

TP N° 4

*Dinámica Molecular regida  
por el paso temporal*

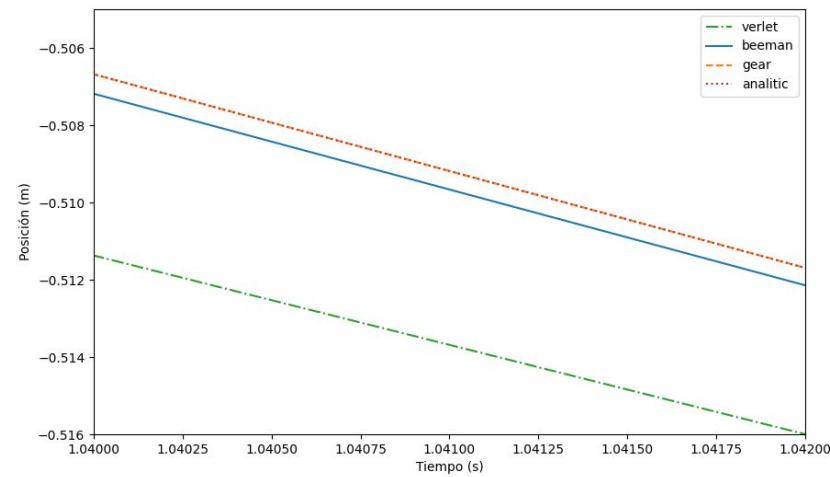
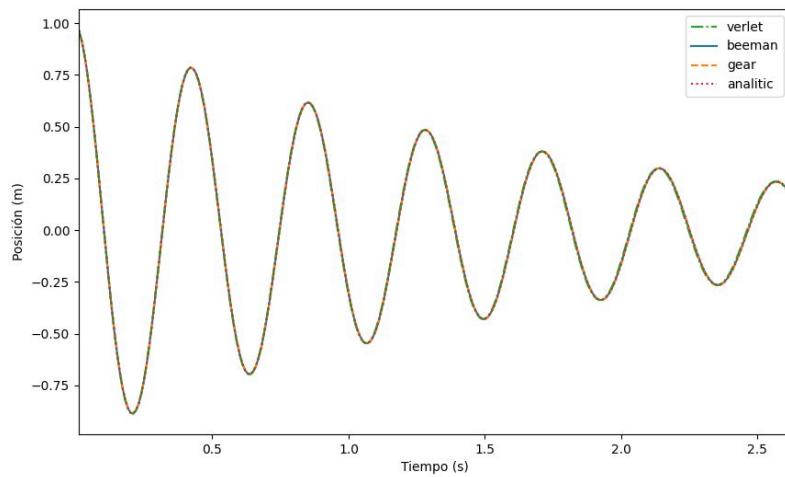


