

Introducción a las simulaciones computacionales

Tarea Dinámica Molecular-4 (Corregida) — Entrega 5 de noviembre de 2015

Profesor: Rodrigo Soto
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

1. Se busca que implementen un flujo de Couette plano en la mezcla binaria estudiada en la tarea anterior y midan la transferencia de momentum en las paredes.

Para eso:

- a) Tome su programa de la Tarea 3 con la mezcla binaria usando los mismos potenciales
- b) Use una temperatura $T = 0.8$ y $N_A = N_B = 300$.
- c) Simule siempre hasta $t = 1000$
- d) Use una condición inicial maxwelliana con temperatura $T = 0.8$
- e) La caja tiene tamaño $L \times L$, con $L = 30\sigma$ y bordes en $\pm L/2$
- f) Modifique las condiciones de borde de las paredes rígidas para que impongan velocidades V_1 en $-L/2$ y V_2 en $L/2$ (condiciones de borde de non-slip).
- g) Se debería formar un flujo de Couette

$$\vec{U} = U_x \hat{x}; \quad \text{con} \quad U_x = V_1 + \frac{(V_2 - V_1)(y + L/2)}{L}$$

de manera que la temperatura se debe calcular ahora como

$$E_{kin} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N [(v_{ix} - U_x(y_i))^2 + v_{iy}^2] \text{ (versión corregida)}$$

Es decir, se mide la temperatura respecto al sistema local del fluido.

Cree una función que calcule la velocidad del flujo de Couette en la posición de la partícula y modifique la función de cálculo de la energía cinética.

- h) El termostato también debe ser modificado para que regule la temperatura respecto al sistema de referencia local. Es decir

$$\begin{aligned} v_x &\rightarrow v'_x = \lambda(v_x - U_x(y_i)) + U_x(y_i) \\ v_y &\rightarrow v'_y = \lambda v_y \text{ (versión corregida)} \end{aligned}$$

- i) Implemente un medidor que acumule el impulso transmitido por cada pared a las partículas: $SumaI_1$ y $SumaI_2$. Grábelos en la misma rutina en que se graba la energía cinética.

Corra una simulación con $V_1 = 2$ y $V_2 = 0$. Grafique los valores absolutos de $SumaI_1$ y $SumaI_2$ en función del tiempo. Muestre que asintóticamente tienen la misma pendiente.

Haga lo mismo con $V_1 = 1$ y $V_2 = -1$ (versión corregida). Indique por qué el transiente es menor.

Haga un video de su simulación. Para eso modifique el programa visualiza3.pde descomentando la línea

```
//saveFrame("output-####.png");
```

Eso generará archivos `output-####.png` con #### números enteros consecutivos partiendo de 0. **OJO:** Corra en este caso una simulación corta o sino **llenará su disco duro**. Las imágenes que resultan se pueden unir en una película usando:

- MovieMaker en Windows (no se cómo funciona).
- En Linux y Mac se debe instalar `ffmpeg` y se ejecuta el comando
`ffmpeg -i output-%04d.png -qscale 0 pelicula.mpg`