

# TP4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal

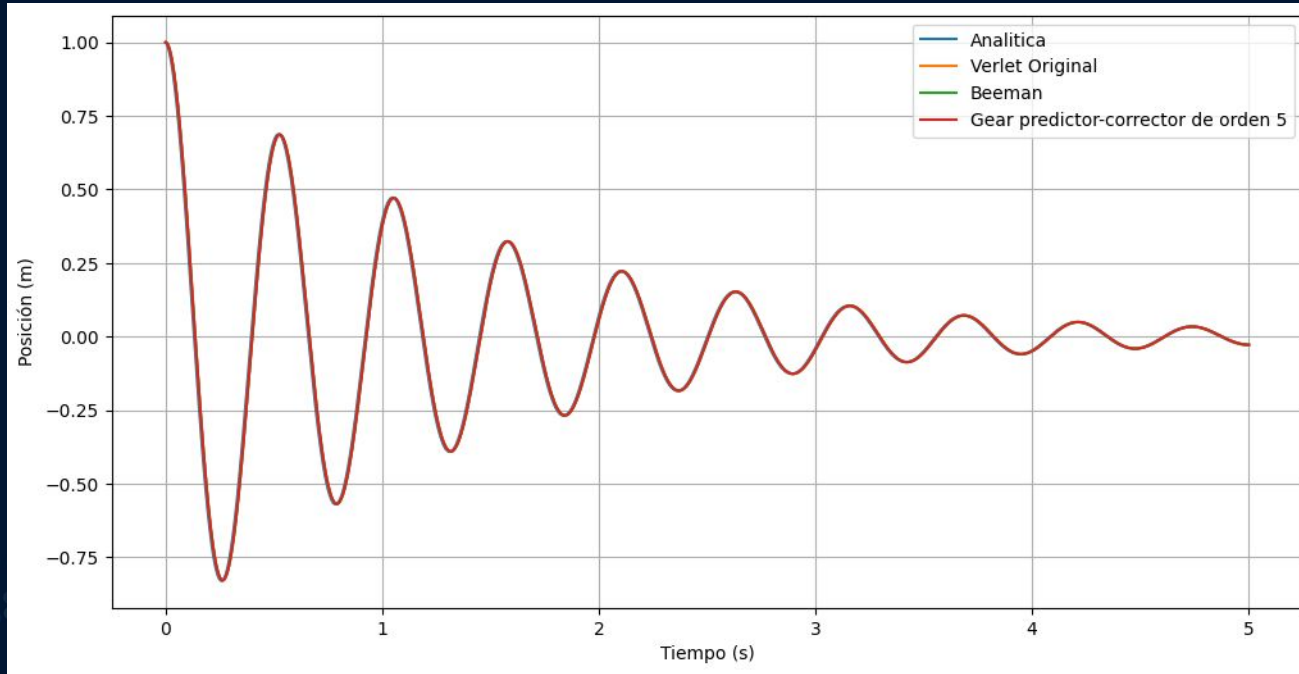
Grupo 5

Tomás Álvarez Escalante (60127)

Lucas Agustín Ferreiro (61595)

Román Gómez Kiss (61003)

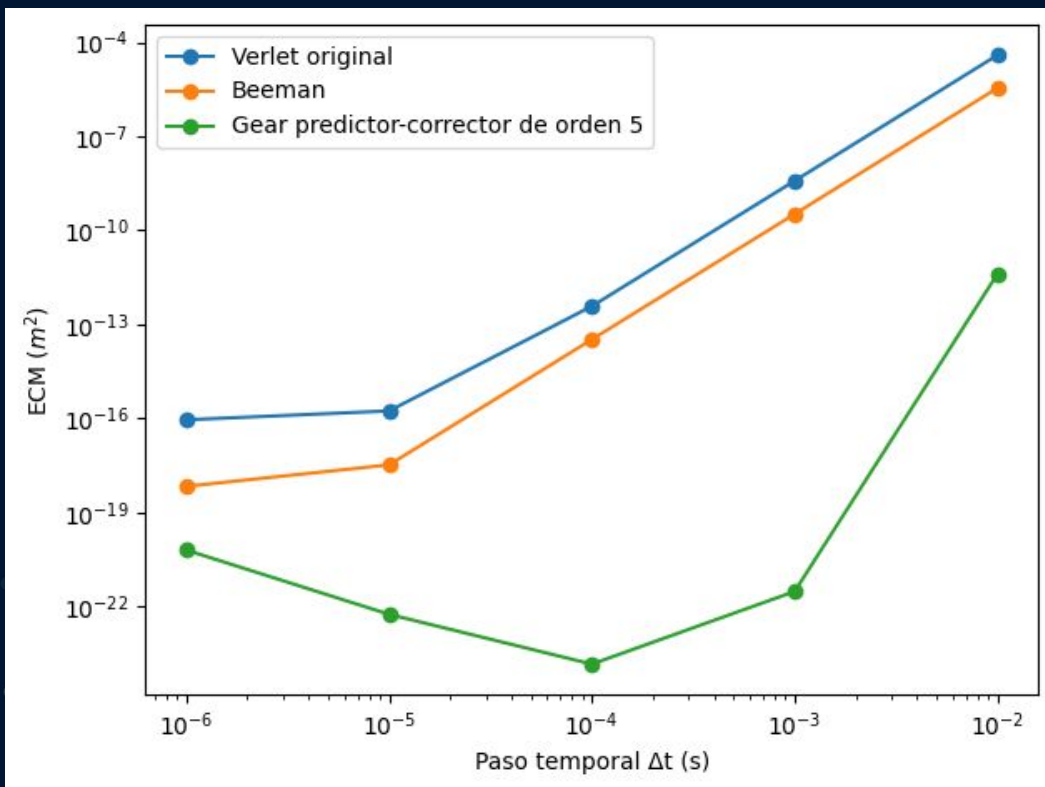
# Oscilador amortiguado



# Error cuadrático medio

$\Delta t [s]$	Verlet Original [ $m^2$ ]	Beeman [ $m^2$ ]	Gear Predictor-Corrector de orden 5 [ $m^2$ ]
$10^{-2}$	$3.91 \times 10^{-5}$	$3.48 \times 10^{-6}$	$4.05 \times 10^{-12}$
$10^{-3}$	$3.82 \times 10^{-9}$	$3.31 \times 10^{-10}$	$2.99 \times 10^{-22}$
$10^{-4}$	$3.79 \times 10^{-13}$	$3.29 \times 10^{-14}$	$1.44 \times 10^{-24}$
$10^{-5}$	$1.73 \times 10^{-16}$	$3.28 \times 10^{-18}$	$5.57 \times 10^{-23}$
$10^{-6}$	$9.01 \times 10^{-17}$	$6.78 \times 10^{-19}$	$6.25 \times 10^{-21}$

