

Dinámica Molecular regida por el paso temporal

Trabajo Práctico Nro. 4

Badi Leonel, Buchhalter Nicolás Demián y Meola Franco
Román

2 de mayo de 2016

Grupo 3

Que vamos a ver

Oscilador Puntual Amortiguado
Formación del Sistema Solar

Parte I

Oscilador Puntual Amortiguado

Fundamentos

Introducción

- Vamos a comparar los errores cometidos por distintos sistemas de integración
- Oscilador amortiguado: Sistema con sólo una partícula puntual cuya solución analítica es conocida
- Se implementaron:
 - *Beeman*
 - *Velocity Verlet*
 - *Gear Predictor Corrector de orden 5*

Fundamentos

Variables relevantes

- Parámetros
 - $m = 70$
 - $k = 10000$
 - $\gamma = 100$
 - $t_f = 5$
- Condiciones iniciales
 - $r(t = 0) = 1$
 - $v(t = 0) = -\frac{2\gamma}{m}$

Implementación

Cálculo Numérico

```
void simulateGear(double time, double deltaT) {  
    double simTime = 0;  
    Oscillator oscillator = new Oscillator();  
    oscillator.writePositionAndError();  
    oscillator.makeEulerStep(deltaT);  
    simTime += deltaT;  
    oscillator.writePositionAndError();  
    while (simTime < time) {  
        oscillator.makeGearStep(deltaT);  
        simTime += deltaT;  
        oscillator.writePositionAndError();  
    }  
}
```

Código 1: Método de Gear Predictor Corrector.

Implementación

Detalles de precisión

- Todas las operaciones se realizan en `double`
- Se utilizan cinco cifras decimales como output en los archivos de salida de resultados y errores.

Resultados

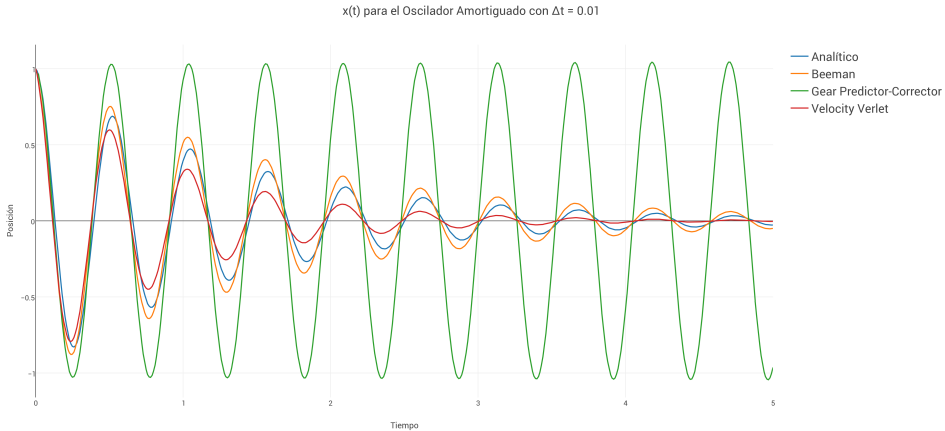
Error total normalizado por el número total de pasos para distintos valores de Δt

Δt	Método	E
0.01	<i>Beeman</i>	0,00471
0.01	<i>Verlet</i>	0,00663
0.01	<i>Gear</i>	0,33624
0.001	<i>Beeman</i>	0,00235
0.001	<i>Verlet</i>	0,00225
0.001	Gear	-0,00199
0.0001	<i>Beeman</i>	0,00225
0.0001	<i>Verlet</i>	0,00224
0.0001	<i>Gear</i>	0,00228

Tabla: Suma de las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales normalizado por el número total de pasos

