

Física Estatística Computacional - Projeto 5

Jorge Augusto Salgado Salhani

Novembro 2018

1 Introdução

Fenômenos físicos em escala micro e macro decorrem de interações de inúmeros agentes através de forças de contato ou a distância. Muitos fenômenos emergem da simples presença de mais de um corpo em um dado sistema. Grandes blocos massivos de terra flutuantes, por exemplo, deformam o espaço do vácuo celestial e, quando suficientemente próximos de outros similares, dizem aos demais como dançar de modo harmonioso e síncrono. [1] De modo análogo, em escala micro, moléculas dispersas em meio aquoso apresentam campos magnéticos fortes o suficiente para que, quando outras o percebem, aglomerados moleculares são formados, gerando estruturas mais estáveis que suas partes individuais, já que sua movimentação é restringida pelo complexo do qual passam a fazer parte. Fenômenos de polimerização são alguns dos resultados dessas aglomerações espontâneas.

Moléculas são pequenas estruturas estáveis compostas por átomos. Algumas das moléculas biológicas mais estáveis são proteínas, compostas por múltiplas moléculas menores, denominadas aminoácidos, acopladas por polimerização (como acima referido). [2] Estas moléculas são aproximadas por forças magnéticas que "surgem" devido à presença de densidades eletrônicas em cada um dos átomos que as compõe. Complexos proteicos são, portanto, o resultado de múltiplas camadas de fenômenos emergentes.

O estudo de comportamento de sistemas dinâmicos pode ser tomado de modo teórico através de abordagens clássicas e/ou quânticas. Neste estudo os corpos são tratados através da mecânica clássica newtoniana que, apesar de não ser a mais precisa na descrição de estruturas em escala molecular, apresenta descrição bem consolidada. Interações entre múltiplos corpos, além disso, evocam uma outra área do conhecimento, a termodinâmica, capaz de descrever propriedades do sistema pelo comportamento médio dos mesmos. [3]

Tendo em vista estas descrições, modelos computacionais de simulação de inúmeros corpos possuem grande importância de descrição de fenômenos físicos, porém analisar dinâmica de sistemas de N partículas em regime clássico ou quântico requer grande poder de processamento, uma vez que é necessário a contabilização de equações de movimento e interação para cada ente físico presente no sistema.

A dinâmica molecular que aqui será apresentada garante melhor compreensão do comportamento molecular auto-organizável na presença de potencial atrativo inerente a cada um dos entes físicos, com fenômenos emergentes descritos em termos de variáveis de estado termodinâmicas, em especial a temperatura que, como será visto ao longo do trabalho, relaciona-se com a energia do sistema e pode ser descrita como uma simples característica consequente da agitação molecular.

2 Objetivo

Este trabalho visa a descrição física de dinâmica de múltiplos corpos sujeitos a um potencial atrativo de curta distância, denominado potencial de Lennard-Jones. Aspectos qualitativos e quantitativos do comportamento das moléculas serão investigados utilizando dinâmica newtoniana com aproximações discretas para a possibilidade de modelagem computacional. Características como distribuição de velocidades, energia, temperatura e mudança de estado serão observadas no transcorrer do tempo em um espaço de coordenadas reais.

3 Metodologia

Considerando que as partículas apresentem movimento restrito a um plano, a posição da i -ésima partícula em um dado tempo t é descrita através da coordenada cartesiana $\vec{r}_i^t = (x_i^t, y_i^t)$ com equações de movimento dadas por

$$\frac{d\vec{r}_i^t}{dt} = \vec{v}_i^t \quad (1)$$

e

$$\frac{d^2\vec{r}_i^t}{dt^2} = \frac{d\vec{v}_i^t}{dt} = \vec{a}_i^t, \quad (2)$$

onde $\vec{v}_i^t = (v_{xi}^t, v_{yi}^t)$ é o vetor velocidade e $\vec{a}_i^t = (a_{xi}^t, a_{yi}^t)$, vetor aceleração, ambos respectivos ao corpo i no instante t .

Para que seja possível contabilizar a dinâmica de cada partícula através de um modelo computacional, devemos discretizar as derivadas. Uma das estratégias bastante empregadas é através do método de Euler. No entanto, como é responsável por uma aproximação das equações contínuas apenas em primeira ordem, os erros associados a cada medida é intensificado para muitos corpos. Logo, utilizamos a aproximação pelo método de Verlet. Sua forma assemelha-se àquela apresentada por Euler-Cromer, mas considerando termos anterior, atual e posterior da variável em análise, ou seja

$$\frac{d^2\vec{r}_i^t}{dt^2} \approx \frac{\vec{r}_i^{t+1} + \vec{r}_i^{t-1} - 2\vec{r}_i^t}{(\Delta t)^2}, \quad (3)$$

com Δt intervalo temporal fixo. Substituindo a aceleração dada pela equação (2) e rearranjando com evidência à posição da partícula em $t + 1$, temos

$$\vec{r}_i^{t+1} \approx 2\vec{r}_i^t - \vec{r}_i^{t-1} + \vec{a}_i^t(\Delta t)^2 \quad (4)$$

.