# ECM en función de $\Delta t$



# Introducción

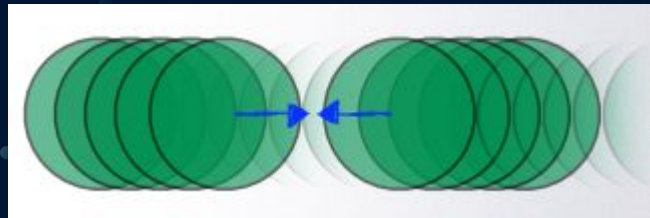
Sistema real y fundamentos

# Sistema real

Simular el movimiento de partículas  
autopropulsadas unidimensionales con  
interacciones de colisión elástica



Simulaciones dirigidas por paso temporal  $\Delta t$



# Fundamentos

- Partículas interactúan mediante fuerzas.
- Integración numérica con Gear Predictor-Corrector de orden 5.



1. Predecir  $r_i(t+\Delta t)$  y  $v_i(t+\Delta t)$
2. Evaluar  $F_i(t+\Delta t)$  y obtener  $a_i$
3. Corregir variables

$r_i \rightarrow$  Posición

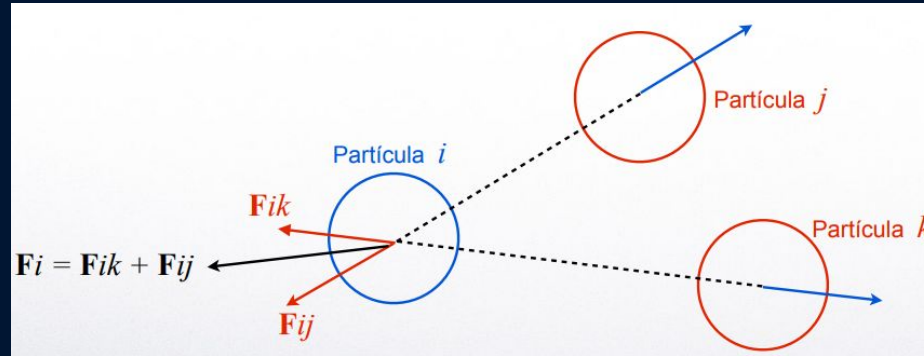
$v_i \rightarrow$  Velocidad

$a_i \rightarrow$  Aceleración

$F_i \rightarrow$  Fuerza



# Fundamentos



$$F_x = F_N \cdot e_x^n \quad e_x^n = (x_j - x_i) / |r_j - r_i|$$

$$F_y = F_N \cdot e_y^n \quad e_y^n = (y_j - y_i) / |r_j - r_i|$$



# Ecuación de movimiento

$$ma_i = F_i^d + \sum_j F_{ij}$$

Fuerza de propulsión  
de la partícula i

$$F_i^d = (u_i - v_i) / \tau$$

Fuerza de colisión  
que ejerce una partícula j sobre  
una partícula i

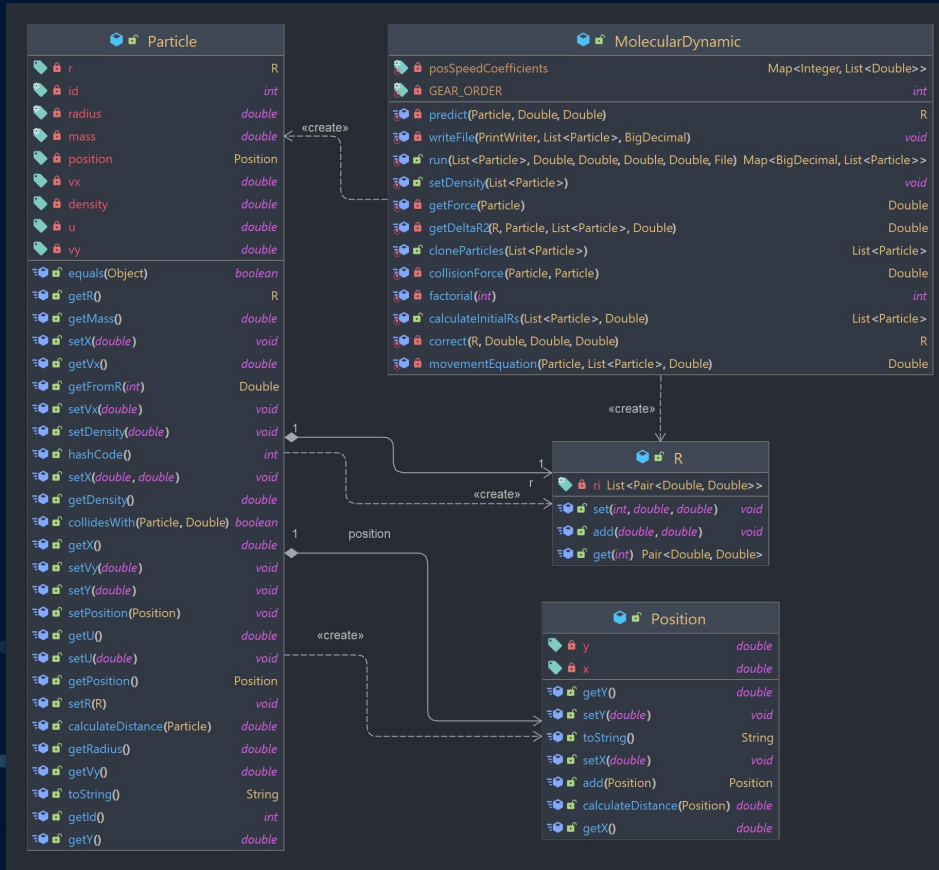
$$F_{ij} = k \left( |x_j - x_i| - 2r \right) \text{sign}[x_j - x_i]$$

- $m \rightarrow$  Masa de la partícula i
- $u_i \in [9-12]$  cm/s  $\rightarrow$  Velocidad límite de la partícula i
- $\tau = 1$  s  $\rightarrow$  Tiempo de reacción característico
- $\text{sign}[\cdot] \rightarrow$  Función signo
- $k = 2500$  g/s<sup>2</sup>

# Implementación

Arquitectura y algoritmo

# Arquitectura



# Algoritmo

## Algorithm 1: Algoritmo del modelo de sistema de partículas unidimensional

Generar partículas con  $(x,y)$  y  $v$  aleatorias sin superposición;

Calcular el 1.er paso de integración;

**while**  $dt < t_f$  **do**

**for** *particle* **do**

        Predecir  $r_i^p(t + \Delta t)$  y  $v_i^p(t + \Delta t)$ ;

        Evaluar  $F(t + \Delta t)$  con las variables predichas y obtener  $a(t + \Delta t)$  ;

        Corregir las variables  $r_q^c$  ;

        Actualizar la partícula con la nueva posición y velocidad;

    Guardar el estado del sistema;

# Simulaciones

Parámetros fijos, observable y variables a estudiar

## Parámetros

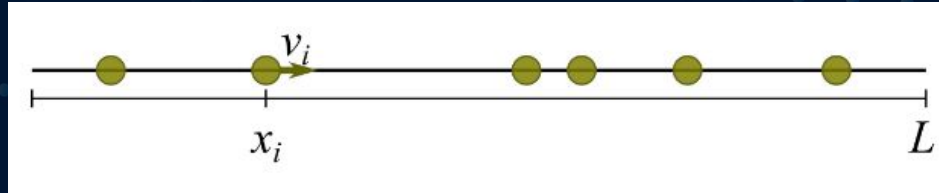
- Cantidad de partículas  $N$
- Paso temporal  $\Delta t$



$$N \in \{5, 10, 15, 20, 25, 30\}$$
$$\Delta t \in \{10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}\} [\text{s}]$$

## Variables fijas

- Masa = 25 g
- Radio = 2.25 cm
- $L = 135$  cm
- $T_f = 180$  s
- $\Delta t_2 = 0.1$  s



# Consideraciones

Generación de partículas



- Sin superposición
- Posiciones aleatorias
- Velocidades iniciales  $v_i(t=0)=u_i$  aleatorias



$u_i \in [9-12] \text{ cm/s} \rightarrow \text{Cte. para cada partícula durante toda la simulación}$



# Observables

## Velocidad promedio

$$v^k(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i$$

## $\phi^k$

$$\phi^k(t) = \sum_{i=1}^N \left\| r_i^{k+1}(t) - r_i^k(t) \right\|$$

## Densidad individual

$$\rho = \frac{1}{d_{ij} + d_{ik}}$$

j y k son las partículas primeras vecinas anterior y posterior de i

# Variables a estudiar

1.  $\Phi^k$  en función del tiempo para  $\Delta t = 10^{-k}$  ( $k = 1, 2, 3$  y  $4$ )  
 $N \in \{5, 10, 15, 20, 25, 30\}$
2. Velocidad promedio en función del tiempo
3. Velocidad promedio en el estacionario como función de  $N$
4. Nube de datos  $(v_i(t), \rho_i(t)) \rightarrow$  velocidad vs.  $\rho$   
 $N \in \{10, 20, 30\}$
5. Distribución de probabilidades de velocidades

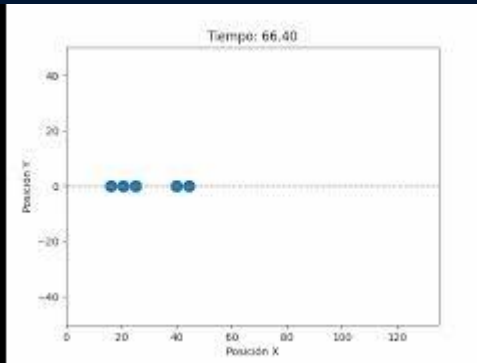
Nota: 2, 3 y 5 con agregado aleatorio y ordenado según  $u_i$

# Resultados

Animaciones y gráficos

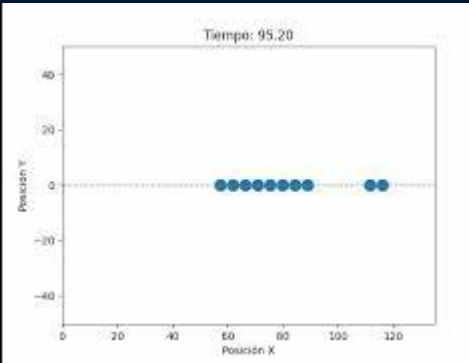
# Animaciones

$$\Delta t = 10^{-3}$$



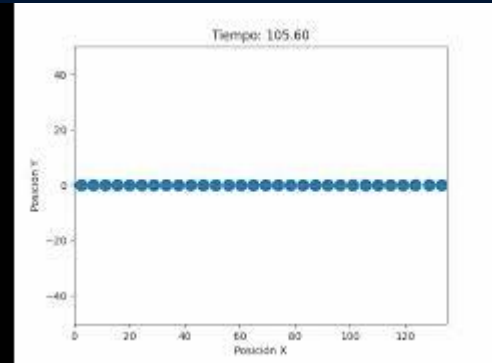
<https://youtu.be/xoNCYVG4Hz8>

**N=5**  
**Agregado aleatório**



<https://youtu.be/yvMCKgZfUAE>

**N=10**  
**Agregado aleatório**

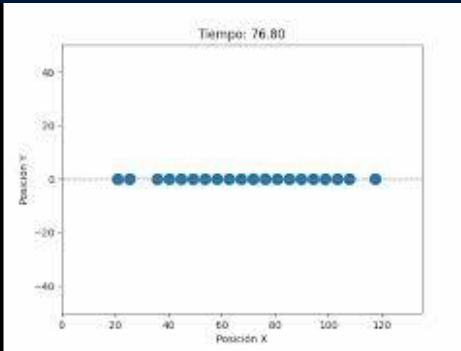


<https://youtu.be/tMRBXrY-xfc>

**N=30**  
**Agregado aleatório**

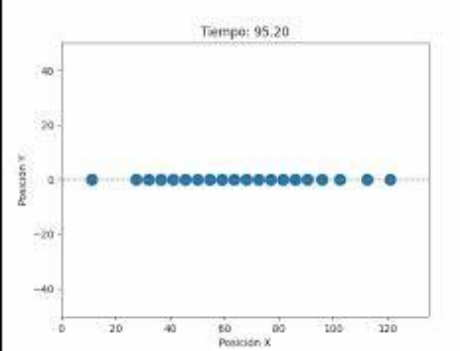
# Animaciones

$$\Delta t = 10^{-3}$$