Simulación de Sistemas  
Grupo 2

# Sistema 1: Oscilador Puntual Amortiguado

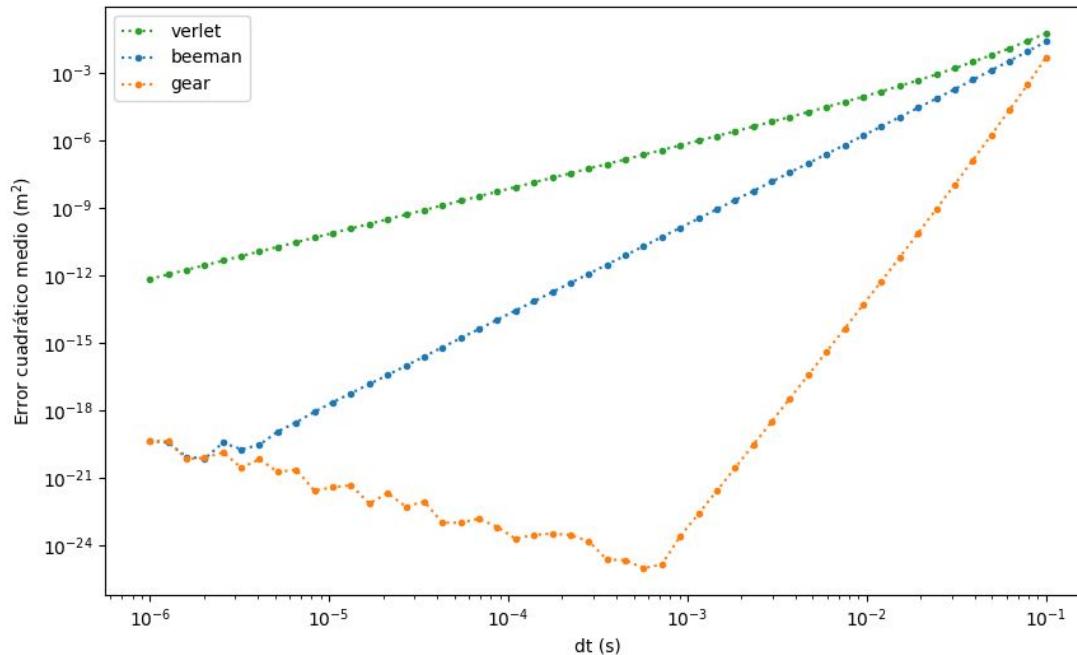
# Resultados

Gear Predictor-Corrector (Orden 5), Beeman y Verlet



# Resultados

Variación de  $dt$ : Error Cuadrático Medio



# Sistema 2: Osciladores acoplados

# Introducción

# Introducción

Modelo Matemático: Partículas Intermedias

## Ecuación de Fuerza

$$F_i(t) = -k \cdot (y_i(t) - y_{i-1}(t)) - k \cdot (y_i(t) - y_{i+1}(t))$$

$$i \in [1, N - 1]$$

# Introducción

Modelo Matemático: Partícula Forzada

## Ecuación de Movimiento

$$y_N(t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t)$$

# Implementación

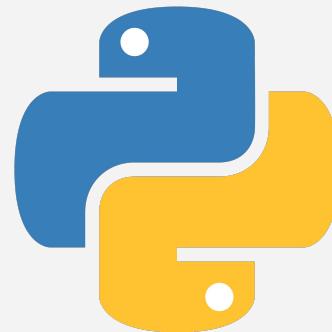
# Implementación

## Lenguajes de Programación

Simulaciones

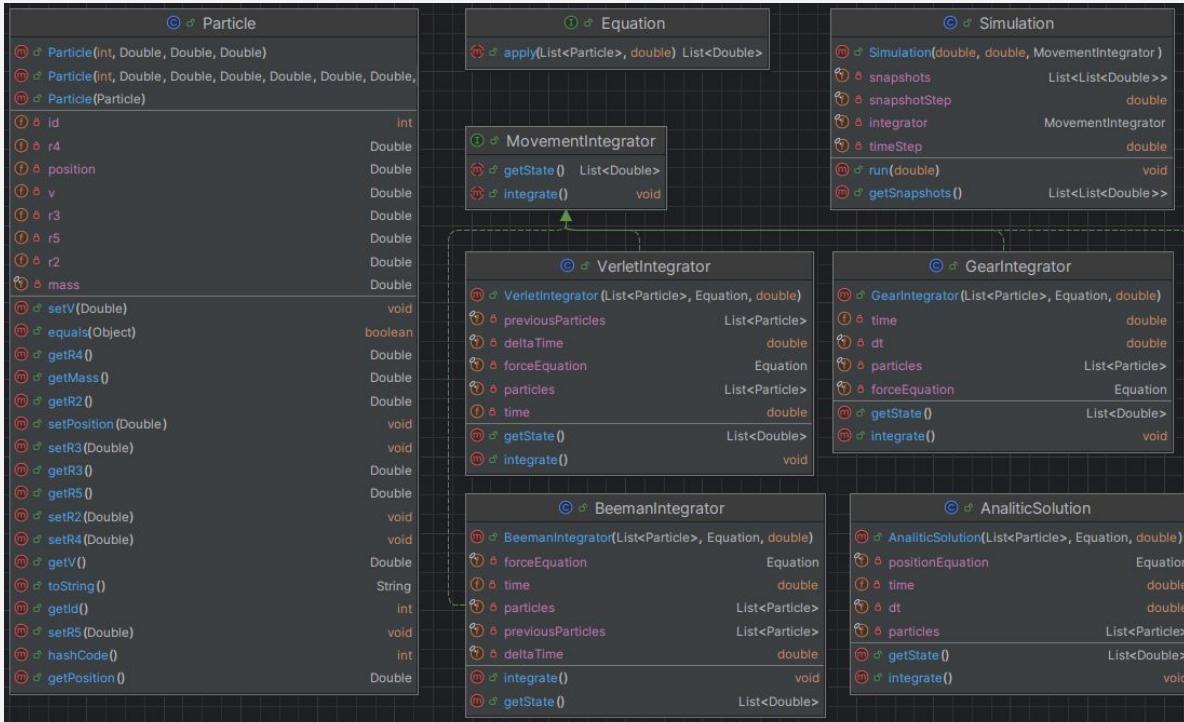


Gráficos



# Implementación

## Diagrama UML



# Implementación

## Pseudocódigo

Inicio

    Definir partícula/s

    Definir función de fuerza

    Elegir método de integración

