

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 16/04/2019)

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 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.

La entrega del T.P. consiste en:

a- Presentación de, como máximo, 15 minutos de duración (tipo powerpoint).
Con las secciones:

- Fundamentos (1 diapositiva);
- Implementación (Arquitectura del Código Implementado);
- Resultados (con figuras, tablas, animaciones);
- Conclusiones.

Todos los alumnos del grupo deben estar en condiciones de responder preguntas de cualquier parte de la presentación y del trabajo en general. Además, durante la presentación oral se podrá solicitar una demostración en vivo, del funcionamiento del código.

b- Archivos *.avi de las animaciones generadas. Colorear a las partículas según el módulo de su velocidad u otra variable de interés.

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 03/05/2019 a las 9 hs. Los Archivos deben nombrarse de la siguiente manera:

"SdS-TP4-GX_Presentación" y "SdS-TP4-GX_Codigo", donde X es el número de grupo.

Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 03/05/2019. 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 35 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
- Elegir alguna de las variantes de Verlet.

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 esquema de integración resulta mejor para este sistema ?

Importante: NO realizar animaciones de este sistema de una partícula.

Sistema 2) Gas de Lennard-Jones

Considerar un gas de Lennard-Jones formado por partículas cuyos parámetros adimensionales son $r_m = 1$, $\varepsilon = 2$, $m = 0.1$, y velocidad inicial $v = 10$. La distancia de corte del potencial es $r = 5$. La caja que contiene al gas mide 200 unidades de alto x 400 de ancho con un tabique que divide a la caja en dos mitades de 200 x 200 y que presenta un orificio central de 10 unidades (cualitativamente similar a la Fig.1 del T.P. Nro.3). Inicialmente todas las partículas se encuentran en el lado izquierdo de la caja y al evolucionar el sistema estas irán difundiendo hacia la otra mitad. Las partículas se encuentran confinadas en la caja por lo tanto la condición de contorno es de paredes rígidas.

2.1) Simular la evolución de $N=1000$ partículas, usando alguno de los integradores vistos en la teórica. Elegir el paso temporal dt tal que los resultados sean consistentes.

2.2) Calcular durante la evolución, la energía total del sistema (cinética + potencial) y compararla para los distintos dt elegidos. ¿Cual es el mejor para este sistema ? ¿Cual fue el criterio utilizado?

2.3) Usando el mejor dt , dejar evolucionar al sistema hasta que la cantidad de partículas a ambos lados del tabique se estabilice. Graficar la fracción de partículas en el recinto izquierdo (f_p) en función del tiempo.

2.4) Graficar la distribución de velocidades en distintos momentos de la simulación y, en particular, al final de la misma.

2.5) Aumentar N lo máximo posible para que la simulación se realice en un tiempo razonable (~ hora). El criterio de corte es que la fracción (f_p) oscile alrededor del valor $f_p \sim 0.5$. Con este N repetir los puntos 2.2) a 2.4).

2.6) Realizar animaciones del sistema simulado.