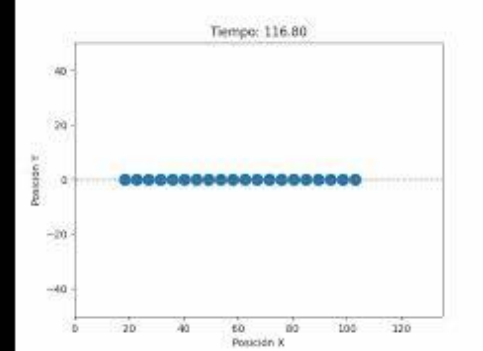
<https://youtu.be/sy9q9jyKb0Y>

**N=20**  
**Agregado aleatório**



<https://youtu.be/LaSFzx9ZBZU>

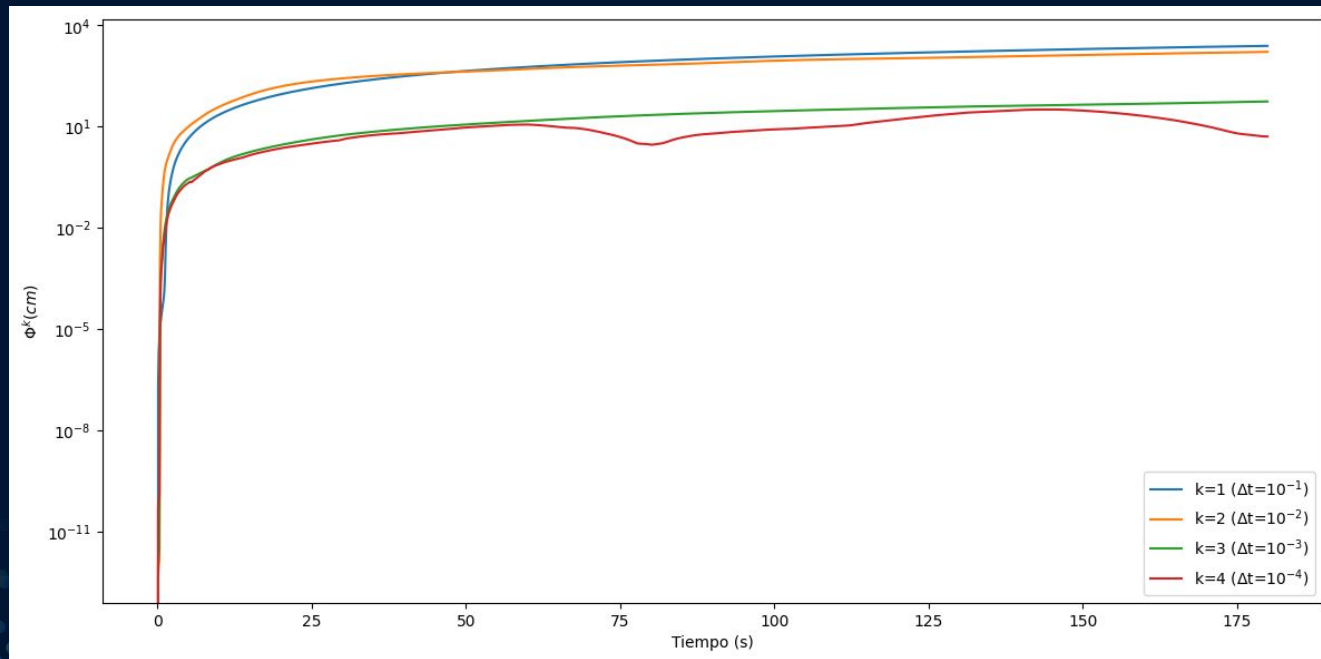
**N=20**  
**Agregado ascendente**



<https://youtu.be/5KRjbNByN0w>

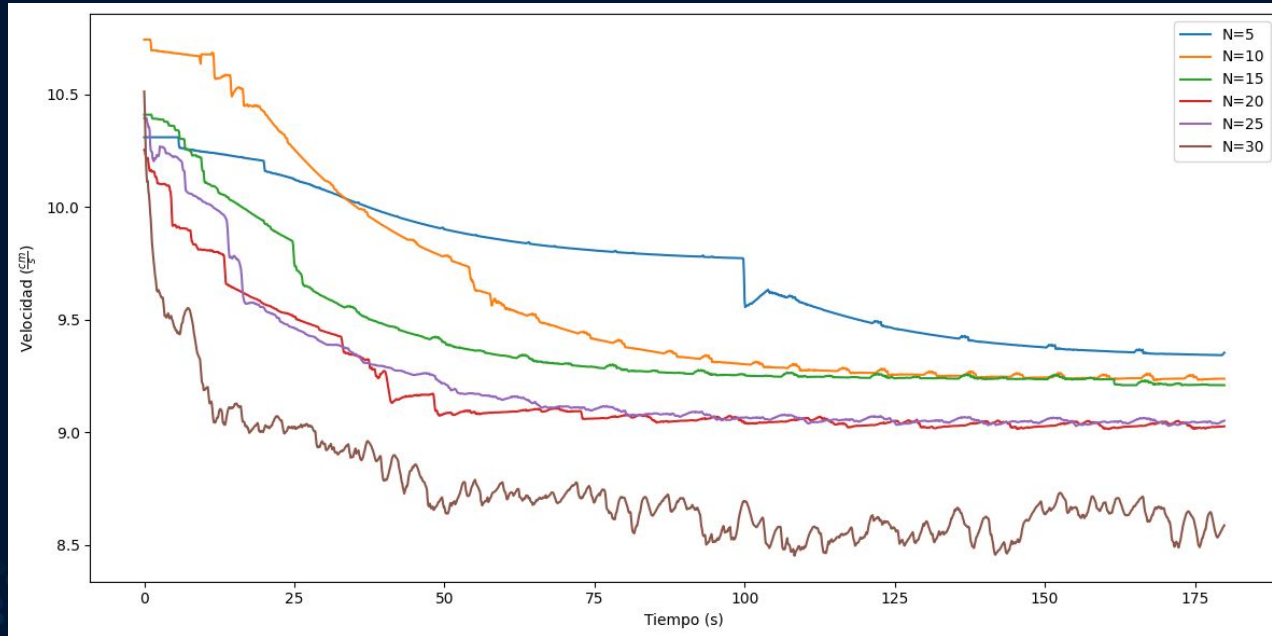
**N=20**  
**Agregado descendente**

## $\Phi^k$ en función del tiempo



N = 25

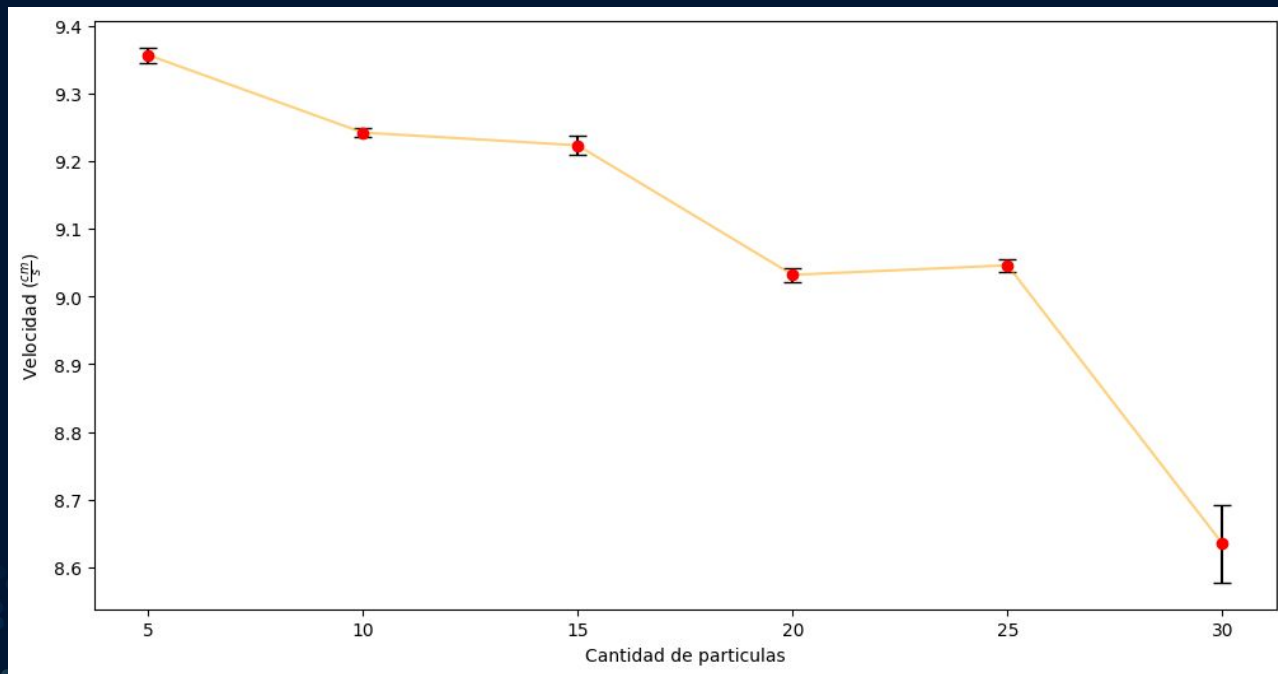
# Velocidad en función del tiempo



$\Delta t = 10^{-3}$