    Mientras no exceda el tiempo de la simulación, avanzando con paso dt

        Avanzar un paso la integración

        Actualizar partícula/s

        Dado un paso de tiempo dt2, guardar snapshots

    Fin Mientras

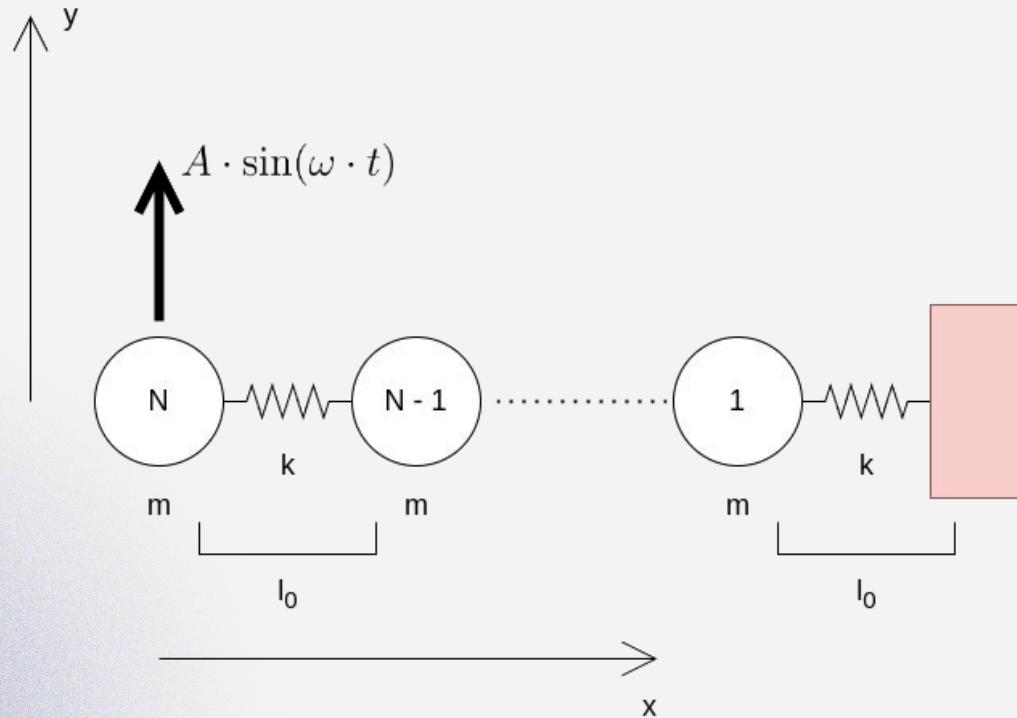
    Guardar los estados en un archivo

Fin

# Simulaciones

# Simulaciones

## Geometría



- $N$  partículas acopladas
- Separadas por  $l_0$
- Masa  $m$
- Desplazamiento vertical

# Simulaciones

## Parámetros

### Fijos

$$\left\{ \begin{array}{l} N = 100 \\ m = 0.001 \text{ kg} \\ A = 0.01 \text{ m} \\ I_o = 0,001 \text{ m} \end{array} \right.$$

Tiempo de simulación: **100s**

Integrador: **Verlet**

### Variables

$$\left\{ \begin{array}{l} k = 100, \quad \omega \in [5, 15] \\ k = 2000, \quad \omega \in [40, 50] \\ k = 4000, \quad \omega \in [55, 70] \\ k = 7000, \quad \omega \in [75, 90] \\ k = 10000, \quad \omega \in [90, 110] \\ dt = \frac{1}{100 \cdot \omega} \end{array} \right.$$

