# 72.25 - "Simulación de Sistemas"
# TP4: "Dinámica Molecular regida por el paso temporal"

De Simone, Franco - 61100
Dizenhaus, Manuel - 61101

# Sistema 1: "Oscilador Amortiguado"

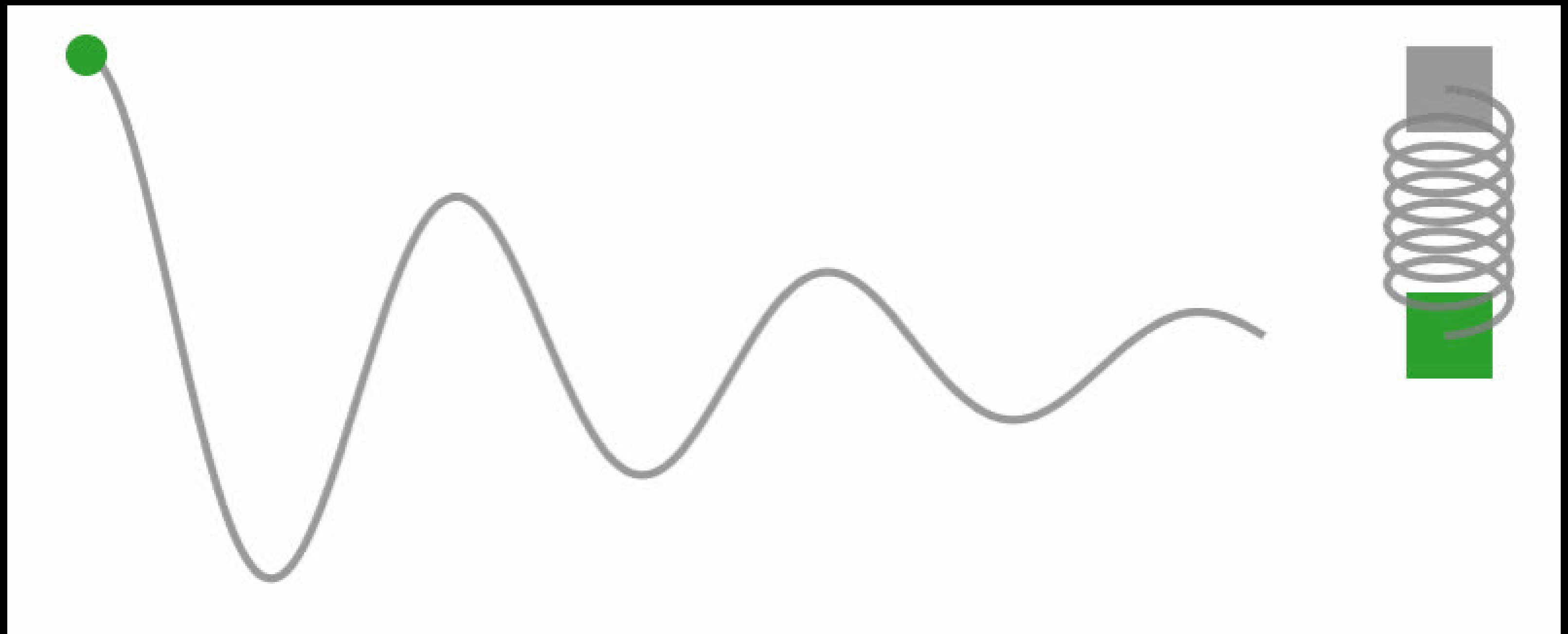
# Sistema 1: "Oscilador amortiguado"

Consideraciones:

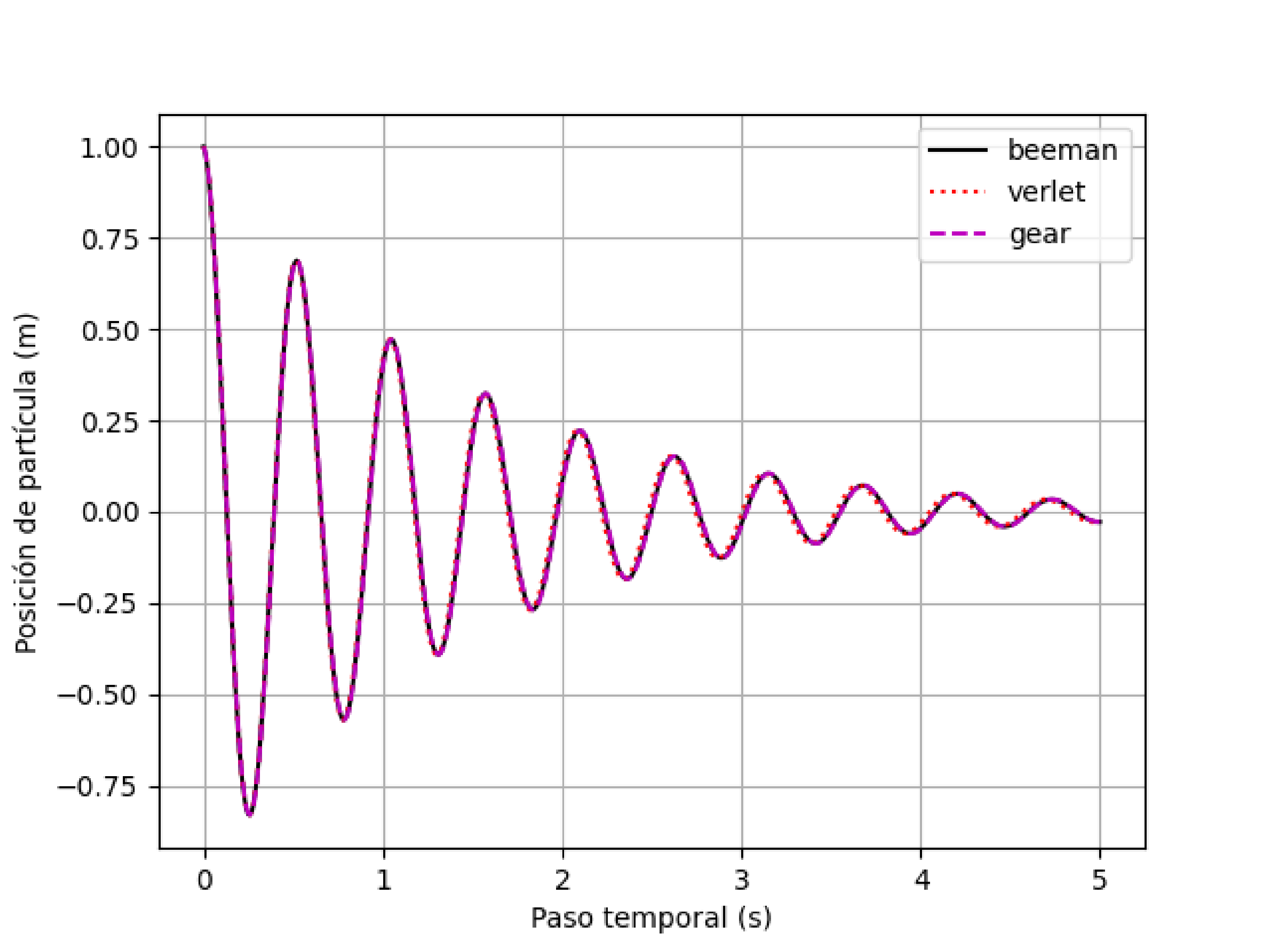
- **Conocemos solución real**
  - Cálculo de ECM
- **3 metodos de integración:**
  - Verlet
  - Gear Predictor-Corrector grado 5
  - Beeman