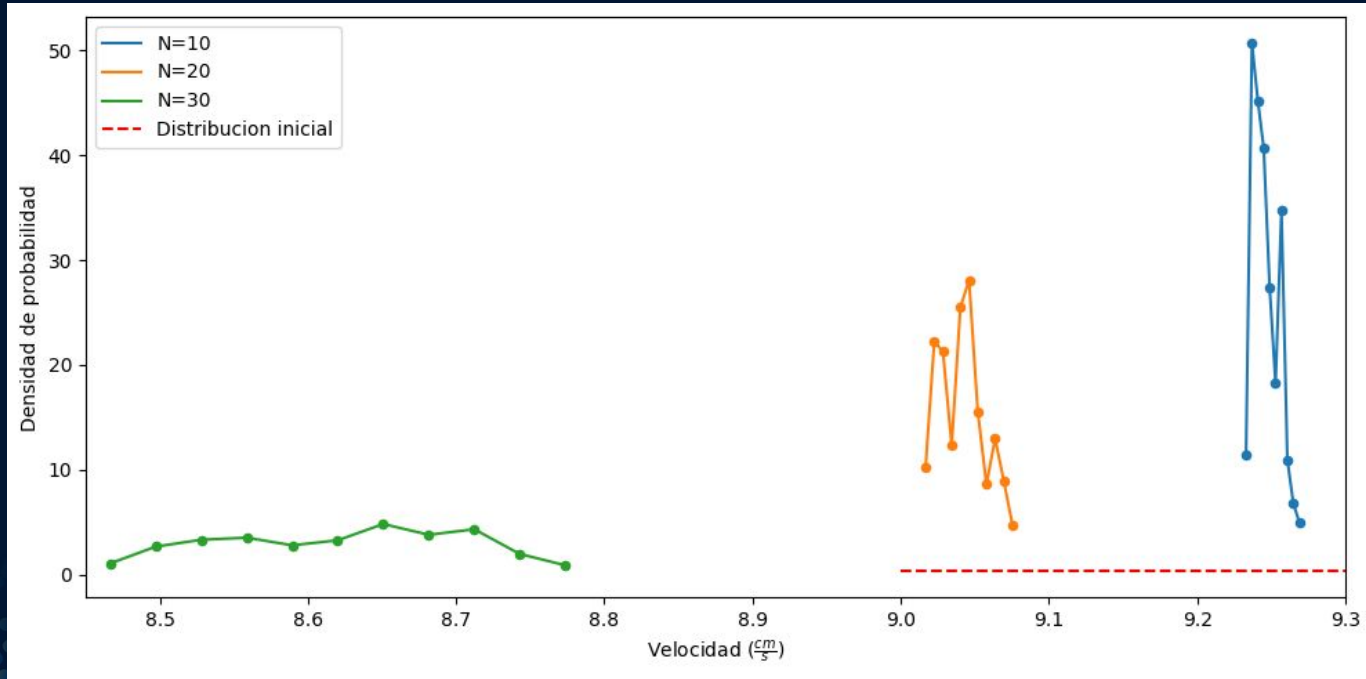


## Velocidad promedio en función de N



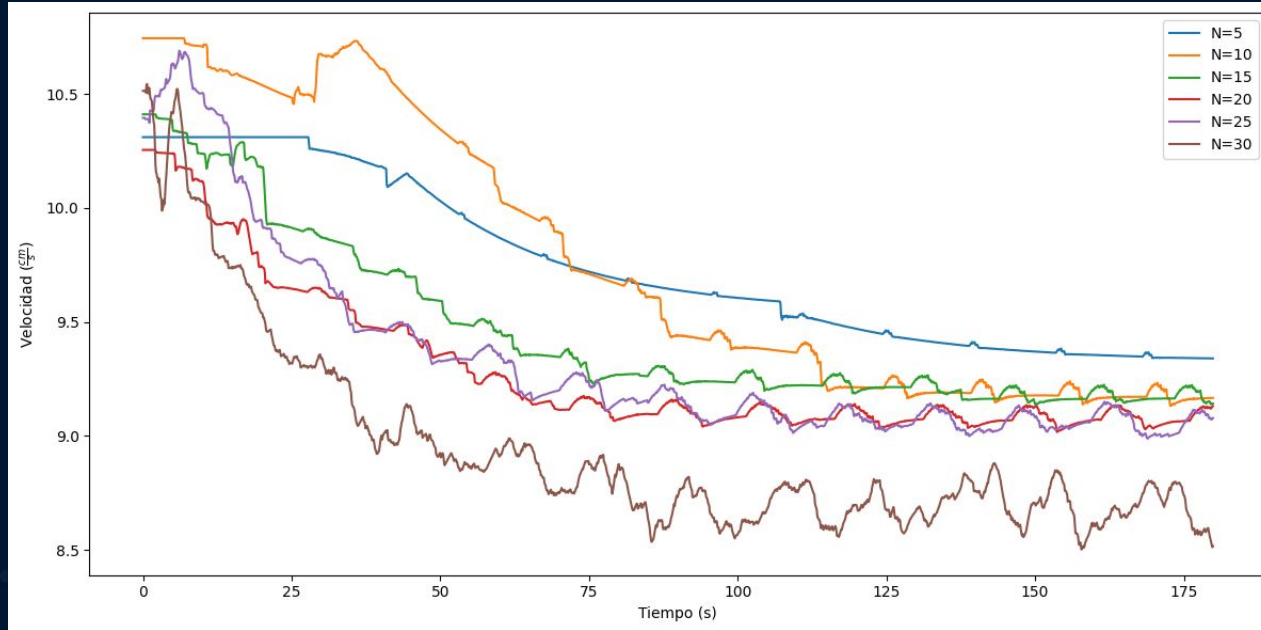
$$\Delta t = 10^{-3}$$

# Distribución de probabilidades de velocidades



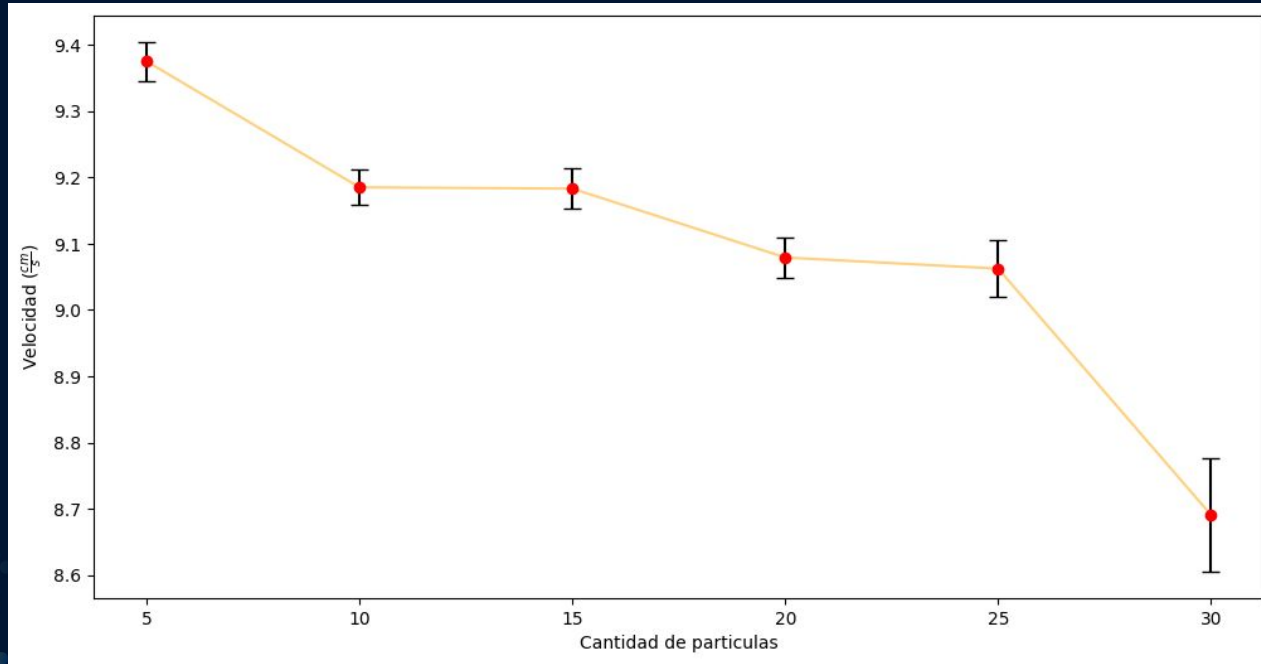
$$\Delta t = 10^{-3}$$

## Velocidad en función del tiempo



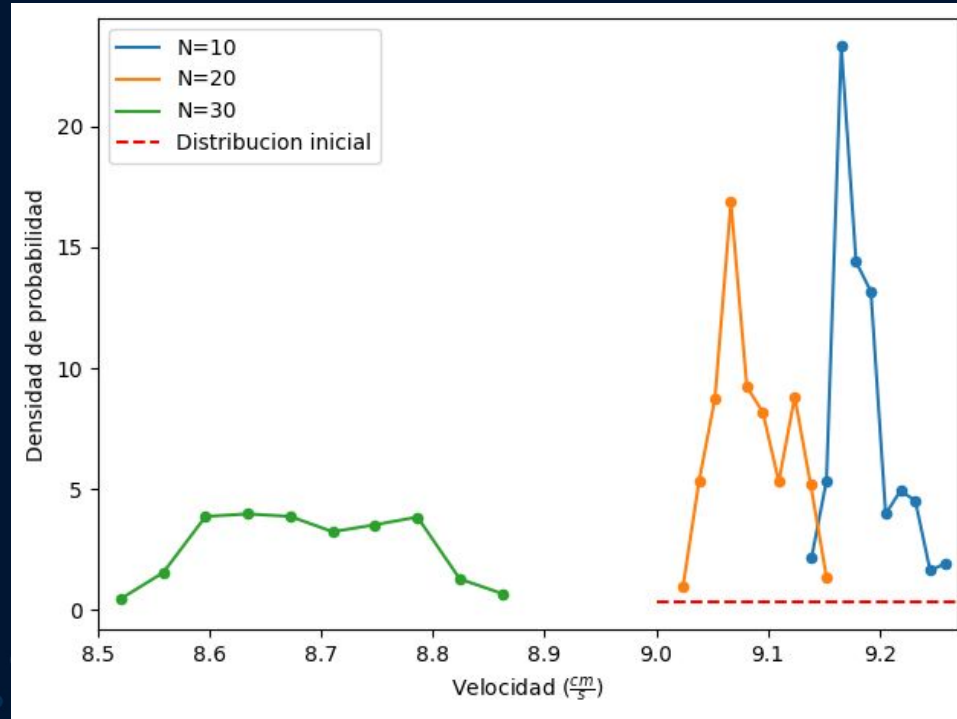
$$\Delta t = 10^{-3}$$

## Velocidad promedio en función de N



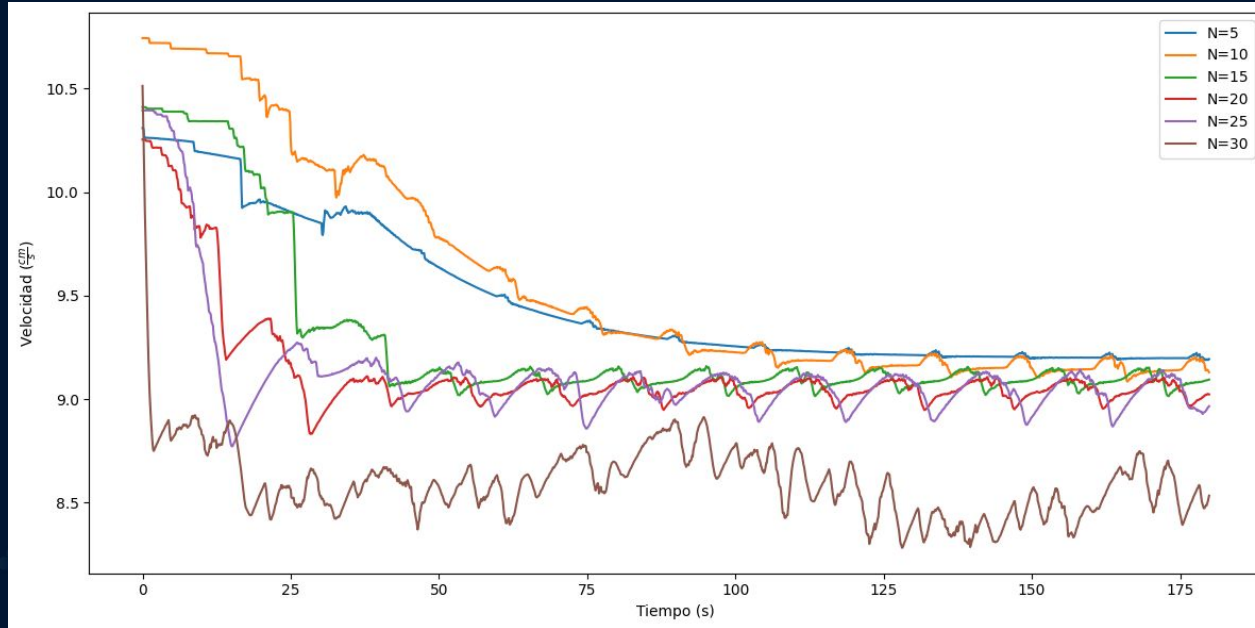
