

Física Computacional: Resolución problema 3, guía 7

Martín Famá

Fecha de entrega: 01/10/2020

1 Resumen

Se llevó a cabo una simulación de muchos cuerpos usando el método de integración de Verlet. En particular, se simularon 900 átomos confinados a una caja en 2 dimensiones que interactúan mediante el potencial de Lennard-Jones:

$$U(r) = 4(r^{-12} - r^{-6})$$

en donde r es la distancia entre dos átomos cualesquiera. Definiendo $N_c = 30$ (de modo que $N = N_c^2 = 900$), densidad $\rho = 0.3$ y $L = \sqrt{N/\rho}$ el largo de los lados de la caja, se simularon 2000 iteraciones del algoritmo, utilizando un paso temporal de $h = 0.005$.

2 Análisis

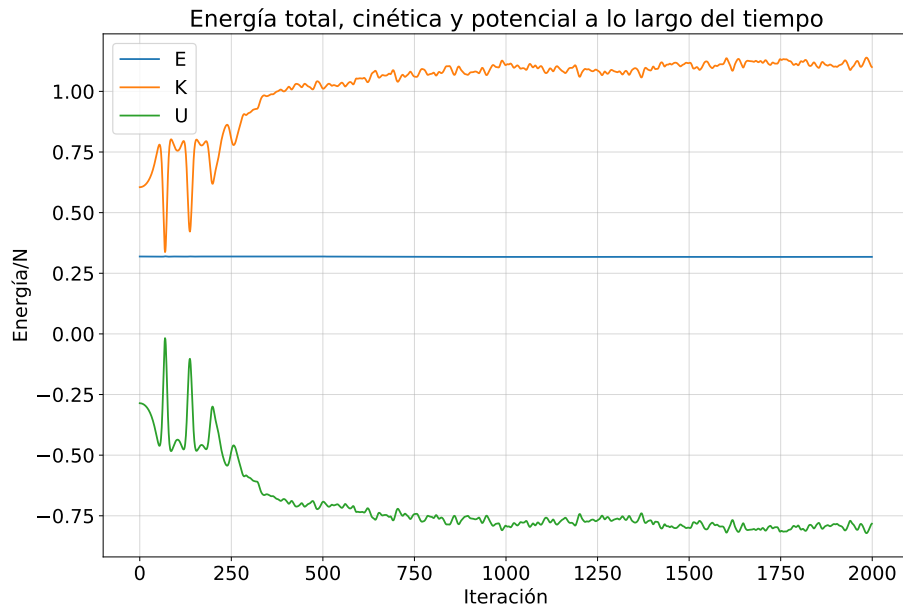


Fig. 1: Energía total, cinética y potencial del sistema a lo largo de su vida

En la figura 1 se puede ver la evolución de la energía. Luego de un periodo de transición, el sistema entra en un estado en donde las energías cinética y potencial varían relativamente poco. Vemos que el método de Verlet es un método *conservativo*, es decir la energía total se conserva. En realidad hay pequeñas variaciones en la misma, del orden de centésimas, pero son errores de redondeo.

2.1 Distribución de velocidades

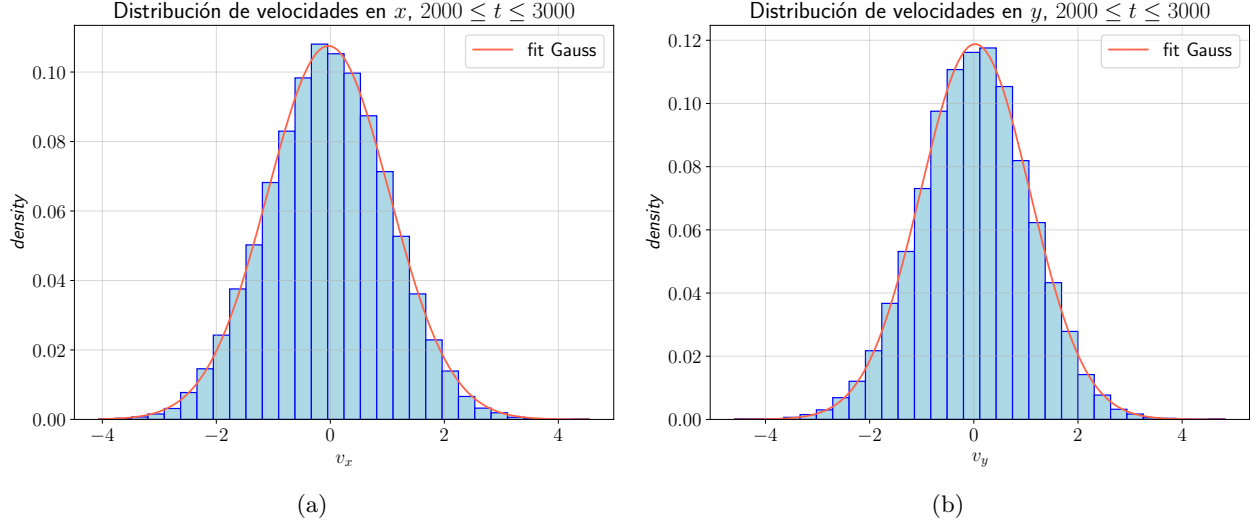


Fig. 2: Distribución de las componentes de velocidad v_x y v_y . Valores tomados para cada partícula sobre 1000 iteraciones, luego de un periodo de termalización de 2000 iteraciones.

En la figura 2 se pueden ver la distribución de velocidades en x y en y de las partículas. La serie de datos fue tomada a partir de la iteración 2000, en donde podemos considerar que el sistema está bien termalizado. Se tomaron 1000 iteraciones sucesivas. Vemos que las distribuciones son muy similares, y se ajustan con una función gaussiana con media en $v_{x,y} = 0$.

En la figura 3, tenemos la distribución del módulo de la velocidad de cada partícula (fig. 3a) y la distribución promedio de v_x y v_y , es decir $P(v) = (P(v_x) + P(v_y))/2$ (fig. 3b). Vemos que en el primer caso, la distribución es del tipo Maxwell-Boltzmann, con una densidad de probabilidad nula para $v < 0$ (lógicamente, pues el módulo de la velocidad no puede ser negativo). Es un resultado esperado, pues esta distribución describe en general a las velocidades de las partículas de un gas. La otra distribución es una gaussiana.

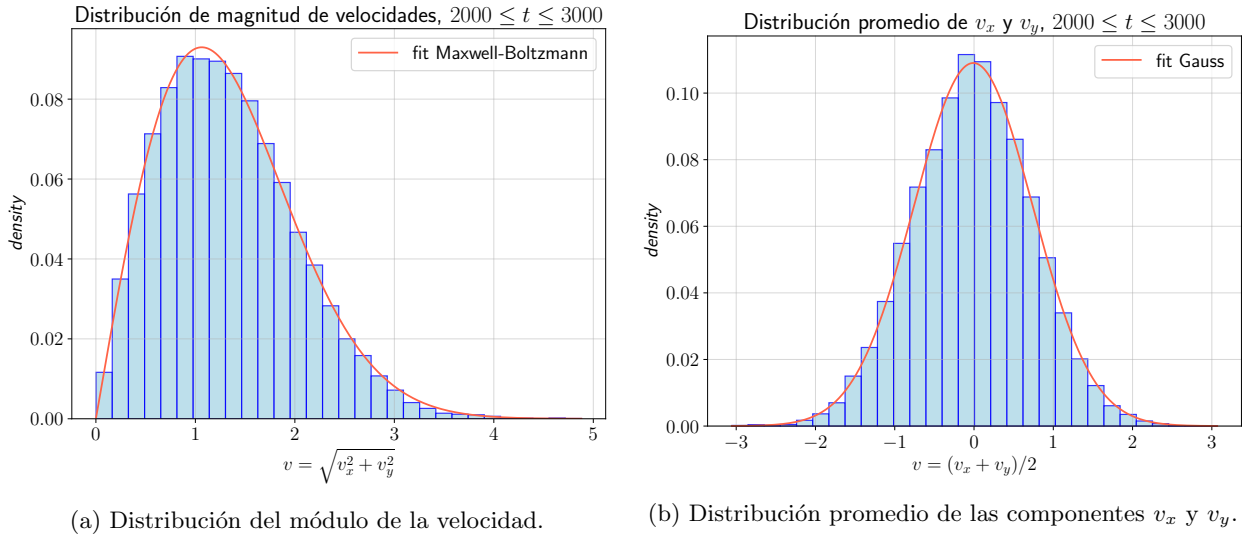


Fig. 3: Distribuciones de $|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ y $v = (v_x + v_y)/2$