**Condiciones iniciales:**

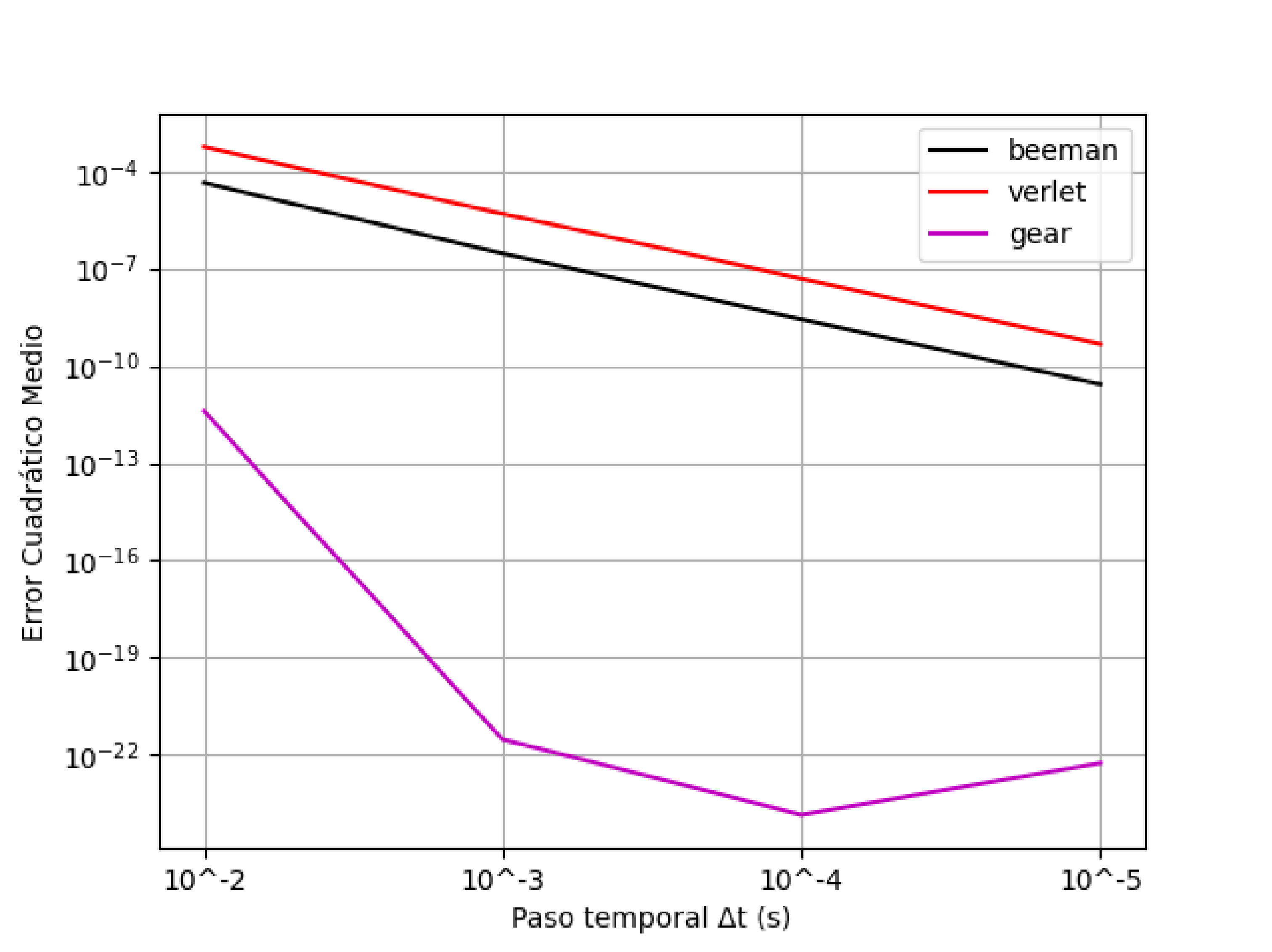
- m = 70kg
- k = 10^4 N/m
- γ = 100 kg/s
- tf = 5s
- r0 = 1m
- v0 = -Aγ / 2m m/s