$$\Delta t = 10^{-3}$$

# Distribución de probabilidades de velocidades



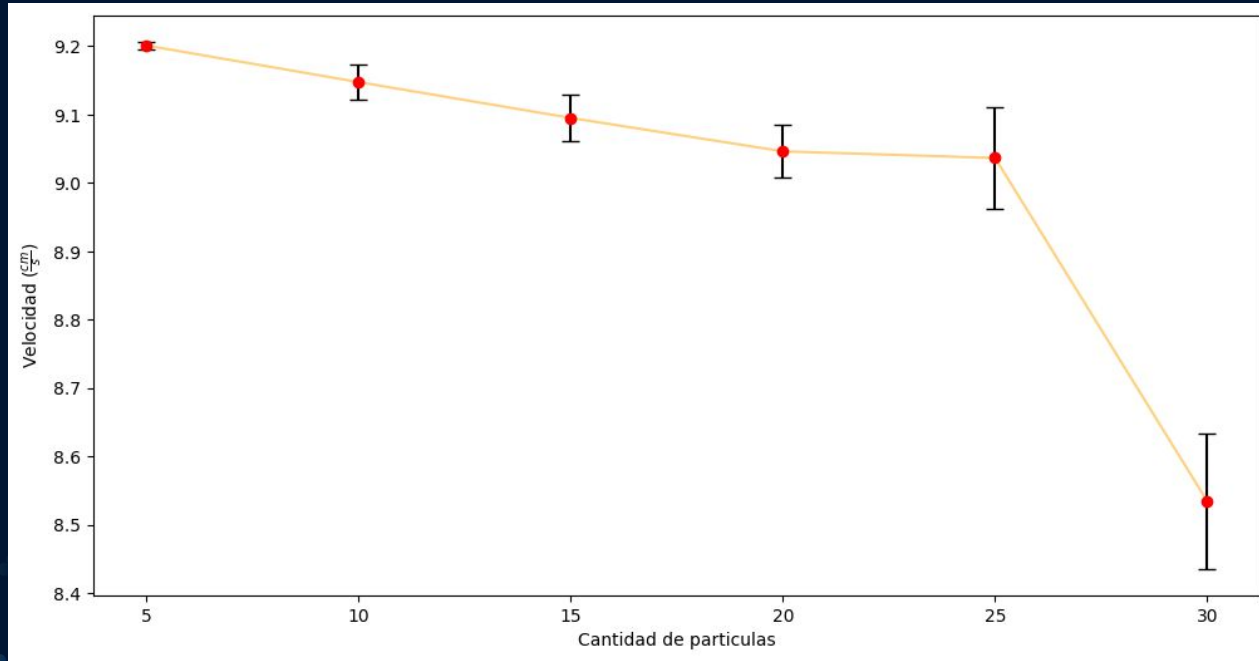
$$\Delta t = 10^{-3}$$

## Velocidad en función del tiempo



$$\Delta t = 10^{-3}$$

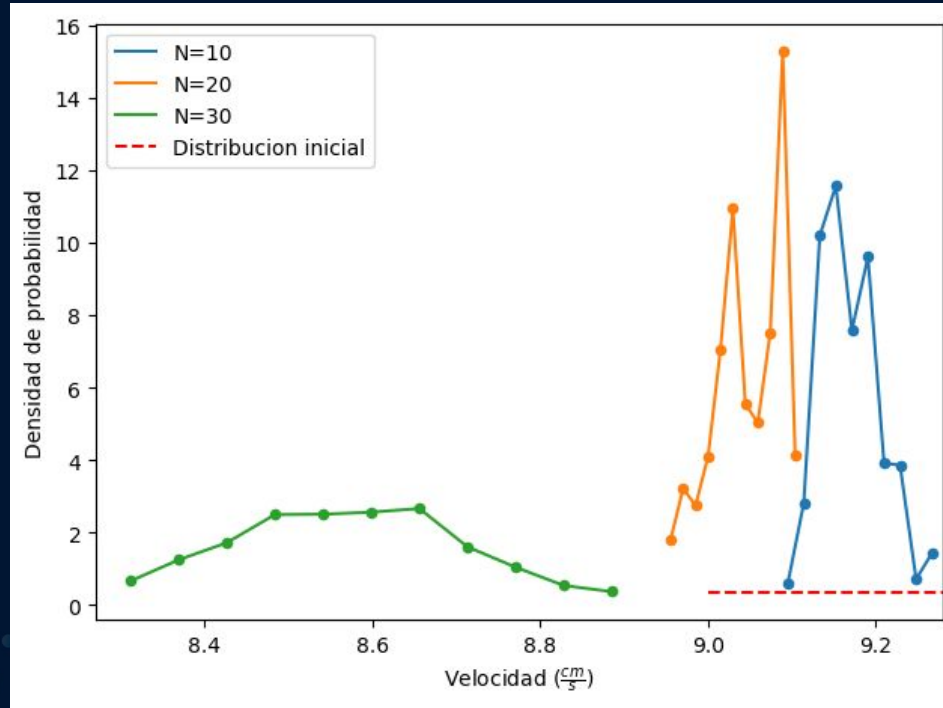
## Velocidad promedio en función de N



$$\Delta t = 10^{-3}$$

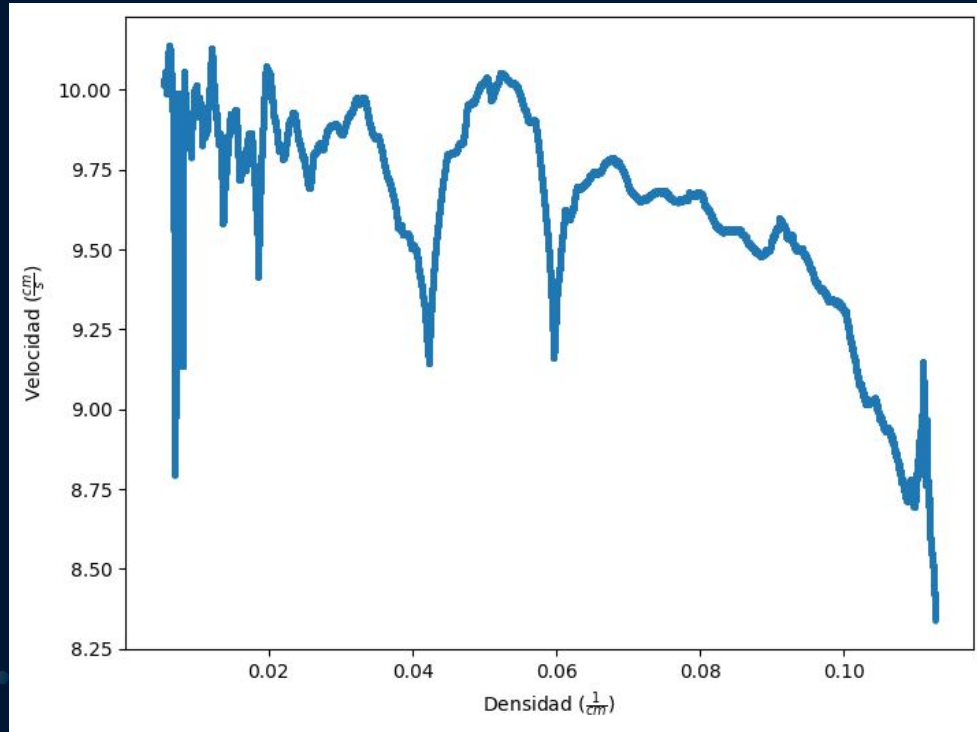


# Distribución de probabilidades de velocidades



$\Delta t = 10^{-3}$

# Velocidad vs. Densidad



$$\Delta t = 10^{-3}$$

# Conclusiones

1. El sistema estudiado no es conservativo, pues la fuerza de autopropulsión agrega energía al sistema.
2. A menor  $\Delta t$ , menor  $\Phi^k$
3. A mayor  $N$ , menor velocidad promedio.
4. A mayor  $N$ , mayor fluctuación de velocidad en el estacionario.
5. Agregado ascendente de partículas  $\rightarrow$  converge más lento.
6. Agregado descendente de partículas  $\rightarrow$  converge más rápido.
7. A mayor densidad, menor velocidad.

**¡Muchas gracias!**