# Simulaciones

Observables: Amplitud

**Temporal:** Amplitud

$$A(t) = \max_i \{y_i(t)\}$$

**Escalar:** Amplitud Máxima

$$A_{max} = \max_t \{A(t)\}$$

# Simulaciones

Observables: Frecuencia de Resonancia

$$\omega_0 = \arg \left[ \max_{\omega} \{ A_{max}(\omega) \} \right]$$

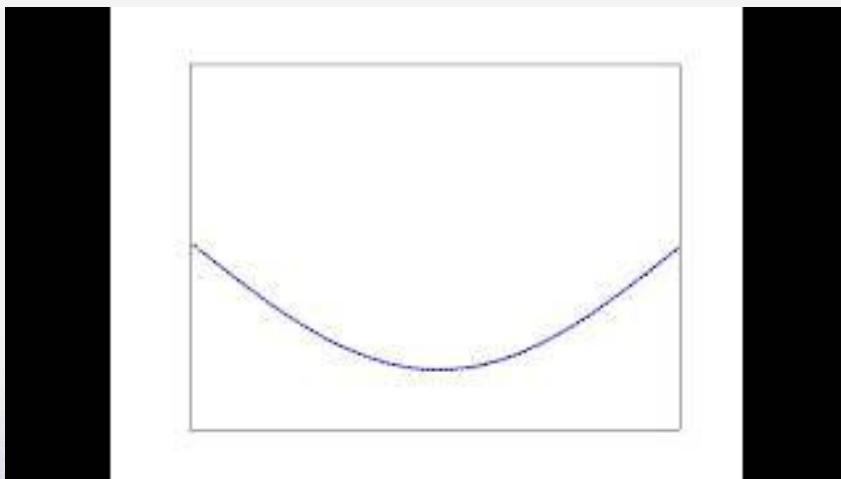
Frecuencia para la cual  $A_{max}$   
alcanza su valor máximo