Utilizando a dinâmica newtoniana para um "corpo" pontual de massa m , sabemos que

$$\epsilon_o = 0.1 \quad (5)$$

considerando que a aceleração da partícula i é devido à interação da mesma com todas as $N - 1$ restantes. A força $\vec{F}_{i,j}^t = \vec{F}(\vec{r}_{i,j}^t)$, onde $\vec{r}_{i,j}^t = \vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t$, é conhecida para dado potencial $V_{i,j}^t = V(\vec{r}_{i,j}^t)$ através da relação $\vec{F}(\vec{r}_{i,j}^t) = -\nabla V(\vec{r}_{i,j}^t)$. Para o potencial de Lennard-Jones

$$V(\vec{r}_{i,j}^t) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|} \right)^6 \right], \quad (6)$$

a força correspondente, assumindo $\epsilon = \sigma = 1$, como será explicado mais detalhadamente na seção dos resultados obtidos, é dada por

$$\vec{F}_{i,j}^t = \frac{\partial V(\vec{r}_{i,j}^t)}{\partial \vec{r}_{i,j}^t} = 24 \left[\frac{2}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|^{13}} - \frac{1}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|^7} \right]. \quad (7)$$

Deste modo, destacando a aceleração \vec{a}_i^t da equação (5), temos

$$\vec{a}_i^t = \frac{24}{m} \sum_{i \neq j}^N \left[\frac{2}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|^{13}} - \frac{1}{|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|^7} \right], \quad (8)$$

que, associada à equação (4) do modelo de Verlet, prediz a posição no instante $t + 1$ dadas condições iniciais para $t - 1$ e t . Para que as forças sejam computadas de forma que a distância entre as partículas $|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t|$ não seja grande o suficiente para a aceleração \vec{a}_i^t tenha alcance infinito, caso $|\vec{r}_i^t - \vec{r}_j^t| \geq 3$, $\vec{a}_i^t = 0$ e consequentemente não há força sobre a partícula i devido j . O valor 3 é escolhido por, como podemos observar pela figura 1, o potencial ser aproximadamente nulo quando próximo ou maior que 3.

Tendo em vista a descrição física acima, para descrever o sistema usaremos uma matriz retangular de dimensões $(N, 6)$, onde cada linha i representa uma partícula e as colunas, as coordenadas $x_i^{t-1}, y_i^{t-1}, x_i^t, y_i^t, x_i^{t+1}, y_i^{t+1}$.

A princípio são dadas posições aleatórias para a coordenada $(x_i^{t-1}, y_i^{t-1}) = (x_i^0, y_i^0)$ para as N linhas da matriz. Estas são escolhidas como números reais presentes no plano quadrado de lado L sobre o qual os corpos serão

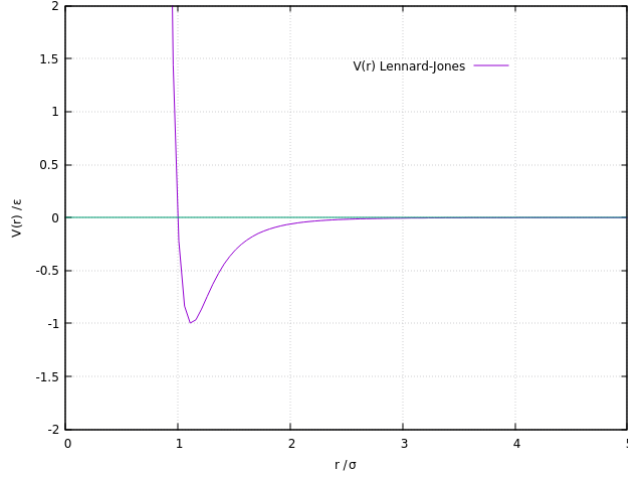


Figure 1: Potencial de Lennard-Jones $V(r)$ onde r representa a distância entre partículas $\vec{r}_{i,j}^t$, onde os índices foram omitidos. Podemos observar a aproximação para o valor de potencial nulo, representado pela reta tracejada em coloração verde, para $r \approx 3$.

depositados, atentando para que a separação entre elas $|\vec{r}_i^0 - \vec{r}_j^0|$ seja controlável para que a repulsão entre elas não seja demasiadamente alta. Na mesma iteração linha a linha a subsequente coordenada $(x_i^t, y_i^t) = (x_i^1, y_i^1)$ é obtida por meio de

$$\vec{r}_i^1 = \vec{r}_i^0 + \vec{v}\Delta t, \quad (9)$$

onde consideramos que toda partícula apresentará velocidade inicial $|\vec{v}|$ constante mas variando aleatoriamente seu sentido e direção. Logo, este vetor pode ser descrito em termos de $\vec{v}_i = [v\cos(\theta_i), v\sin(\theta_i)]$, o que implica na escolha de valores aleatórios tais que $\theta_i \in [0, 2\pi]$. Dispondo das condições iniciais $\vec{r}_i^0 = (x_i^0, y_i^0)$ e $\vec{r}_i^1 = (x_i^1, y_i^1)$, a posição $\vec{r}_i^2 = (x_i^2, y_i^2)$ pode ser calculada, assim como todas as subsequentes $\vec{r}_i^{t+1} = (x_i^{t+1}, y_i^{t+1})$ até um tempo $t = T$ final pré estabelecido.

Para analisar o sistema em termos da energia cinética de cada partícula cuja relação se faz através da sua velocidade instantânea ao quadrado, utilizamos das posições \vec{r}_i^{t+1} e \vec{r}_i^{t-1} e da equação

$$\vec{v}_i^t = \frac{\vec{r}_i^{t+1} - \vec{r}_i^{t-1}}{2\Delta t}, \quad (10)$$

cujo método aplicado corresponde a uma aproximação em primeira ordem da equação (1).

