

--- Proyectos pendientes ---

- Modos normales en una molecula

Los modos normales de vibracion de una molecula pueden calcularse diagonalizando su matriz dinamica (segundas derivadas de la energia con respecto a las posiciones), o con un analisis de Fourier de la trayectoria obtenida integrando la ecuacion de Newton.

- Fonones en un cristal

Los fonones son modos normales de vibracion en un solido. Pueden calcularse como los modos normales de una molecula, pero con condiciones periodicas de contorno.

- Explosion coulombiana

Cuando una bola de liquido metalico se carga electricamente, el campo tira hacia fuera, contrarrestando la tension superficial y tendiendo a deformarla. Por encima de cierta carga, la deformacion crece hasta romper la bola en dos. Esto se puede simular con dinamica molecular y un potencial que incluya una parte atractiva mas la repulsion entre un conjunto de cargas 'metalicas'.

- Esferas duras dipolares

Un conocido juego manual consiste en bolitas imanadas con las que se pueden construir multitud de estructuras. Estas estructuras pueden estudiarse minimizando la energia magnetica en funcion de las posiciones y orientaciones de las bolas.

- Transicion liquido-gas

Simulando n particulas, que interaccionan con un potencial tipo Lennard-Jones, puede comprobarse que, a bajas temperaturas, el sistema se divide en una parte mas densa (liquido) y otra menos densa (gas).

- Lattice gas

Es un modelo para estudiar la transicion liquido-gas, en la que las posiciones de una red pueden estar ocupadas o no, dependiendo de sus interacciones con particulas en las posiciones vecinas. La estadistica del sistema puede estudiarse mediante el metodo de Montecarlo.

- Campo electrico en STM

En el microscopio de efecto tunel se aplica una diferencia de potencial entre la superficie plana a estudiar y una punta muy afilada y cercana. El campo electrico resultante se puede calcular en funcion de la carga en una serie de puntos de las superficies, y exigiendo que el potencial en esos puntos sea constante.

- Optimizacion de la trayectoria de un cohete

Dada una trayectoria $r(t(i))$, $i=1:n$, de un cohete hasta entrar en orbita, puede calcularse la aceleracion y la fuerza derivando con diferencias finitas. Restando la fuerza gravitatoria e integrando, puede obtenerse la energia consumida por los motores. Minimizandola se obtendra la trayectoria optima.

- Optimizacion de la trayectoria de un velero

La velocidad de un velero con respecto al agua es una función conocida de su rumbo y de la velocidad del viento. Dada una serie de posiciones $r(i)$, $i=1:n$, y una velocidad prevista del viento $v(r,t)$, puede calcularse el tiempo requerido para ir de cada posicion a la siguiente. Minimizando el tiempo total, puede obtenerse la trayectoria optima.

--- Proyectos realizados ---

- Misil balistico

La trayectoria de un misil balistico puede calcularse en un sistema de referencia inercial o en el sistema ligado a la Tierra en rotacion. En este ultimo, hay que incluir las fuerzas centrifuga y de Coriolis. Pero la trayectoria y el punto de impacto sobre la Tierra deben coincidir.

- Trompo como un conjunto de particulas

Las ecuaciones del solido rigido pueden comprobarse simulando un trompo como un conjunto de particulas unidas por muelles muy rigidos e integrando la ecuacion de Newton.

- Cadena colgando y rotando

Una cadena, colgando de un brazo que rota, toma una serie de formas bastante singulares que pueden estudiarse integrando la ecuacion de Newton, con muelles bastante duros entre las cuentas.

- Tokamak

Es un dispositivo toroidal para confinar mediante campos magneticos un plasma de protones y electrones a una temperatura muy alta, con objeto de producir fusion nuclear. La trayectoria de las cargas puede simularse integrando la ecuacion de Newton bajo la fuerza de Lorentz.

- Tostada

Se trata de simular el movimiento de una tostada cayendo desde una mesa, para comprobar el principio de Peter, segun el cual siempre cae boca abajo.

- Ondas de trafico

Como la distancia de seguridad aumenta cuadraticamente con la velocidad, la maxima capacidad de una autopista se obtiene para cierta velocidad optima. Cuando la circulacion esta cerca de la capacidad maxima, cualquier incidente puede disminuir la velocidad por debajo de la optima y disminuir la capacidad, provocando una retencion. Modelizando el comportamiento de aceleracion y frenado, en funcion de la distancia y velocidad del coche precedente, se pueden simular estas ondas de trafico.

- Distribucion de Maxwell-Boltzman

Simulando n particulas, que interaccionan con un potencial repulsivo, puede estudiarse la distribucion de velocidades de Maxwell-Boltzman, para distintas temperaturas, masas, y dimensiones del espacio.

- Reflexion, refraccion y dispersion de ondas en 2D

Una red de masas unidas por muelles genera ondas en dos dimensiones. Si las masas cambian a lo largo de una linea, las ondas que lleguen a ella se reflejaran y refractaran de acuerdo con la ley de Snell. Si solo una de las masas es distinta, las ondas se dispersaran circularmente.

- Optimizacion de la trayectoria de un ciclista

La potencia interna consumida por los musculos es una funcion no lineal de la potencia externa que actua sobre los pedales. Dadas unas posiciones $x(t(i))$, $i=1:n$, y un perfil de alturas de la carretera $y(x)$, puede obtenerse la velocidad por diferencias finitas, y la potencia externa e interna. Minimizando esta ultima se obtendra la velocidad optima en cada punto para minimizar la energia consumida.

- Bola rodando en un cono

En <https://www.youtube.com/watch?v=mt98cAMC9bw> se observa el curioso comportamiento de bolas rodando en la superficie de un cono invertido. La teoria del potencial central permite explicar cualitativamente por que las bolas vuelven a subir. Mejor aun es una simulacion cuantitativa de la dinamica de una bola rodando en una superficie curva.

- Difusion de calor en una plancha

La temperatura de un cuerpo en presencia de fuentes de calor evoluciona segun la ecuacion de difusion, que puede resolverse usando diferencias finitas.

- Vela solar

Se ha propuesto impulsar naves espaciales con velas solares que, al reflejar la luz del Sol, sufren una fuerza repulsiva, con la que puede simularse su trayectoria.

- Billar caotico

Se trata de una particula puntual rebotando elasticamente en las paredes de un recinto con forma de estadio. Es un sistema dinamico 'hamiltoniano' (determinista) pero que presenta un comportamiento caotico (muy sensible a las condiciones iniciales). Puede simularse la trayectoria y estudiarse mediante representaciones de Lorentz.

- Calculo de eclipses

Integrando la ecuacion de Newton pueden obtenerse las trayectorias de la Tierra y la Luna alrededor del Sol. Y con ellas, calcular los tiempos en que estan suficientemente alineadas para producir un eclipse.

--- Otras ideas ---

- Propagacion de rayos de luz en un medio inhomogeneo
- Busqueda de estructuras de agregados
- Simulacion de discos con imanes en una mesa de aire
- Microscopio electronico
- Difusion en una red con trampas
- Granos en un silo