

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos

(Enunciado publicado en CAMPUS el 05/04/2019)

Elegir uno de los 3 sistemas que se detallan más abajo para simular, animar y presentar. Se deberá utilizar la técnica de dinámica molecular regida por eventos con choques elásticos. Los sistemas no tienen campos externos por lo tanto las partículas siguen movimientos rectilíneos uniforme entre colisiones. En todos los problemas  $N$  es el número de partículas y debe ser el máximo posible que permita simulaciones en tiempos razonables.

En todos los casos estudiar distintos comportamientos del sistema variando  $N$ .

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  $dt$  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.

La entrega del T.P. consiste en:

a- Presentación de, como máximo, 15 minutos de duración (tipo powerpoint). Con 3 secciones:

1- Fundamentos; 2-Implementación; 3-Resultados (con gráficos, tablas, animaciones) y 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.

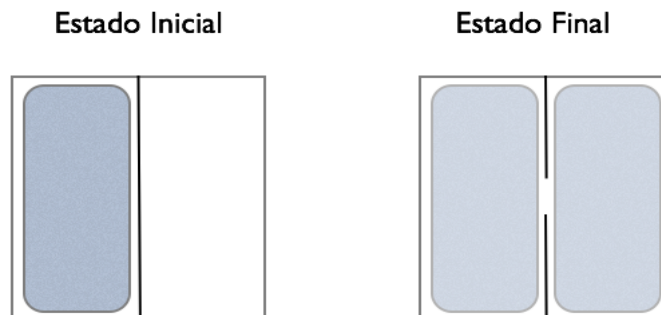
#### Fecha y Forma de Entrega:

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser presentados **a través de campus**, antes del día 04/09/2018 a las 9 hs. Los Archivos deben nombrarse de la siguiente manera: **"SdS-TP3-GX\_Presentación"** y **"SdS-TP3-GX\_Codigo"**, donde X es el número de grupo.

Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 12/04/2019.

## Sistema 1) Difusión de un gas 2D

Sea un dominio de simulación de 0.24 m de ancho x 0.09 m de alto contiene dos recintos iguales separados por un tabique con una apertura central de 0.006 m como se muestra 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 modulo 0.01 m/s y con direcciones al azar. Las masas de las partículas son todas iguales a 1 kg.

1.1) Calcular la fracción de partículas ( $fp$ ) en ambos lados en función del tiempo y usar como criterio de corte de la simulación, cuando  $fp \sim 0.5$ .

1.2) Luego usando los resultados de la simulación. Graficar la evolución de  $fp$  y registrar el tiempo en que se llega al equilibrio para distintas (al menos 3) configuraciones del sistema, variando el ancho de la apertura. Para cada configuración, simular varias realizaciones y presentar de manera adecuado los resultados.

1.3) Verificar si, en el equilibrio, se cumple la ley de gases ideales ( $P.V \sim T$ ), generando una curva de  $P$  versus  $T$ . El volumen ( $V$ ) es fijo. La presión ( $P$ ) se calcula como el impulso transferido a las paredes por unidad de tiempo y por unidad de longitud. Cómo se cambia la temperatura del sistema ?

1.4) Detallar como considera la colisión entre las partículas y los vértices de las paredes.

## Sistema 2) Barrera en fluido 2D

Considerar un dominio rectangular de 1 m x 0.5 m con una barrera vertical de largo  $L$  análoga a la Fig.1 del enunciado del TP Nro.2.

Condiciones Iniciales:

$N$  Partículas de 0.005 m de radio colocadas al azar con distribución uniforme en el dominio. Las velocidades de las partículas también deben tener una distribución uniforme en los rangos:  $0 < v_x < 0.1$  m/s y  $-0.1$  m/s  $< v_y < 0.1$  m/s . Las masas de las partículas son todas iguales a 1 g.

Condiciones de Contorno:

En la dirección  $y$  (vertical) considerar paredes rígidas. Las partículas colisionan con los límites inferior y superior del dominio.

En la dirección  $x$  (horizontal) considerar que las partículas que salen del sistema por el lado derecho ( $x = 1$  m) son eliminadas. Y por el lado izquierdo ( $x = 0$  m) ingresa un caudal de partículas con velocidad  $v_x = 0.05$  m/s,  $v_y = 0$ . Este caudal debe ser igual al caudal de salida de forma tal de mantener el nro. total de partículas del sistema constante.

2.1) Realizar simulaciones considerando  $L = 0.05, 0.1, 0.2$  y crear animaciones para cada caso. La

longitud de la simulación será tal que el sistema se estabilice en cuanto a los patrones de flujo observados.

2.2) Definir un observable que mida el grado de turbulencia del sistema. Graficarlo en función de distintos  $N$  y valores iniciales de  $v_x$ .

2.3) Generar el Histograma o Distribución de Probabilidades de tiempos de vuelo (entre colisiones) para cada caso teniendo en cuenta todas las colisiones.

2.4) Detallar como considera la colisión entre las partículas y los vértices del tabique.

### **Sistema 3) Movimiento Browniano**

Considerar un dominio cuadrado de lado  $L=0.5$  m. En su interior colocar  $N$  partículas pequeñas de radio  $R_1=0.005$  m y masa  $m_1=0.1$  g y una partícula grande de radio  $R_2=0.05$  y masa  $m_2=100$  g.

Condiciones Iniciales:

Las posiciones de todas las partículas deben ser al azar con distribución uniforme dentro del dominio. Las partículas pequeñas deben tener velocidades con una distribución uniforme en el rango:  $|\mathbf{v}| < 0.1$  m/s. La partícula grande debe tener velocidad inicial  $\mathbf{v}_2 = 0$  y su posición inicial en  $x=L/2, y=L/2$

Condiciones de Contorno:

Sistema confinado, es decir, todas las paredes son rígidas.

Hacer evolucionar el sistema y calcular:

3.1) Frecuencia de colisiones (Nro. de colisiones por unidad de tiempo); Promedio y distribución de probabilidades (o alternativamente, PDF) de tiempos de colisión.

3.2) Distribución de probabilidades (o alternativamente, PDF) del módulo de las velocidades en el último tercio de la simulación. Comparar con la PDF del estado inicial del sistema (a  $t=0$ ).

3.3) Graficar la trayectoria de la partícula grande para distintas temperaturas. Cómo se cambia la temperatura en el sistema simulado?

3.4) Estimar el coeficiente de difusión de la partícula grande (y de alguna de las pequeñas) calculando el desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo. Para la partícula que se estudia, solo se deben considerar trayectorias hasta que choquen con las paredes.