

FÍSICA COMPUTACIONAL (F811)

Segundo poyecto: fecha de entrega 7 de mayo de 2021.

Guatemala, 9 de abril de 2021

Instrucciones: Presentar un informe completo sobre el desarrollo y la implementación en Fortran de su solución a cada problema. Preparar un único archivo tar.gz para adjuntar todos los archivos usados para elaborar el informe: un capítulo del informe por cada problema y los códigos fuente necesarios para compilar todas las implementaciones. El requisito para calificar el problema es que el código debe compilar sin errores en el clúster Euclides.

Problema 1: Aproximaciones numéricas (20 puntos)

Escriba una implementación para los métodos de aproximación numérica de Lagrange, de Diferencias Divididas de Newton (para los casos de diferencias adelantadas, diferencias atrasadas, diferencias centradas y el caso general cuando los nodos no están equiespaciados) y de Hermite. La implementación debe ir acompañada de un manual de uso donde debe explicar el método, el algoritmo usado y los criterios usados para la implementación. Además, el manual debe mostrar las soluciones para las series de datos ejemplo (que están disponibles en el Moodle y en el Google Drive). Como algunos métodos dan una mejor aproximación para los datos ejemplo, entonces presente una comparación de los métodos aplicados a cada conjunto de datos ejemplo.

Notas: (a) los datos ejemplo están en los archivos adjuntos, puede modificar el formato de los archivos pero debe explicar en el manual el formato que va a usar, por ejemplo puede agregar información como el número de datos, etc. Sin embargo, no se pueden modificar los datos; (b) elija algunos puntos para probar las aproximaciones en distintos puntos del intervalo, por ejemplo para el archivo `datos1` puede usar $x = 2.5$, $x = 5.5$, $x = 8.5$ y $x = 12.4$, escriba esto en el informe en una sección de pruebas de funcionamiento; (c) los datos ejemplo son de precisión sencilla, pero los datos que se usarán para evaluar el código podrían ser de doble precisión así que se sugiere que su código permita el cambio de precisión de forma sencilla.

Problema 2: Problema de n cuerpos (30 puntos)

Este problema se enfoca en la descripción del movimiento de n partículas de masa constante m_i y carga constante q_i sujetas a un *potencial central*, es decir que produce una fuerza central. Las fuerzas centrales pueden mantener su dirección, como en el

caso del potencial gravitacional. Sin embargo, las fuerzas centrales también pueden cambiar la dirección dependiendo de la naturaleza partículas, como en el caso del potencial electrostático cuya dirección depende de la polaridad de las cargas.

El problema de n cuerpos no se puede resolver analíticamente, sin embargo es posible *integrar* una solución numérica sencilla y eficiente con el método de integración de Verlet (que es semejante al método *del salto de rana* o *leap-frog* en inglés). Si se conocen la posición y la velocidad de las n partículas del sistema en un instante de tiempo t_0 entonces, $\vec{r}_i(t_0)$ denota la posición y $\dot{\vec{r}}_i(t_0)$ la velocidad de la i -ésima partícula en ese instante. Usando esta configuración inicial de posiciones es posible obtener todas las fuerzas, según el potencial que se use, que actúan sobre la i -ésima partícula durante un intervalo de tiempo infinitesimal, $\Delta t = t_1 - t_0$. Las leyes de Newton nos permiten calcular la aceleración de esta partícula en este intervalo

$$\ddot{\vec{r}}_i(\Delta t) = \frac{1}{m_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \vec{F}_{i,j}(t_0),$$

donde $\vec{F}_{i,j}(t_0)$ es la fuerza en la partícula i ejercida por la partícula j en el instante t_0 . Con las aceleraciones es posible obtener las posiciones y velocidades para el instante t_1 usando

$$\begin{aligned}\dot{\vec{r}}_i(t_1) &= \dot{\vec{r}}_i(t_0) + \Delta t \ddot{\vec{r}}_i(\Delta t), \\ \vec{r}_i(t_1) &= \vec{r}_i(t_0) + \Delta t \dot{\vec{r}}_i(t_0) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \ddot{\vec{r}}_i(\Delta t),\end{aligned}$$

entonces se puede repetir iteración temporal tras iteración temporal hasta obtener un conjunto de posiciones para cada partícula, es decir la órbita o trayectoria para cada partícula.

