Métodos Computacionais da Física C - Lista 2

(1)

(Abordagem orientada à objetos)

(1) Inicialização de variáveis relevantes: N, L_x, L_y, $t=0$, t_{max}, etc.

(2) Define classe que representa partícula, com seguintes atributos principais: x, y, v_x, v_y, m.

E define dois métodos principais para a partícula:

- Evolução temporal: basicamente a integração da eq. de movimento
- Reflexão: inversão da velocidade da partícula quando sua posição for igual ou próxima a alguma das paredes. (na verdade, inversão somente da componente ortogonal à parede).

(3) Cria lista de objetos Partícula.

(4) Distribui as partículas dentro da região da caixa, isto é $x \subset (0, L_x)$ e $y \subset (0, L_y)$, de acordo com alguma distribuição, por exemplo, uma gaussiana.

(5) Atribui velocidades v_x e v_y para as partículas seguindo alguma distribuição. Por exemplo, a distribuição de Maxwell.

(6) Executa um laço temporal para evolução simultânea de todas partículas usando seus métodos de evolução. Da forma:

```
while t<tmax:
        for particula in lista:
              particula.evolucao()

        t=t+dt
```

OBS: Opcionalmente pode ser adicionada uma linha antes do incremento em t, para medir variáveis dinâmicas relevantes, como energia, temperatura, pressão, etc.

② Potencial de Lennard-Jones:

$$V = q'\left[\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6}\right]$$

Calculando o mínimo do potencial:

$$\frac{dV}{dr} = 0 \rightarrow \frac{dV}{dr} = q'\left[\frac{-12\sigma^{12}}{r_{min}^{13}} + \frac{6\sigma^6}{r_{min}^7}\right] = 0$$

$$\frac{6\sigma^6}{r_{min}^7} = \frac{12\sigma^{12}}{r_{min}^{13}} \rightarrow r_{min}^6 = 2\sigma^6 \rightarrow \boxed{r_{min} = 2^{\frac{1}{6}}\sigma}$$

Se $r_{min} = 1 \rightarrow 2^{\frac{1}{6}}\sigma = 1 \rightarrow \sigma = 2^{-\frac{1}{6}}$ e sendo $q = \frac{q'}{4}$, temos:

$$V = 4q\left[\frac{(2^{-\frac{1}{6}})^{12}}{r^{12}} - \frac{(2^{-\frac{1}{6}})^6}{r^6}\right] = 4q\left[\frac{1}{4r^{12}} - \frac{1}{2r^6}\right]$$

Como o potencial de Lennard-Jones é conservativo, a força associada será:

$$F = -\nabla V = -4q\frac{d}{dr}\left[\frac{1}{4r^{12}} - \frac{1}{2r^6}\right] = -4q\left[\frac{-12}{4r^{13}} + \frac{6}{2r^7}\right] = 12q\left[\frac{1}{r^{13}} - \frac{1}{r^7}\right]$$

E na forma vetorial:

$\left(\hat{r} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}\right)$, $(r = |\vec{r}|)$

$$\boxed{\vec{F} = 12q\left[\frac{1}{r^{14}} - \frac{1}{r^8}\right]\vec{r}}$$

(3) O algoritmo escrito para o cálculo das forças seria incluído dentro do laço temporal descrito no passo (6) do exercício 1 desta lista, logo antes do laço sobre as partículas para suas respectivas evoluções.

Dentro da classe partícula podemos definir um método com a seguinte estrutura:

```
force = 0
for particula in lista:
    if (particula.ID != self.ID):
        r = abs (particula.r - self.r)
        force = 12*q*(((r**(-14)) - (r**(-8))) + force
    else:
        pass    # sem autointeração
```

---

(4) O método das caixas pode ser usado quando a interação à longas distâncias entre as partículas é desprezível, isto é, existe um raio l que delimita uma região em torno de uma partícula dentro da qual as interações com qualquer outra partícula são relevantes.

Para calcular as forças sobre cada partícula fazemos um laço sobre as caixas primeiro, calculando as forças entre todos os pares de partículas dentro de cada caixa.

Depois fazemos um novo laço sobre as caixas, dessa vez calculando a força entre as partículas de uma caixa **A** e as partículas de suas caixas vizinhas. Aqui existe um detalhe, como a 3ª lei de Newton é respeitada (Ação/Reação), então podemos calcular uma força e aplicá-la com sinal invertido nas duas partículas n e m:

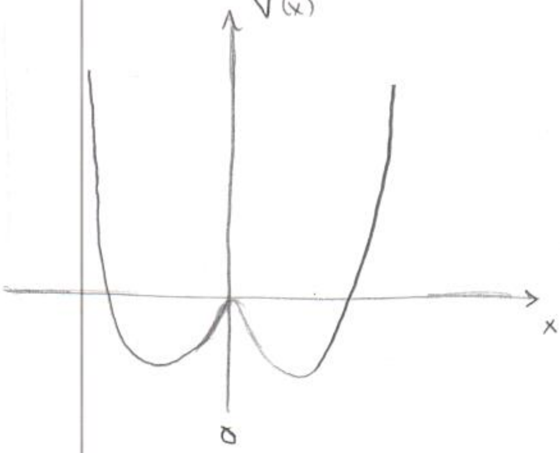
$$\vec{F}_n = -\vec{F}_m$$

Assim diminuímos o número de cálculos necessários, calculando as forças somente entre 4 dos vizinhos de uma caixa (exceto as caixas dos cantos).

PARTE 2: Dinâmica Estocástica

Livro: Métodos computacionais da Física - Prof. Cláudio Scherer (2ª ed.)

Exemplo 7.1: Poço duplo com ruído aditivo



$$V(x) = ax^4 - bx^2$$

Partindo da eq. de movimento temos:

$$m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} - \nabla V + \beta\xi(t)$$

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} - (4ax^3 - 2bx) + \beta\xi(t)$$

Na aprox. de Stokes $\frac{d^2x}{dt^2} \approx 0$, então:

$$\gamma\frac{dx}{dt} = -4ax^3 + 2bx + \beta\xi(t)$$

$$dW(t) = \xi(t)dt$$

Assim: $\gamma\, dx = (-4ax^3 + 2bx)\,dt + \beta\, dW(t)$

Fazendo $\gamma = 1$; $4a = 1$ e $2b = \alpha$:

$$\boxed{dx = (\alpha x - x^3)\,dt + \beta\, dW(t)}$$

que será a eq. de movimento evoluída

Exercício 7.1: