

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 3: Dinámica Molecular Dirigida por Eventos

(Enunciado publicado en CAMPUS el 10/04/2023)

Se deberá utilizar la técnica de dinámica molecular regida por eventos con choques elásticos. El sistema no tiene campos externos por lo tanto las partículas siguen en movimiento rectilíneo uniforme entre colisiones.

Las simulaciones tendrán un  $dt$  intrínseco variable que dependerá de cuando sucedan los eventos. Imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) en cada uno de estos  $dt$  (o cada un número entero de ellos) para luego realizar animaciones y los correspondientes análisis.

Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma la velocidad de la animación no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

Los entregables del T.P. son:

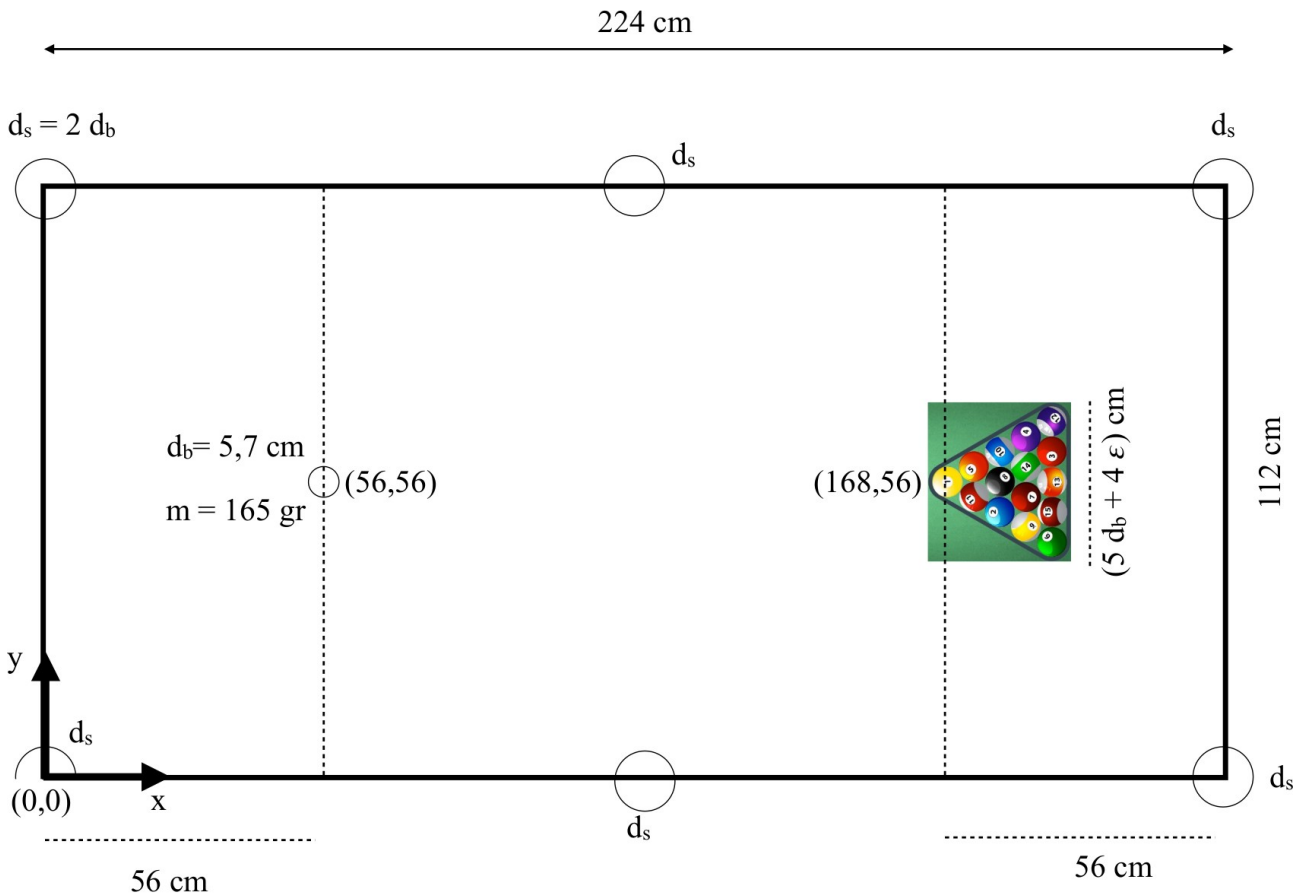
- a- Presentación oral de 13 minutos de duración con las secciones indicadas en el documento ".../00\_GuiasFormato/Formato\_Presentaciones.pdf". Durante la presentación oral se podrá solicitar una demostración en vivo del funcionamiento del código.
- b- Links a youtube o vimeo de las animaciones generadas (NO enviar archivos de animaciones por medio de links ni subirlos a campus).
- c- El documento de la presentación en formato pdf.
- d- El código fuente implementado.

#### Fecha y Forma de Entrega:

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser presentados **a través de campus**, antes del día 24/04/2023 a las 10 hs. Los archivos deben nombrarse de la siguiente manera: "**SdS\_TP3\_2023Q1GXX\_Presentación**" y "**SdS\_TP3\_2023Q1GXX\_Codigo**", donde **XX** es el número de grupo.

## Sistema 1) Mesa de Pool

Sea un dominio de simulación de 224 cm de largo y 112 cm de ancho que representa una mesa de pool como se muestra en la Fig. 1. Se consideran 16 bolas de masa  $m = 165$  gr y diámetro  $d_b = 5,7$  cm. La mesa tiene 6 sumideros (buchacas) de diámetro  $d_s = 2 d_b$ , centradas en los vértices de la mesa y los puntos centrales de sus laterales mas largos (ver Fig. 1). Total de partículas a considerar choques son  $16 + 6 = 22$ . Las ubicaciones iniciales de las bolas son según se ilustra esquemáticamente en la Fig. 1.



**Figura 1:** Esquema del sistema a simular: una mesa de pool con 6 agujeros y 16 bolas.

El problema consiste en simular el golpe inicial de la bola blanca y estudiar la evolución del sistema. Considerar que la bola sale inicialmente con velocidad inicial en  $x$ ,  $v_0 = 2$  m/s. La posición inicial de la bola blanca está en  $x = 56$  cm e  $y = [42, 56]$  cm. La ubicación de las bolas del triángulo tienen una pequeña separación entre vecinas de una distancia al azar ( $\epsilon$ ) distribuida uniformemente en el rango  $\epsilon = [0.02, 0.03]$  cm. Cuando alguna bola toca el radio de las buchacas, ésta desaparece.

- 1.1) Considerar 10 posiciones iniciales de la bola blanca dentro del rango especificado. Para cada una de ellas, simular varias realizaciones variando la semilla que ubica las bolas del triángulo.
- 1.2) Graficar la distribución de tiempos entre eventos. Calcular el tiempo medio entre eventos y la frecuencia media de ocurrencia.
- 1.3) Para cada simulación, medir el tiempo en el que todas las bolas desaparecen de la mesa. Estudiar el valor promedio de este tiempo en función de la posición inicial de la bola blanca
- 1.4) Prueba de determinismo: realizar dos simulaciones con idénticas condiciones iniciales y verificar si el resultado es idéntico. Repetir variando la precisión numérica utilizada en el código. .
- 1.5) OPTATIVO: repetir el análisis 1.3) dejando fija la posición inicial de la bola blanca y variando la velocidad inicial  $v_0$ .