No es posible determinar por la simple inspección de todas las órbitas si el método funciona, por lo que es necesario utilizar medidas globales como la conservación del momentum angular del sistema, \vec{L} . Dependiendo del tamaño de paso temporal Δt que se use, el momentum angular puede tener oscilaciones alrededor de un valor promedio $\langle \vec{L} \rangle$ y cuya medida está dada por la desviación estándar, ΔL .

Para los siguientes sistemas y configuraciones, determine cómo se comporta el tiempo de cómputo T y la desviación estándar del momentum angular en función de Δt para poder responder: ¿cuánto tiempo de cómputo tomaría disminuir la desviación estándar del momentum angular en un orden de magnitud?

1. considere el sistema Sol-Tierra-Luna (las masas y las distancias entre cuerpos celestes se encuentran fácilmente en internet);
2. considere un sistema de cuatro partículas idénticas (en carga y en masa) colocadas en los vértices de un cuadro de lado 1mm, todas parten del reposo;

3. considere un sistema de cuatro partículas idénticas en masa, pero dos son de carga negativa y las otras dos de carga positiva colocadas en los vértices de un cuadro de lado 1mm, todas parten del reposo,
4. considere un sistema de cuatro partículas, tres de ellas son idénticas (en carga y en masa) colocadas en los vértices de un triángulo equilátero inscrito en un círculo unitario, las velocidades de las partículas son todas iguales a 1mm/s y con la dirección de la tangente al círculo en el punto de contacto y yendo en contra de las agujas del reloj, la cuarta partícula está inicialmente en reposo en el centro del círculo y posee el doble de masa y el doble de la carga de signo opuesto a las otras tres;
5. **Opcional:** considere un sistema de cuatro partículas idénticas (en carga y en masa) e inicialmente en reposo colocadas en los vértices de un tetraedro inscrito en una esfera de radio unitario. El tetraedro es un sólido platónico y esta configuración de las posiciones es la de menor energía para este sistema. En la tesis de Emilio Estrada, dirigida por Juan Ponciano, hacen un algoritmo de optimización para encontrar soluciones como estas para encontrar soluciones de solitones en el Modelo de Baby-Skyrme.
6. **Opcional:** considere el sistema formado por el Sol, Marte, Fobos y Deimos.
7. **Opcional:** considere el sistema formado por el Sol, Mercurio, Venus, Tierra, Marte, Júpiter, Europa, Ío, Ganímedes y Calisto. En la tesis de Brayan Lemus, dirigida por Enrique Pazos, hacen una solución numérica de la dinámica relativista de un sistema de n cuerpos.

Problema 3: Péndulos (30 puntos)

- (a) El péndulo es un sistema que tiene una cuerda de longitud l que sostiene una masa m . Analíticamente se pueden resolver las ecuaciones de movimiento para el caso de oscilaciones pequeñas, pero para el caso general se puede usar el método de Euler (o cualquiera de sus variantes: Euler Modificado, Heun) o el método de Runge-Kutta para encontrar las trayectorias descritas por la masa dadas las condiciones iniciales del problema: partiendo del reposo se suelta la masa cuando la cuerda que está formando un ángulo ϕ con respecto a la vertical. Implemente los métodos de Euler y Runge-Kutta para encontrar la trayectoria de la masa del péndulo simple para cualquier valor inicial del ángulo ϕ . Elija distintos valores ϕ_i y compare la precisión obtenida de cada método a lo largo del tiempo.
- (b) El péndulo doble es un sistema que tiene una cuerda de longitud l_1 que sostiene una masa m_1 de la cual pende otra cuerda de longitud l_2 que sostiene otra masa m_2 . El sistema puede moverse en cualquier dirección y los ángulos con respecto a la vertical que forman las cuerdas ϕ_1 y ϕ_2 permiten llevar al sistema a distintos tipos de respuesta, por ejemplo las respuestas caóticas.