# Resultados




**Posición de partícula en función del tiempo, Paso temporal = 10^-2 s**



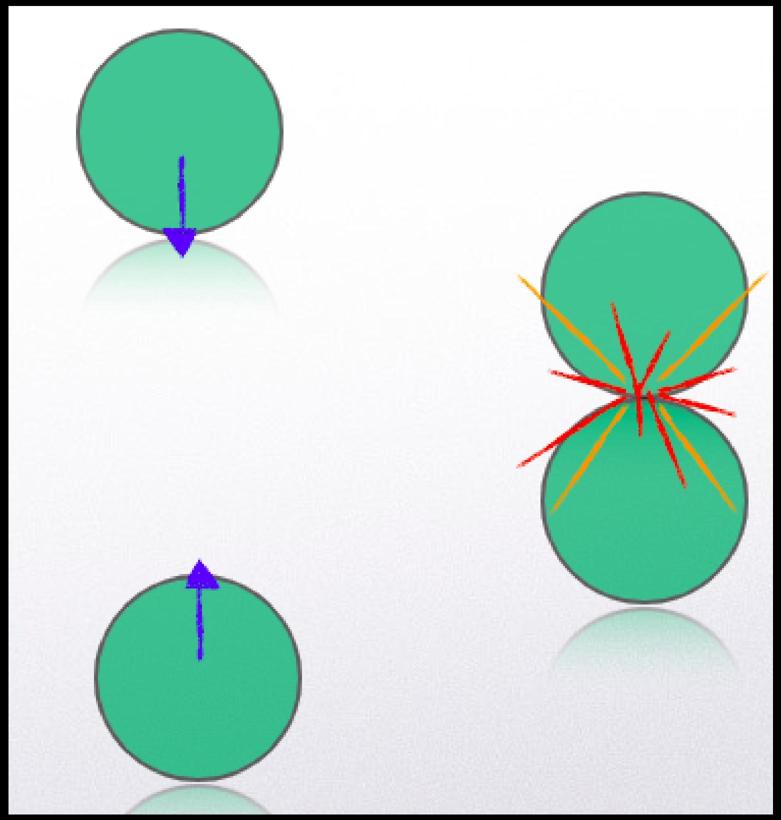

**Error Cuadrático Medio con diferentes pasos temporales**

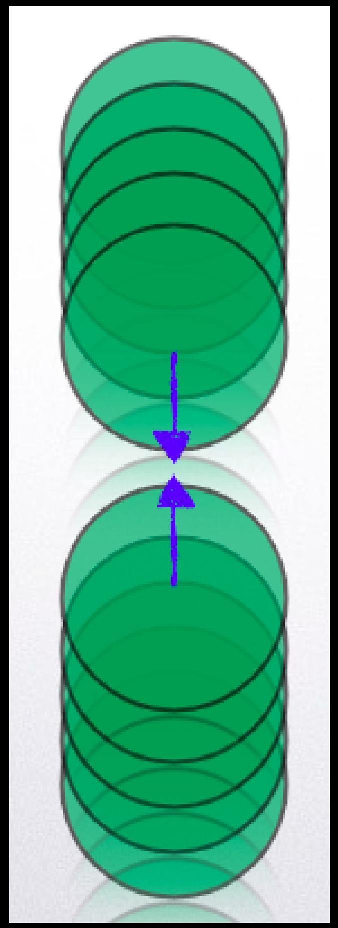
# Sistema 2 : "Mesa de Pool"

# Introducción

# Introducción

- TP3 -> Sistema dirigido por eventos
- TP4 -> Sistema regido por el paso temporal





# Fundamentos

# Fundamentos

- Sistema dirigido por paso temporal → N partículas, tiempo avanza en $\Delta t$, interacciones de largo o corto alcance.

- Algoritmos basados en desarrollos de Taylor nos permiten **aproximar** la solución de estos problemas.

- Realizamos análisis con **Gear Predictor-Corrector orden 5**

# Fundamentos

## Algoritmo Gear Predictor-Corrector :

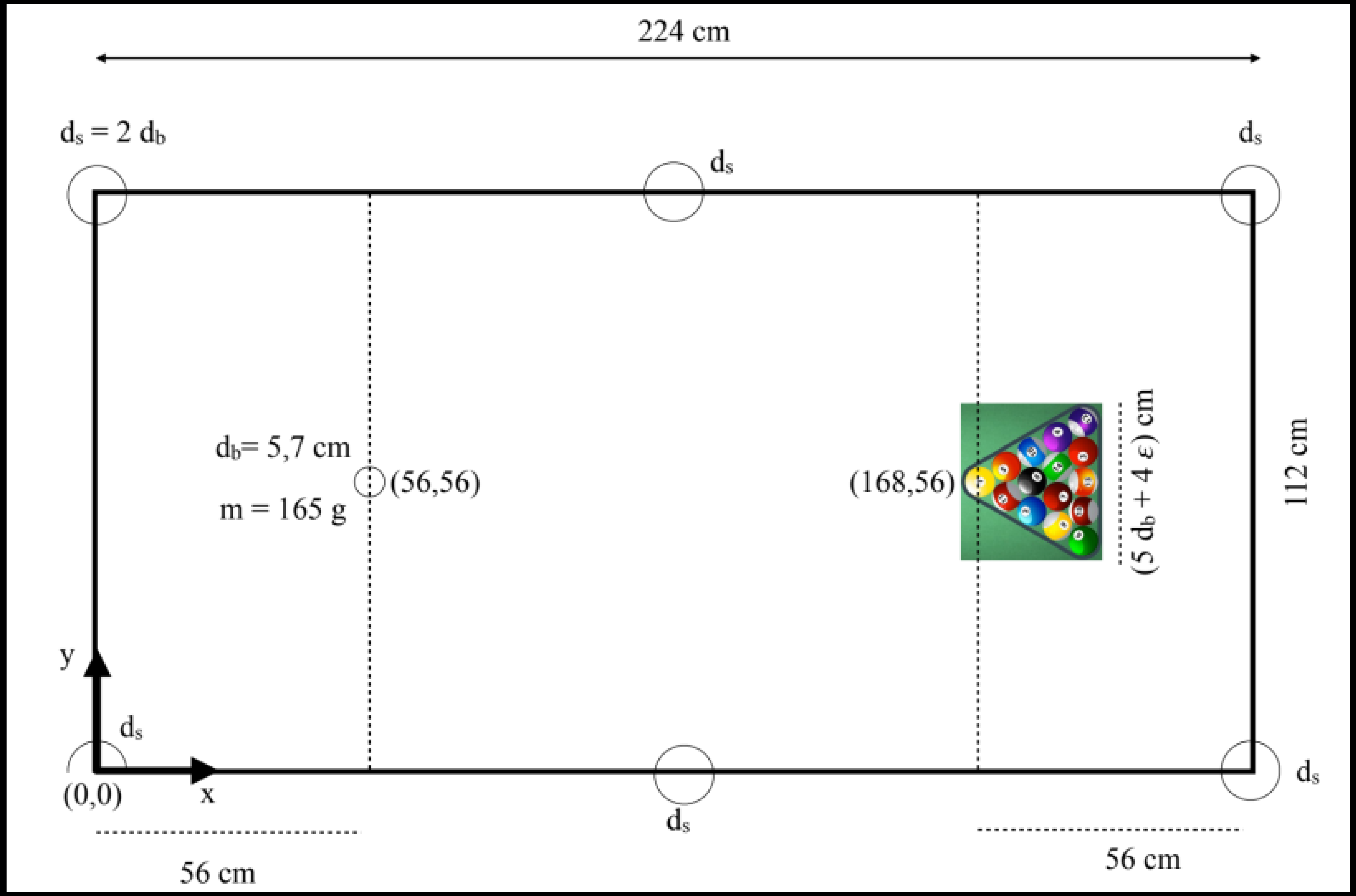
$$r_i^p(t+\Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t$$
$$v_i^p(t+\Delta t) = v_i(t) + a_i(t)$$

