



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Dinâmica molecular para esferas duras: revisão sobre métodos numéricos e aplicações
Autor	GUSTAVO TAVARES CABRAL
Orientador	CAROLINA BRITO CARVALHO DOS SANTOS

O modelo de esferas duras descreve partículas esféricas que não podem se sobrepor no espaço. É muito usado como modelo para descrever interações entre partículas em teorias de fluidos e sólidos em mecânica estatística. Apesar de ser muito simples, o modelo apresenta um diagrama de fases bastante rico e isto fez com que ele fosse utilizado para estudo de diversos sistemas, como meios granulares, coloides, fluidos e polímeros. Mais recentemente o modelo tem sido utilizado em teoria da informação (como em problemas de digitalização de sinais e correção de códigos), e também em problemas de otimização.

Existem duas abordagens típicas para a simulação de sistemas de partículas: orientada a tempo orientada a eventos.

Na dinâmica molecular orientada a tempo, todas as partículas são deslocadas de maneira síncrona por intervalo de tempo Δt , a cada iteração. A necessidade de atualizar a posição de todas as partículas a cada iteração inviabiliza o uso do método para sistemas com muitas partículas.

Por outro lado, na dinâmica orientada a eventos, o tempo avança de um evento para o próximo (tipicamente, um evento é uma colisão entre duas partículas). Esta abordagem permite diversas otimizações que a tornam aplicável a uma ampla gama de sistemas.

Neste trabalho, apresento algumas melhorias no método orientada a eventos: processamento assíncrono, uso de células e uso de *heap* como fila de prioridade. Tais aprimoramentos fazem com o tempo de processamento varie pouco com os parâmetros do sistema, possibilitando simulações eficientes em sistemas com baixa densidade ou com milhões de partículas.