



Bases de la simulación Molecular

23 de enero 2023

Repaso de Física, ecuaciones de Movimiento

La posición de una partícula con respecto a un punto fijo se denota con el vector \vec{r} cuya norma $|r|$ corresponde a la distancia entre el punto fijo y la partícula. Si el objeto se mueve, su posición será función del tiempo (t), y estará denotado por la ecuación anterior.

$$r = f(t) \quad (1)$$

La velocidad (v) y la aceleración (a) —que también son vectores— están definidas como:

$$v = \frac{dr}{dt} \quad (2)$$

$$a = \frac{dv}{dt} \quad (3)$$

El punto clave de la Mecánica Newtoniana está en reconocer que la aceleración de una partícula está determinada por el conjunto de fuerzas (F) que actúan sobre un objeto. Y la fuerza (F) estará descrita como cualquier cosa que pueda cambiar el estado de movimiento de una partícula, cambiando su capacidad de hacer trabajo.

$$F(t) = m \frac{d^2 r(t)}{dt^2} = m \frac{dv(t)}{dt} = m a \quad (4)$$

donde m es la masa de la partícula.

Las fuerzas que actúan sobre un objeto las podemos clasificar en dos:

- Una **fuerza conservativa** es aquella cuyo trabajo depende únicamente de la posición inicial y final de la partícula y no de la trayectoria descrita para ir desde la posición inicial a la final.



- Por otro lado, las fuerzas dependientes del tiempo o de la velocidad (la fricción o el desgaste) son **fuerzas no conservativas**.

Movimiento. Para estudiar sistemas con aceleración constante podemos resolver las ecuaciones de movimiento de acuerdo con la definición de velocidad v y aceleración a :

$$a = \frac{dv}{dt} \simeq \frac{\Delta v}{\Delta t} \quad (5)$$

$$dv = a dt \quad (6)$$

$$\int_{v_0}^v dv = \int_0^t a dt \quad (7)$$

$$v - v_0 = at \quad (8)$$

resolvemos para v

$$v = v_0 + at \quad (9)$$

Ahora vamos a ver qué pasa con la velocidad, de la misma forma y por definición:

$$v = \frac{dr}{dt} \simeq \frac{\Delta r}{\Delta t} \quad (10)$$

$$dr = v dt \quad (11)$$

sustituimos nuestra velocidad de la ecuación 9

$$dr = (v_0 + at) dt \quad (12)$$

integramos

$$\int_{r_0}^r dr = \int_0^t (v_0 + at) dt \quad (13)$$

$$r - r_0 = v_0 t + \frac{1}{2} at^2 \quad (14)$$



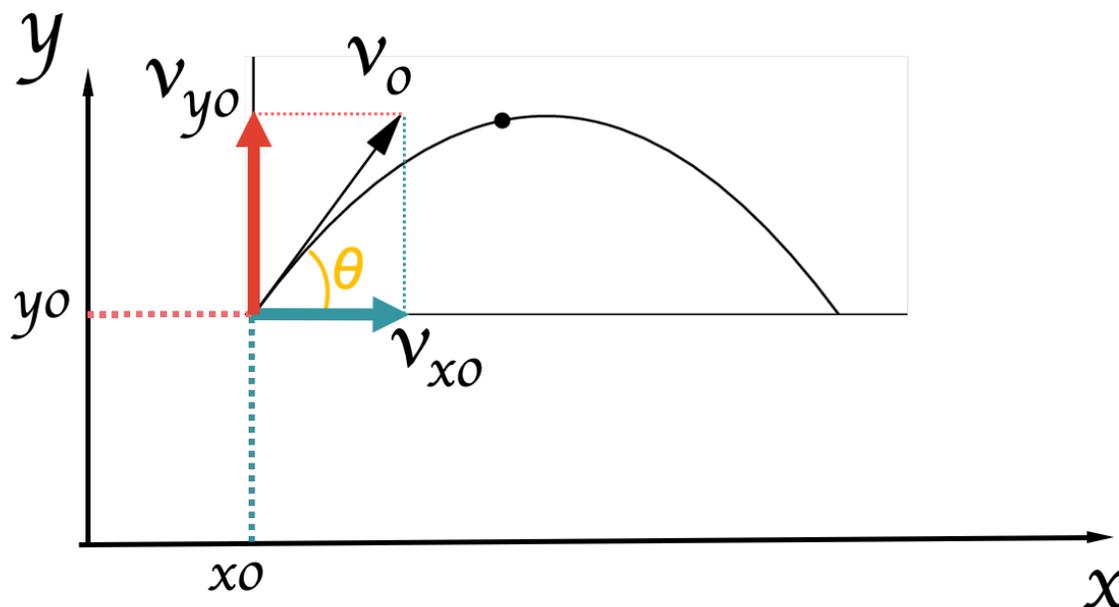
para finalmente obtener

$$r = r_0 + v_0t + \frac{1}{2}at^2 \quad (15)$$



Tiro Parabólico

Vamos a regresar al ejemplo clásico de Física I. Aventamos una pelota desde un origen y dadas la posición, la velocidad y el ángulo de lanzamiento queremos describir su trayectoria.



- La posición de la pelota estará dada por las coordenadas (x, y) iniciales.
- La posición de la pelota depende del tiempo t y estará definido por las funciones $x(t), y(t)$.
- Al tiempo $t = 0$, la pelota será lanzada de un punto $(x, y) = (x_0, y_0)$ con una velocidad inicial \vec{v}_0 .
- El vector de velocidad inicial tiene una magnitud $|\vec{v}_0|$ y una dirección θ_0 .
 - $x(0) = 0$
 - $v_{x_0} = v \cos(\theta)$
 - $y(0) = h$
 - $v_{y_0} = v \sin(\theta)$



Solución Analítica del Tiro Parabólico

La clave para resolver el problema del tiro parabólico de forma analítica está en reconocer que el movimiento horizontal $x(t)$ y vertical $y(t)$ de la pelota son completamente independientes uno del otro. De tal forma

, , mientras que en dirección y es la aceleración de la gravedad, donde $g = 9.81 \text{ m/s}^2$.

Resolvemos las ecuaciones de Newton para encontrar las ecuaciones que describen el movimiento de la pelota. Integrando ambos lados de la ecuación con respecto a t y definiendo las condiciones iniciales.

- **Para (x):** si no tomamos en cuenta la interacción de la pelota con el aire, no habrá fuerzas que actúen sobre el eje horizontal (x), la aceleración en la dirección x es cero y el movimiento de la pelota será descrito por un movimiento uniforme con velocidad constante.

$$\begin{aligned}a_x(t) &= 0 \\v_x(t) &= v \cos \theta \\x(t) &= vt \cos \theta\end{aligned}\tag{16}$$

- **Para (y):** sobre el eje vertical, $y(t)$, si actúa la fuerza de la gravedad que consideraremos constante en el intervalo de altura que estamos trabajando. Por tanto, el movimiento de la pelota en este eje será descrito por un movimiento con aceleración constante.

$$\begin{aligned}a_y(t) &= -g \\v_y(t) &= v \theta - gt \\y(t) &= h + vt \theta - \frac{1}{2}gt^2\end{aligned}\tag{17}$$



Simulación

- La idea general de la **simulación** es programar las leyes de la física en una computadora para que calcule lo que le va a pasar a nuestro sistema de interés como función del tiempo, digamos, que calcule lo que sucederá paso a paso en el futuro.
- En esta clase típicamente utilizaremos las leyes de movimiento de Newton y nuestro objetivo será predecir el movimiento de diferentes objetos que son sometidos a varias fuerzas.