$$f_i(r_i^p, v_i^p) \Rightarrow a_i(t+\Delta t)$$

$$v_i(t+\Delta t) = v_i(t) + a_i(t+\Delta t)\Delta t$$
$$r_i(t+\Delta t) = r_i(t) + v_i(t+\Delta t)\Delta t$$

# Fundamentos

## Mesa de Pool :



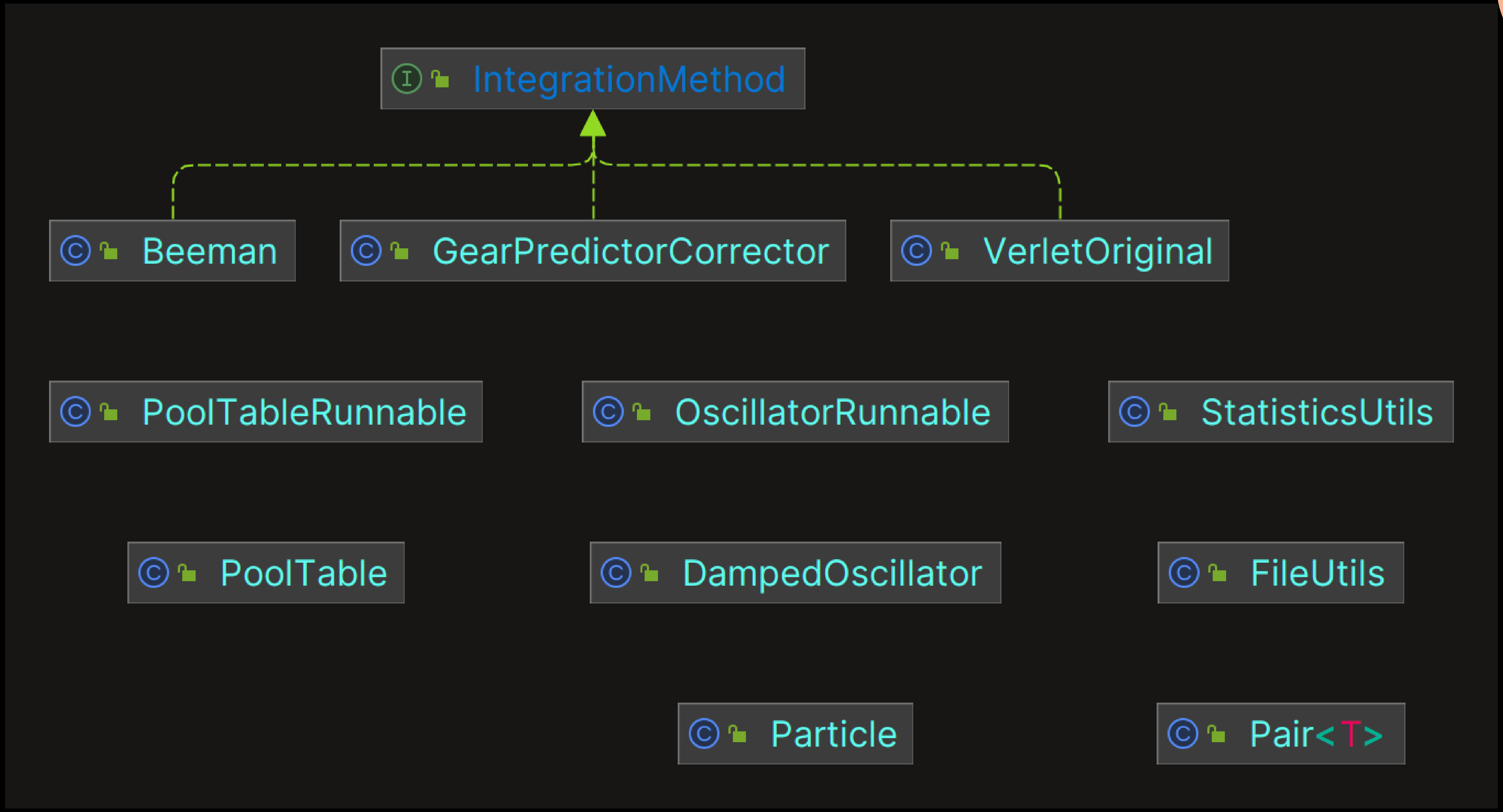

Fuerza de interacción entre partículas

$$F_{ij} = \kappa(|r_j - r_i| - (R_i + R_j))\hat{r}$$

con $\quad \hat{r} = \dfrac{r_j - r_i}{|r_j - r_i|}$

# Implementación

# Implementación



# Simulaciones

# Simulaciones

Parte 1:

