

Dinámica Molecular regida por el Paso Temporal

Oscilador puntual y osciladores acoplados

Grupo 4:

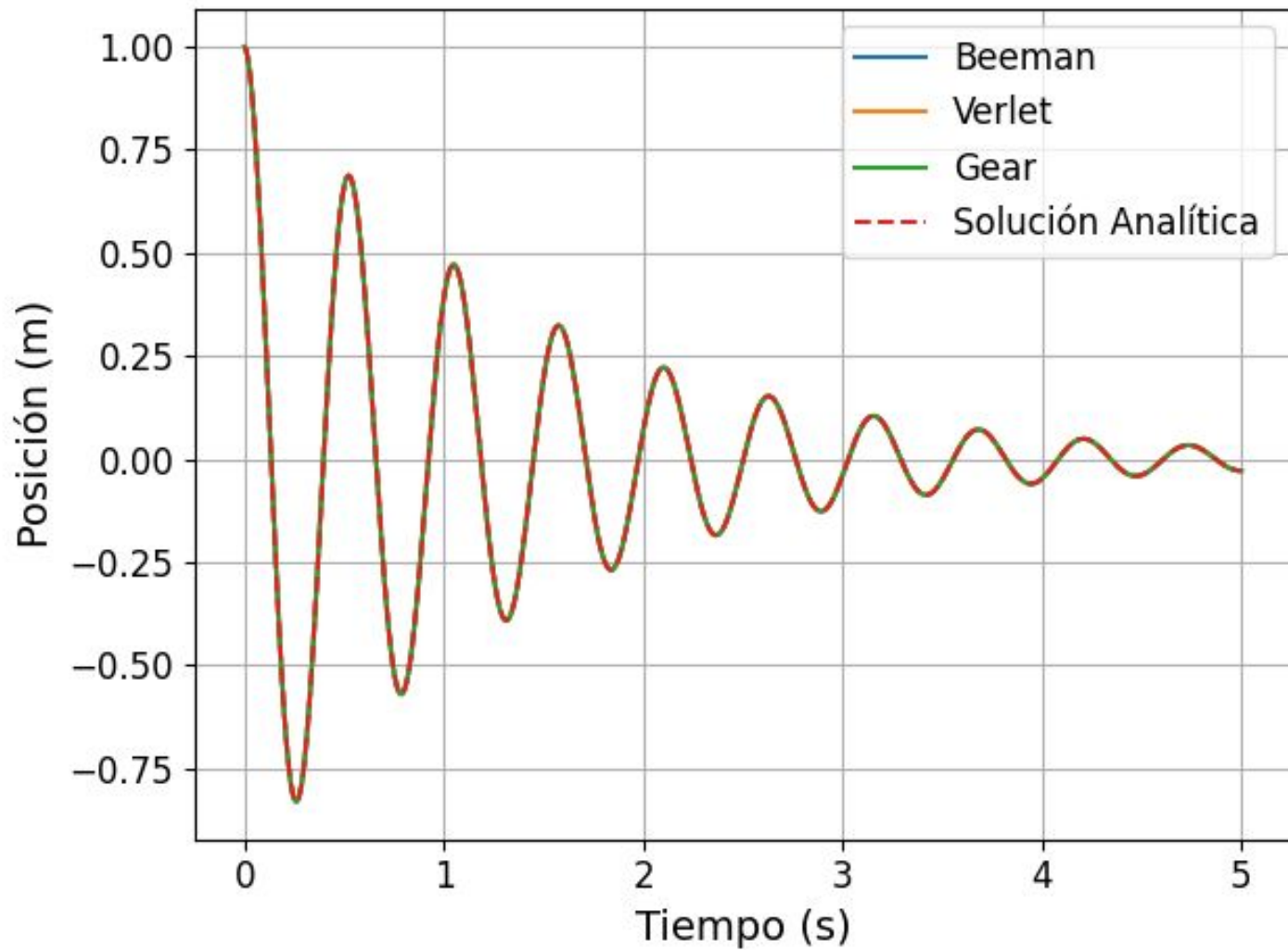
Nicolás Matías Margenat

Juan Burda

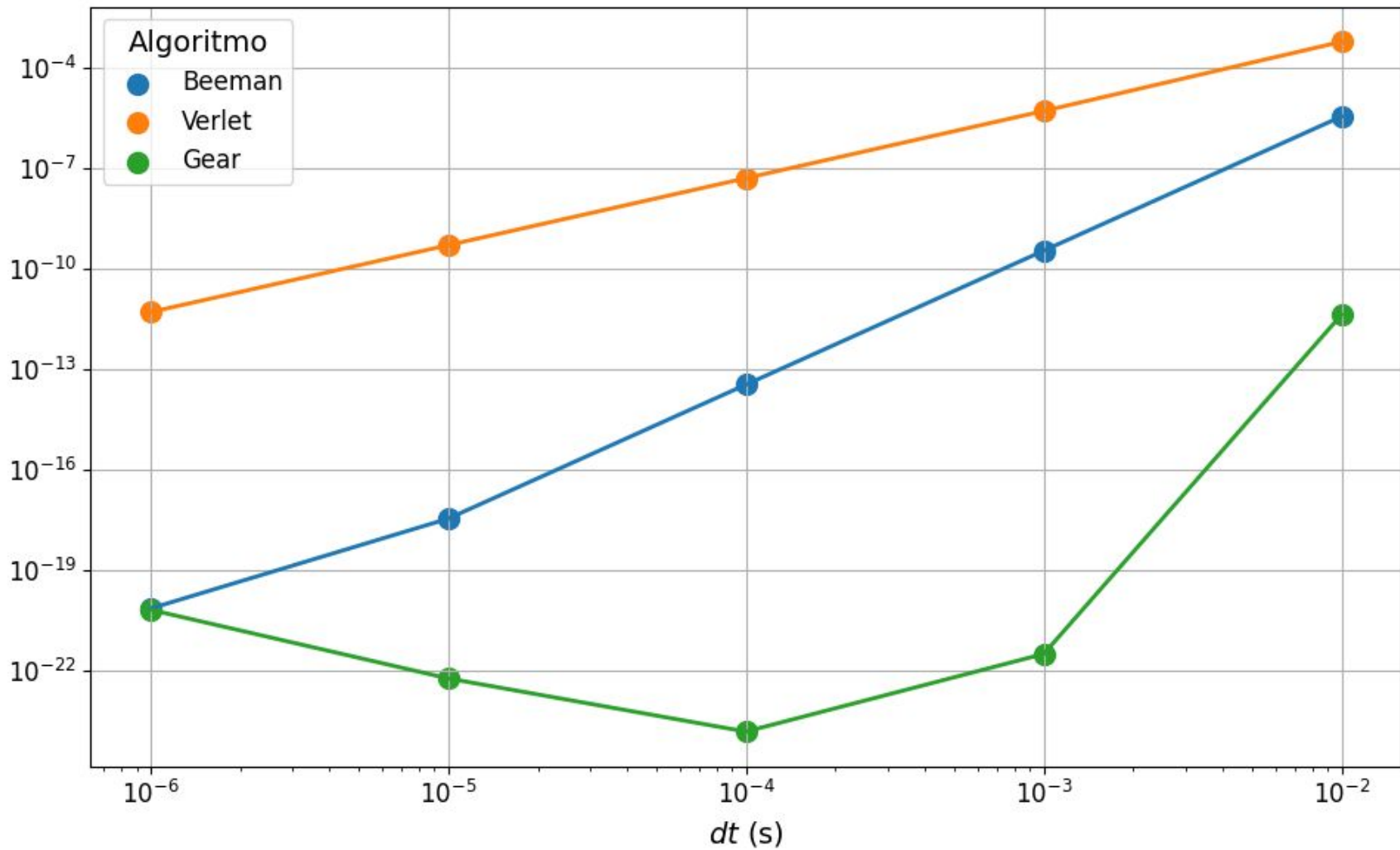
Bruno Enzo Baumgart

72.25 - Simulación de Sistemas

14 de octubre, 2024
Instituto Tecnológico de Buenos Aires

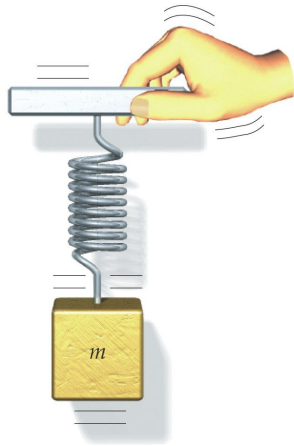


