

## **Simulación y Animación de Sistemas Multipartículas**

### **Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal**

(Enunciado publicado en IOL el 01/10/2014)

Resolver los siguientes problemas usando dinámica molecular regida por el paso temporal.

La presentación comprende una demostración en vivo del funcionamiento del código y la entrega de los códigos fuente y archivos de video con animaciones seleccionadas del segundo sistema simulado.

Durante la demostración en vivo se podrán pedir cambios de parámetros para realizar nuevas simulaciones.

No está permitido el uso de librerías o toolkits.

#### *Fecha y Forma de Entrega:*

El plazo máximo para la presentación será el lunes 15/10/2014 a las 17:00 hs. Los archivos que contengan el código fuente deberán ser enviado por mail a dparisi@itba.edu.ar. Las animaciones serán copiadas a un dispositivo de almacenamiento provisto por la cátedra.

#### **Sistema 1) Oscilador Puntual Amortiguado (solución analítica)**

Con la finalidad de comparar los errores cometidos por 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 30 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 y calcular el error total (sumando los errores de todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos temporales si fueran distintos para los distintos esquemas).

¿Cuál esquema de integración resulta mejor para este sistema ?

#### **Sistema 2) Gas de Lennard-Jones**

Considerar un gas de Lennard-Jones formado por partículas cuyos parámetros adimensionales son  $r_m = 1$ ,  $\epsilon = 1$  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 (algunas horas). El criterio de corte es que la fracción ( $f_p$ ) (punto c) 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.

### **Sistema 3) (Opcional) Formación del Sistema Solar**

Usando alguno de los esquemas de integración ya implementados, simular el nacimiento del sistema solar simulando  $N$  partículas que orbitan alrededor del sol y que se irán agrupando en "planetas" a medida que evoluciona el sistema. Ensayar con  $N=100$ , 1000 y 10000 partículas.

Considerar que las velocidades tangenciales iniciales sean tales que todas tengan el mismo momento angular es decir que  $|v|=L/r$ , con  $L$  tal que las partículas no colapsen al Sol ni se escapen todas de su influencia gravitatoria.

El rango inicial de distancias al Sol es desde  $10^9$  m hasta  $10^{10}$  m. La masa total de las partículas es igual a la del Sol ( $2 \cdot 10^{30}$  kg). Cuando dos partículas distan menos de  $10^8$  m, las mismas colapsan y generan una nueva partícula cuya masa es la suma de las anteriores y su posición es la del centro de masa de las anteriores y su velocidad tangencial sea tal que el momento angular se conserve.

3.3) Elegir el paso temporal ( $dt$ ) óptimo para simular el sistema.

3.2) Calcular y graficar las energías cinética, potencial y total del sistema para todo instante. Verificar que la energía total se mantiene constante.

3.3) Realizar animaciones del sistema simulado.