

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 17/09/2016)

Resolver, utilizando dinámica molecular regida por el paso temporal, los problemas 1) y 2) u opcionalmente 1) y 3).

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) para luego realizar animaciones con una velocidad adecuada.

Se recuerda que la simulación debe generar un *output* en formato de archivo de texto. Luego el módulo de animación se ejecuta en forma independiente tomando estos archivos de texto como *input*. De esta forma la velocidad de la animación no queda supeditada a la velocidad de la simulación.

La entrega del T.P. consiste en:

a- Presentación de, como máximo, 20 minutos de duración (tipo powerpoint). Con 3 secciones:

1- Fundamentos; 2-Implementación; 3-Resultados (con gráficos, tablas, animaciones) y Conclusiones. Todos los alumnos del grupo deben estar en condiciones de responder preguntas de cualquier parte de la presentación y del trabajo en general. Además, durante la presentación oral se podrá solicitar una demostración en vivo, del funcionamiento del código.

b- Archivos \*.avi de las animaciones generadas. Colorear a las partículas según el módulo de su velocidad u otra variable de interés.

c- El documento de la presentación en formato pdf.

d- El código fuente implementado.

#### Fecha y Forma de Entrega:

La presentación en pdf (c) y el código fuente (d) deberán ser enviados por mail a dparisi@itba.edu.ar y gpatters@itba.edu.ar **indicando en el subject: "SdS-TP4-GX", donde X es el número de grupo**, hasta el día 28/09/2016 a las 10 hs.

Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día miércoles 28/09/2016.

## Sistema 1) Oscilador Puntual Amortiguado (solución analítica)

Con la finalidad de comparar los errores cometidos por 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 31 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
- Elegir alguna de las variantes de Verlet.

1.2) En todos los casos graficar las soluciones analítica y numérica y calcular el error total (sumando las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos).

¿Cuál esquema de integración resulta mejor para este sistema ?

## Sistema 2) Gas de Lennard-Jones

Considerar un gas de Lennard-Jones formado por partículas cuyos parámetros adimensionales son  $r_m = 1$ ,  $\epsilon = 2$ ,  $m = 0.1$ , y velocidad inicial  $v = 10$ . La distancia de corte del potencial es  $r = 5$ . La caja que contiene al gas mide 200 unidades de alto x 400 de ancho con un tabique que divide a la caja en dos mitades de 200 x 200 y que presenta un orificio central de 10 unidades (cualitativamente similar a la Fig.1 del T.P. Nro.3). Inicialmente todas las partículas se encuentran en el lado izquierdo de la caja y al evolucionar el sistema estas irán difundiendo hacia la otra mitad. Las partículas se encuentran confinadas en la caja por lo tanto la condición de contorno es de paredes rígidas.

2.1) Simular la evolución de  $N=1000$  partículas, usando alguno de los integradores vistos en la teórica. Elegir el paso temporal  $dt$  tal que los resultados sean consistentes.

2.2) Calcular durante la evolución, la energía total del sistema (cinética + potencial) y compararla para los distintos  $dt$  elegidos. ¿Cual es el mejor para este sistema ? ¿Cual fue el criterio utilizado?

2.3) Usando el mejor  $dt$ , dejar evolucionar al sistema hasta que la cantidad de partículas a ambos lados del tabique se estabilice. Graficar la fracción de partículas en el recinto izquierdo ( $f_p$ ) en función del tiempo.

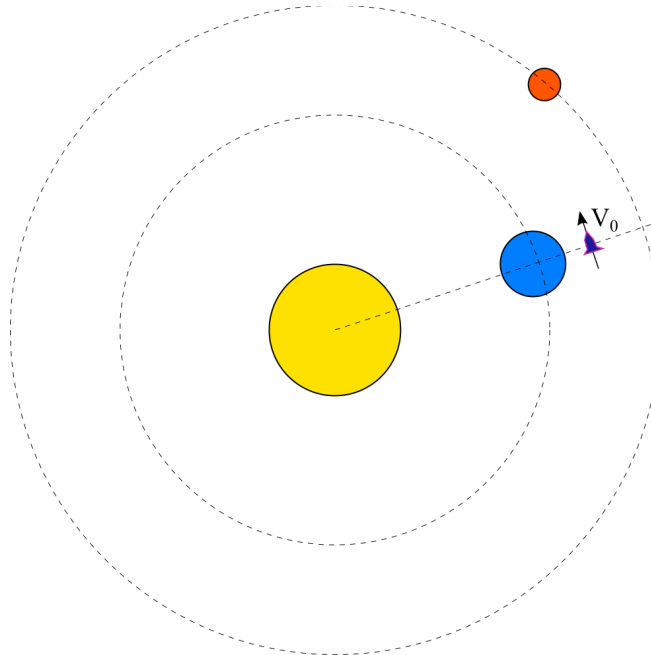
2.4) Graficar la distribución de velocidades en distintos momentos de la simulación y, en particular, al final de la misma.

2.5) Aumentar  $N$  lo máximo posible para que la simulación se realice en un tiempo razonable ( $\sim$  hora). El criterio de corte es que la fracción ( $f_p$ ) oscile alrededor del valor  $f_p \sim 0.5$ . Con este  $N$  repetir los puntos 2.2) a 2.4).

2.6) Realizar animaciones del sistema simulado.

### Sistema 3) Viaje a Marte

Usando alguno de los esquemas de integración ya implementados, simular el el viaje espacial de una nave que parte desde la Tierra con destino a Marte. Para esto considerar el sistema formado por Sol, Tierra, Marte y nave como se muestra en la Figura 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 el instante en que el Sol, la Tierra y la estación espacial se encuentran alineados como se ve en la Figura 1.



**Figura 1:** Esquema del sistema propuesto.

A partir de las condiciones iniciales dadas por las posiciones y velocidades de los planetas al día 19/09/2016.

1) Considerando un velocidad de despegue  $V_0 = 3$  km/s (sumada a las velocidades orbitales que ya tiene la nave antes del despegue), con dirección y sentido dada por la componente tangencial a la órbita, encontrar:

- a) El momento en el cual la nave debe partir para asegurar el arribo al planeta rojo.
- b) El período en el cual esta condición se cumple.
- c) Tiempo de viaje.
- d) Velocidad de la nave al llegar. Queda en órbita o impacta sobre la superficie marciana?

Repetir el análisis para una velocidad  $V_0 = 8$  km/s. Optativo: Elegir una tercer velocidad propuesta y comparar.

2) Dadas las posiciones actuales como condiciones de salida. Optimizar el tiempo de viaje variando el módulo y ángulo de la velocidad de salida  $V_0$ .

3) Proponga y estudie alguna variación del presente sistema.

En todos los casos, determine cuales serán los criterios para evaluar el éxito 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  $2 \cdot 10^5$  kg. Los datos necesarios se encuentran en los archivos adjuntos: 20160916\_mars.txt, 20160916\_sun.txt y 20160916\_earth.txt.