

Introducción a las simulaciones computacionales
Tarea Dinámica Molecular-5 (última) — Entrega 12 de noviembre de 2015

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

1. Se busca que midan la viscosidad de la mezcla binaria que se ha estudiado en las últimas tareas.

Para eso:

- a) Tome su programa de la Tarea 4, usando los mismos parámetros de ésta.
- b) Simule cada vez hasta (al menos) $t = 1000$.
- c) Use una condición inicial lo más cercana al estado estacionario final. Es decir, posiciones homogéneas (en retícula) velocidades maxwellianas con temperatura $T = 0.8$ más una velocidad de centro de masa dada por el flujo de Couette.

Si las velocidades de las paredes son V_1 y V_2 , la intensidad del gradiente de velocidades se mide con el parámetro adimensional

$$\Psi = \frac{(V_2 - V_1)}{L} \frac{1}{n \sigma^{d-1} \sqrt{k_B T / m}}$$

que lo compara con la frecuencia de colisiones de la teoría cinética. En esta expresión $n = N/L^2$ es la densidad de número y $d = 2$ es la dimensión del espacio.

Corra simulaciones con distintos valores del parámetro Ψ entre 0 y 10.

Para cada uno:

- a) Mida la pendiente de $\text{Suma}I_1$ y $\text{Suma}I_2$ en el rango en que ambas pendientes son iguales.
- b) Determine la viscosidad η a partir de la relación

$$\left| \frac{d\text{Suma}I}{dt} \right| = \eta L_x \frac{(V_2 - V_1)}{L_y}$$

donde L_x y L_y son los largos de la caja (que son iguales en este caso).

- c) Grafique η versus Ψ .
- d) Calcule la viscosidad Newtoniana del sistema como la extrapolación de η para $\Psi \rightarrow 0$.

Nota: En algún caso se puede requerir que disminuya el valor de dt . Eso lo puede comprobar controlando que nunca las variables toman valores demasiado grandes.