

Dinámica Molecular regida por el paso temporal

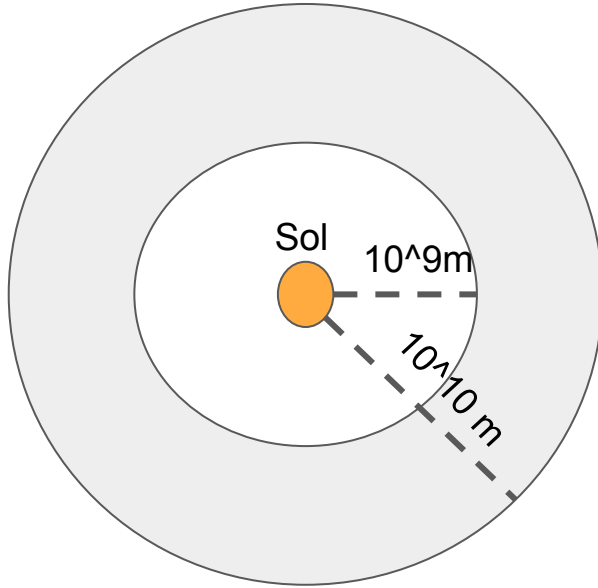
Equipo 5:

- Fernando Bejarano (legajo 52043).
- Luis Marzoratti (legajo 54449).
- Sebastian Kulesz (legajo 54045).

1) Oscilador puntual amortiguado (sistema 1).

- $f = m * a = m * r_2 = -k * r - \gamma * r_1$
- Parámetros:
 - $m = 70; k = 10^4; \gamma = 100; t_f = 5$
- Condiciones iniciales
 - $r(t = 0) = 1; v(t = 0) = \frac{-\gamma}{2 * m}$

2) Formación del sistema solar (Sistema 3).

