

Métodos Computacionales en Nanomateriales

Profesor: Elmer Cruz Mendoza
email: elmer.cruz.mendoza@gmail.com

23 de febrero de 2016

Práctica 2

El objetivo de esta práctica es que el estudiante adquiera destreza en la solución de problemas en ciencia utilizando métodos computacionales. Se resolverán problemas básicos de mecánica clásica, en donde plantearán las soluciones de los problemas así como las condiciones de frontera (si existen) utilizando métodos numéricos. Se pretende que al final de estos ejercicios, el estudiante ya se encuentre familiarizado con algún lenguaje de computo (Fortran90), lo cual le ayudará en la elaboración de otros proyectos.

1. Problema del minigolf

Considere el problema de la partícula en la caja 2D. Suponga que ahora la caja tiene un hoyo circular de radio R centrado en (x_c, y_c) , definido por

$$(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 = R^2, \quad (1)$$

tal como se muestra en la figura 1. De manera que, si la partícula, que se encuentra en la posición (x, y) , cae dentro de hoyo se debe satisfacer la condición $(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 \leq R^2$.

Actividades

- Modificar el programa para la partícula en la caja 2D: introducir la condición que indica que la partícula se encuentra dentro del hoyo.
- graficar la trayectoria de la partícula, es decir x Vs y .
- Realizar el cálculo utilizando distintas condiciones iniciales.

2. Dos partículas en una caja 1D

A continuación, considere el problema de la caja 1D resuelto anteriormente. En esta ocasión, suponga dos partículas, P_1 y P_2 , que se encuentran dentro de dicha caja en las posiciones x_{01} y x_{02} , respectivamente (Fig. 2). Además, tome

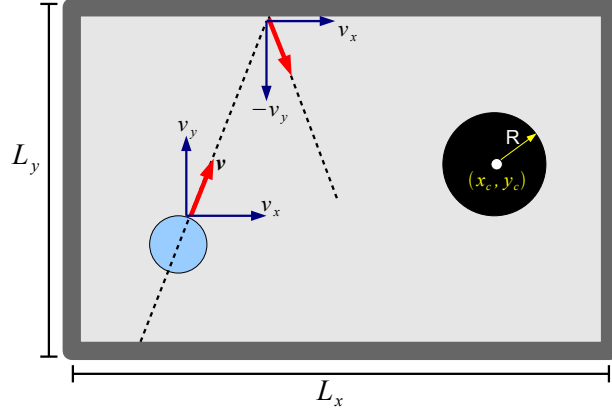


Figura 1: Partícula en una caja 2D con un hoyo de radio R localizado en (x_c, y_c) .

en cuenta que dichas partículas pueden colisionar elásticamente entre ellas y con las paredes de la caja, lo cual dará lugar a la inversión en el signo de la velocidad; Se tomará en cuenta el caso más simple. Suponga que $|v_{01}| = |v_{02}|$ además $x_{01} < x_{02}$.

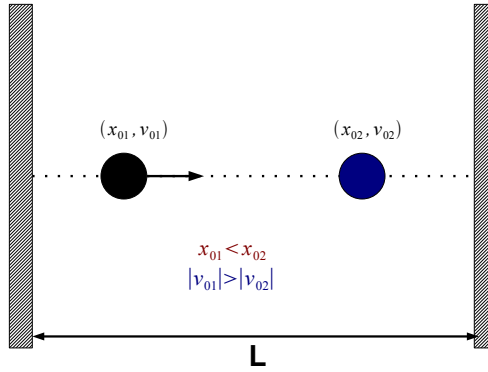


Figura 2: Partícula en una caja 2D con un hoyo de radio R localizado en (x_c, y_c) .

La dinámica de cada una de las partículas se encontrará descrita por una

ecuación de movimiento dada por

$$\begin{aligned} x_i(t) &= x_{0i} + v_{0i}(t - t_0) \\ v_i(t) &= v_{0i} \text{ velocidad constante} \end{aligned} \quad (2)$$

donde i representa la i -ésima partícula.

Actividades:

- Modifique el programa para la partícula en la caja unidimensional y agregue las ecuaciones para la segunda partícula.
- Considere que $|v_{01}| = |v_{02}|$ y que $x_{01} < x_{02}$.
- Resuelva para distintos valores de v_{0i} y de x_{0i}

3. Tiro Parabólico

A continuación, considerese el problema de tiro parabólico, en donde un proyectil es lanzado a cierto ángulo sobre la horizontal (Ver la figura 3). La dinámica del cuerpo se encuentra determinada por medio de las ecuaciones de movimiento

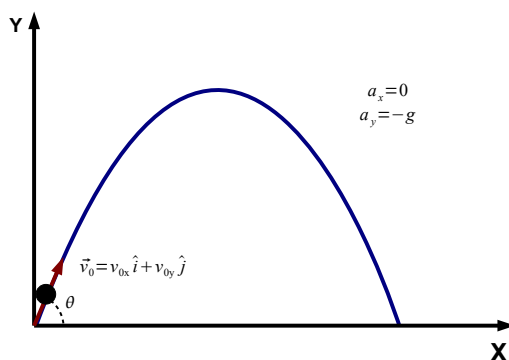


Figura 3: Movimiento en dos dimensiones. Tiro parabólico.

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{dv_x}{dt} = 0 \\ a_y &= \frac{dv_y}{dt} = -g \end{aligned} \quad (3)$$

De donde se obtienen expresiones para la velocidad y la posición en x e y .

- Calcule las expresiones para v_x , v_y , x e y ¹.

¹considere que $a_i = \frac{dv_i}{dt}$, así mismo, tome en cuenta que $v_x = \frac{dx}{dt}$ y $v_y = \frac{dy}{dt}$

- Escriba un programa que utilice las anteriores expresiones para calcular la velocidad y posición como función del tiempo.
- introduzca una condición para que el programa deje de calcular cuando el proyectil toque el eje $y = 0$.

En el caso en que se considera la resistencia del aire sobre el proyectil en vuelo, las anteriores ecuaciones se pueden escribir como sigue:

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{dv_x}{dt} = -\kappa v_x \\ a_y &= \frac{dv_y}{dt} = -\kappa v_y - g, \end{aligned} \tag{4}$$

donde $F = -\kappa v_i$ representa la fuerza debida a la resistencia del aire en la dirección i .

- Calucular las soluciones para la velocidad y la posición.
- Escribir un programa para mostrar los cambios de la velocidad y la posición como función del tiempo.
- Comparar este caso con el problema si resistencia del aire. Discuta las diferencias.

Nota: Escribir un reporte con formato de artículo científico, en el cual se exhiban los resultados y conclusiones de la práctica.