$$\Delta t = 0.001 \text{ s}$$

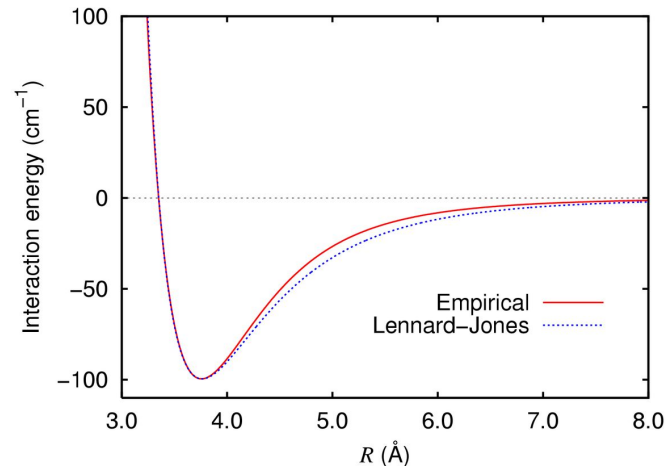


Introducción

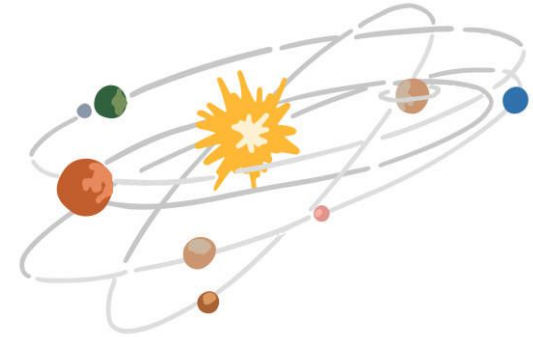
Osciladores



Gas de Lennard-Jones

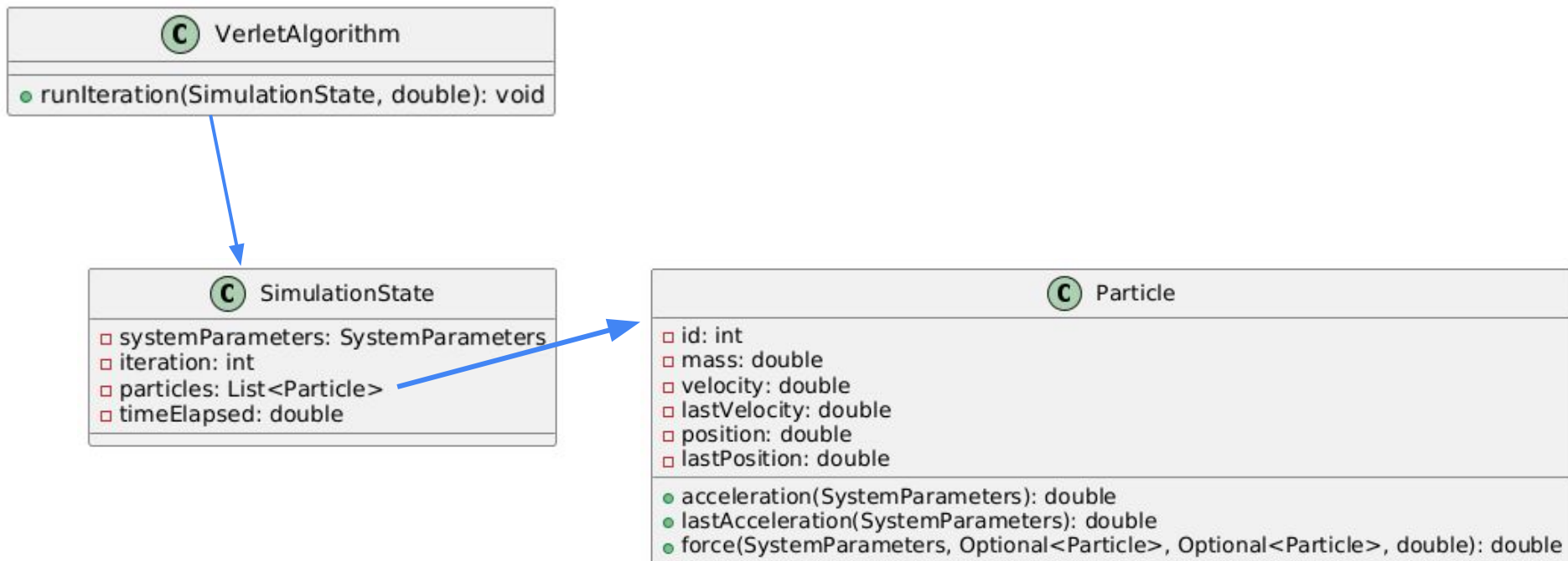


Sistema Solar



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

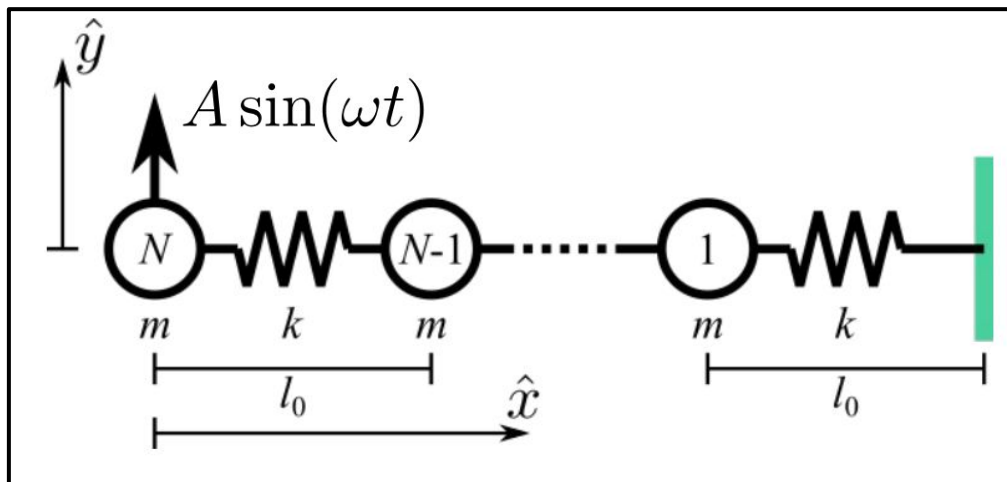
Implementación




```
partículas ← generarPartículas(parametros)
estadoSimulación ← generarEstadoSimulación(parámetros, partículas)

while tiempo < maxTiempo:
    guardarEstado(estadoSimulación)
    Verlet.correrIteración(estadoSimulación)
end
```

Simulaciones



Parámetros Fijos

- $m = 0.001 \text{ kg}$ • $A = 10^{-2} \text{ m}$
- $l_0 = 10^{-3} \text{ m}$ • $N = 100$
- $\Delta t = \min \left(10^{-3}, \frac{1}{100 * \omega} \right) \text{ s}$