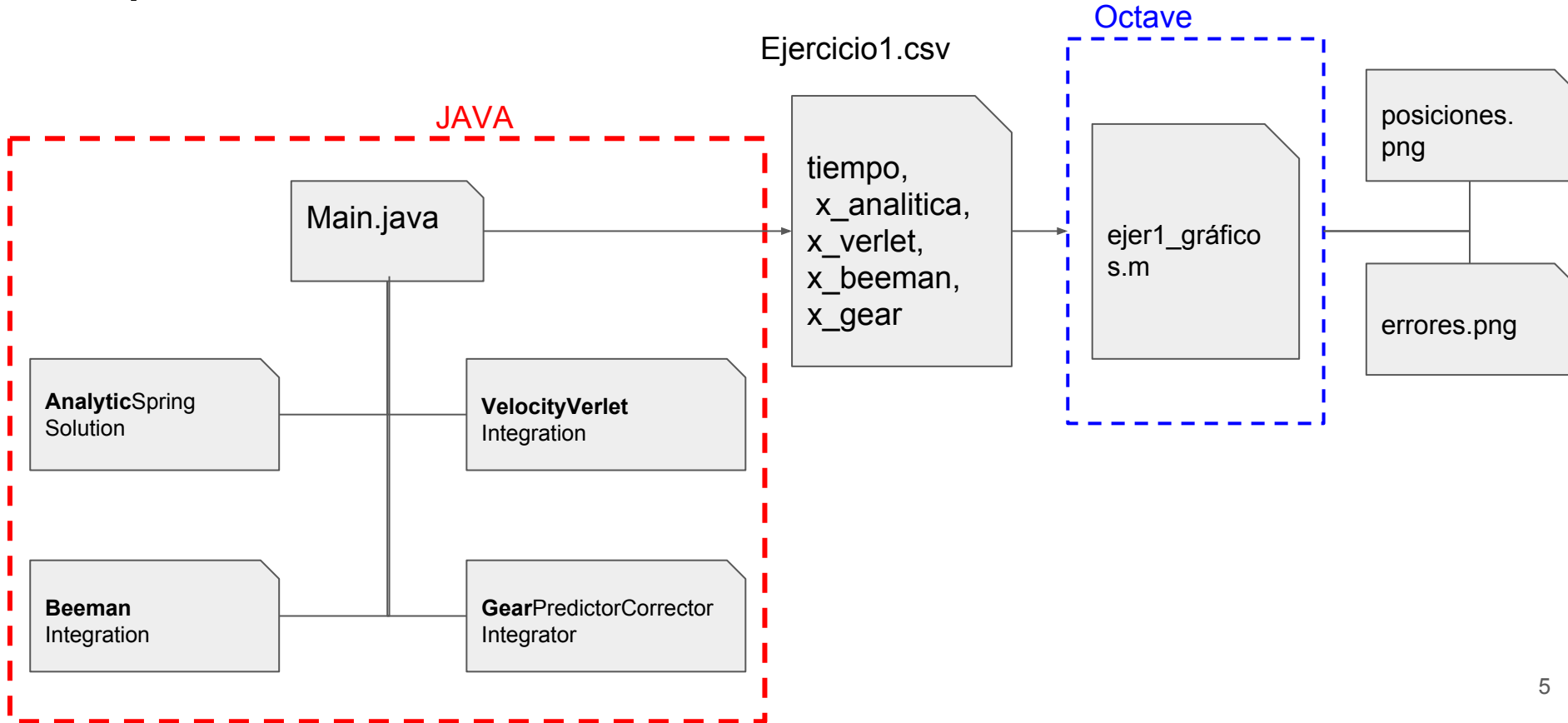


- Condiciones iniciales
 - N partículas.
 - Masa total de partículas $2 \cdot 10^{30}$ [kg].
 - Momento angular inicial: $L = 0.8 \cdot 2^{140}$.
 - Velocidades tangenciales en sentido antihorario.
 - $|v| = L/r$.
 - Partículas entre 10^9 metros y 10^{10} metros del Sol.

2) Formación del sistema solar.(2)

- Energía cinética: $E_k = \frac{1}{2}mv^2$
- Energía potencial: $E_{pot} = -G \frac{m_i * m_j}{r_{i,j}}$
- Energía total: $E_{total} = E_k + E_{pot}$

Implementación sistema 1

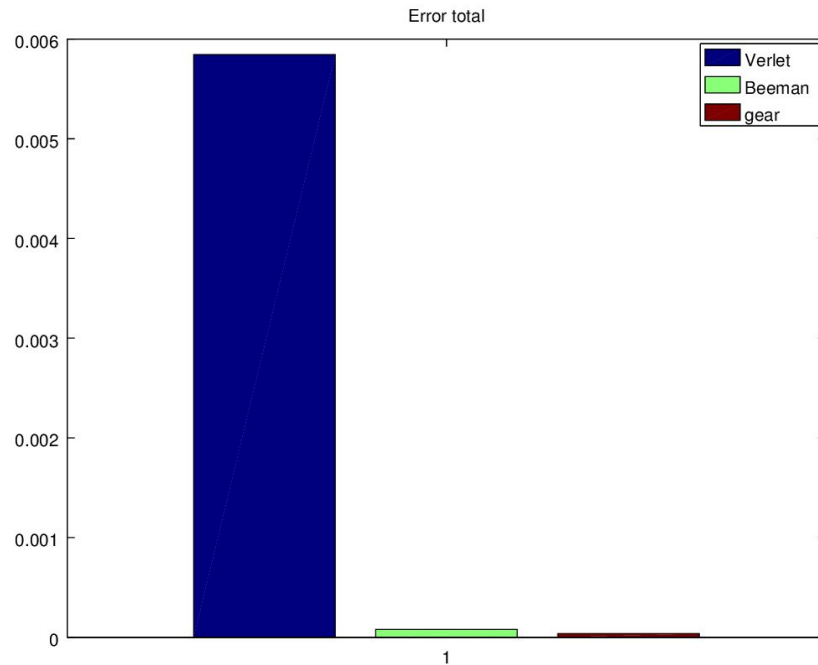
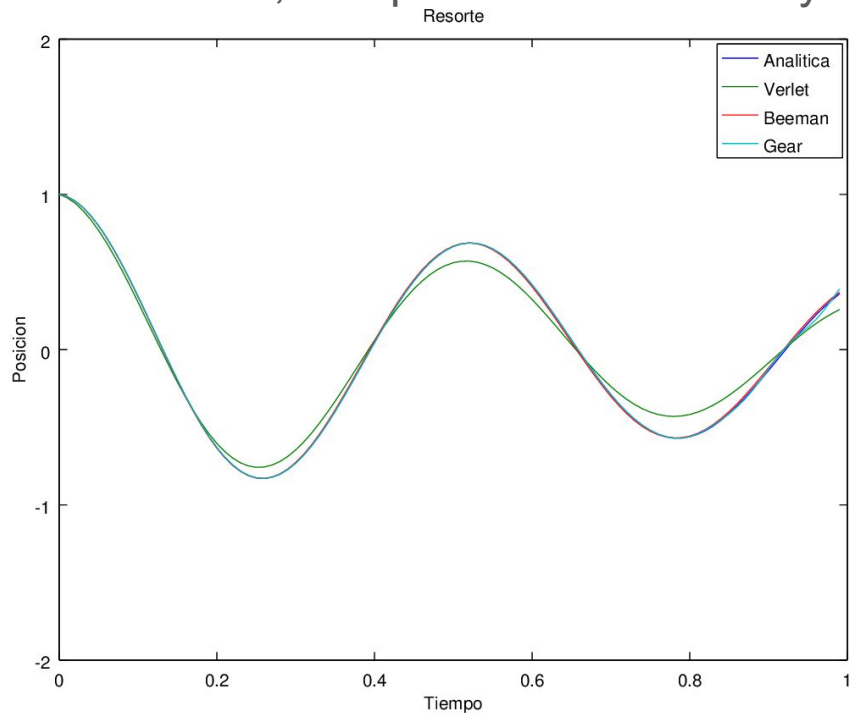


