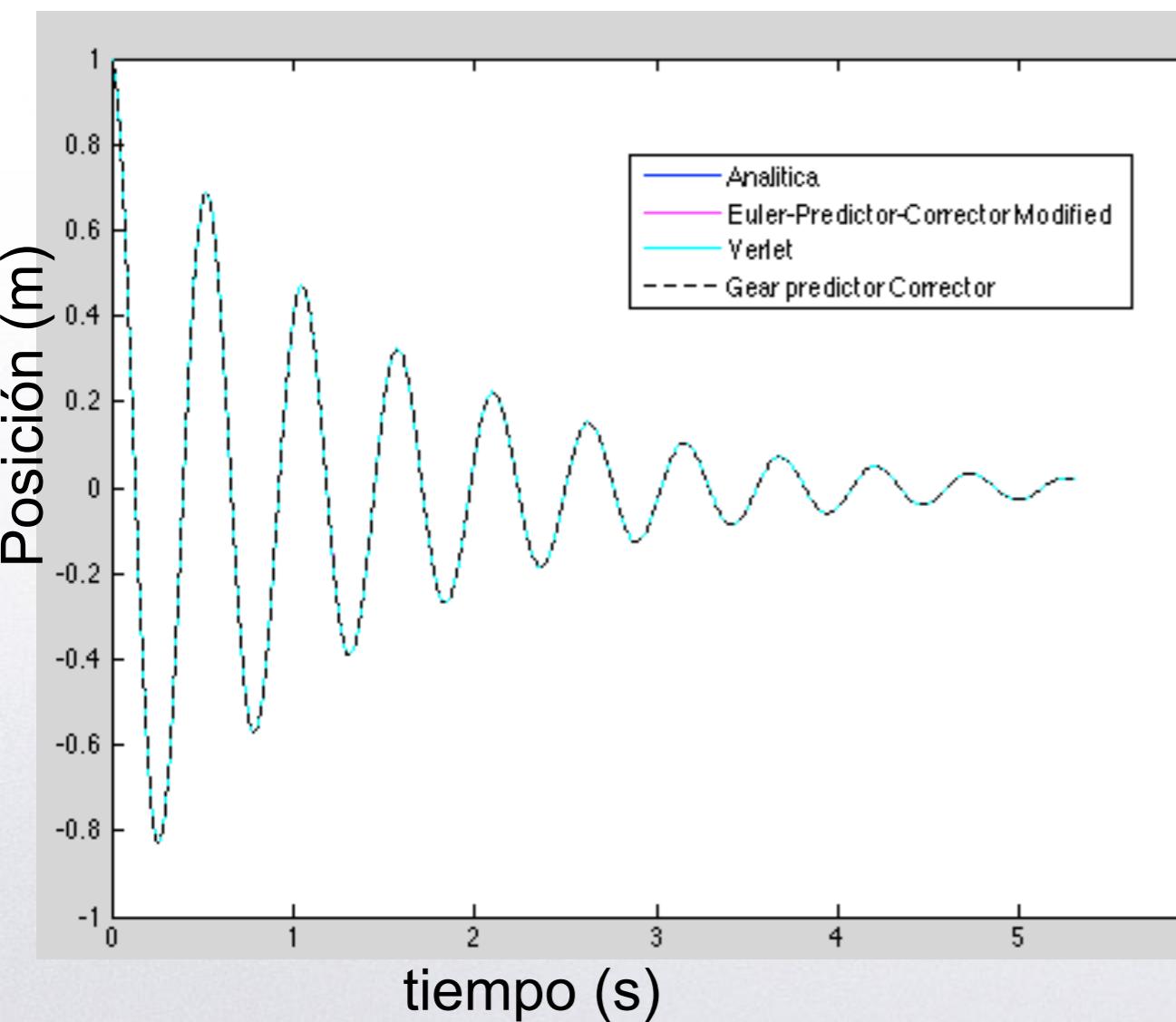
$$r = A \exp\left(-\left(\frac{\gamma}{2m}\right)t\right) \cos\left(\left(\frac{k}{m} - \frac{\gamma^2}{4m^2}\right)^{0.5} t\right)$$