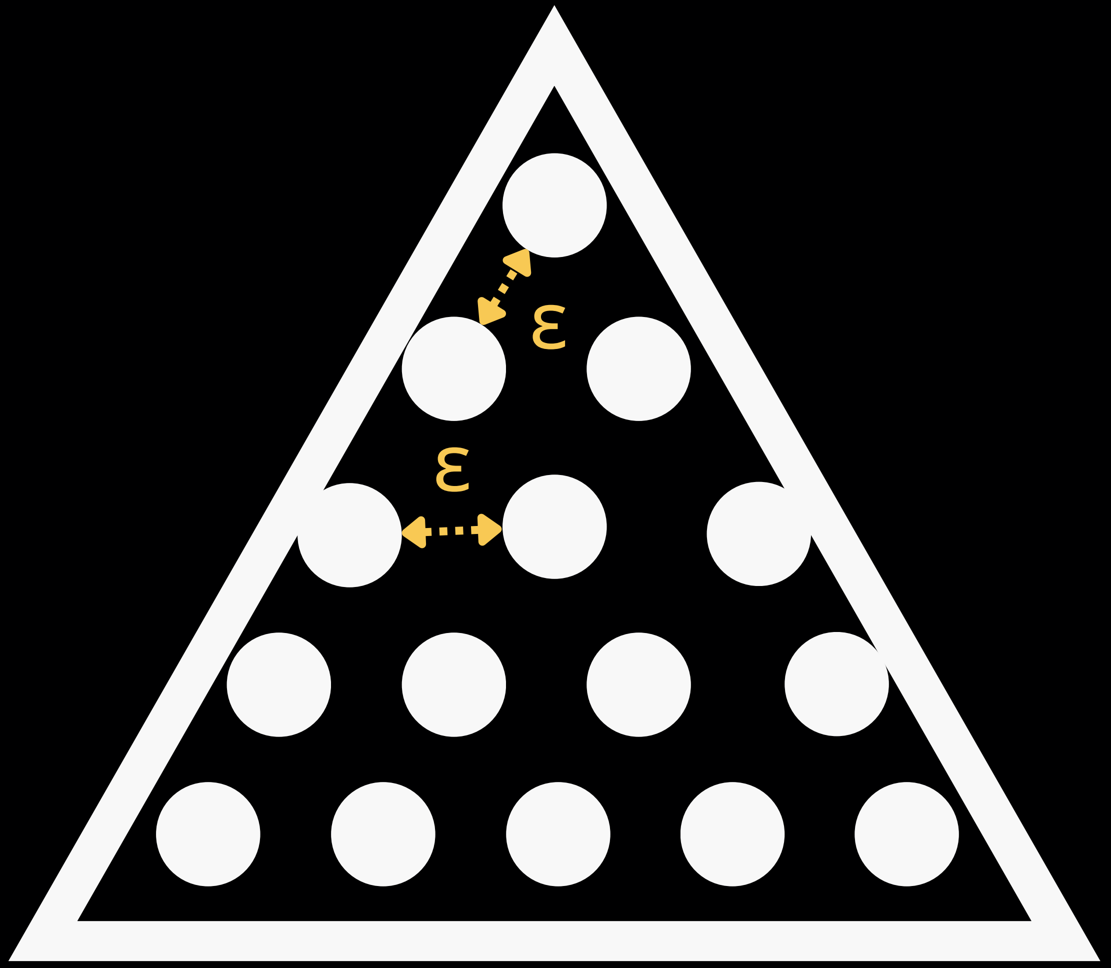
- **Variación del paso temporal Δt = {-2,-3,-4,-5}**
  - Comparar posiciones de partículas a mismo **t** con diferentes Δt
  - **Sin** buchacas
  - Condiciones iniciales:
    - Altura inicial bola blanca: 0.56m
    - ε (separación entre bolas del triangulo) fija en 0.0003m

Observable ⟶ $$\Phi^k(t) = \sum_{i=1}^{N_B} ||r_i^{k+1}(t) - r_i^k(t)||$$

# Simulaciones

Parte 2:

- **Variación de la altura inicial h = [0.42, 0.56]**
  - 20 alturas diferentes (paso de 0.7m)
  - **Con** buchacas
  - ε variable entre 0.0002m y 0.0003m