Condiciones de contorno

- $y_N = A \sin(\omega t)$
- $y_0 = 0$

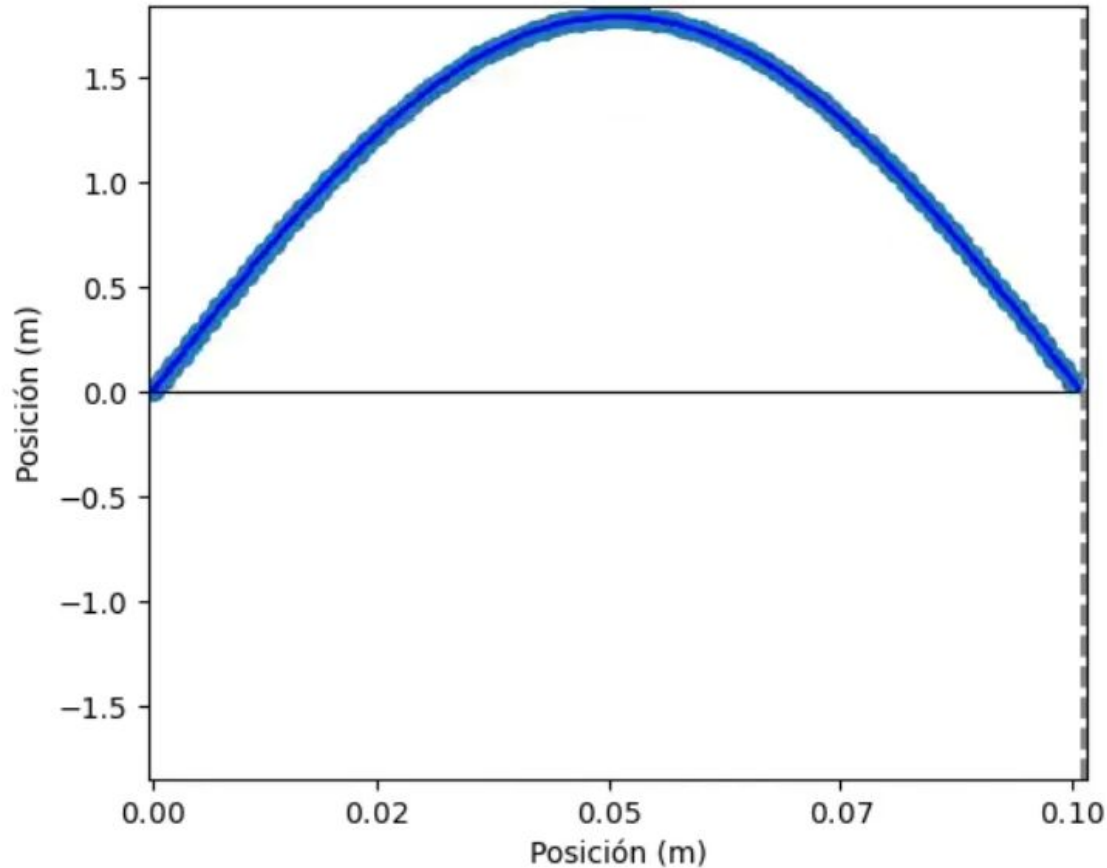
Parámetros Variables

- $k \in [100; 10000] \text{ kg/s}^2$
- $\omega \in [8; 101] \text{ s}^{-1}$

- $y_M = \max (\max(|y_i(t)|))$ con $i \in [0; N]$
- $\omega_0 = \omega / y_M(\omega) \geq y_M(\omega'), \forall \omega'$