Com a velocidade obtida de cada uma das partículas do sistema é possível a determinação da temperatura do sistema fazendo uso do teorema de equipartição de energia. Sendo a energia cinética instantânea de cada partícula dado por

$$E_i^t = \left(\sqrt{\frac{m}{2}} v_i^t \right)^2 \quad (11)$$

pelo teorema da equipartição de energia, sabemos que cada termo quadrático da energia corresponde a energia $k_B T$, onde $k_B \approx 1,38 \cdot 10^{-23} J/K$ em unidade de energia por temperatura, temos que

$$k_B T = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \frac{[(v_{xi}^t)^2 + (v_{yi}^t)^2]}{N}. \quad (12)$$

4 Resultados

Através das equações de movimento individuais devido à força exercida pelos $N - 1$ pares de partículas, a evolução do sistema no tempo foi avaliada, com condições distintas de acordo com a quantidade física a ser caracterizada.

Em primeira análise, para que o sistema finito do modelo computacional mimetize um ambiente infinito e contínuo, impomos condições periódicas sobre a matriz (L, L) . Par $L = 20$, qualitativamente a trajetória de cada uma das $N = 10$ e $N = 20$ partículas para tempos curtos foram calculadas, como pode ser visto na figura (2), onde os círculos pretos representam a posição final das massas após um tempo $T = 5$, contabilizando o intervalo temporal $\Delta t = 0.01$ por iteração, e os marcadores em roxo, as posições sobre as quais cada partícula esteve presente em tempos anteriores. O potencial confere às partículas alguns movimentos interessantes de oscilação próximas a posição de equilíbrio.

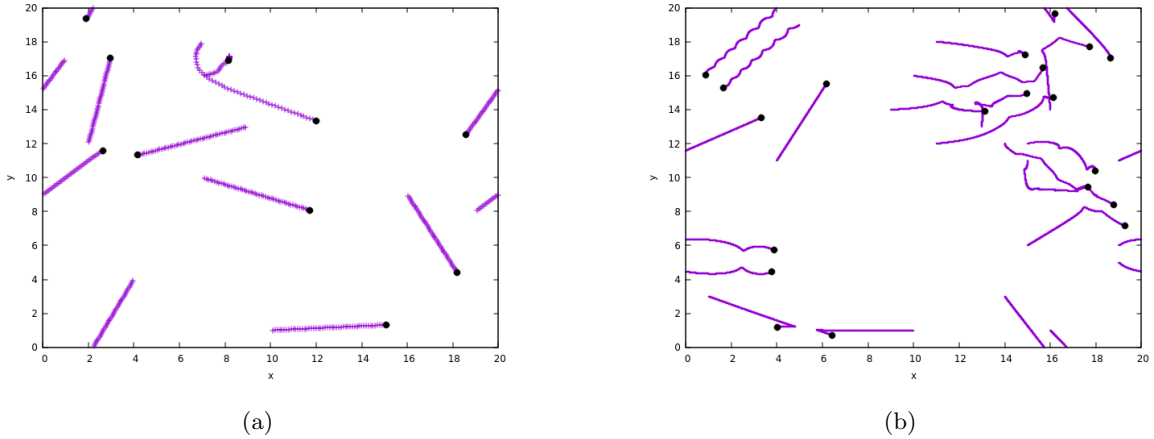


Figure 2: Trajetória das N partículas em uma caixa bidimensional com condições de contorno toroidais considerando (a) $N = 10$, $\Delta t = 0.1$, e (b) $N = 20$, $\Delta t = 0.01$. Em ambas a velocidade inicial é unitária $v = 1$ com trajetórias apresentadas por pontos em coloração roxo enquanto a posição final em $T = 5$ é marcado com um círculo preto.

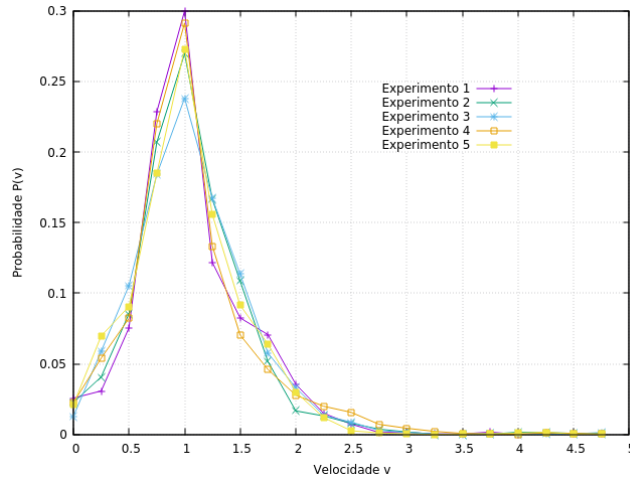


Figure 3: Distribuição da densidade de probabilidade da velocidade para cada uma das 5 simulações realizadas para $N = 100$ partículas, $T = 10$ tempo total e $\Delta t = 0.01$ intervalo de cada passo temporal.

