

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 26/04/2021)

Resolver, utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal, los problemas 1) y 2).

Las simulaciones tendrán un dt fijo e intrínseco de la simulación, Además considerar un dt_2 para imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) como *output* del sistema. Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el análisis y módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma, la velocidad de la animación y postprocesamiento no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La realización del T.P. consiste en:

Sistema 1) Solo deben presentarse los resultados (no incluir introducción, ni ecuaciones de integradores, ni implementación, ni animaciones, ni conclusiones) en la menor cantidad posible de diapositivas (2-3) (duración 1 minuto) y debe ubicarse antes de la presentación del sistema (2).

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) incluyendo ambos sistemas y el código fuente (d) deberán ser subidos a **campus**, antes del día 10/05/2021 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera:

"SdS_TP4_2021Q1GXX_Presentación" y **"SdS_TP4_2021Q1GXX_Codigo"**, donde **XX** es el **número de grupo**. Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 10/05/2021. No subir animaciones a campus.

Sistema 1) Oscilador Puntual Amortiguado (solución analítica)

Con la finalidad de comparar los errores de los 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 35 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
- Verlet

1.2) En todos los casos graficar las soluciones analítica y numérica y calcular el error cuadrático medio (sumando las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos).

1.3) Estudiar como disminuye el error al disminuir el paso de integración (dt). Usar ejes semi-logarítmicos o logarítmicos para poder apreciar las diferencias de error a escalas pequeñas.

¿Cuál esquema de integración resulta mejor para este sistema ?

Sistema 2) Interacción de la radiación con la materia

Usando alguno de los esquemas de integración ya implementados, estudiar la propagación de una partícula cargada al incidir perpendicularmente en un material de estructura cristalina como se muestra en la Fig. 1. La partícula parte con velocidad inicial V_0 , a una distancia D de la superficie y posición vertical distribuida uniformemente entre $L/2-D$ y $L/2+D$. La partícula incidente tiene masa M y carga eléctrica $+Q$. El material está compuesto por un arreglo bidimensional cuadrado de N partículas separadas una distancia D . La carga de cada nodo del arreglo alterna entre $+Q$ y $-Q$ como se indica en la Fig. 1. Las partículas que componen el material no interactúan entre sí y están fijas en el espacio.

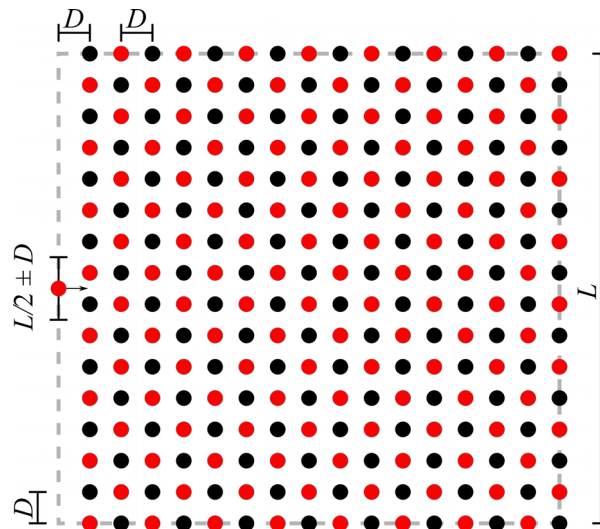


Figura 1: Esquema del sistema propuesto.

La interacción entre la partícula incidente y las que componen el material estará mediada por la fuerza electrostática de Coulomb. La fuerza que ejercen N partículas cargadas j sobre una partícula cargada i se expresa como:

$$\vec{F}_i = k q_i \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2} \hat{r}_{ij} \quad .$$

La energía potencial electrostática de una partícula con carga q_i debido a N cargas puntuales q_j se define según:

$$U_j(\vec{r}_i) = k q_i \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad .$$

Los valores de los parámetros y constantes son los siguientes:

$$k = 1 \cdot 10^{10} \text{ Nm}^2/\text{C}^2$$

$$Q = 1 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$M = 1 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$D = 1 \cdot 10^{-8} \text{ m}$$

$$V_0 = [10 \cdot 10^3, 100 \cdot 10^3] \text{ m/s}$$

$$N = 16^2$$

Considerar como criterio de corte de simulación el momento en que la partícula incidente alcanza algún borde de la región inicial o cuando se encuentra a una distancia $D_{\text{cut}} < 0.01 \cdot D$ de cualquiera de las partículas que componen el material

2.1) Para un conjunto de condiciones iniciales fijas, simular el sistema usando varios dt con alguno de los integradores implementados en 1)

2.2) Calcular la evolución de la energía total del sistema ($E_T = \text{cinética} + \text{potencial}$) y compararla para los distintos dt elegidos. Para esto considerar la evolución de la diferencia $|E_T(t=0) - E_T(t>0)|$. Usar escala logarítmica para mostrar los detalles de la diferencia ¿Cuál es el mejor dt para este sistema? ¿Cuál fue el criterio utilizado?

2.3) Calcular la longitud de la trayectoria de la partícula incidente, mostrar su evolución temporal y estudiar como varía en función del módulo de la velocidad inicial V_0 teniendo en cuenta la variabilidad introducida por la posición inicial de la partícula. Mostrar animaciones para los casos de comportamientos más representativos

2.4) Variando el módulo de la velocidad inicial, analizar la proporción de partículas que escapa por cada lado de la región o que son absorbidas por el material