Resultados

Resultados



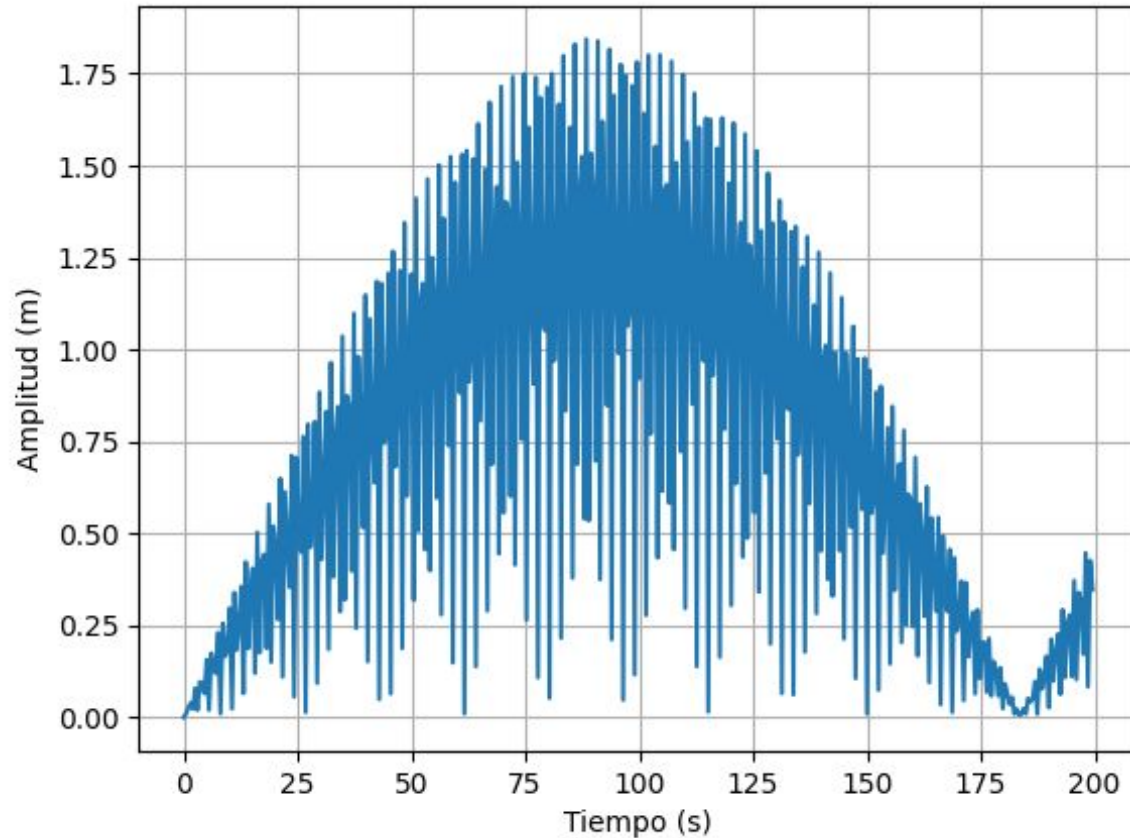
$$k = 100 \text{ kg/s}^2$$

$$\omega = 9.9 \text{ s}^{-1}$$

<https://youtu.be/mXduEEfSMLg>

Resultados

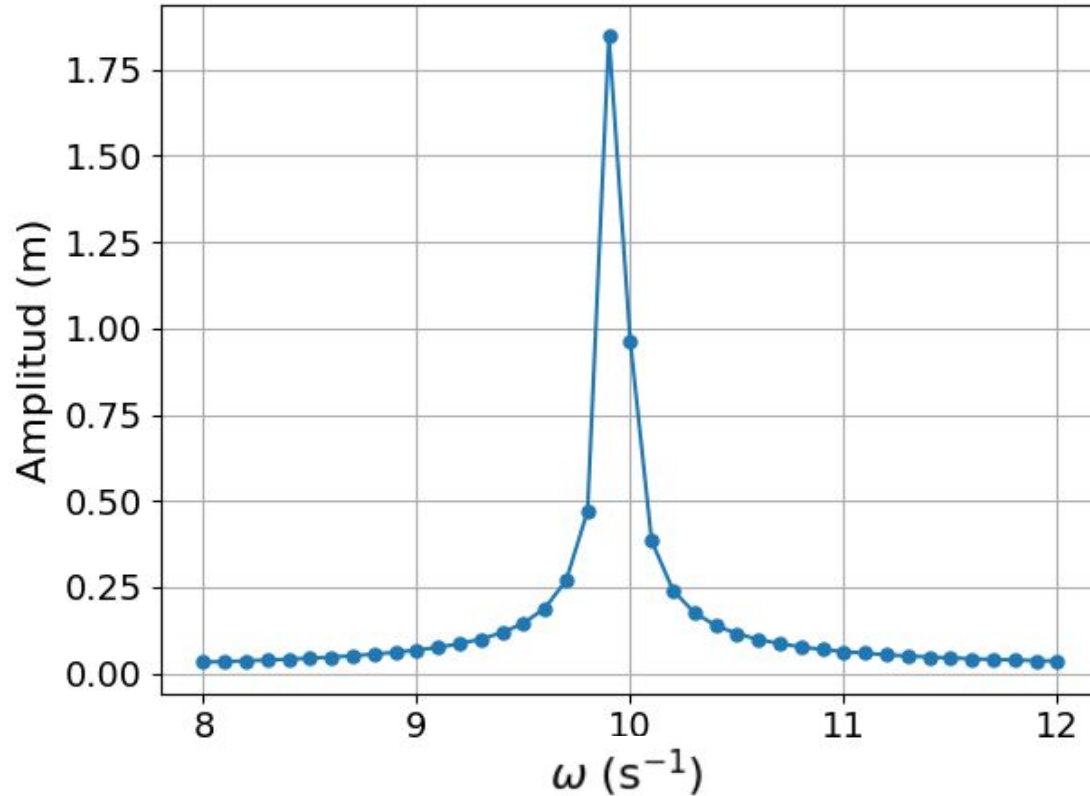
Amplitud del sistema



$$k = 100 \text{ kg/s}^2$$
$$\omega = 9.9 \text{ s}^{-1}$$

