Tarea 1

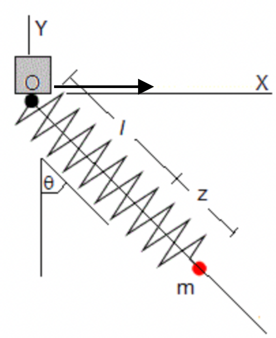
Simulaciones Moleculares

M.I.F.I. María G. Salas Zepeda

Elabore un reporte que aborde la resolución numérica de los problemas. Debe explicar las modificaciones que realizo en los códigos de programación y subir los programas (.py o .f). Debe realizar las graficas de los resultados numéricos obtenidos y dar una pequeña conclusión por problema resuelto.

1. Péndulo elástico (actividad en clase): Consideremos un péndulo formado por una partícula de masa m que pude deslizarse a lo largo de una varilla de masa despreciable, que oscila en el plano vertical. La partícula está unida al centro de oscilación O mediante un resorte de constante k, como se muestra en la figura 1.

Figura 1. Péndulo elástico, donde l es la longitud del resorte y z es la extensión que sufre al estar sujeto a una masa.



Las ecuaciones de movimiento del sistema están dadas por:

$$(l+z)\ddot{\theta} + 2\dot{\theta}\dot{z} + g sin\theta = 0 \tag{1}$$

$$\ddot{z} + \frac{k}{m}z - (l+z)\dot{\theta}^2 - g cos\theta = 0 \tag{2}$$

Resuelva el problema utilizando el método de RK de segundo orden usando los siguientes parámetros

$$r1(0) = 45; \quad v1(0) = 0$$

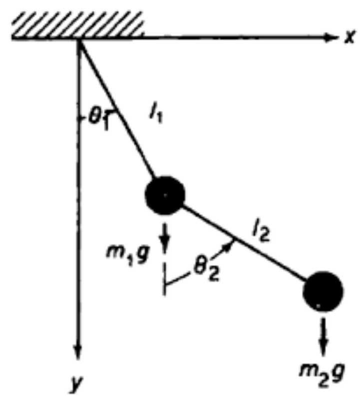
$$r2(0) = 0.1; \quad v2(0) = 0$$

$$m = 40$$

Considere que la ecuación (1) es el movimiento del péndulo y la ecuación (2) es el movimiento del resorte. El sistema es acoplado, por lo que debe tener cuidado al modificar el código.

2. Péndulo doble: El sistema esta conformado por dos péndulos simples de longitudes l1 y l2, de los cuales cuelgan partículas de masas m1 y m2. En un instante determinado t, los hilos forman ángulos θ_1, θ_2 con la vertical. Como se muestra en la figura 2.

Figura 2. Péndulo doble: Las cuerdas que sujetan a las masas son inextensibles.



La lagrangiana del sistema queda:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m_1(\dot{\theta}_1 l_1)^2 + \frac{1}{2}m_2\left[\left(l_1\dot{\theta}_1\right)^2 + \left(l_2\dot{\theta}_2\right)^2 + 2l_1l_2\cos(\theta_1 - \theta_2)\,\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2\right] + m_1gl_1\cos(\theta_1) + m_2g[l_1\cos(\theta_1) - l_2\cos(\theta_2)]$$

Resuelva el problema utilizando el método de RK de segundo orden usando los siguientes parámetros:

$$l_1 = l_2 = 50; m_1 = m_2 = 85$$

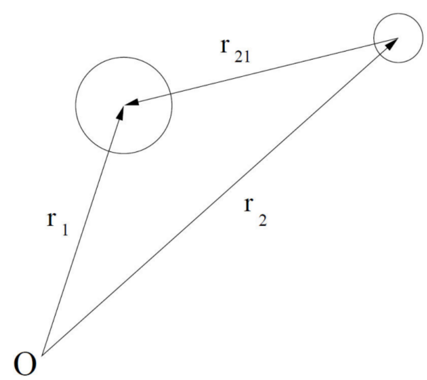
$$\theta_1(0) = \theta_2(0) = \frac{\pi}{2}$$

$$v_1(0) = v_2(0) = 0$$

Posterior a esta simulación, modifique los parámetros de masa, longitud y condiciones iniciales en θ y compare los resultados.

3. Problema de los dos cuerpos: El problema de dos cuerpos que interactúan por su campo gravitatorio generalmente se reduce al de un solo cuerpo sujeto al campo de interacción del otro. Suponga que hay dos partículas aisladas, tal como se muestra en la figura 3. Modifique el método verlet de velocidad para resolver el problema.

Figura 3. Problema de dos cuerpos: Dos masas diferentes interactuando bajo una fuerza de atracción constante dirigida a lo largo del vector $\overrightarrow{r_{12}} = \overrightarrow{r_1} - \overrightarrow{r_2}$.



La fuerza que ejerce la partícula 2 sobre la 1 es $\overrightarrow{F_{21}} = -|\vec{F}|\widehat{r_{21}}$, donde $\widehat{r_{21}}$ es el vector unitario que une a la partícula 2 con la 1. Considere a la magnitud de la fuerza invariante y que el vector de posición cambia con el tiempo:

$$\overrightarrow{r_{21}} = r_1(t) - r_2(t)$$

Considere los siguientes parámetros para resolver el problema:

$$m_1 = m_2 = 10\,; F = 123.8$$

$$r_1(0) = 10\,; r_2(0) = -5$$

$$v_1(0) = 1; v_2(0) = 2.5$$

Hint: Cuando se calcule numéricamente la velocidad de la partícula 1 y 2, considere una suma de fuerzas de la forma: $F_{21} + F_{21normalizada}$. Estos valores se actualizan en cada iteración.