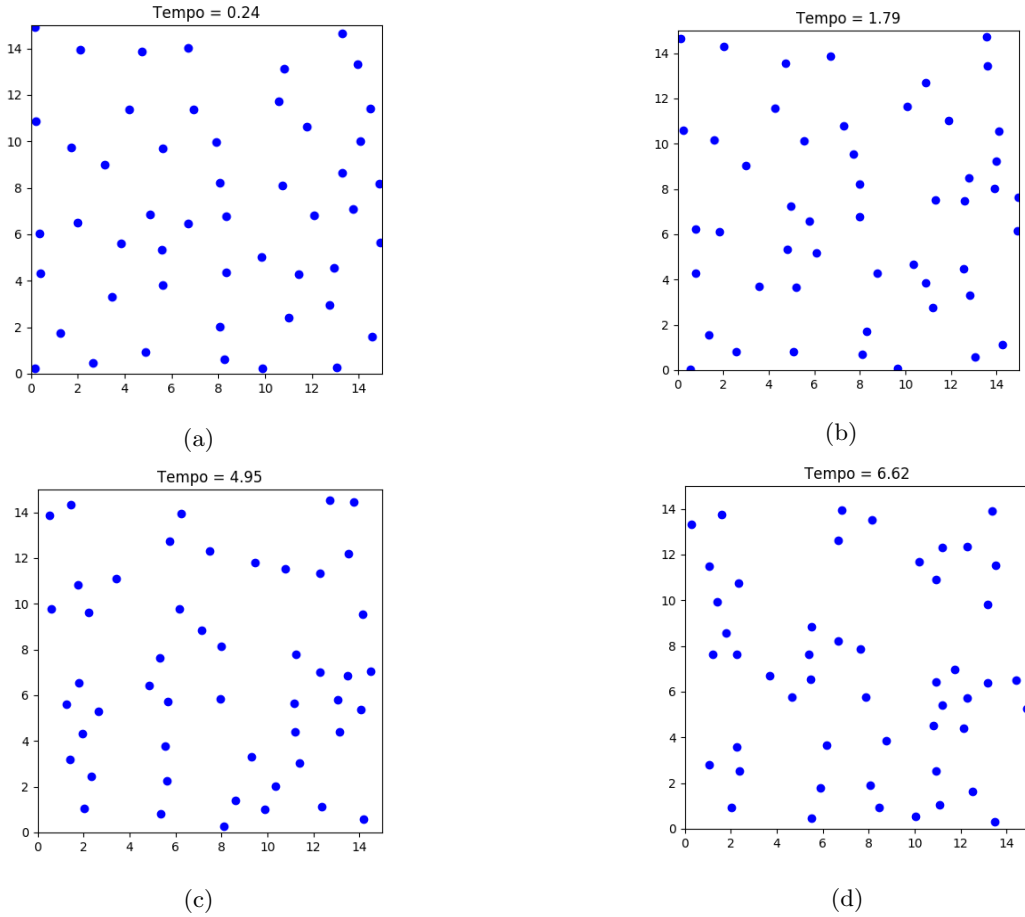


Figure 4: Evolução Temporal da posição das $N = 50$ partículas confinadas a um espaço de dimensão (15,15) com bordas reflexivas após (a) $t = 0.24$, (b) $t = 1.79$, (c) $t = 4.95$, (d) $t = 6.62$ considerando $\Delta t = 0.001$ e $v_0 = 0.1$. A aglutinação das partículas é observada conforme o tempo avança característico do potencial atrativo.

Como apresentado pela equação (6), o potencial atrativo é descrito em termos das constantes σ e ϵ , em unidades de distância e energia, respectivamente. Caso seja considerado a mudança de variável $V^*(r) \equiv V(r)/\epsilon$ e $r^* \equiv r/\sigma$, torna-se mais claro que cada constante apresenta a magnitude da distância e energia associadas ao potencial. Tratando ambas como unitária, a dimensão do potencial e da distância podem ser tomadas sem necessidade de manter uma constante multiplicativa a cada termo, facilitando a modelagem do sistema.

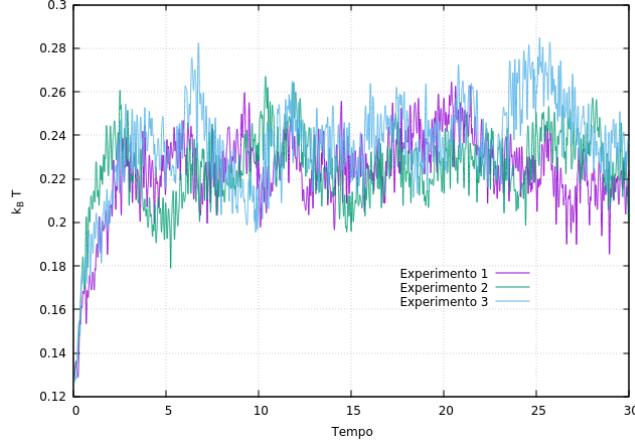


Figure 5: Evolução temporal da energia cinética média. De acordo com o teorema da equipartição dado pela equação (12), a energia pode ser expressa por $k_B T$. É possível notar a redução do aumento da distribuição de energia após algum tempo, já que todas as partículas passam a se aglomerar. Em todos os experimentos as condições foram $v_0 = 1$ e $\Delta t = 0.001$.

Para que seja possível quantificar a dinâmica de forma mais adequada, podemos obter a densidade de probabilidade da velocidade das partículas. Ou seja, a probabilidade de haver uma partícula com velocidade v_i^t no intervalo $[v_i^t, v_i^t + \Delta v_i^t]$. Para um espaçamento de $\Delta v_i^t = 0.25$, 5 experimentos foram feitos e o resultado pode ser observado na figura (3).

Notamos que a distribuição é compatível com a forma da distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann, cuja dependência é dada pela relação

$$P(v) \approx \frac{v^2}{k_B T} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2k_B T}\right\}, \quad (13)$$

que corrobora o resultado obtido pelo modelo aqui apresentado.

Como próxima análise, a temperatura do sistema foi avaliada lançando uso do teorema da equipartição de energia, dado pela equação (12). Neste caso, mantivemos o sistema com paredes rígidas, as quais transferem todo momento da colisão de volta às partículas. Este sistema foi estabelecido para que possa ser realizado o experimento de expansão livre, que será descrito em sequência e suas temperaturas possam ser comparadas de modo semelhante.