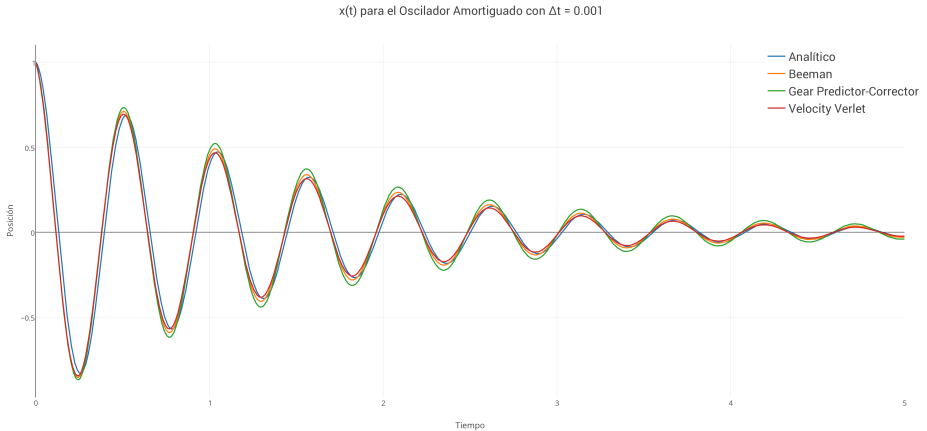
Resultados

Gráfico de $x(t)$ para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,01$



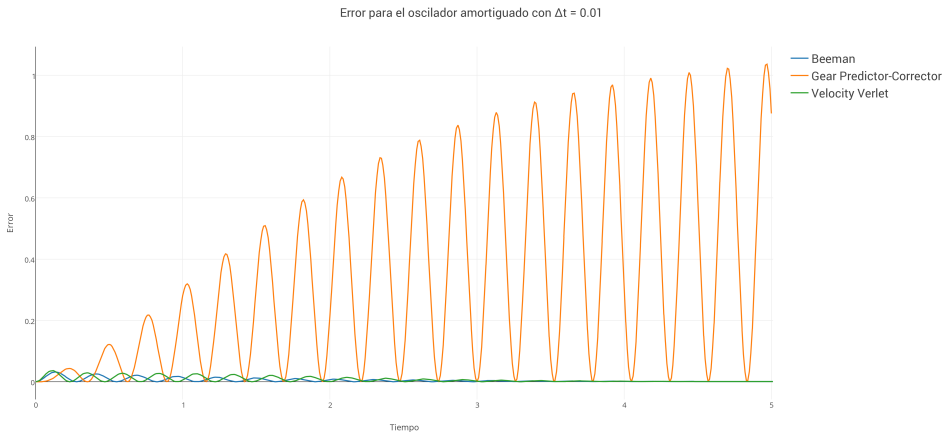
Resultados

Gráfico de $x(t)$ para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,001$



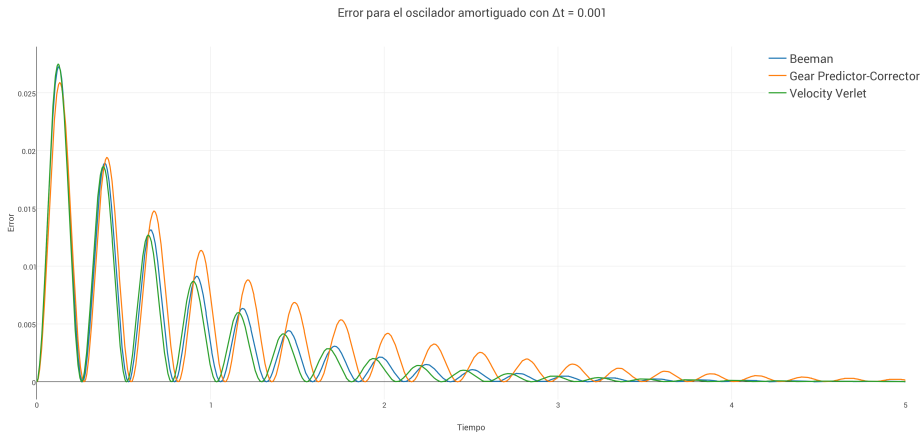
Resultados

Gráfico de E para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,01$



Resultados

Gráfico de E para el oscilador puntual amortiguado con $\Delta t = 0,001$



Conclusiones

- Para una cantidad de pasos baja (500 pasos, $\Delta t = 0,01$), el error de *Gear Predictor-Corrector* aumenta, simulando un oscilador no amortiguado.
- Con un $\Delta t = 0,001$ obtuvimos resultados con errores muy bajos para los tres métodos.
- Con 50000 pasos ($\Delta t = 0,0001$), los tres métodos tienen un error que varía recién en la quinta cifra decimal.
- El esquema de integración que mejor resulta para este sistema es *Gear Predictor-Corrector* para $\Delta t = 0,001$, es decir, 5000 pasos.

Parte II

Formación del Sistema Solar

Fundamentos

Introducción

- Usando el esquema de integración de *Beeman* vamos a simular el nacimiento del sistema solar.
- Se simularán N partículas que orbiten alrededor del Sol.
- Las partículas se irán agrupando en planetas a medida que el sistema evolucione.

