

Simulación de Sistemas

Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 26/04/2024)

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 10/05/2024 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera:

"SdS_TP4_2024Q1GXX_Presentación" y **"SdS_TP4_2024Q1GXX_Codigo"**, donde **XX** es el **número de grupo**. Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 10/05/2024. 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. ¿Cuál de los esquemas de integración resulta mejor para este sistema ?

Sistema 2) Misión a Marte

Usando alguno de los esquemas de integración ya implementados, simular el viaje espacial de una nave que parte desde la Tierra con destino a Marte. Para esto, considerar el sistema formado por el Sol, Tierra, Marte y una nave como se muestra en la Fig. 1. La nave espacial parte de una estación que se encuentra a 1500 km de altura respecto a la superficie terrestre y su velocidad orbital respecto de la tierra es de 7,12 km/s. Considerar que la nave parte hacia Marte en un instante en que el Sol, la Tierra y la estación espacial se encuentran alineados como se ve en la Fig. 1. Para ello proyecte la velocidad de la nave en las coordenadas tangenciales definidas en la diapositiva 43 de la Teórica (No hay que simular la trayectoria orbital de la nave alrededor de la tierra)

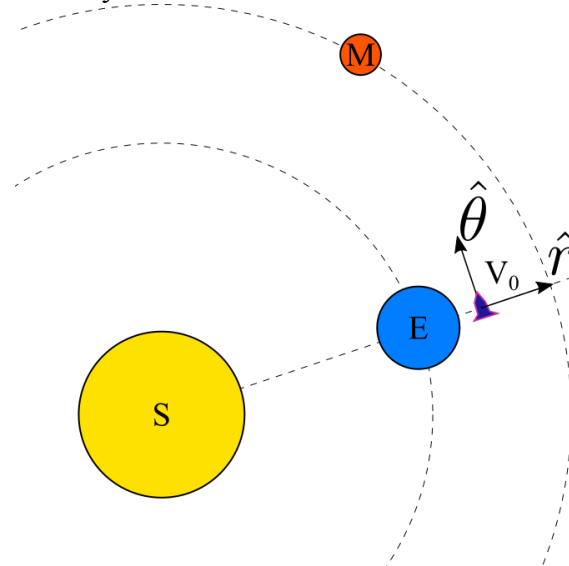


Figura 1: Esquema del sistema propuesto.

A partir de la condiciones iniciales dadas por las posiciones y velocidades de los planetas al día 26/04/2024. (Bajar posiciones y velocidades de: <https://ssd.jpl.nasa.gov/horizons.cgi#top>) (ignorar la componente z), para ello setear las siguientes variables:

Ephemeris Type [change] : VECTORS
Target Body [change] : Earth [Geocenter] [399] / Mars [499]
Coordinate Origin [change] : Sun (body center) [500@10]
Time Span [change] : Start=2024-04-26, Stop=2024-04-26, Step=1 d
Table Settings [change] : quantities code=2; output units=KM-S
Display/Output [change] : plain text

Luego clicar "Generate Ephemeris" y se obtendrá un archivo de texto con la información solicitada (uno para Earth y otro para Mars, el Sol no sería necesario para posiciones y velocidades por que está en el origen de coordenadas (0,0), sin embargo se podría obtener la masa). Además de obtener las masas del Sol y los Planetas involucrados, se debe escribir la constante de gravitación universal en unidades compatibles con las utilizadas.

1) Considerar que la nave inicia su viaje a una distancia del centro de la tierra dada por el radio de la tierra mas la altura de la estación orbital y que tiene una velocidad de despegue $V_0 = 8 \text{ km/s}$ (sumada a la velocidad orbital total que ya tiene la nave antes del despegue, dada por la velocidad de la tierra más la velocidad de la estación espacial), con dirección y sentido dada por la componente tangencial a la órbita.

a) Determinar, usando alguno de los criterios vistos en la clase teórica, el dt de integración óptimo para este sistema.

b) Hallar el momento en el futuro (fecha y cuántos días desde 26/04/2024) en el cual la nave debería partir para asegurar el arribo a Marte. Para ello, graficar la mínima distancia nave-Marte en función de la fecha de salida.

c) Para la fecha óptima hallada en (b), graficar la evolución temporal del módulo de la velocidad de la nave. Informar el tiempo de viaje hasta alcanzar la órbita marciana.

2) Dadas las posiciones optimas halladas en el punto anterior, o las posiciones actuales, como condiciones de salida. Optimizar el tiempo de viaje variando el módulo de la velocidad de salida V_0 .

3) Proponga y estudie alguna variación del presente sistema como, variar el ángulo o el módulo (el módulo a valores menores) de V_0 , un viaje a otro planeta cercano, el regreso desde Marte, etc.).

En todos los casos, determine cuales serán los criterios para evaluar el éxito o fracaso de la misión, como ser, alguna cota de tiempo, cruzar la órbita de Marte, etc. Puede ser útil medir la distancia entre Marte y la nave al momento en que ésta atraviese la órbita marciana. Considere que la nave tiene una masa de $2 \cdot 10^5 \text{ kg}$. En la presentación, describir con precisión cómo se calcula la velocidad inicial de la nave (módulo y dirección).