# Resultados

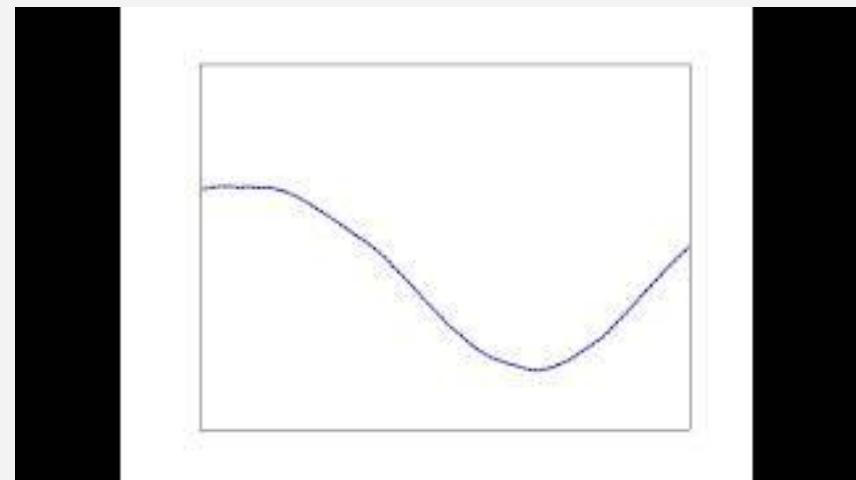
# Resultados

## Animaciones

$\omega = 10 \text{ rad/s}$     $k = 100 \text{ N/m}$



$\omega = 15 \text{ rad/s}$     $k = 100 \text{ N/m}$

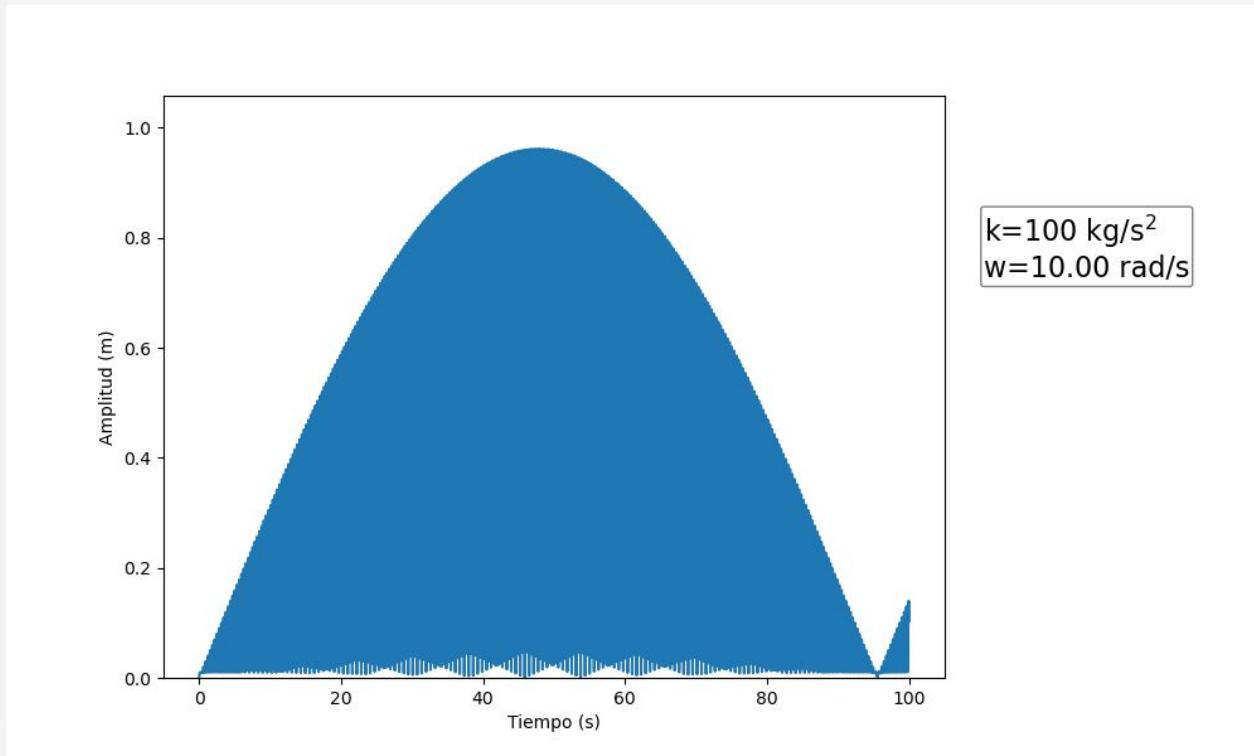


<https://youtu.be/L9UrWSvBN34>

<https://youtu.be/NCi4Tod9WHE>

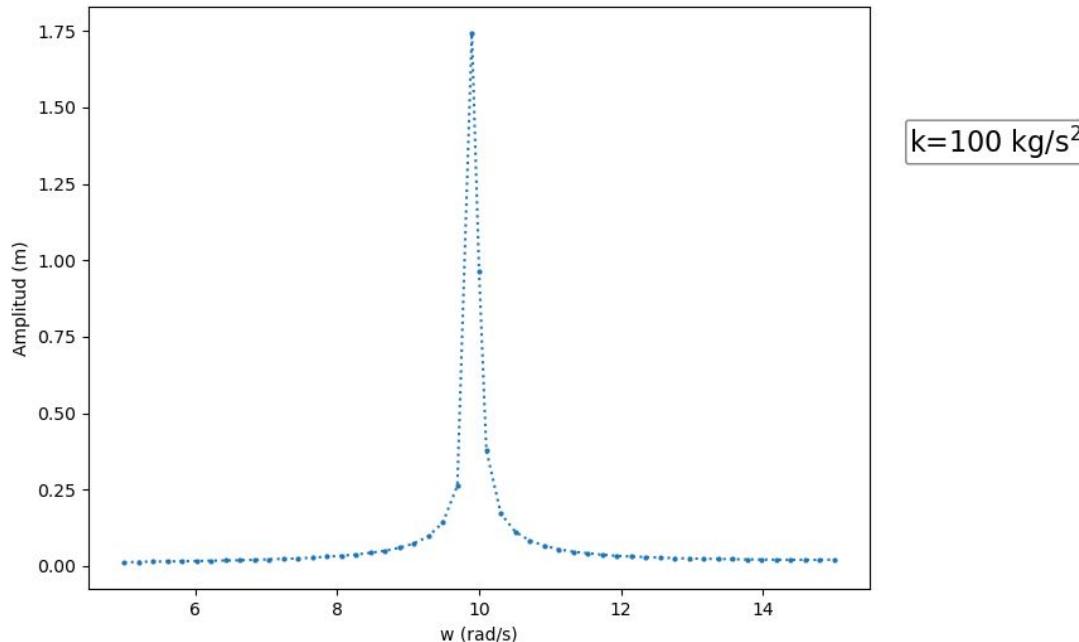