Las posiciones de las masas están dadas por las ecuaciones

$$\begin{aligned}x_1 &= l_1 \sin \phi_1, \\y_1 &= -l_1 \cos \phi_1, \\x_2 &= l_1 \sin \phi_1 + l_2 \sin \phi_2, \\y_2 &= -l_1 \cos \phi_1 - l_2 \cos \phi_2,\end{aligned}$$

de modo que el lagrangiano del sistema se puede escribir como

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{1}{2}(m_1 + m_2)l_1^2\dot{\phi}_1^2 + \frac{1}{2}m_2l_2^2\dot{\phi}_2^2 + m_2l_1l_2\dot{\phi}_1\dot{\phi}_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) + (m_1 + m_2)gl_1 \cos \phi_1 \\&\quad + m_2gl_2 \cos \phi_2,\end{aligned}$$

de donde se obtienen las ecuaciones de movimiento

$$(m_1 + m_2)l_1\ddot{\phi}_1 + m_2l_2\ddot{\phi}_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) + m_2l_2\dot{\phi}_2^2 \sin(\phi_1 - \phi_2) + (m_1 + m_2)g \sin \phi_1 = 0,$$

y

$$m_2l_2\ddot{\phi}_2 + l_1\ddot{\phi}_1 \cos(\phi_1 - \phi_2) - l_1\dot{\phi}_1^2 \sin(\phi_1 - \phi_2) + g \sin \phi_2 = 0.$$

Analíticamente se puede resolver el caso de oscilaciones pequeñas. Sin embargo, en el caso general, se deben usar las ecuaciones de movimiento para obtener las aceleraciones $\ddot{\phi}_1$ y $\ddot{\phi}_2$ y transformando las ecuaciones de movimiento con $\omega_1 = \dot{\phi}_1$ y $\omega_2 = \dot{\phi}_2$ para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden para $\dot{\omega}_1$ y $\dot{\omega}_2$ a los cuales se puede aplicar algún método numérico, como el método de Runge-Kutta, para obtener una solución numérica.

El método de Runge-Kutta de cuarto orden para un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden se aplica a un sistema de m ecuaciones diferenciales en $[a, b]$

$$\begin{aligned}\dot{u}_1 &= f_1(t, u_1, \dots, u_m), \\&\vdots \\ \dot{u}_m &= f_m(t, u_1, \dots, u_m),\end{aligned}$$

sujetos a las condiciones iniciales $u_i(a) = \alpha_i$, para $i = 1, \dots, m$. Si tomamos una distribución de puntos tal que

$$t_j = a + jh,$$

para $j = 0, 1, \dots, N$ y si μ_{ij} representa la aproximación de $u_i(t_j)$ de modo que los valores iniciales sean

$$\mu_{1,0} = \alpha_1, \mu_{2,0} = \alpha_2, \dots, \mu_{m,0} = \alpha_m,$$

entonces, los $(j + 1)$ -ésimos puntos serán

$$\mu_{i,j+1} = \mu_{i,j} + \frac{1}{6}(k_{1,i} + 2k_{2,i} + 2k_{3,i} + k_{4,i}),$$

donde

$$\begin{aligned} k_{1,i} &= h f_i(t_j, \mu_{1,j}, \mu_{2,j}, \dots, \mu_{m,j}), \\ k_{2,i} &= h f_i\left(t_j + \frac{h}{2}, \mu_{1,j} + \frac{1}{2}k_{1,1}, \mu_{2,j} + \frac{1}{2}k_{1,2}, \dots, \mu_{m,j} + \frac{1}{2}k_{1,m}\right), \\ k_{3,i} &= h f_i\left(t_j + \frac{h}{2}, \mu_{1,j} + \frac{1}{2}k_{2,1}, \mu_{2,j} + \frac{1}{2}k_{2,2}, \dots, \mu_{m,j} + \frac{1}{2}k_{2,m}\right), \\ k_{4,i} &= h f_i(t_j + h, \mu_{1,j} + k_{3,1}, \mu_{2,j} + k_{3,2}, \dots, \mu_{m,j} + k_{3,m}), \end{aligned}$$

los cuatro para $i = 1, 2, \dots, m$.

Escriba una implementación de este método para describir las trayectorias de las masas m_1 y m_2 para cualquier configuración inicial del péndulo y estudie las características del régimen de oscilaciones pequeñas. (Opcional) El péndulo doble permite estudiar sistemas caóticos, puede buscar un punto en el espacio de parámetros que tenga una respuesta caótica.

