

Física computacional II

Autor: David Eduardo León

Tarea: Producto

Unidad: V

Simulación de dinámica molecular utilizando Makie en Julia

Resumen

En este proyecto, implemente una simulación de dinámica molecular utilizando el lenguaje de programación Julia y la biblioteca de visualización Makie. La dinámica molecular es una técnica computacional poderosa utilizada para estudiar el comportamiento de átomos y moléculas a lo largo del tiempo. Utilice un potencial de Lennard-Jones para modelar las interacciones entre partículas y aplique un algoritmo de integración numérica para simular el movimiento de las partículas en un entorno tridimensional. La visualización de la simulación se realizó utilizando la biblioteca Makie, que permite representaciones gráficas interactivas y dinámicas.

Introducción

La dinámica molecular es una herramienta crucial en la investigación científica, permitiendo simular sistemas físicos a nivel molecular para estudiar propiedades termodinámicas, estructurales y cinéticas. En este proyecto, me enfoque en simular un sistema de partículas interactuantes utilizando el potencial de Lennard-Jones, que modela la interacción entre átomos neutros. Emplee el método de integración numérica para resolver las ecuaciones de movimiento de Newton y obtener la trayectoria de cada partícula en función del tiempo.

Metodología

Modelado del potencial de Lennard-Jones

El potencial de Lennard-Jones se utiliza ampliamente para describir la interacción entre pares de átomos o moléculas neutras en una simulación de dinámica molecular. Este potencial se define como:

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

donde r es la distancia entre dos partículas, ϵ determina la profundidad del potencial, y σ la distancia a la cual el potencial es nulo.

Implementación en Julia

Utilice el lenguaje de programación Julia debido a su eficiencia en cálculos numéricos y su flexibilidad para la computación científica. Implemente el algoritmo de dinámica molecular en un bucle de simulación principal que itera sobre pasos de tiempo discretos. Cada paso de tiempo, calcule las fuerzas entre todas las partículas utilizando el potencial de Lennard-Jones y actualice las posiciones y velocidades de las partículas según las leyes de Newton.

Visualización con Makie

Makie es una biblioteca de visualización en Julia que ofrece capacidades avanzadas para crear gráficos interactivos y dinámicos. Utilice Makie para visualizar la simulación en un entorno tridimensional. Cada paso de tiempo, actualice la posición de las partículas en la visualización tridimensional para mostrar la evolución del sistema en tiempo real. Esto me permitió observar cómo las partículas interactúan y se mueven bajo la influencia de las fuerzas interatómicas.

Resultados

Realice la simulación de dinámica molecular para un sistema de N partículas, inicialmente distribuidas de manera aleatoria en un volumen finito. Observe la formación de estructuras ordenadas y la difusión de partículas a lo largo del tiempo, lo que refleja la dinámica de equilibrio del sistema bajo las condiciones simuladas. La visualización en tiempo real proporcionada por Makie permitió una observación detallada de estos fenómenos.

Conclusiones

Este proyecto demostró la aplicación efectiva de Julia y Makie para simular y visualizar sistemas físicos complejos, específicamente en el contexto de la dinámica molecular. La combinación de un potencial de interacción realista, un algoritmo de integración robusto y una visualización interactiva proporcionó una herramienta poderosa para estudiar sistemas de partículas a nivel molecular. Futuras extensiones podrían incluir la adición de condiciones de contorno periódicas más complejas y la incorporación de interacciones más realistas entre partículas.

Puede visualizar el proyecto en mi [GitHub](#)

Referencias

Julia Computing. (n.d.). Julia programming language. Retrieved July 17, 2024, from <https://julialang.org/>

Makie Development Team. (2024). Makie documentation. Retrieved July 17, 2024, from <https://makie.juliaplots.org/stable/>

Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (1987). *Computer simulation of liquids*. Oxford University Press.