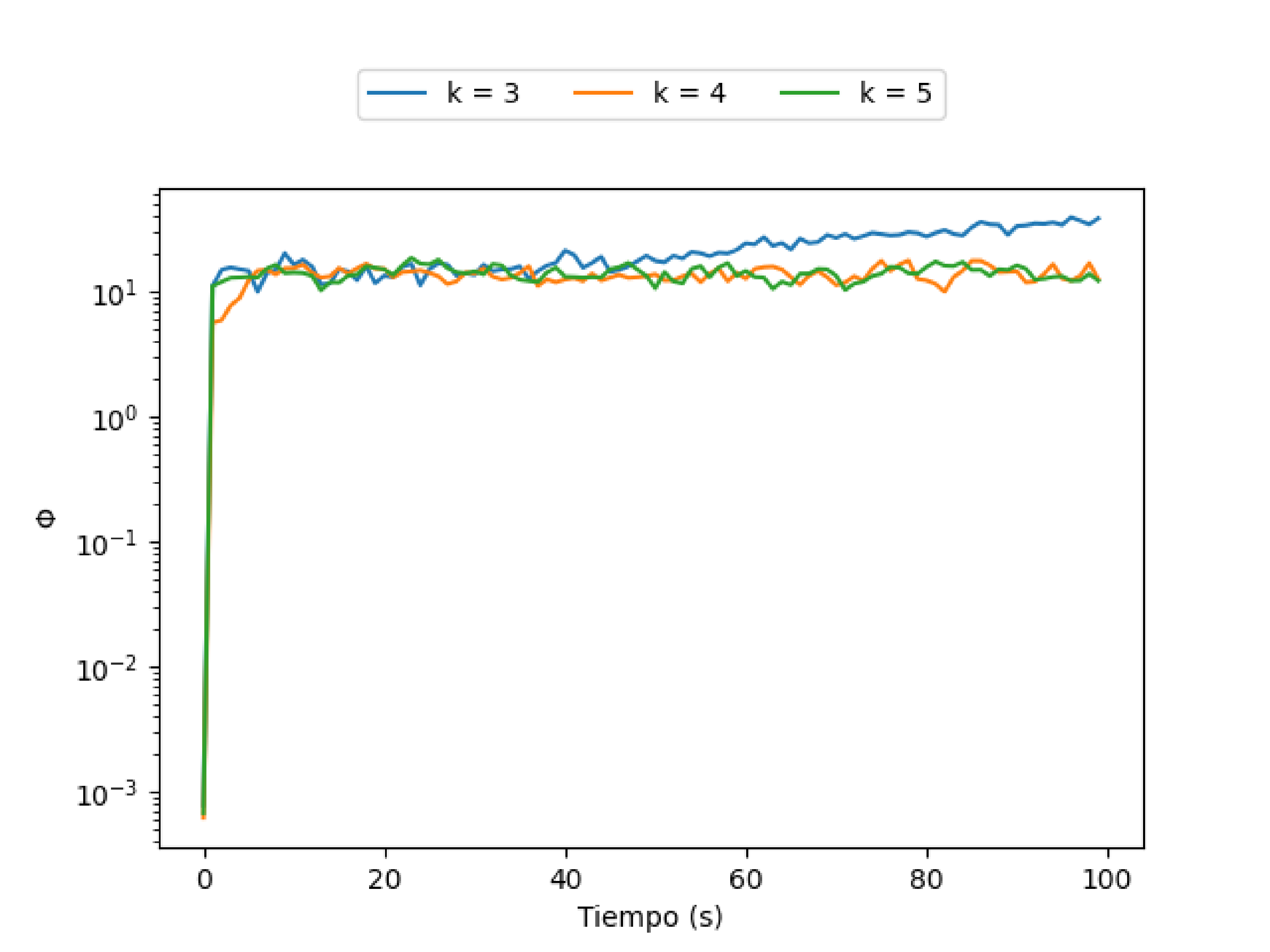



- Se estudia:
  - Tiempo para que el 50% de las bolas desaparezcan
  - Tiempo para que el 100% de las bolas desaparezcan

