

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 22/09/2023)

Resolver, utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal, los problemas 1) y 2).

Las simulaciones tendrán un dt fijo e intrínseco de la simulación, Además considerar un dt_2 para imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) como *output* del sistema. Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el análisis y módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma, la velocidad de la animación y postprocesamiento no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La realización del T.P. consiste en:

Sistema 1) Solo deben presentarse los resultados (no incluir introducción, ni ecuaciones de integradores, ni implementación, ni animaciones, ni conclusiones) en la menor cantidad posible de diapositivas (2-3) (duración 1 minuto) y debe ubicarse antes de la presentación del sistema (2).

a- Presentación oral de 13 minutos de duración con las secciones indicadas en el documento `"../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) incluyendo ambos sistemas y el código fuente (d) deberán ser subidos a **campus**, antes del día 06/10/2023 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera:

"SdS_TP4_2023Q2GXX_Presentación" y **"SdS_TP4_2023Q2GXX_Codigo"**, donde **XX** es el **número de grupo**. Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 06/10/2023. No subir animaciones a campus.

Sistema 1) Oscilador Puntual Amortiguado (solución analítica)

Con la finalidad de comparar los errores de los distintos esquemas de integración se estudiará un sistema con sólo una partícula puntual: el oscilador amortiguado, cuya solución se conoce analíticamente.

Considerar la solución, los parámetros y las condiciones iniciales dadas en la diapositiva 36 de la teórica.

1.1) Integrar la ecuación de movimiento del oscilador utilizando por lo menos los esquemas:

- Gear predictor-corrector de orden 5
- Beeman
- Verlet original

1.2) En todos los casos graficar las soluciones analítica y numérica y calcular el error cuadrático medio (sumando las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos).

1.3) Estudiar como disminuye el error al disminuir el paso de integración (dt). Usar ejes semi-logarítmicos o logarítmicos para poder apreciar las diferencias de error a escalas pequeñas. ¿Cuál de los esquemas de integración resulta mejor para este sistema ?

Sistema 2) Velocidad vs. densidad en un sistema de partículas unidimensional

Eligiendo alguno de los escenarios unidimensionales que se ilustran en la Fig. 1, simular un sistema de partículas autopropulsadas con interacciones de colisión elásticas. Utilice el integrador que crea más conveniente para este problema de los caracterizados en el punto anterior. Los sistemas están compuestos por N partículas de radio $r = 2,25$ cm y masa $m = 25$ g. Las dimensiones del sistema son $L = 135$ cm y $R = 21,49$ cm, respectivamente. La propulsión de las partículas para el escenario 1 está dada por:

$$F_i^d = (u_i - v_i) / \tau ,$$

donde a_i es la aceleración de la partícula, v_i la velocidad, u_i es una constante que determina la velocidad límite de la partícula i y $\tau = 1$ s el tiempo de reacción característico. En caso de contacto, la fuerza que ejerce una partícula j sobre una i es:

$$F_{ij} = \kappa (|x_j - x_i| - 2r) \text{sign}[x_j - x_i] ,$$

donde $\kappa = 2500$ g/s² y $\text{sign}[\cdot]$ es la función signo. La ecuación de movimiento a resolver para cada partícula es:

$$m a_i = F_i^d + \sum_j F_{ij} .$$

En el caso del escenario 2, las ecuaciones de movimiento son:

$$\begin{aligned} F_i^d &= (u_i / R - \omega_i) / \tau , \\ F_{ij} &= \kappa (|\theta_j - \theta_i| - 2r/R) \text{sign}[\theta_j - \theta_i] , \\ m \dot{\omega}_i &= F_i^d + \sum_j F_{ij} , \end{aligned}$$

donde ω_i es la velocidad angular y se define como la derivada temporal de θ_i .

En ambos sistemas, los parámetros u_i son elegidos de manera aleatoria al inicio de cada simulación a partir de una distribución uniforme en el rango [9–12] cm/s y se mantienen constantes a lo largo de la misma. Las posiciones iniciales son aleatorias dentro del espacio considerado (sin superposición) y las velocidades iniciales son iguales al parámetro $v_i(0) = u_i$ y $\omega_i(0) = u_i/R$, respectivamente a cada sistema.

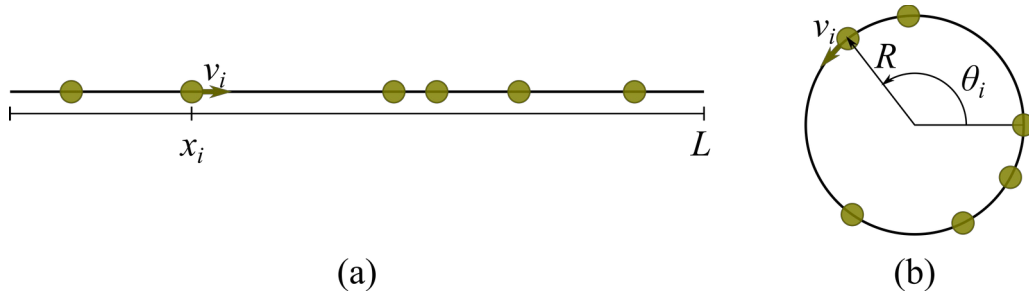


Figura 1: Esquemas propuestos del sistema a simular: partículas autopropulsadas que se desplazan en un espacio unidimensional.

1) Universos paralelos

En un primer estudio, tomando $N = 25$, simular el sistema con idénticas condiciones iniciales (posiciones y velocidades iniciales) y parámetros pero distintos pasos de integración $\Delta t = 10^{-n}$ ($n = 1, 2, 3, 4$ y 5).

1.1) Considerar un tiempo de simulación final $T_f = 180$ s y calcular

$$\Phi^k(t) = \sum_{i=1}^{N_b} \|r_i^{k+1}(t) - r_i^k(t)\| ,$$

donde r_i^k es la posición de la partícula i a tiempo t simulada con $\Delta t = 10^{-k}$ ($k = 1, 2, 3$ y 4) y decidir cuál es el Δt más adecuado para este problema. Para esto, graficar las curvas obtenidas de $\Phi^k(t)$. ¿Sería posible determinar Δt a partir de la conservación de energía del sistema?

2) Velocidad media

Ahora, considerando el Δt determinado anteriormente y el mismo T_f , realizar un estudio del sistema variando el número de agentes.

2.1) Para $N = 5, 10, 15, 20, 25, 30$, calcular la velocidad promedio del sistema en función del tiempo y luego el promedio temporal en el estacionario como función de N .

2.2) Calcular la distribución de probabilidades de velocidades considerando todas las partículas durante el régimen estacionario para los casos $N = 10, 20$ y 30 . Comparar las distribuciones resultantes con la inicial.

2.3) (opcional) Repetir los puntos 2.1 y 2.2 teniendo en cuenta de agregar las partículas al sistema de forma ordenada (creciente o decreciente) respecto a sus valores u_i .

2.4) (opcional) Para los casos del punto 2.1) calcular la densidad individual de cada partícula en cada instante como $\rho_i = \frac{1}{d_{ij} + d_{ik}}$, donde j y k son las partículas primeras vecinas anterior y posterior de i . Con esta información crear una nube de datos $(v_i(t), \rho_i(t))$ para todo i y para todo t . Realizar un promedio de ventana para suavizar los resultados.