Implementación

Generación de los agentes

- Posiciones (x, y) aleatorias para todas las partículas
- v_{0t} tal que todas las partículas tengan el mismo L
- $v_{0n} = 0$.
- Distancia al sol entre 10 a la 9 y 10 a la 10
- Angulo respecto al Sol entre 0 y 2π

Simulación

Variables relevantes

- Δt : cantidad de pasos.
- k relación entre cantidad de pasos simulados y visualizados.
- `time`: Tiempo en segundos a visualizar

Simulación

Detalles de implementación

- utilización del cell index method del tp anterior para calcular las colisiones de las partículas.
- Para las partículas que se alejen más de 2×10^4 no las consideramos dentro del sistema.
- Para simplificar, luego de la colisión de dos partículas, se obtiene una nueva con un radio correspondiente a la suma de los radios de las dos.

Simulación

Problemas encontrados

- Manejo numérico de grandes dimensiones.
 - Para poder mantener en memoria números tan grandes, utilizando la precisión double .
 - Se normalizó la distancia por 10 a la 6
 - Se normalizó la masa por 10 a la 25
- El radio de las partículas en comparación con las dimensiones del sistema solar era muy chico
 - Dificultaba la visualización, sobre todo para una gran cantidad de partículas.
 - El radio de interacción es diferente al radio de visualización.

Implementación

Cálculo Numérico

```
void simulateGear(double time, double deltaT) {  
    double simTime = 0;  
    Oscillator oscillator = new Oscillator();  
    oscillator.writePositionAndError();  
    oscillator.makeEulerStep(deltaT);  
    simTime += deltaT;  
    oscillator.writePositionAndError();  
    while (simTime < time) {  
        oscillator.makeGearStep(deltaT);  
        simTime += deltaT;  
        oscillator.writePositionAndError();  
    }  
}
```

Código 2: Método de Gear Predictor Corrector.

Implementación

Visualización

- La simulación y la visualización son independientes
- El algoritmo de simulación escribe un archivo `.tsv` con los siguientes datos:
 - (x, y)
 - r
 - Color RGB para indicar las velocidades, donde R es la componente en el eje Y y G es la componente en eje X
- Por último, se carga en Ovito el archivo de salida `.tsv` para realizar la visualización

Resultados

Gráfico de las energías U , K y E_T para la simulación de $N = 100$



Image

Resultados

Gráfico de las energías U , K y E_T para la simulación de $N = 1000$



Image

Resultados

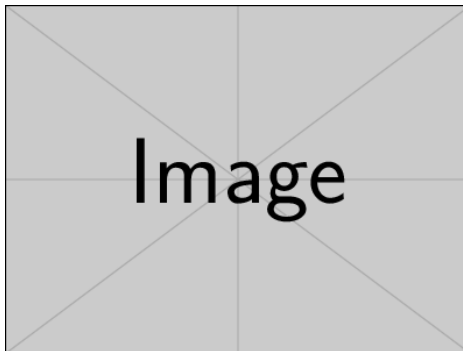
Gráfico de las energías U , K y E_T para la simulación de $N = 10000$



Image

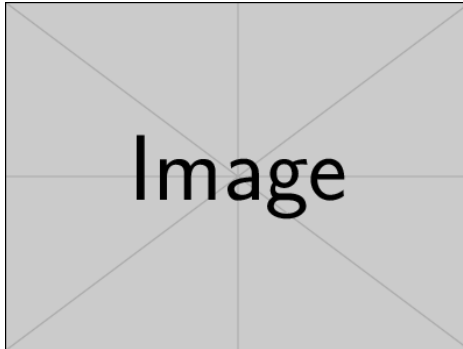
Resultados

Animación de la simulación para $N = 100$



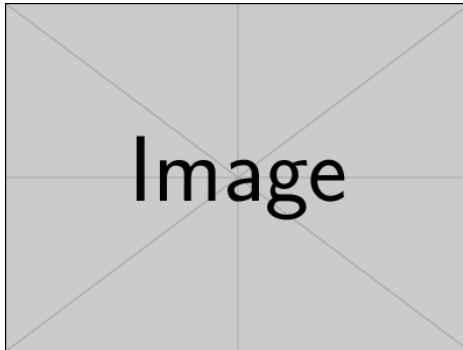
Resultados

Animación de la simulación para $N = 1000$



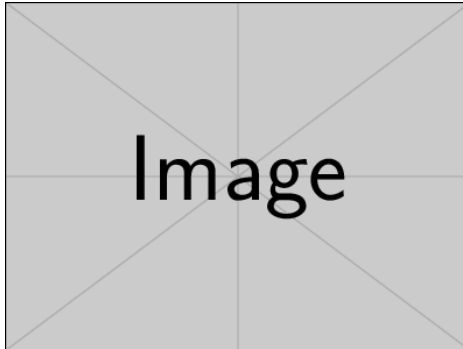
Resultados

Animación de la simulación para $N = 10000$



Resultados

Animación de la simulación para $N = 50000$



Conclusiones

- El paso temporal (Δt) óptimo para simular el sistema es ?.

Gracias