Implementación del sistema 3 (pseudocódigo).

```
for paso=(0, TOTAL_PASOS-1 ){  
    for i =(0,N-1){  
        for j=(i+1,N-1){  
            distancia = distancia( i.posición, j.posición)  
            if ( distancia < ( i.radio + j.radio)){  
  
                j.posición=calcularNuevaPosición( i.posición, j.posición)  
                j.velocidad=calcularNuevaVelocidad( i , j)  
                j.masa= j.masa + i.masa  
                eliminarPartícula( i )  
            }  
        }  
    }  
}
```

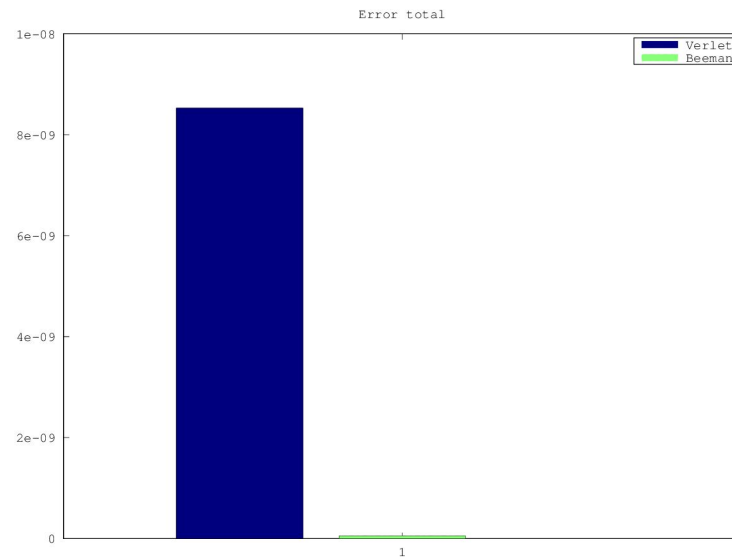
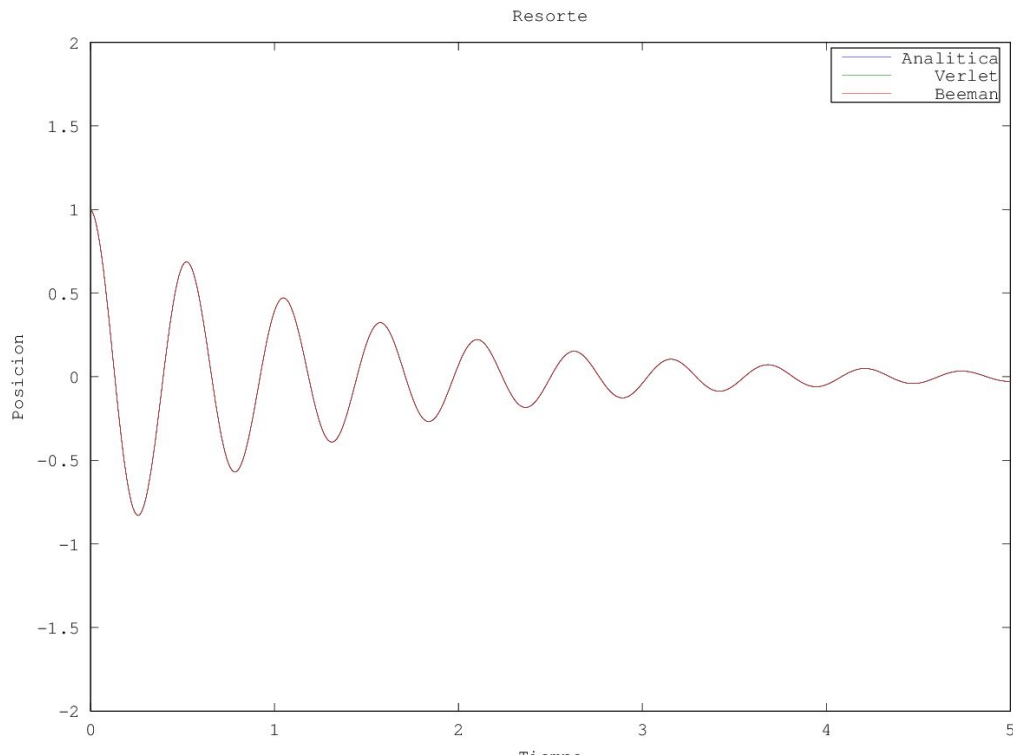
Resultados - *sistema 1.*

