

## Simulación de Sistemas

### Trabajo Práctico Nro. 4: Dinámica Molecular regida por el paso temporal (Enunciado publicado en CAMPUS el 24/09/2021)

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 15/10/2021 a las 10 hs. Los archivos se nombran de la siguiente manera:

**"SdS\_TP4\_2021Q2GXX\_Presentación"** y **"SdS\_TP4\_2021Q2GXX\_Codigo"**, donde **XX** es el **número de grupo**. Las presentaciones orales (a) -conteniendo las animaciones (b)- se realizarán durante la clase del día 15/10/2021. 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 35 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

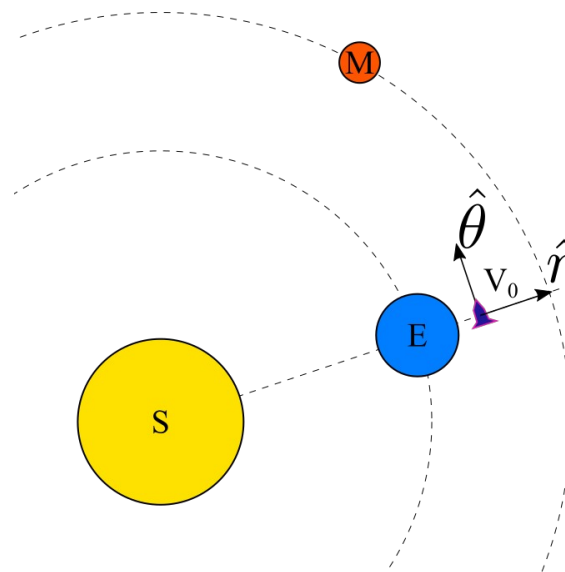
1.2) En todos los casos graficar las soluciones analítica y numérica y calcular el error cuadrático medio (sumando las diferencias al cuadrado para todos los pasos temporales y normalizando por el número total de pasos).

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 esquema 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 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 un instante en que el Sol, la Tierra y la estación espacial se encuentran alineados como se ve en la Fig. 1.



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

A partir de las condiciones iniciales dadas por las posiciones y velocidades de los planetas al día 23/09/2021. (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=2020-09-28, Stop=2020-09-29, Step=1 d  
Table Settings [change] : quantities code=2; output units=KM-S  
Display/Output [change] : plain text

Luego clickear "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  $V_0 = 8$  km/s (sumada a las velocidad orbital total que ya tiene la nave antes del despegue, dada por la velocidad de la tierra mas la velocidad de la estación espacial), con dirección y sentido dada por la componente tangencial a la órbita, hallar:

- a) El momento en el futuro (fecha y cuantos dias desde 24/09/2021) 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.
- b) Para la fecha óptima hallada en (a), graficar la evolución temporal del módulo de la velocidad de la nave. Informar el tiempo de viaje hasta alcanzar la órbita marciana.
- c) Velocidad relativa a Marte de la nave al llegar. ¿Queda en órbita, pasa de largo o impacta sobre la superficie 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  $2 \cdot 10^5$  kg. En la presentación, describir con precisión cómo se calcula la velocidad inicial de la nave (módulo y dirección).