Dinámica Molecular

Casos de Estudio

1) Oscilador Amortiguado





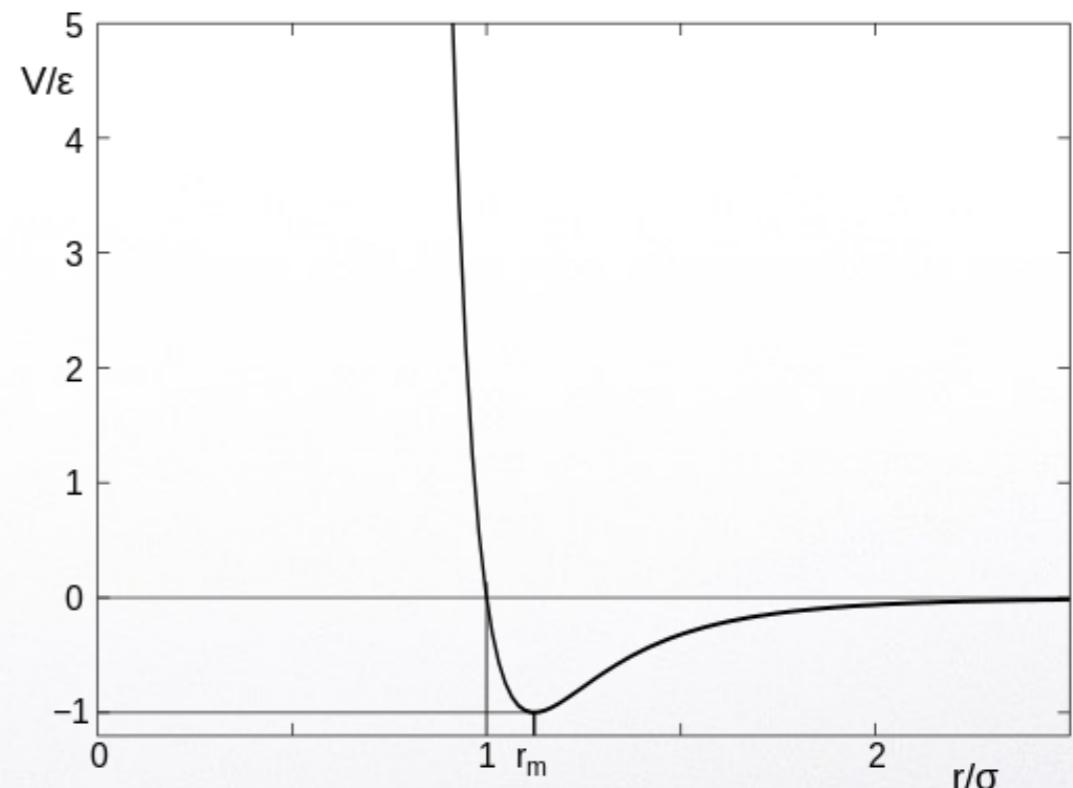
Dinámica Molecular

Casos de Estudio

2) Gas de Lennard-Jones

El potencial LJ 12-6

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = \epsilon \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right]$$



Donde:

ϵ es la profundidad del pozo.

r es la distancia entre partículas.

σ es la distancia a la cual el potencial se hace cero

r_m es la distancia a la cual se encuentra el mínimo ($r_m = 2^{1/6}\sigma$).



Dinámica Molecular

Casos de Estudio

2) Gas de Lennard-Jones

La Fuerza LJ 12-6

$$\begin{aligned}F(r) &= -V'(r) \\&= -\epsilon \left[-\frac{12}{r_m} \left(\frac{r_m}{r} \right)^{13} + \frac{12}{r_m} \left(\frac{r_m}{r} \right)^7 \right] \\&= \frac{12\epsilon}{r_m} \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^{13} - \left(\frac{r_m}{r} \right)^7 \right]\end{aligned}$$



Dinámica Molecular

Casos de Estudio

3) Sistema Gravitatorio

Fuerza de Gravedad

$$\mathbf{F}_{ij} = G \frac{m_i m_j}{r_{ij}^2} \mathbf{e}_{ij}$$

Energía Potencial

$$E_{ij}^{pot} = -G \frac{m_i m_j}{r_{ij}}$$

Donde:

m es la masa de cada partícula

r_{ij} es la distancia entre las partícula i y la j .