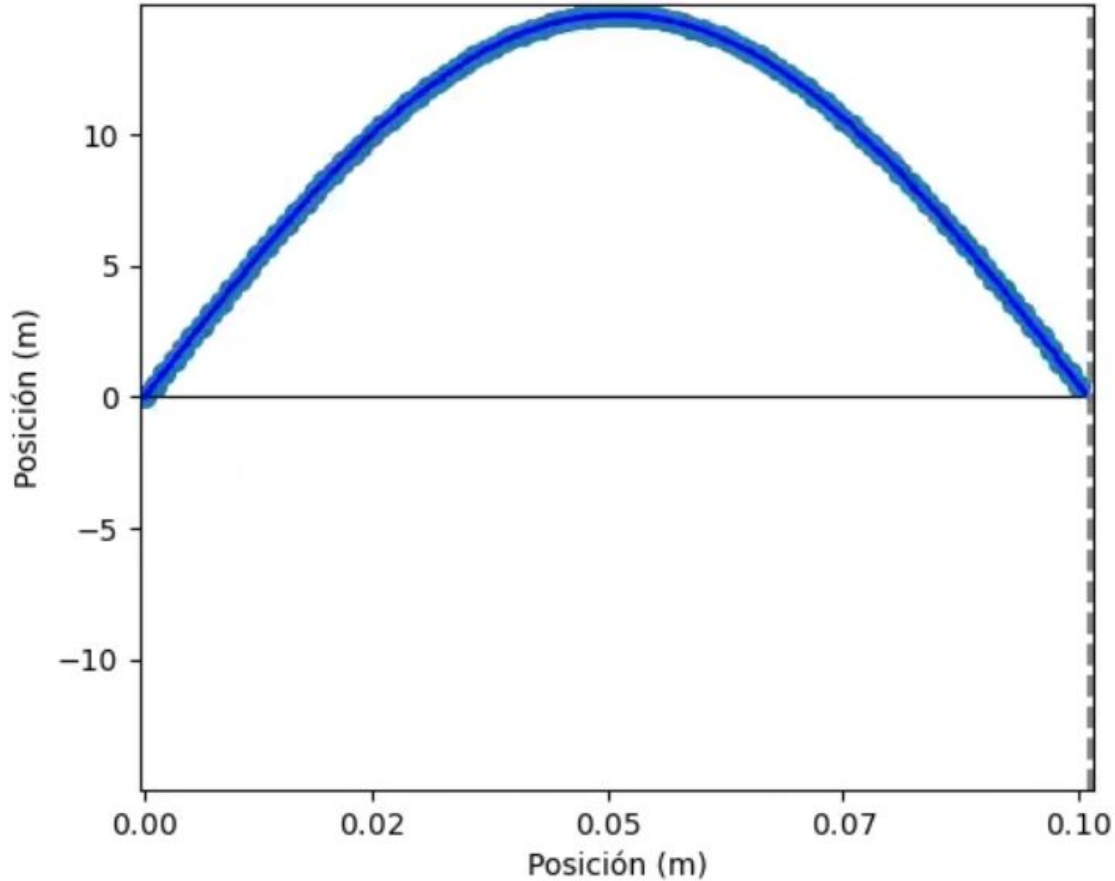
Resultados

Frecuencia óptima



$$k = 100 \text{ kg/s}^2$$
$$\omega_0 = 9.9 \text{ s}^{-1}$$

Resultados



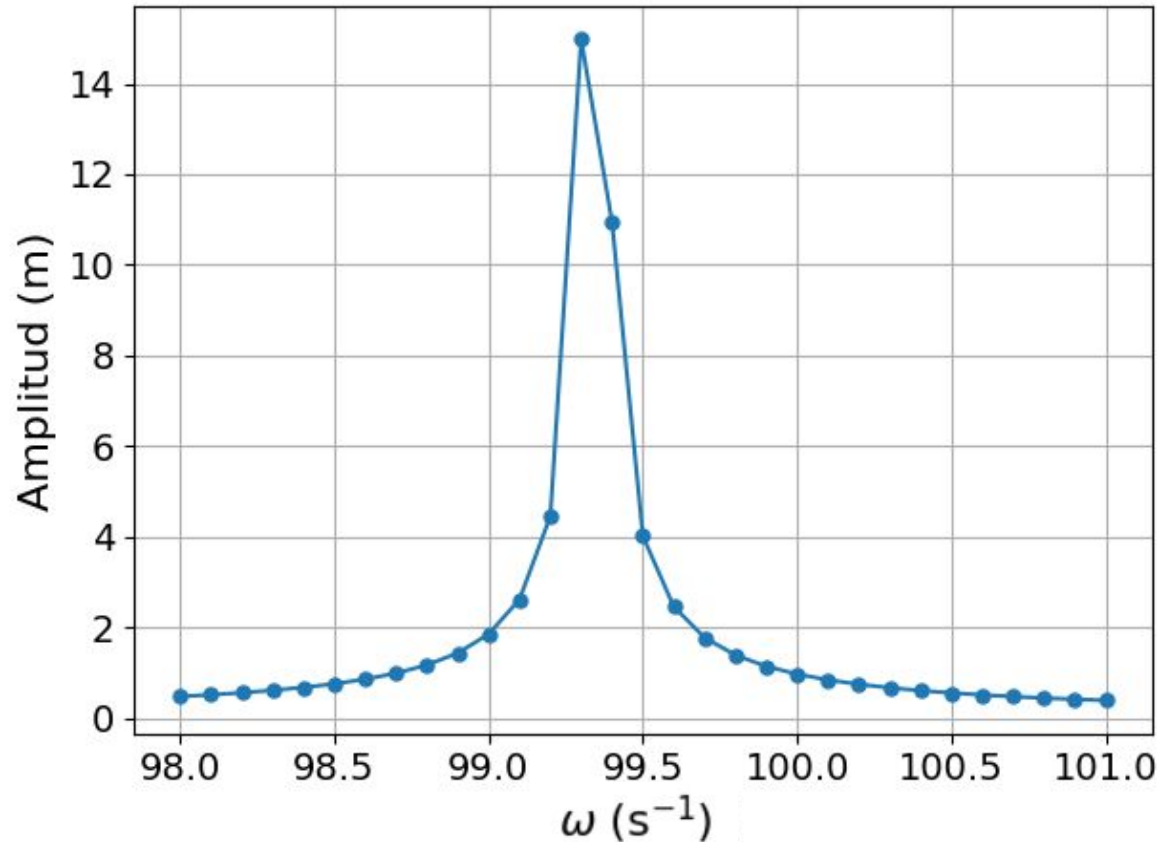
$$k = 10000 \text{ kg/s}^2$$

$$\omega = 99.3 \text{ s}^{-1}$$

<https://youtu.be/U9vksk5QX4g>