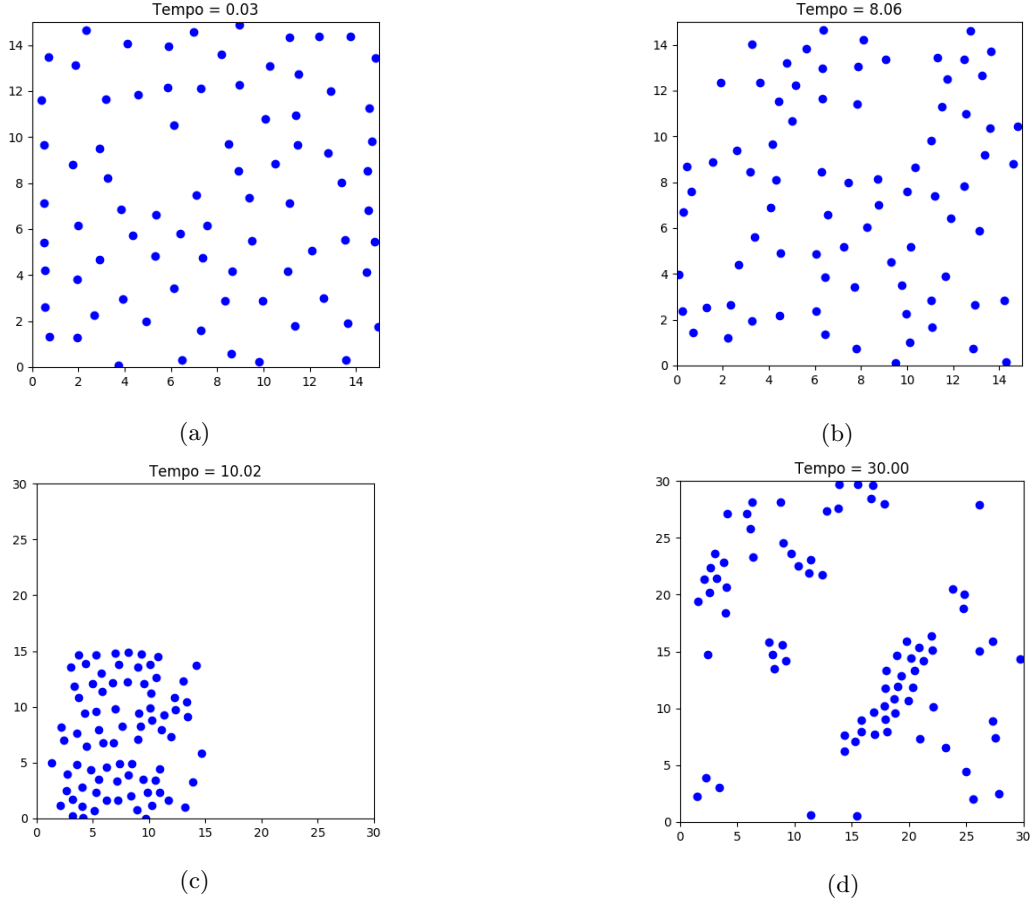


Figure 6: Evolução Temporal da posição das partículas confinadas a um espaço de dimensão (15, 15) com bordas reflexivas após (a) $t = 0.03$, (b) $t = 8.06$, (c) $t = 10.02$, (d) $t = 30.00$ considerando $\Delta t = 0.001$ e $v_0 = 1$. Quando $t = 10$, há aumento do espaço para (30, 30), em tentativa de simular expansão livre.

Condicionando as partículas a possuírem uma velocidade inicial de $v_0 = 0.05$ com espaços temporais $\Delta t = 0.02$, a evolução temporal dos $N = 20$ corpos em um espaço (10, 10) pode ser visualizada na figura (4) para múltiplos tempos. Fica claro a aglomeração das mesmas após algum tempo devido ao potencial atrativo sobre as quais estão submetidas. Este fenômeno pode ser idealizado como a emergência de cristalização, presente para baixas velocidades e, conseqüentemente baixas temperaturas. Contabilizando para cada tempo transcorrido a velocidade quadrática média, podemos estimar o valor do produto $k_B T$. A figura (5) mostra essa relação para 3 experimentos distintos.

Observamos a estabilização do produto em valores $k_B T \approx 0.24(4)$. Este resultado possui boa aproximação com o resultado exato esperado de $k_B T = 0.25$, uma vez que a massa de cada partícula é unitária $m = 1$ e a média $\langle (v_{xi}^t)^2 + (v_{yi}^t)^2 \rangle = 0.5$.

Mantendo o mesmo sistema, ao atingir o tempo $t = 10$ o espaço é expandido de (15, 15) para (30, 30), de modo a simular uma expansão livre. Na figura (6) podemos observar a evolução temporal da disposição das $N = 50$ partícula antes e após a expansão, sendo perceptível a formação de aglomerados mais individualizados, já que a

distancias maiores, não existe forças entre os corpos. De modo quantitativo, a energia, dado pelo produto $k_B T$, sofre uma leve queda em seu valor mas volta a se estabilizar próximo a 0.24 (figura (9)) similar ao resultado da dinâmica em espaço restrito. A redução da temperatura em consequência à diminuição da energia pode ser explicada através do aumento do distanciamento das partículas que, na ausência de forças atuantes, não têm sua velocidade aumentada devido ao potencial repulsivo para pequenas distâncias inter-partículas. Porém, algum tempo depois da expansão livre, a energia tende ao equilíbrio anterior à expansão, visto que as partículas passam a se aglutinar e voltarem a estar sujeitas ao potencial de Lennard-Jones, observado na figura (6).