2.2 Visualización del sistema

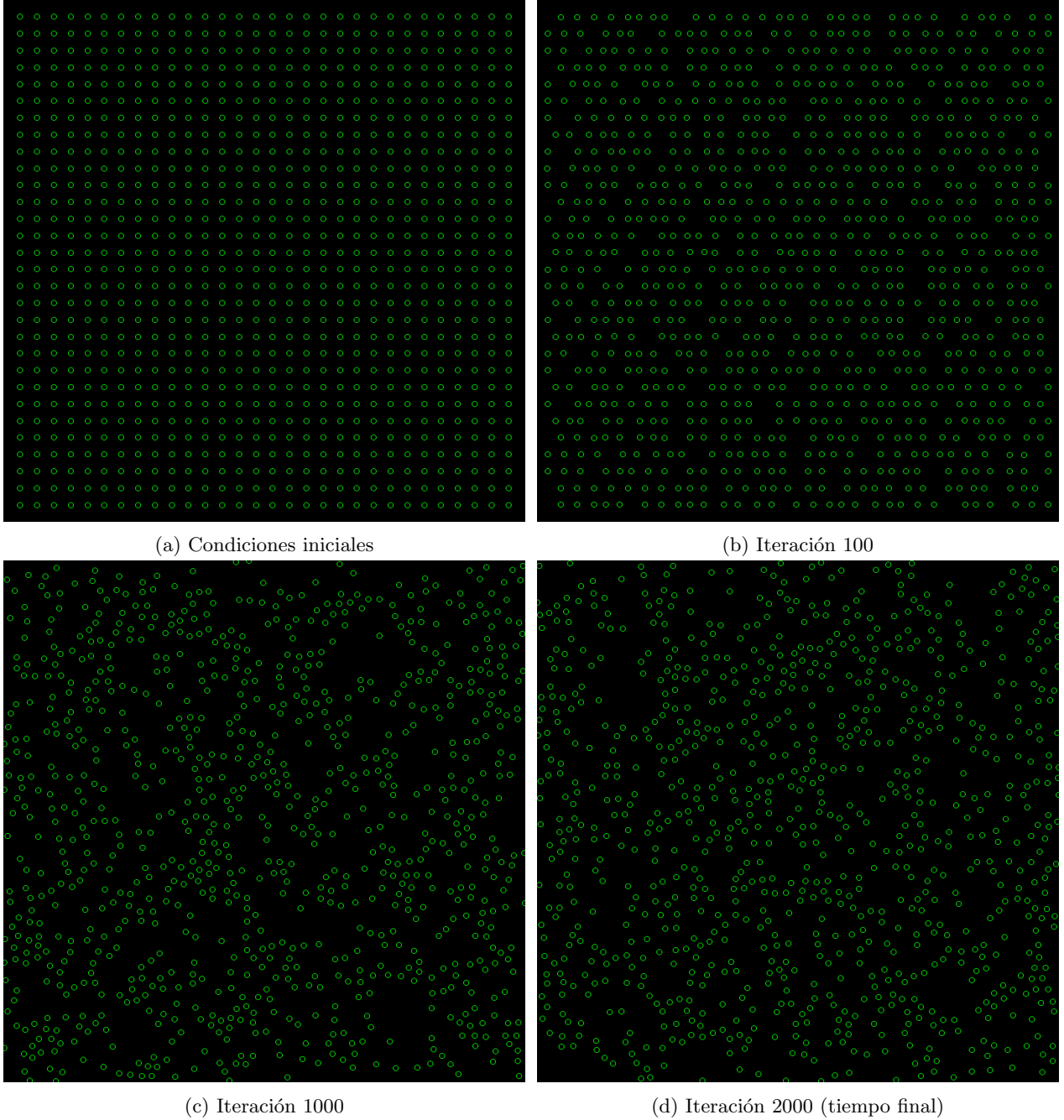


Fig. 4: Posiciones de las partículas a lo largo de la evolución del sistema.

En la figura 4 se pueden ver las partículas graficadas en distintos tiempos de la simulación. Vemos que la condición inicial las coloca de manera equidistante en una grilla, mientras que en la iteración 100 podemos ver como se manifiesta la condición inicial de las velocidades: desplazamientos hacia la derecha o la izquierda debido a que $v_x^0 = \pm 1.1$ y $v_y^0 = 0$ para cada partícula. Luego de más iteraciones, podemos ver que la evolución del sistema lleva a una distribución más aleatoria de las posiciones (y velocidades) de las partículas.