- $dt=0.01$, tiempo limitado entre 0 y 1 segundo.



Resultados - *sistema 1.*

- $dt = 0.00001$, sin Gear predictor



Resultados - *sistema 1*.

- Mejores resultados (entre Velocity-Verlet y Beeman): Beeman.

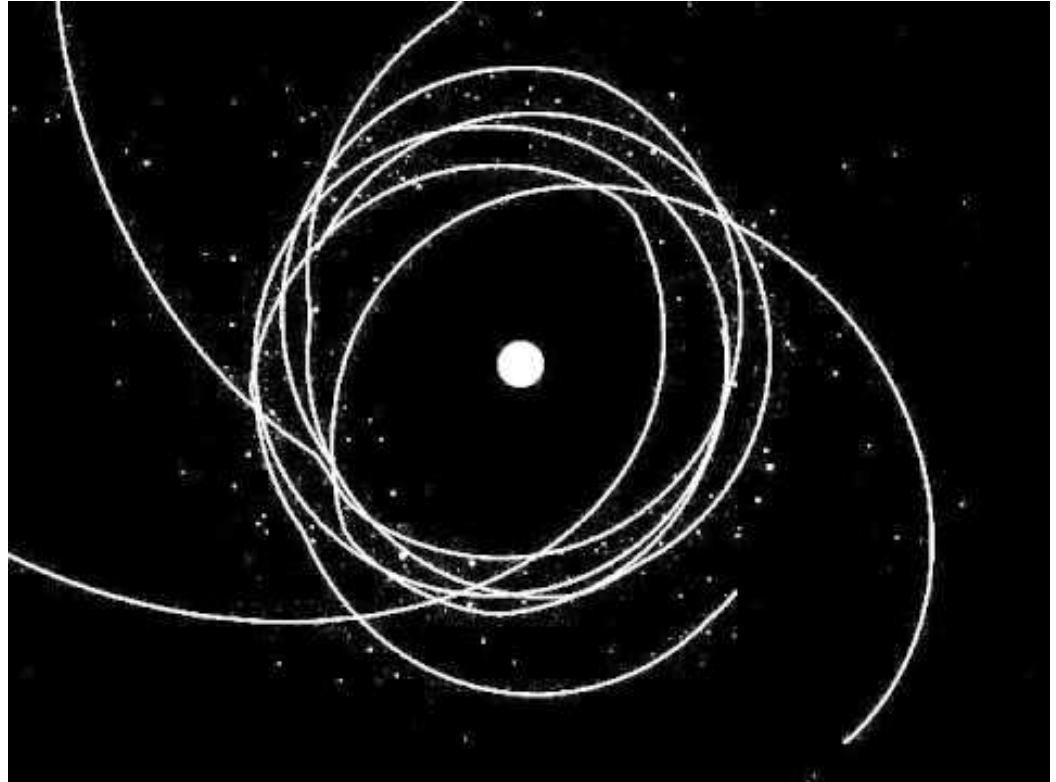
Resultados - *sistema 3*.