Resultados

Frecuencia óptima

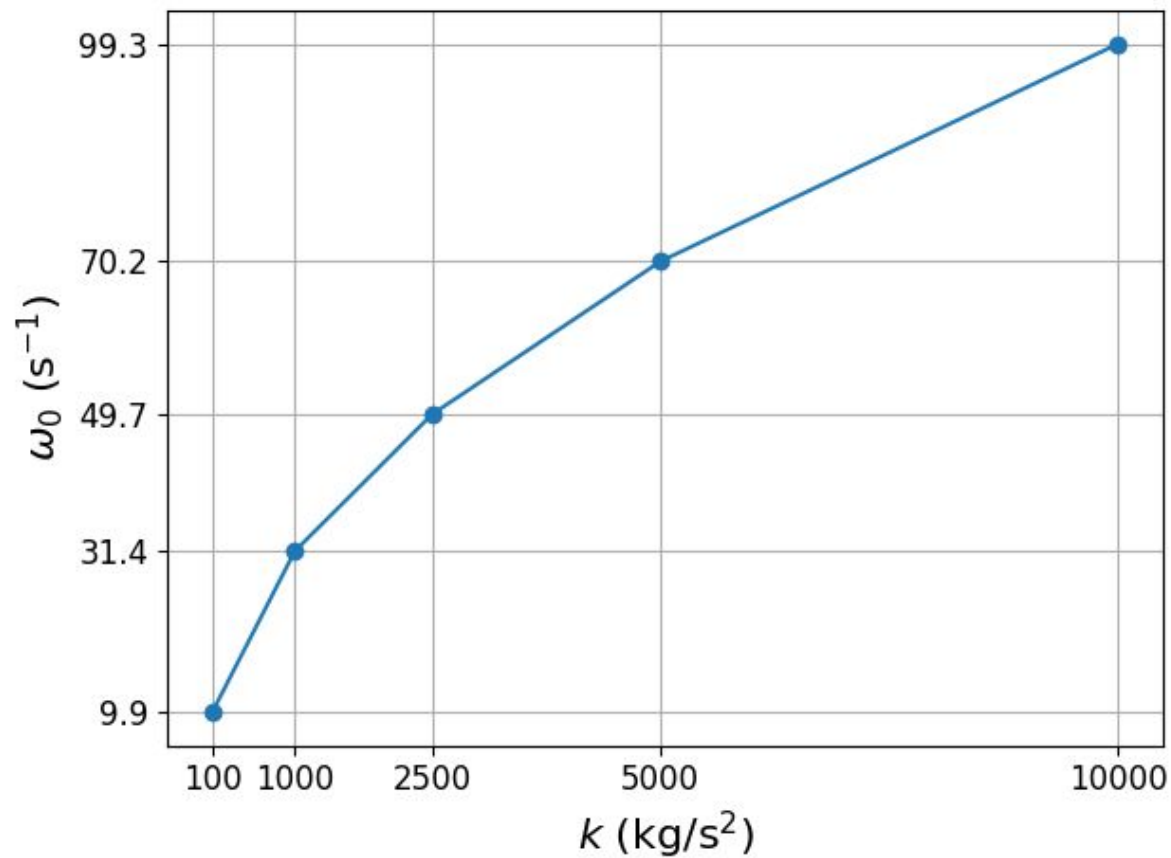


$$k = 10000 \text{ kg/s}^2$$

$$\omega_0 = 99.3 \text{ s}^{-1}$$

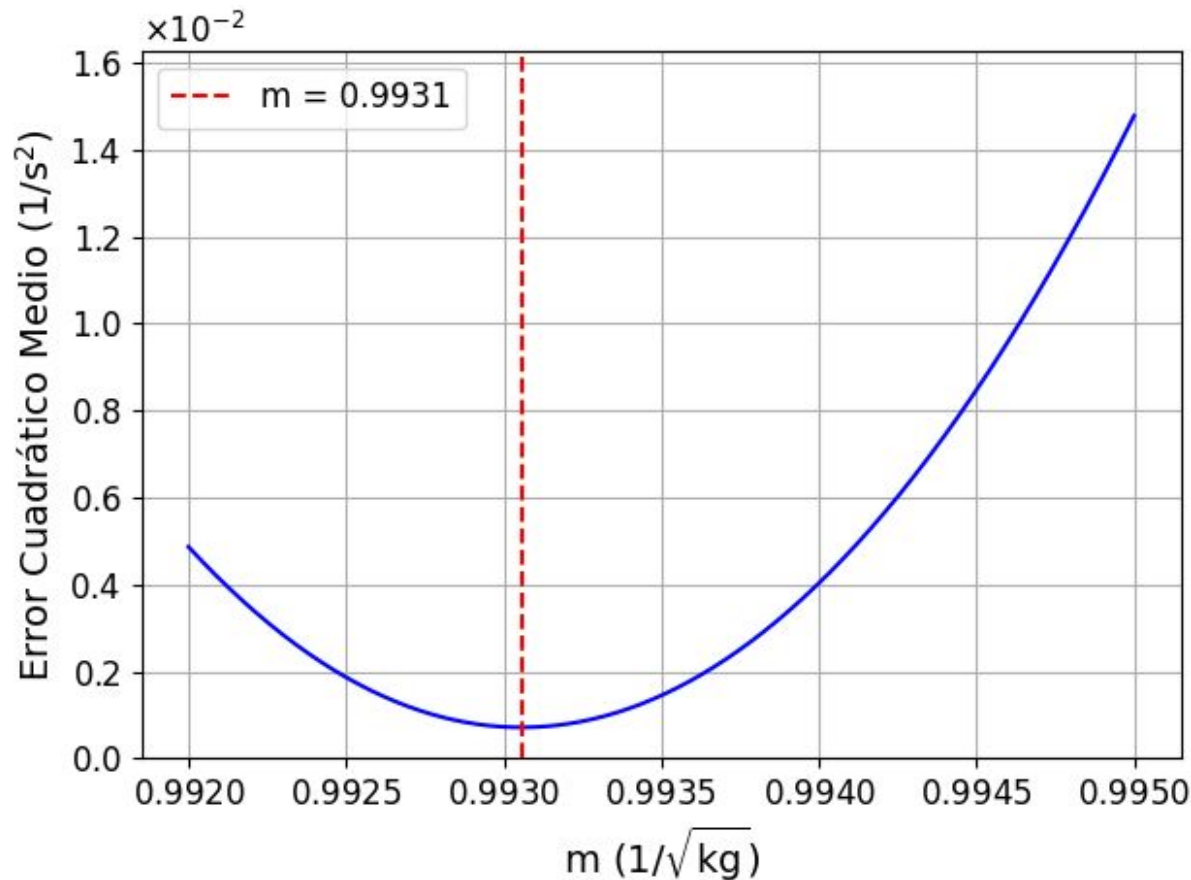
Resultados

Análisis entre ω_0 y k



Resultados

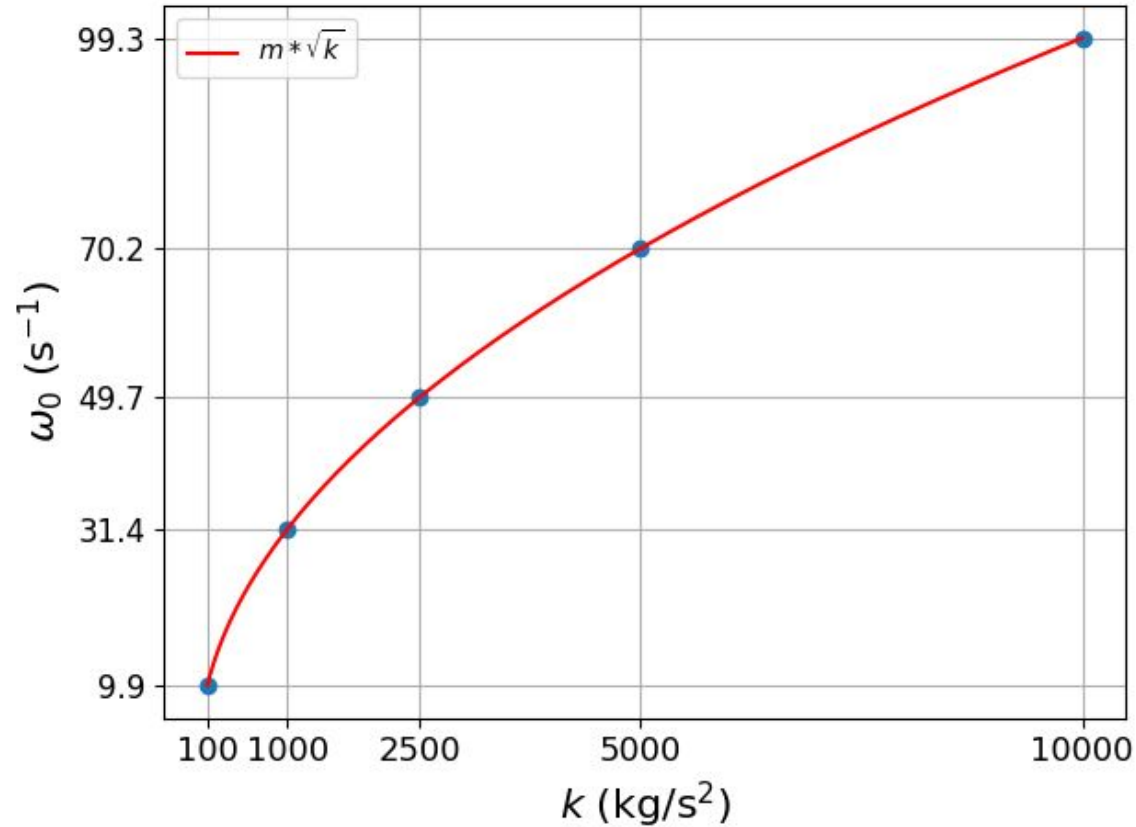
Relación entre ω_0 y k



$$k \in [100; 10000] \text{ kg/s}^2$$
$$\omega \in [9.9; 99.3] \text{ s}^{-1}$$

Resultados

Relación entre ω_0 y k



Conclusiones

- $\omega_0 \sim \sqrt{k}$
- Mayor $k \Rightarrow$ mayor amplitud si ambos sistemas están en su frecuencia de resonancia.

¡Gracias por su atención!