# Resultados

Variación de  $\omega$ : Amplitud del Sistema en el Tiempo



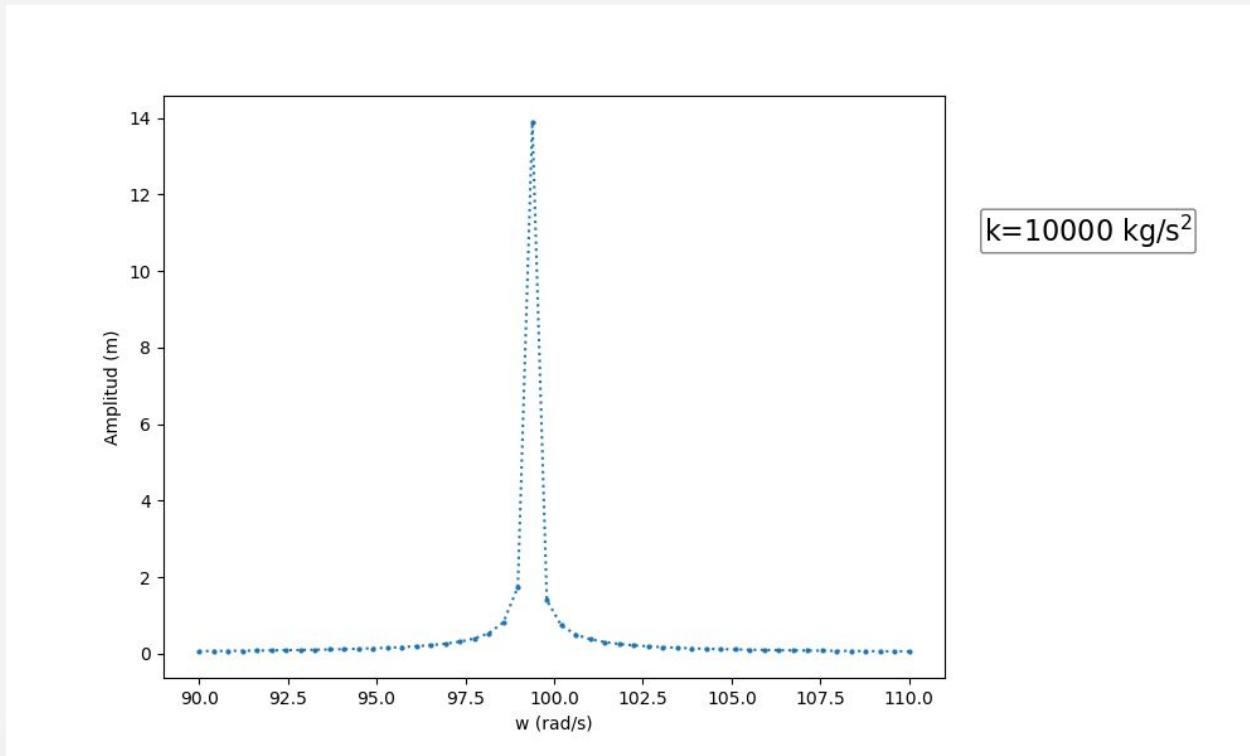
# Resultados

Variación de  $\omega$ : Amplitud Máxima del Sistema



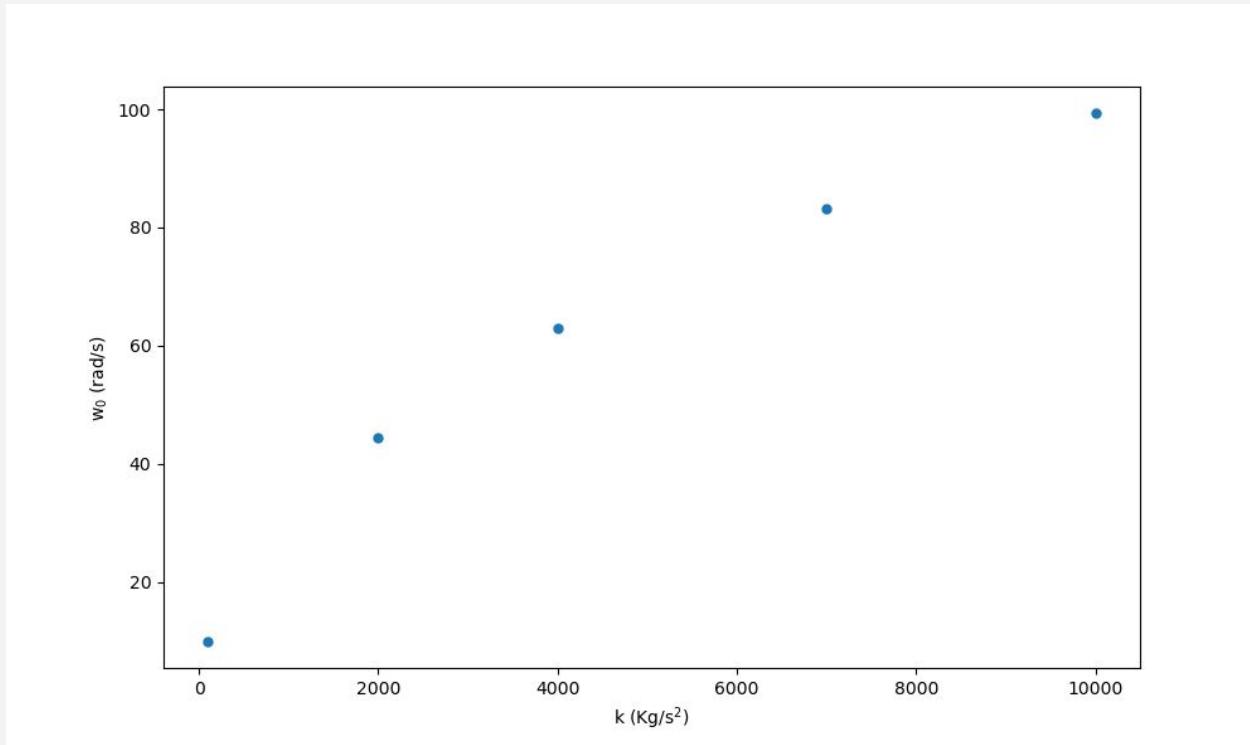
# Resultados

Variación de  $\omega$ : Amplitud Máxima del Sistema



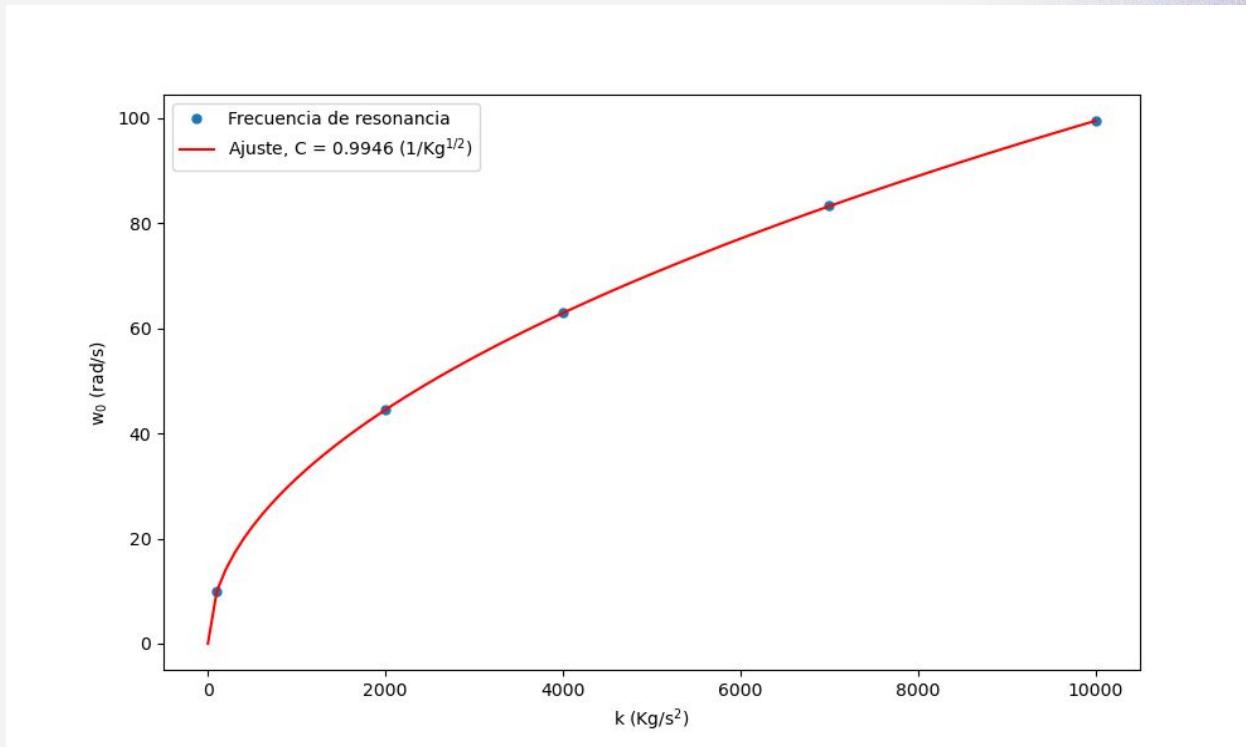
