

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos (Enunciado publicado en CAMPUS el 02/09/2024)

Para simular, animar y presentar el problema detallado más abajo se deberá utilizar la técnica de dinámica molecular regida por eventos con choques elásticos. El sistema no tiene campos externos por lo tanto las partículas siguen en movimiento rectilíneo uniforme entre colisiones. El máximo número de partículas $N > 200$ se debe elegir de manera que las simulaciones se completen en tiempos de cómputo razonables.

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 (o cada un número entero de ellos) 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.

Los entregables del T.P. son:

- a- Presentación oral de 13 minutos de duración con las secciones indicadas en el documento ".../material didáctico/00_GuiasFormato/Formato_Presentaciones.pdf". Durante la presentación oral se podrá solicitar una demostración en vivo del funcionamiento del código.
- b- Links a youtube o vimeo de las animaciones generadas (NO enviar archivos de animaciones por medio de links ni subirlos a campus).
- 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 20/09/2024 a las 10 hs. Los archivos deben nombrarse de la siguiente manera: **"SdS_TP3_2024Q2GXX_Presentación"** y **"SdS_TP3_2024Q2GXX_Codigo"**, donde **XX** es el número de grupo.

Sistema 1) Recinto cerrado con obstáculo fijo

Considerar un dominio de simulación que consiste en un recinto cerrado y cuadrado de lado $L = 0,1$ m. En el centro se ubica un obstáculo fijo circular de radio $R = 0,005$ m como se ilustra en la Fig. 1.

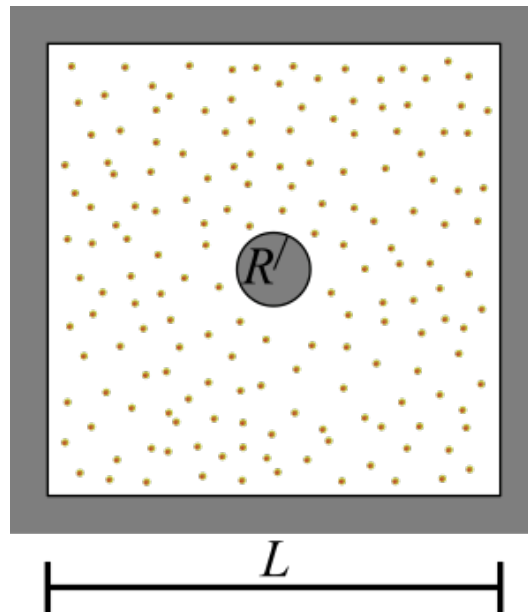


Figura 1: Esquema del sistema a simular: Sistema de partículas que colisionan con un obstáculo fijo.

Considerar inicialmente N partículas de radio $r = 0,001$ m ubicadas dentro del recinto con velocidades de módulo $v_0 = 1$ m/s y direcciones al azar. Las masas de las partículas son $m = 1$ kg.

1.1) Desde el instante inicial, medir las presiones ejercidas sobre las paredes y el obstáculo. Graficar ambas presiones en función del tiempo y asegurarse que el sistema alcance el régimen de equilibrio. La presión (P) se calcula como el impulso transferido a los bordes por unidad de tiempo y por unidad de longitud.

1.2) Repetir 1.1 inicializando a las partículas con $v_0 = 3, 6$ y 10 m/s. Luego, usando los resultados de las simulaciones en el estado estacionario, calcular la presión promedio en función de la temperatura (T) del sistema y verificar si se cumple la ley de gases ideales ($P \sim T$) estudiando la curva de P vs T . ¿Cómo se define la temperatura del sistema? (No es necesario calcular esta temperatura en grados, solo interesan cambios relativos de temperatura).

1.3) Medir el número de choques entre las partículas pequeñas y el obstáculo. Considerar los siguientes casos:

- a- Contabilizando los choques de partículas que colisionan por primera vez con el obstáculo.
- b- Contabilizando los choques de todas las partículas, independientemente si ya había colisionado con el obstáculo.

Para ambos casos mostrar las curvas de evolución temporal de Nro. de choque vs. tiempo y reportar el observable escalar que considere más adecuado como función de la temperatura T .

1.4) Finalmente considerar que el obstáculo es una partícula libre de masa $M = 3$ kg que inicialmente está en reposo. Teniendo en cuenta que la velocidad inicial de las partículas pequeñas es $v_0 = 1$ m/s, calcular el desplazamiento cuadrático medio de la partícula grande como función del tiempo. Luego realizar un ajuste lineal siguiendo las indicaciones del método mostrado en la clase **Teórica 0** para obtener el coeficiente de difusión (D). Describir con detalle como se eligen los

tiempos en los cuales se calcula el DCM, dado que el estado del sistema fue guardado con pasos temporales (dt) no uniformes debido a la inhomogeneidad de los eventos.

1.5) OPTATIVO: En lugar de realizar el ejercicio con un contenedor cuadrado, cambiarlo por uno circular de radio $R = L/2$. En caso de elegir esta opción, no es necesario hacerlo con la variante cuadrada.