Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal
(Enunciado publicado en CAMPUS el 28/04/2023)

Resolver, utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal, los problemas 1) y 2).

Las simulaciones tendrán un *dt* fijo e intrínseco de la simulación, Además considerar un dt_2 para imprimir el estado del sistema (posiciones y velocidades de las partículas) como *output* del sistema. Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el análisis y módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma, la velocidad de la animación y postprocesamiento no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La realización del T.P. consiste en:
Sistema 1) Solo deben presentarse los resultados (no incluir introducción, ni ecuaciones de integradores, ni implementación, ni animaciones, ni conclusiones) en la menor cantidad posible de diapositivas (2-3) (duración 1 minuto) y debe ubicarse antes de la presentación del sistema (2).
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) incluyendo ambos sistemas y el código fuente (d) deberán ser subidos **a campus**, antes del día 15/05/2023 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera: **"SdS_TP4_2023Q1GXX_Presentación" y "SdS_TP4_2023Q1GXX_Codigo", donde XX es el número de grupo.** Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 15/05/2023. No subir animaciones a campus.

Sistema 1) Oscilador Puntual Amortiguado (solución analítica)

Con la finalidad de comparar los errores de los distintos esquemas de integración se estudiará un sistema con sólo una partícula puntual: el oscilador amortiguado, cuya solución se conoce analíticamente.
Considerar la solución, los parámetros y las condiciones iniciales dadas en la diapositiva 36 de la teórica.

1.1) Integrar la ecuación de movimiento del oscilador utilizando por lo menos los esquemas:
- Gear predictor-corrector de orden 5
- Beeman
- Verlet original

1.2) En todos los casos graficar las soluciones analítica y numérica y calcular el error cuadrático medio (sumando las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos).

1.3) Estudiar como disminuye el error al disminuir el paso de integración (*dt*). Usar ejes semi-logarítmicos o logarítmicos para poder apreciar las diferencias de error a escalas pequeñas. ¿Cuál de los esquemas de integración resulta mejor para este sistema ?

Sistema 2) 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 N_b = 16 bolas de masa m = 165 g 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 más largos (ver Fig. 1). Las ubicaciones iniciales de las bolas son según se ilustra esquemáticamente en la Fig. 1.

La interacción entre partículas es del tipo elástica. La fuerza que ejerce una partícula *j* sobre una *i* es:

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

donde κ = 10^4 N/m, $R_{i/j}$ es el radio de la partícula *i/j* y $\hat{r} = \dfrac{r_j - r_i}{|r_j - r_i|}$ el versor normal definido por ambas partículas.

Universos paralelos
En un primer estudio, considerar el sistema sin buchacas. Simular el sistema con idénticas condiciones iniciales pero distintos pasos de integración $\Delta t = 10^{-n}$ (n = 2, 3, 4, 5 y 6). Describir como se simula la interacción partícula-borde de la mesa.

1.1) Considerar T_f = 100 s y calcular

$$\Phi^k(t) = \sum_{i=1}^{N_b} \| r_i^{k+1}(t) - r_i^k(t) \| \quad ,$$

donde r_i^k es la posición de la partícula *i* a tiempo *t* simulada con $\Delta t = 10^{-k}$ (k = 2, 3, 4 y 5) y decidir cuál es el Δt más adecuado para este problema. Para esto, graficar las curvas obtendias de $\Phi^k(t)$.

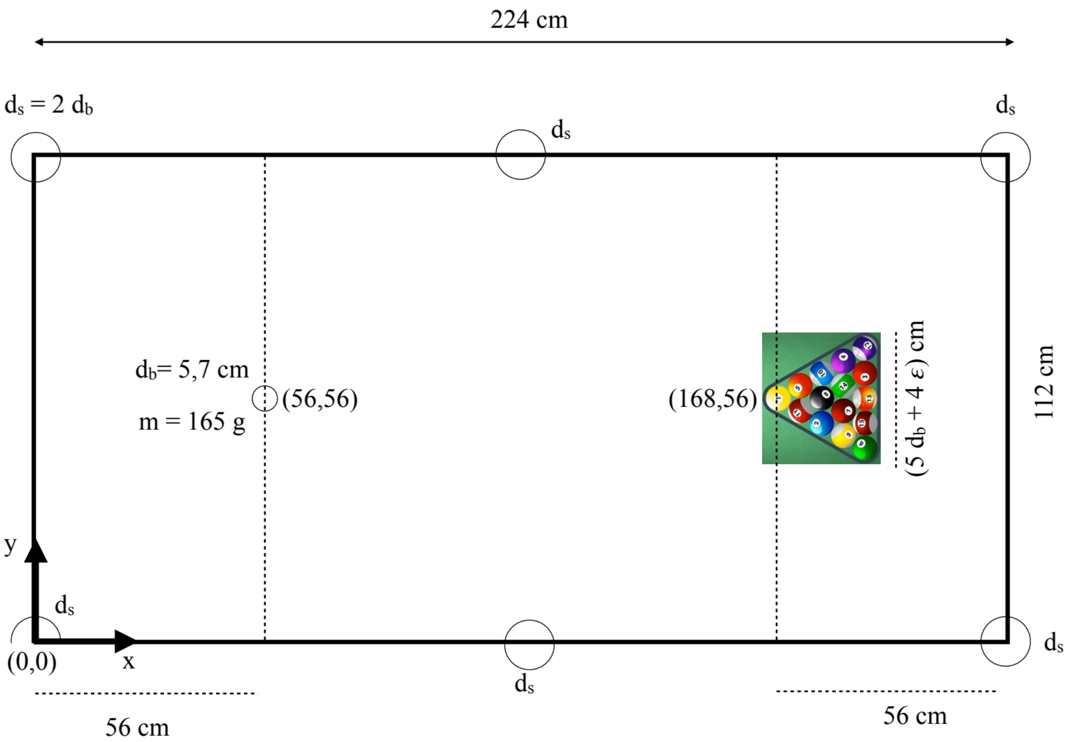

Figura 1: Esquema del sistema a simular: una mesa de pool con 6 agujeros y 16 bolas.

Golpe de suerte

Ahora, considerando la presencia de las buchacas y el Δt determinado anteriormente, 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 = 100 cm/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 un pequeña separación entre vecinas de una distancia al azar (ε) distribuida uniformemente en el rango ε = [0.02, 0.03] cm. Cuando alguna bola toca el radio de las buchacas, ésta desaparece.

2.1) Considerar 20 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.
2.2) Para cada simulación, medir el tiempo en el que la mitad de las bolas desaparecen de la mesa. Estudiar el valor promedio de este tiempo en función de la posición inicial de la bola blanca.
2.3) OPTATIVO: repetir el análisis 2.2) midiendo el tiempo hasta que **todas** las bolas desaparecen