# Resultados

Variación de  $k$ : Frecuencia de Resonancia del Sistema



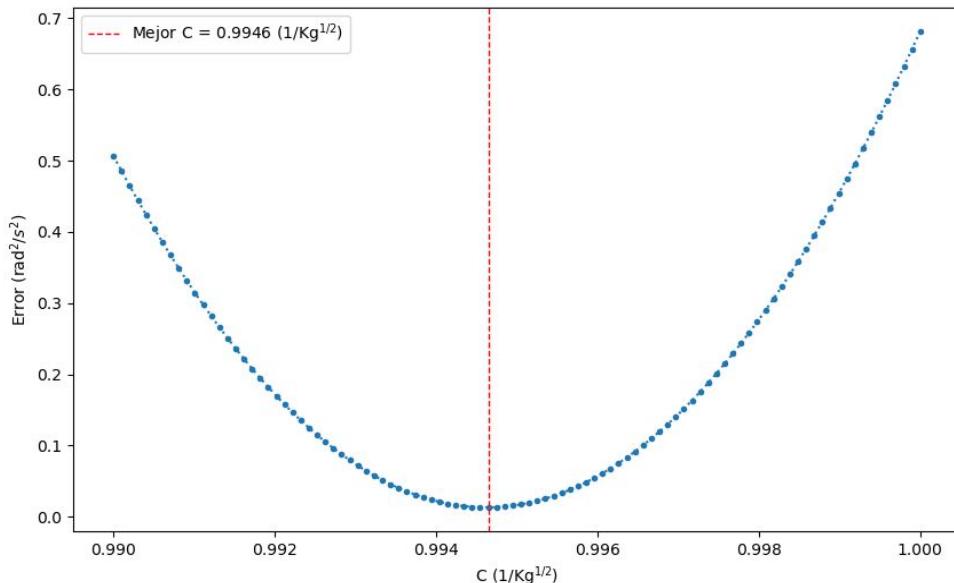
# Resultados

Variación de  $k$ : Frecuencia de Resonancia del Sistema (Ajuste)



# Resultados

Variación de  $k$ : Error del Ajuste



**Función modelo:** Raíz Cuadrada

$$f(k, C) = C \cdot \sqrt{k}$$

**Error del ajuste:**

$$E(C) = \sum_i [\omega_i - f(k_i, C)]^2$$

# Conclusiones

# Conclusiones

Error de integradores, Frecuencia de resonancia

## Oscilador Puntual Amortiguado

- **Gear** tiene menor error que **Verlet** y **Beeman**
- Con  $dt$  demasiados pequeños, el error aumenta

## Osciladores Acoplados

- Existe un  $\omega_0$  donde la amplitud es máxima
- $\omega_0 \sim k^{1/2}$

# Muchas Gracias