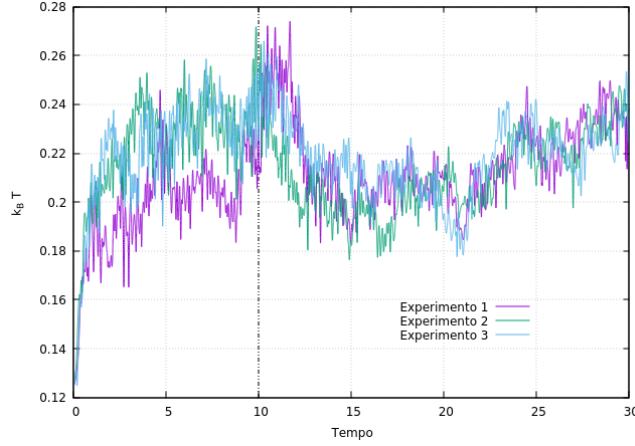


Figure 7

Figure 8: Evolução temporal da energia cinética média expressa por $k_B T$, de acordo com o teorema de equipartição da energia. Os limites do sistema de (15, 15) para (30, 30) são alterados após $t = 10$, representados pela reta tracejada em preto. Em todos os experimentos as condições foram $v_0 = 1$ e $\Delta t = 0.001$.

Em última análise, transições de fase foram simuladas considerando que, ao aumentar a velocidade das partículas presentes no sistema, aumenta-se a temperatura (como já mencionado nos resultados acima). Com este conceito, mantivemos a progressão do sistema até um ponto de equilíbrio térmico (atingido por volta de $T = 10$, como na figura (5)) e, dentro de um intervalo de tempo fixo $\delta t = 0.05$, todo corpo adquiriu velocidade $\delta v = 0.01$ a cada tempo $\Delta t = 0.001$, com acréscimo final de $\Delta v = 0.5$ à velocidade inicial $v = 1$. Os resultados qualitativos são mostrados na figura (10). Neles observamos o estado cristalino - regiões de aglomeração de partículas - em tempos menores que $t = 10$, e o estado líquido - partículas dispersas - para $t > 10$. Ao avançar mais no tempo, o sistema ainda é capaz de cristalizar, porém com maior energia que inicialmente. A recristalização somente é possível devido a contenção forçada do sistema com paredes reflexivas, que pode ser análogo ao consequente aumento da pressão interna.

O mesmo processo de "aquecimento" do sistema foi realizado 2 vezes ao longo de 30 unidades de tempo. Os resultados de 3 experimentos são mostrados na figura (11). O aquecimento realizado é suficientemente pequeno para que as partículas não tenham velocidade para aproximarem-se muito e ganharem aceleração exageradamente grande, o que reflete nos patamares estáveis de energia resultantes após os tempos $t = 10$ e

$t = 20$ de aquecimento.

As regiões estáveis da figura (11) apresentam energias próximas a $k_B T = 0.2$, em $t \in [0, 10)$, $k_B T = 0.5$, em $t \in (10, 20)$ e $k_B T = 1.3$, em $t \in (20, 30]$. Sabendo que a velocidade média em cada trecho é, respectivamente, $\langle (v_{xi}^t)^2 + (v_{yi}^t)^2 \rangle = 0.5$, $\langle (v_{xi}^t)^2 + (v_{yi}^t)^2 \rangle = 1$, pode-se estimar que em cada caso a energia apresenta valores próximos aos resultados teóricos dados por $k_B T \approx 0.25$, em $t \in [0, 10)$, $k_B T \approx 0.56$, em $t \in (10, 20)$. No intervalo $t \in (20, 30]$, a velocidade média $\langle (v_{xi}^t)^2 + (v_{yi}^t)^2 \rangle = 2.5$ não corresponde ao valor acrescido de 0.5 à velocidade 1.5 devido a erro de incrementação no código. O aumento na flutuação da energia com o aquecimento ocorre pois, devido a altas velocidades, maior proximidade inter-partículas é alcançada e, com isso, maior variação das velocidades é observada.