- $t=1000$, $N=1000$.



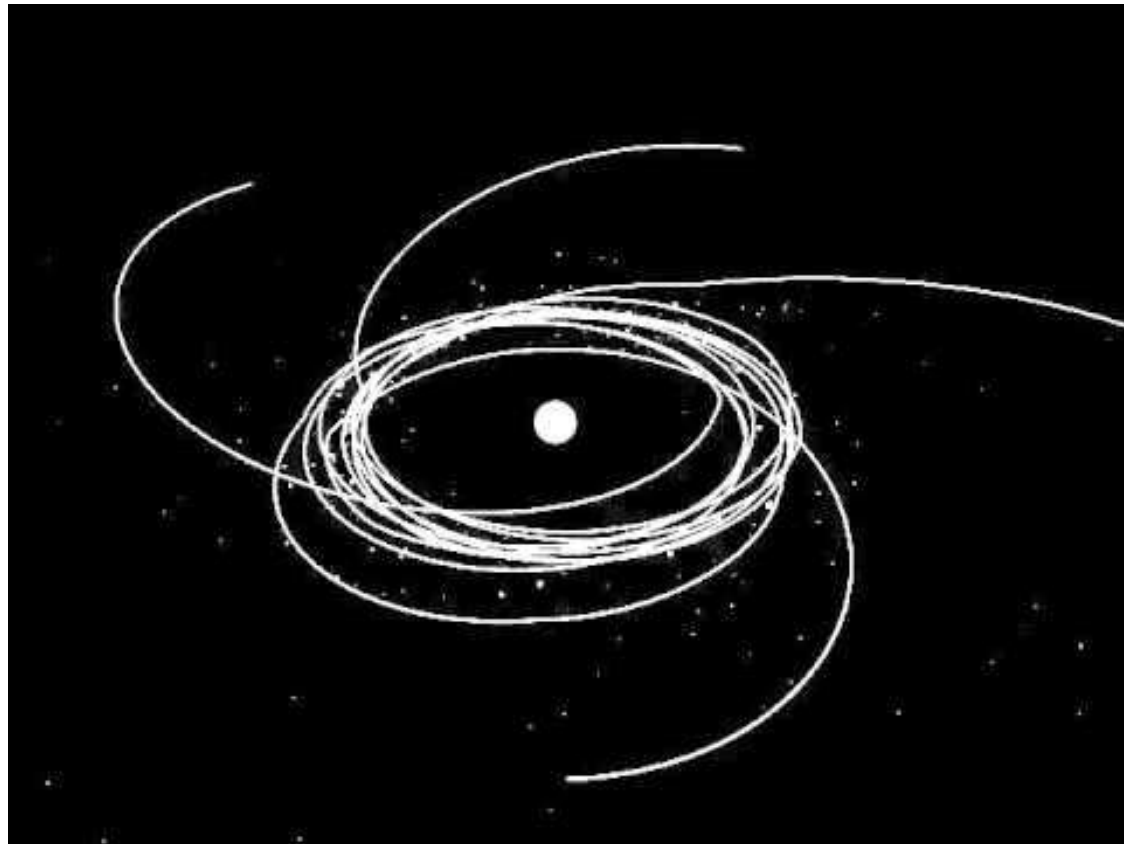
Resultados - *sistema 3.*

- $t=10^6$, $N=1000$, $dt=1.(A)$



Resultados - *sistema 3.*

- $t=10^6$, $N=1000$, $dt=1.(B)$



Resultados - *sistema 3*.

- Energías para $t=(0,1000)$, $N=1000$, $dt=0.1$.

