

083 UMA CASCATA DE ESQUEMAS CONSERVATIVOS DE DISCRETIZAÇÃO E SUA APLICACAO NA DINÂMICA MOLECULAR.

João B. de Carvalho (Depto de MAT Pura e Aplicada, UFRGS).

A Dinâmica Molecular estuda a evolução de sistemas de muitas partículas e cujas forças de interação são conhecidas. Sua metodologia é a da simulação do movimento de cada partícula, através da resolução da equação diferencial que o representa.

Computacionalmente, precisamos enfrentar dois problemas formidáveis: a enorme quantidade de equações a resolver e o enorme intervalo de tempo para evidenciarmos fenômenos significativos no sistema. Tradicionalmente, a Dinâmica Molecular usa métodos numéricos clássicos e de alta ordem. Isso implica num grande volume de cálculos (supercomputadores), e a acumulação dos erros computacionais, se trabalharmos em intervalos de tempo fisicamente úteis, nos levará a conclusões absurdas, como o crescimento explosivo da energia- do sistema.

Neste trabalho usamos uma estratégia diferente: empregamos métodos de baixa ordem MAS que conservam a energia do sistema, o que reflete a estabilidade computacional dos mesmos. Com isso, conseguimos fazer simulações de dinâmica molecular até mesmo em microcomputadores e durante grandes intervalos de tempo.

Demonstrando o sucesso dos métodos implementados, apresentaremos a comprovação computacional de algumas propriedades de fluídos:

-a relação de Einstein: $R(t) \propto v \cdot T$

-a expressão da constante de auto-difusão em termos da auto-correlação das velocidades das partículas do *fluído*. (CNPq)