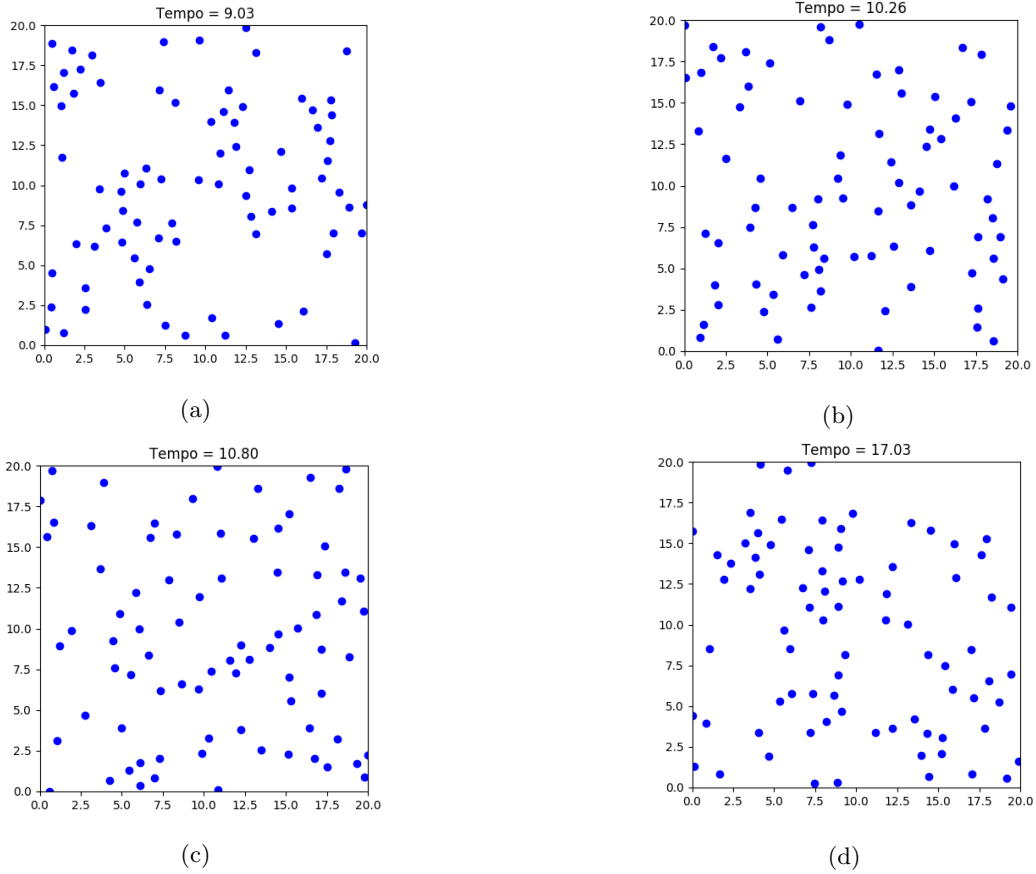


Figure 9: Evolução temporal da posição de $N = 50$ partículas nos tempos (a) $t = 9.03$, (b) $t = 10.26$, (c) $t = 10.80$ e (d) $t = 17.03$ confinadas em espaço fixo de dimensões (20, 20). No intervalo de tempo $[10, 10.05]$ a velocidade de cada corpo é acrescida em 0.01 a cada passo temporal $\delta t = 0.01$, fazendo com que a aglomeração vista em (a) seja desfeita em (b) e, após atingir o equilíbrio térmico, volta a ser observada em (d).

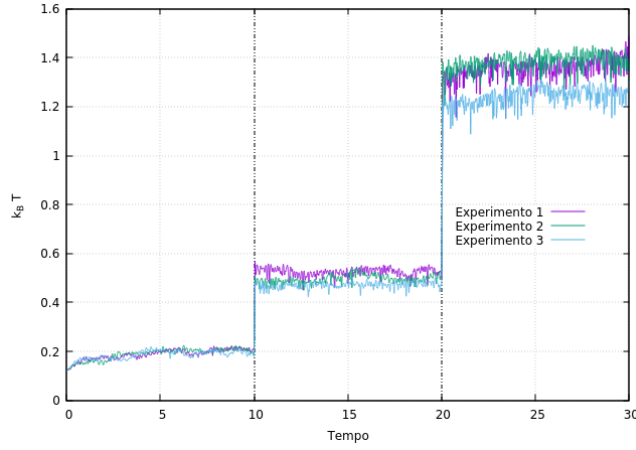


Figure 10

Figure 11: Evolução temporal da energia do sistema $k_B T$ obtido através da equipartição de energia. Para os intervalos de tempo $t \in (10, 10.05)$ e $t \in (20, 20.05)$ o sistema é aquecido. Seu equilíbrio é atingido após algum tempo, com flutuações mais elevadas para o intervalo $t \in (20, 30)$, pois a velocidade de cada partícula é maior que nos demais intervalos de tempo.

5 Conclusão

Com este trabalho concluímos que o método utilizado para simulação de dinâmica molecular apresenta boa representatividade com expectativas realistas de sua descrição tanto qualitativamente, através da evolução temporal da posição de cada partícula devido ao potencial atrativo-repulsivo, quanto quantitativamente, por meio da análise da energia do sistema decorrente do grau de agitação das partículas nele presentes.

No entanto, mesmo com uso do método de Verlet em detrimento de Euler-Cromer como forma de reduzir erros associados ao cálculo da posição de cada partícula, o intervalo espacial utilizado deve ser demasiado pequeno para que não haja variações abruptas das coordenadas (x, y) de cada corpo. Mesmo pequenas, para longos intervalos de tempo o erro resulta em não estabilização do sistema para velocidade nula, isto é, não há cristalização completa do sistema. O modelo, portanto, requer intervalos de integração reduzidos, inviabilizando a simulação de sistemas com números muito maiores que $N = 100$ partículas.

6 Bibliografia

- [1] - Drafta, Viorel. The nature is simple in essence - on gravitation and electromagnetism unification. Cornell University Library, disponível em: <<https://arxiv.org/abs/physics/0211107>>. Acesso em domingo, 11 de novembro de 2018, 04:37.
- [2] - Berg, J. M., Tymoczko, J.L., Stryer, L. Bioquímica. Guanabara Koogan, Ed. 5, Ch. 1, pp. 9-11, 2004.
- [3] - Buxbaum E., Fundamentals of Protein Structure and Function, Springer, Ch. 4, pp. 13-14, 2007
- [4] - Callen, H. B., Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, Ed. 2, Ch. 1, pp. 9-10.