# Resultados

# Resultados

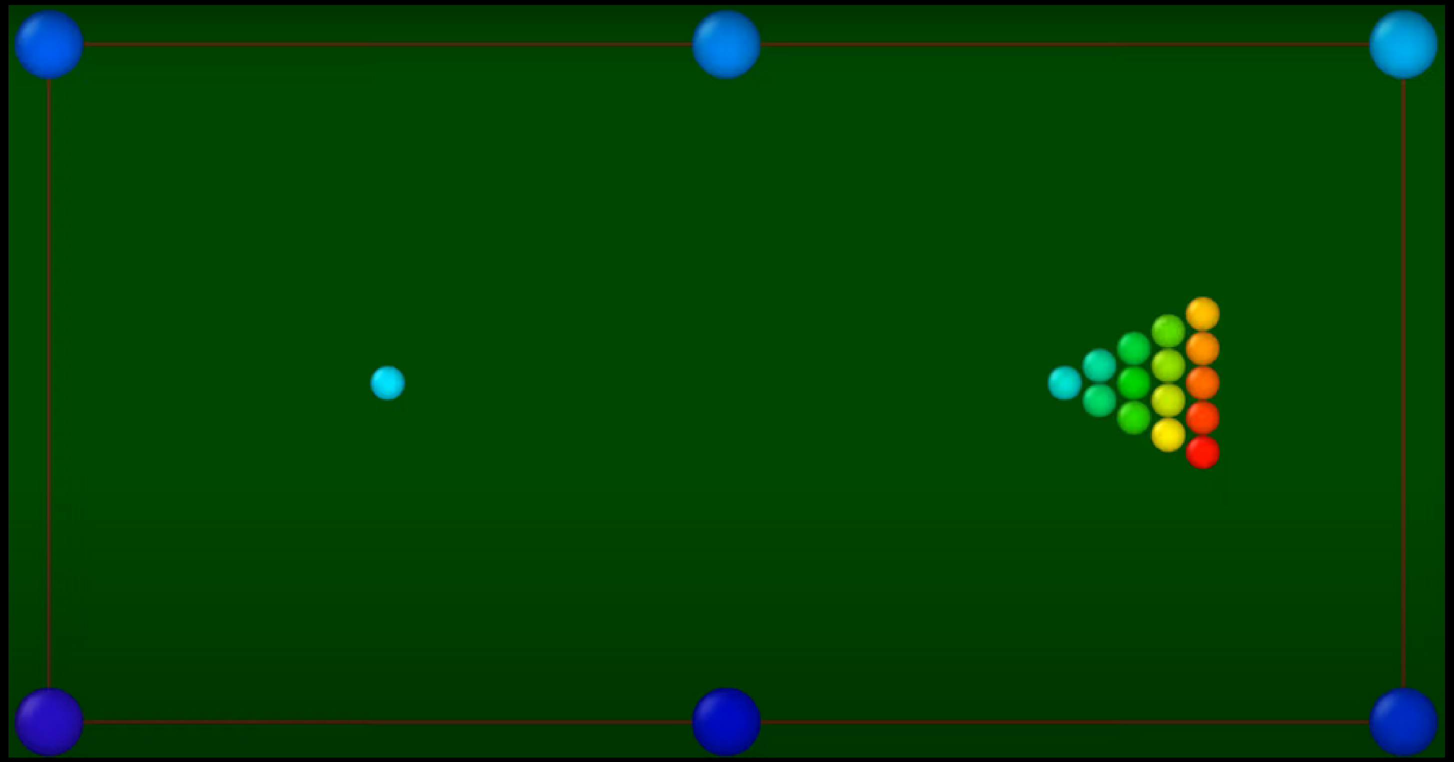
Observable en función del tiempo



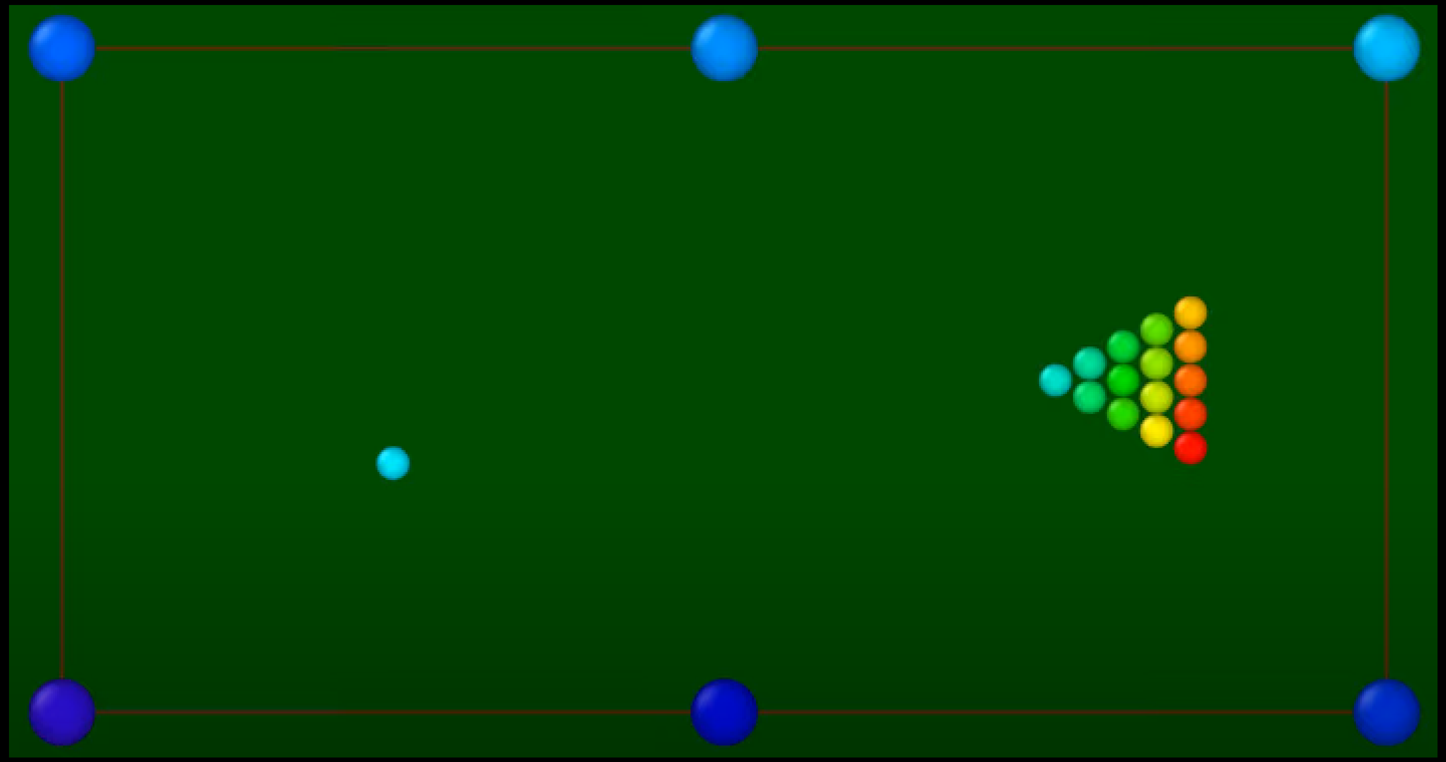
# Resultados

Variación de la altura inicial de la pelota:

