Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal
(Enunciado publicado en CAMPUS el 23/09/2024)

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 ".../material didáctico/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 14/10/2024 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera: **"SdS_TP4_2024Q2GXX_Presentación" y "SdS_TP4_2024Q2GXX_Codigo", donde XX es el número de grupo.** Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 14/10/2024. 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. ¿Cuálde los esquemas de integración resulta mejor para este sistema ?

Sistema 2) Osciladores acoplados

Usando alguno de los esquemas de integración ya implementados, simular la evolución temporal de un sistema de osciladores acoplados y forzados. Para esto, considerar el sistema formado por una cadena de N osciladores puntuales de masa m, unidos por resortes ideales de contaste elástica k. Uno de los extremos de la cadena esta fijo y el otro está estímulado por una fuerza armónica $F(t) = A\cos(\omega t)$ según se muestra en la Fig. 1. Las masas están separadas entre sí por una distancia l_0 y el desplazamiento es en dirección vertical.

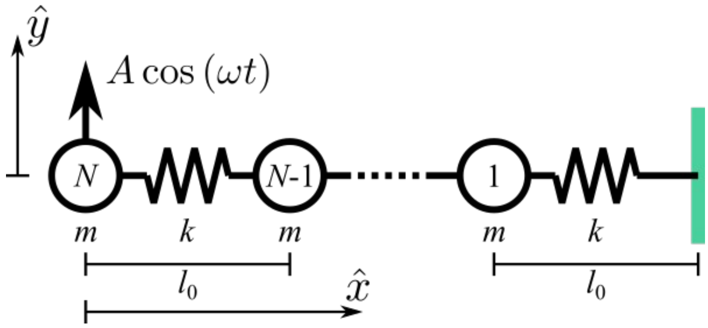

Figura 1: Esquema del sistema propuesto.

El valor de los parámetros es m = 1 g, k = 100 kg/s^2, $A = 10^{-2}$ m y $l_0 = 10^{-3}$ m. La fuerza que experimenta la partícula i es

$$F_i = -k\,(y_i - y_{i-1}) - k\,(y_i - y_{i+1}),$$

donde y_i es el desplazamiento verticial de la partícula i. Usar N = 1000 y $dt = 10^{-2}$ s como paso temporal para integrar el sistema.

1) Estudiar la amplitud de oscilación del sistema como función de ω. Determinar la frecuencia de resonancia del sistema ω_0, esto es, la frecuencia para la cual la amplitud de oscilación del sistema es máxima.

2) Repetir el análisis de 1) variando el valor de k. Considerar 5 valores en el rango [100 – 10000] kg/s^2 y obtener $\omega_0(k)$

3) Analizar la relación entre ω_0 como función de k ¿Se cumple $\omega_0 \sim k^{1/2}$?