7 Códigos

Em sequência é apresentado o código da dinâmica molecular cujos resultados foram vislumbrados ao longo deste trabalho.

```
#Bibliotecas a serem utilizadas
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as ani

L = 20 # Espaco disponivel (L,L)
N = 80 # Numero de particulas
ri = np.zeros((N, 6)) # Matriz contendo as coordenadas (x,y) respectivas a t-1, t e t+1 (nesta ordem)
dt = 0.001 # Intervalo temporal de integracao
v0 = 1 # Velocidade inicial
mass = 1 # Massa de cada particula

fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 5))
ax.set(xlim=(0, L), ylim=(0, L))
coords, = ax.plot([], [], 'bo', ms=6)

n = 0
while n < N: # Posicionamento inicial das N particulas
    # Escolha aleatoria de coordenadas (x,y) em t-1
    ri[n][0] = v0 * dt + np.random.random() * (L - 2 * v0 * dt) # xib
    ri[n][1] = v0 * dt + np.random.random() * (L - 2 * v0 * dt) # yib

    m = 0
    while m < N: # consideracao para que particulas nao sejam posicionadas proximas demais das N-1
        restantes
        if m != n and ri[m][0] != 0 and ri[m][1] != 0:
            if np.sqrt((ri[n][0] - ri[m][0]) ** 2 + (ri[n][1] - ri[m][1]) ** 2) <= 1.2:
                if n <= 0:
                    pass
                else:
                    n -= 1
            m += 1

    teta = np.random.random() * 2 * np.pi # Escolha de angulo aleatorio para o direcionamento das
        velocidades de cada particula
    ri[n][2] = (ri[n][0] + v0 * np.cos(teta) * dt)
```

```

ri[n][3] = (ri[n][1] + v0 * np.sin(teta) * dt)
coords.set_data(ri[:, 2], ri[:, 3])

n += 1
arq = open('temp1.dat', 'w')
time = 0

def update(t):
    global time, L, dt, vel
    i = 0
    vel = 0
    while i < N: # Particula i que sofre a forca das demais
        axi = 0 # Aceleracao x a ser somada
        ayi = 0 # Aceleracao y a ser somada
        j = 0
        while j < N: # Particulas j que exercem forca sobre i
            if j == i:
                pass
            else:
                r = np.sqrt((ri[i][2] - ri[j][2]) ** 2 + (ri[i][3] - ri[j][3]) ** 2) # Distancia entre
                    particulas i j
                if r >= 3: # Quebra de potencial
                    axi += 0
                    ayi += 0

                else: # Forca devido ao potencial de Lennard-Jones
                    axi += (1 / mass) * 24 * ((2 / (r ** 13)) - (1 / (r ** 7))) * (ri[i][2] - ri[j][2])
                        / r
                    ayi += (1 / mass) * 24 * ((2 / (r ** 13)) - (1 / (r ** 7))) * (ri[i][3] - ri[j][3])
                        / r

            j += 1

        # Metodo de Verlet para calculo de r(t+1)

        xnext = (2 * ri[i][2] - ri[i][0] + (axi) * (dt ** 2))
        ynext = (2 * ri[i][3] - ri[i][1] + (ayi) * (dt ** 2))

        """"#Aumento da velocidade de cada particula pelo fator dt2

```

```

dt2 = 0

if t <= 10000 or t >= 10050 and t <= 20000 or t >= 20050:
    xnext = (2 * ri[i][2] - ri[i][0] + axi * (dt ** 2))
    ynext = (2 * ri[i][3] - ri[i][1] + ayi * (dt ** 2))

elif t > 10000 and t < 10050 or t > 20000 and t < 20050:
    dt2 += 0.01
    xnext = (2 * ri[i][2] - ri[i][0] + axi * (dt ** 2)) + dt2 * (ri[i][2] - ri[i][0])
    ynext = (2 * ri[i][3] - ri[i][1] + ayi * (dt ** 2)) + dt2 * (ri[i][3] - ri[i][1])
"""

# Consideracoes de barreiras reflexivas
if xnext > 0 and xnext < L:
    ri[i][4] = xnext

if xnext > 0 and xnext < L:
    ri[i][4] = xnext

else:
    if xnext >= L:
        ri[i][4] = 2 * L - xnext
        ri[i][2] = 2 * L - ri[i][2]

    else:
        ri[i][4] = 2 * L + xnext
        ri[i][2] = 2 * L + ri[i][2]

if ynext > 0 and ynext < L:
    ri[i][5] = ynext

else:
    if ynext >= L:
        ri[i][5] = 2 * L - ynext
        ri[i][3] = 2 * L - ri[i][3]

    else:
        ri[i][5] = 2 * L + ynext
        ri[i][3] = 2 * L + ri[i][3]

# Atualizacao das coordenadas t-1 e t
ri[i][0] = ri[i][2]

```

```

ri[i][1] = ri[i][3]
ri[i][2] = ri[i][4]
ri[i][3] = ri[i][5]

# Contabilizacao das velocidades para calculo de energia, e.g.
vx = (ri[i][4] - ri[i][0]) / (2 * dt)
vy = (ri[i][5] - ri[i][1]) / (2 * dt)

vel += (vx ** 2 + vy ** 2)

i += 1

# Para cada tempo considerado, contabilizacao do produto KT por equiparticao de energia
KT = (mass / 2) * vel / N
time += dt
arq.writelines([str(time), '\t', str(KT), '\n'])
coords.set_data(ri[:, 2], ri[:, 3])
plt.title('Tempo = %.2f' % (time))
"""#Aumento do espaco disponivel apos um tempo t (expansao livre)
if t == 10000:
    L = 30
    ax.set(xlim=(0, L), ylim=(0, L))
"""
return coords,

anime = ani.FuncAnimation(fig, update, frames=30000, interval=1, repeat=False)
plt.show()

```