Problema 3: Modelos matemáticos de epidemiología (20 puntos)

Los modelos matemáticos de epidemiología pueden ser estocásticos o deterministas. Los modelos estocásticos dependen de la probabilidad en algunas de las variables que analizan. Los modelos deterministas *compartimentados* dividen a la población en subgrupos o compartimentos. La tasa de cambio del número de elementos en cada compartimento se expresa como una ecuación diferencial.

El modelo SIR es uno de los modelos compartimentados más simples y muchos modelos se derivan de aquí. Este modelo fue introducido en 1927 por William O. Kermack y Anderson G. McKendrick. El modelo consiste de tres compartimentos $S(t)$ para el número de susceptibles, $I(t)$ para el número de infectados y $R(t)$ para el número de recuperados (que ahora son inmunes o que murieron). El modelo es bastante útil en predicciones para enfermedades contagiosas que se transmiten de persona a persona y cuando una persona que ha pasado la enfermedad obtiene anticuerpos para no volver a caer enfermo.

Para un número fijo de la población, $N = S(t) + I(t) + R(t)$, se establecen las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -\frac{\beta SI}{N}, \\ \frac{dI}{dt} &= \frac{\beta SI}{N} - \gamma I, \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I. \end{aligned}$$

donde $\beta > 0$ es la tasa de contagio, considerando que todas las personas tienen la misma probabilidad de contagiarse, $\gamma > 0$ representa la recuperación media. En otras palabras $T_c = \beta^{-1}$ es el tiempo típico entre contactos y $T_r = \gamma^{-1}$ es el tiempo típico hasta la recuperación. El número básico de reproducción, $r_0 = \beta\gamma^{-1}$, dice el número esperado de nuevas infecciones producidas por una sola persona infectada, en algunos textos este parámetro usa una r mayúscula, pero aquí vamos a usar la minúscula para no confundirla con el valor inicial del número de recuperados R_0 . Este número puede modificarse usando medidas de contención como la cuarentena y el distanciamiento físico.

Existen variaciones del modelo SIR donde se consideran las tasas de natalidad y de mortalidad o también modelos donde se considera que la recuperación no implica inmunidad a la enfermedad (modelo SIS) o que inmunidad sólo se obtiene durante un periodo corto de tiempo (modelo SIRS). Otros modelos también consideran el caso donde las personas están en un estado latente durante el cual no transmiten la enfermedad (SIER y SEIS). Además, hay modelos donde se puede incluir la posibilidad de que haya niños o niñas que puedan nacer con inmunidad (modelo MSIR). La epidemia provocada por el coronavirus COVID-19 que nos afecta actualmente se describe mejor con un modelo SEIR, si quieren ver más información pueden ver las explicaciones que hace Enrique Pazos en su blog ¹. Otras aplicaciones de estos modelos se pueden ver en las publicaciones realizadas por Juan Ponciano, una relacionada a la propagación de dengue² junto a William Polanco y Marlon Barrios y la otra relacionada a la propagación de chikungunya³ junto a Juan Diego Chang y Francisco Quiroa. Además, la ECFM junto a la Escuela de Ingeniería Mecánica Eléctrica y al Departamento de Matemáticas de la Universidad de California Santa Cruz realizó la Escuela de Modelos Interdisciplinarios, eMODi2020: modelos matemáticos aplicados a la epidemiología donde se habló con más detalle de la epidemiología matemática. La escuela está grabada y se puede ver en el canal de YouTube de la escuela⁴.

Nosotros vamos a utilizar un modelo SIR adaptado para la transmisión de tuberculosis⁵ que considera que las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= A - \mu S - \frac{\beta SI}{N}, \\ \frac{dI}{dt} &= \frac{\beta SI}{N} - (\gamma + \mu)I, \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I - \mu R,\end{aligned}$$

¹<https://materviva.wordpress.com/2020/03/25/apuntes-sobre-modelos-matematicos-para-covid-19>

²<https://digi.usac.edu.gt/ojsrevistas/index.php/cytes/article/view/631>

³<https://digi.usac.edu.gt/ojsrevistas/index.php/cytes/article/view/412>

⁴<https://www.youtube.com/playlist?list=PLMMoemjfZa-m1VTsiheMZs9VbaWpUACzL>

⁵S Side et al 2018 J. Phys.: Conf. Ser. 1040 012021

donde A es la población inicial y μ es la tasa de mortalidad.