G es la constante universal de gravitación

$$G = 6,693 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{s}^2}$$



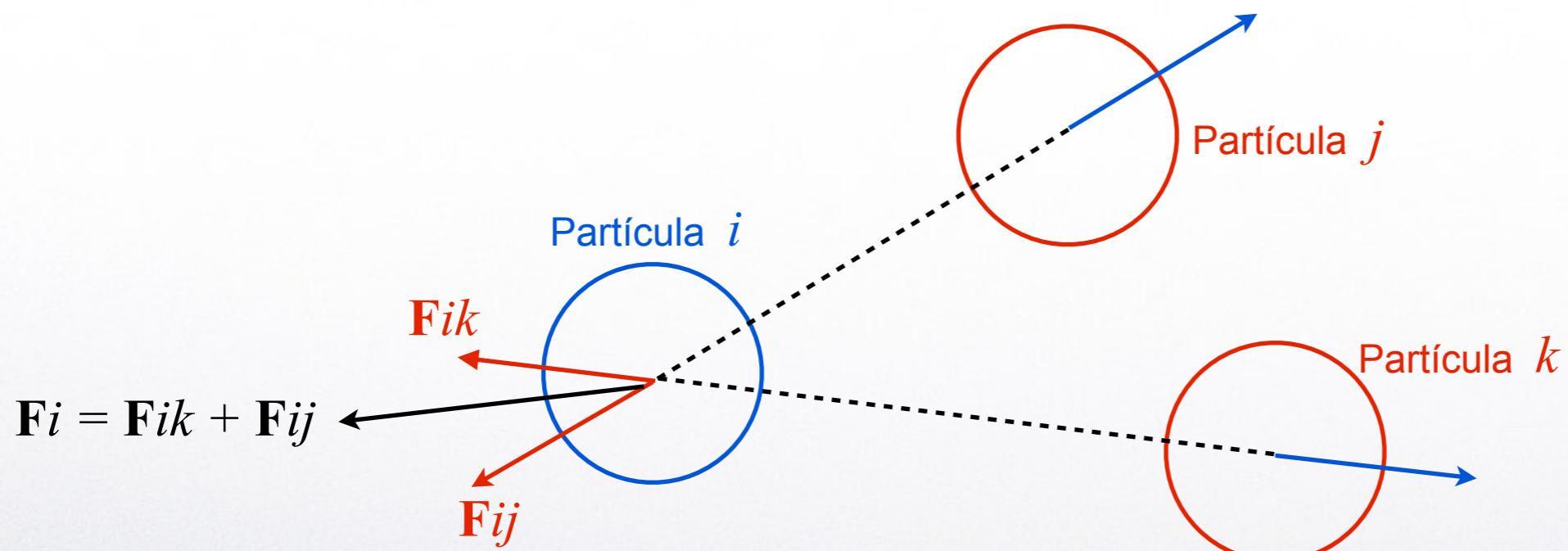
Dinámica Molecular

Suma de Fuerzas



Dinámica Molecular

Suma de Fuerzas





Dinámica Molecular

Suma de Fuerzas

Antes de sumar Fuerzas, para cada partícula, conviene proyectar las Fzas. normal y tangencial (generadas por cada una de las demás partículas en contacto) en las componentes cartesianas (x, y)

$$F_x = F_N e^n_x$$

Donde:

$$F_y = F_N e^n_y$$

$$e^n_x = (x_j - x_i) / |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$$

$$e^n_y = (y_j - y_i) / |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$$

Además, las componentes tangenciales:

$$e^t_x = -e^n_y$$

$$e^t_y = e^n_x$$



Dinámica Molecular

Suma de Fuerzas

Finalmente la fuerza sobre cada partícula i debido la interacción con las demás partículas (j) resulta:

$$\mathbf{F}_i^{Tot} = \sum_j \mathbf{F}_{Nij}$$

$$F_{i\ x}^{Tot} = \sum_j F_{Nij} e_x^n \ ij$$

$$F_{i\ y}^{Tot} = \sum_j F_{Nij} e_y^n \ ij$$



FIN