

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos (Enunciado publicado en CAMPUS el 04/09/2023)

Para simular, animar y presentar el problema detallado más abajo se deberá utilizar la técnica de dinámica molecular regida por eventos con choques elásticos. El sistema no tiene campos externos por lo tanto las partículas siguen en movimiento rectilíneo uniforme entre colisiones. El máximo número de partículas $N > 200$ 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 18/09/2023 a las 10 hs. Los archivos deben nombrarse de la siguiente manera: **"SdS_TP3_2023Q2GXX_Presentación"** y **"SdS_TP3_2023Q2GXX_Codigo"**, donde **XX** es el número de grupo.

Sistema 1) Difusión de un gas 2D

Considerar un dominio de simulación que consiste en dos recintos unidos donde el primero tiene 0,09 m de ancho y 0,09 m de alto y, el segundo, 0,09 m de ancho y su alto es L como se ilustra en la Fig. 1.

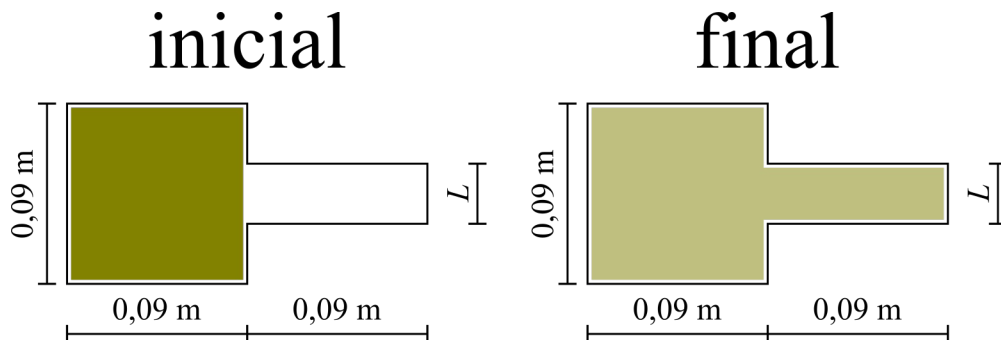


Figura 1: Esquema del sistema a simular: Evolución de un gas inicialmente confinado en el recinto izquierdo.

Considerar inicialmente N partículas de 0,0015 m de radio ubicadas en el lado izquierdo con velocidades de módulo 0.01 m/s y con direcciones al azar. Las masas de las partículas son todas iguales a 1 kg. Considerar $L = 0,03; 0,05; 0,07$ y 0,09 m.

1.1) Desde el instante inicial, medir la presión de ambos recintos. Graficar ambas presiones en función del tiempo y asegurarse que el sistema alcance el régimen de equilibrio. La presión (P) se calcula como el impulso transferido a las paredes por unidad de tiempo y por unidad de longitud. Detallar como considera la colisión entre las partículas y los vértices de las uniones de los recintos.

1.2) Luego, usando los resultados de las simulaciones en el estado estacionario, calcular la presión promedio en función de L y verificar si se cumple la ley de gases ideales ($P \cdot A = cte$) estudiando la curva de P vs A^{-1} . Donde A es el área total del sistema (ambos recintos).

1.3) Realizar el ajuste de un modelo ($P \sim A^{-1}$) de los resultados del punto anterior utilizando el método genérico visto en la Teórica 0.

1.4) Finalmente, para $L = 0.09$ m, calcular el coeficiente de difusión de las partículas. Para esto, calcular el desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo y realizar un ajuste lineal en el tiempo de interés. Para el ajuste utilizar el método genérico de la Teórica 0.