Vamos a aplicar el método de Runge-Kutta de orden cuatro descrito en el problema anterior tomando

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= v(t, S, I, R) = A - \mu S - \frac{\beta SI}{N}, \\ \frac{dI}{dt} &= w(t, S, I, R) = \frac{\beta SI}{N} - (\gamma + \mu)I, \\ \frac{dR}{dt} &= z(t, S, I, R) = \gamma I - \mu R,\end{aligned}$$

de modo que con unas condiciones iniciales (S_0, I_0, R_0) podemos obtener los valores de la $(j + 1)$ -ésima iteración para el tiempo $t = t_0 + jh$

$$\begin{aligned}S_{j+1} &= S_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ I_{j+1} &= I_j + \frac{h}{6}(\ell_1 + 2\ell_2 + 2\ell_3 + \ell_4), \\ R_{j+1} &= R_j + \frac{h}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4).\end{aligned}$$

Los coeficientes están dados por

$$\begin{aligned}k_1 &= A - \mu S_j - \frac{\beta S_j I_j}{N}, \\ \ell_1 &= \frac{\beta S_j I_j}{N} - (\mu + \gamma)I_j, \\ m_1 &= \gamma I_j - \mu R_j,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}k_2 &= A - \mu \left(S_j + \frac{hk_1}{2} \right) - \frac{\beta}{N} \left(I_j + \frac{h\ell_1}{2} \right) \left(S_j + \frac{hk_1}{2} \right), \\ \ell_2 &= \frac{\beta}{N} \left(I_j + \frac{h\ell_1}{2} \right) \left(S_j + \frac{hk_1}{2} \right) - (\mu + \gamma) \left(I_j + \frac{h\ell_1}{2} \right), \\ m_2 &= \gamma \left(I_j + \frac{h\ell_1}{2} \right) - \mu \left(R_j + \frac{hm_1}{2} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}k_3 &= A - \mu \left(S_j + \frac{hk_2}{2} \right) - \frac{\beta}{N} \left(I_j + \frac{h\ell_2}{2} \right) \left(S_j + \frac{hk_2}{2} \right), \\ \ell_3 &= \frac{\beta}{N} \left(I_j + \frac{h\ell_2}{2} \right) \left(S_j + \frac{hk_2}{2} \right) - (\mu + \gamma) \left(I_j + \frac{h\ell_2}{2} \right), \\ m_3 &= \gamma \left(I_j + \frac{h\ell_2}{2} \right) - \mu \left(R_j + \frac{hm_2}{2} \right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k_4 &= A - \mu(S_j + hk_3) - \frac{\beta}{N}(I_j + h\ell_3)(S_j + hk_3), \\
\ell_4 &= \frac{\beta}{N}(I_j + h\ell_3)(S_j + hk_3) - (\mu + \gamma)(I_j + h\ell_3), \\
m_4 &= \gamma(I_j + h\ell_3) - \mu(R_j + hm_3).
\end{aligned}$$

Escriba una implementación de este método para describir el comportamiento de la transmisión de tuberculosis. Para verificar que la implementación funciona se pueden probar los valores iniciales que usaron Side et al corresponden a los datos de 2015 para la provincia de Makasar (Indonesia)

Variable	Valor
S_0	1446093
I_0	1885
R_0	1423
β	(1/2) por mes
γ	(1/9) por mes
μ	0.001167 por mes
$N = A$	1449401

(a) Muestre el efecto de las medidas de contención, es decir haga otras simulaciones modificando el número básico de reproducción primero variando solamente la tasa de contagio y luego variando solamente la tasa de recuperación. (b) Muestre también el efecto de hacer modificaciones a la red hospitalaria, primero considere que se hacen mejoras, esto haría que la tasa de mortalidad disminuya; después considere que la red hospitalaria se deteriora por sobrepoblación de enfermos, esto haría que la tasa de mortalidad aumente.