$$\Delta t_1 = 0.0001s, \ \Delta t_2 = 0.05s$$



Altura inicial de la bola = 0.56m



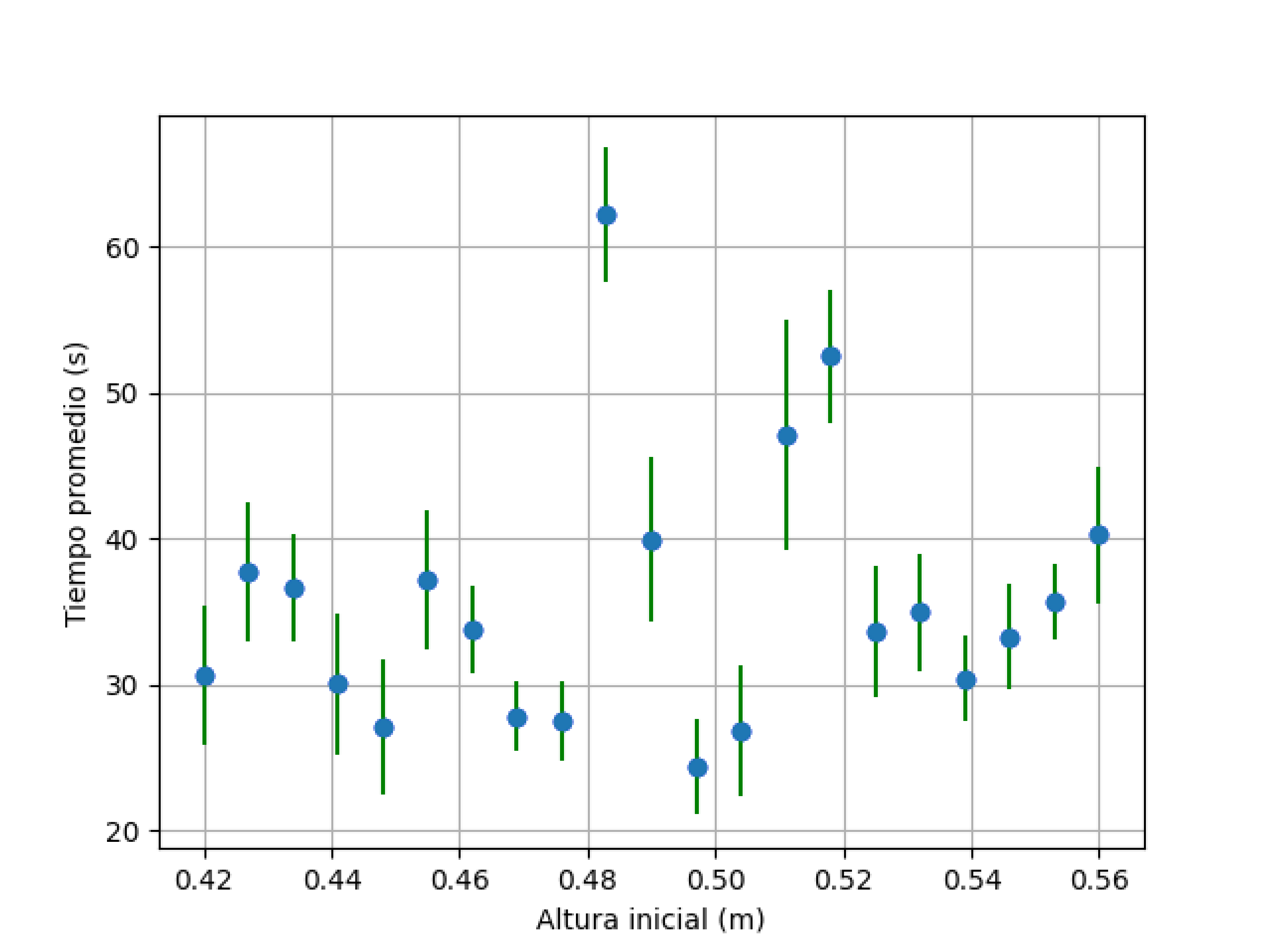
Altura inicial de la bola = 0.42m

https://youtu.be/Ec1GujPtXDM

https://youtu.be/s77RYY6tbzQ

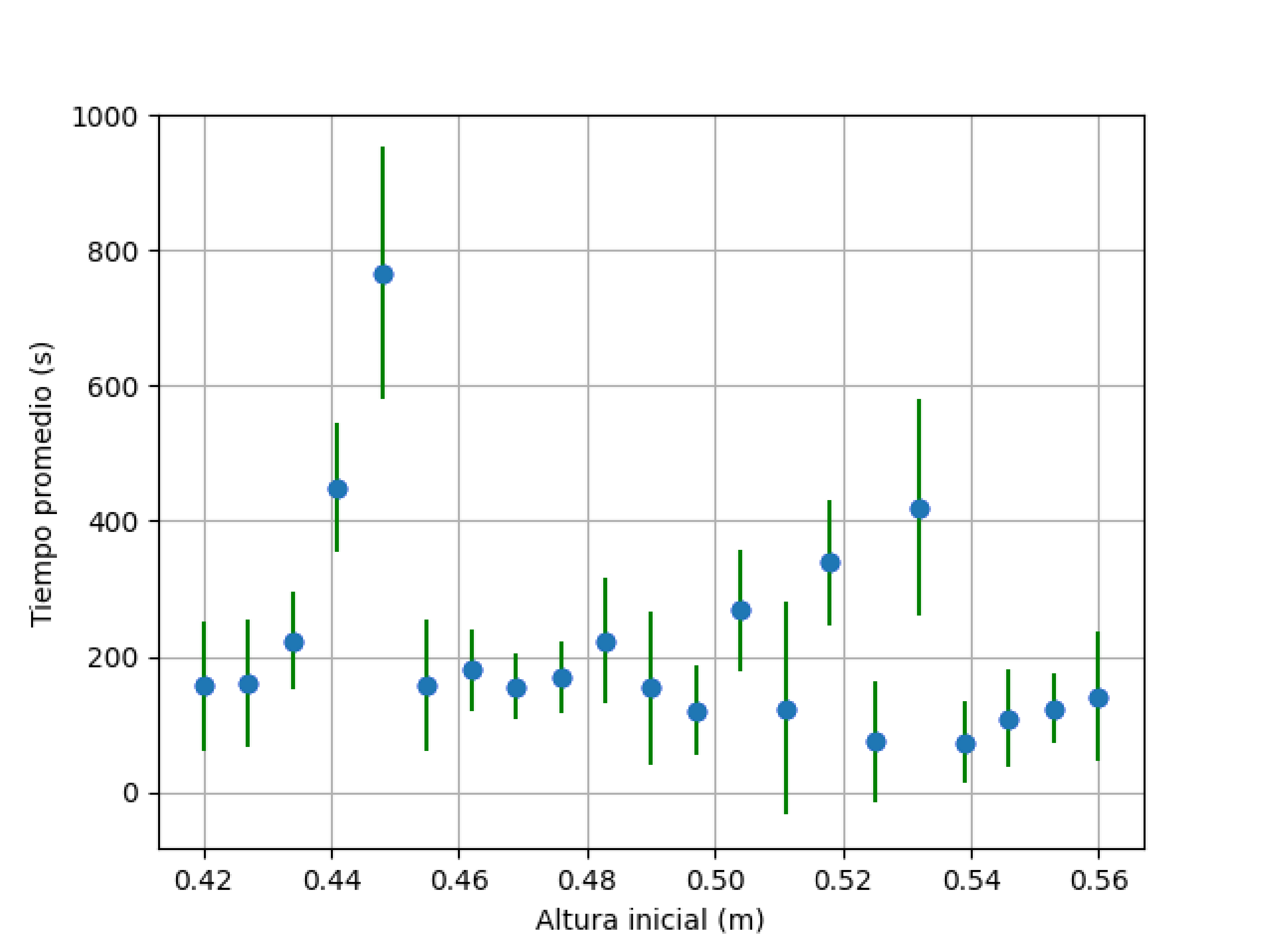
# Resultados

Tiempo promedio de finalización con variación de altura inicial (50% de partículas)



# Resultados

Tiempo promedio de finalización con variación de altura inicial (100% de partículas)



# Conclusiones

# Conclusiones

- El ECM del método gear es significativamente menor que el de los otros dos ante un problema de solución conocida
- El paso temporal influye en las aproximaciones, observando como la función Φ toma valores menores de $k = 2$ a $k = 3$
- El tiempo total que le toma al 50% de las bolas ingresar a las buchacas no tiene una relación directa con el tiempo que le toma desaparecer al 100%
- Los tiempos para que ingresen las buchacas con el sistema dirigido por colisiones y el sistema dirigido por el paso temporal son diferentes