Métodos Computacionales 2: Taller 3

Ecuaciones diferenciales ordinarias

Por Santiago Henao Castellanos

Este taller se centra en aplicaciones de ecuaciones diferenciales ordinarias.

El taller debe ser presentado como un único archivo `.py`, que debe asumir que todos los datos solicitados se encuentran en la carpeta actual, y debe correr simplemente invocando `python Tarea_3.py`. El código no debe tener ningún `plt.show()`, y tampoco debe interrupir su ejecución o esperar ningún input. Todos los resultados que se pidan guardar (gráficas, videos, etc) deben estar en la misma carpeta del código, y deben ser los mismos que produce el código al ser ejecutado. Si se especifica que debe definir una función, debe usar el nombre asignado. Se penalizará con nota si no se cumplen estas especificaciones.

Si el código alza una excepción, se calificará hasta ese punto.

Este taller tiene nota máxima de 5.5. Está diseñado para que se hagan los dos primeros puntos y se elijan tres del resto de puntos, pero nada les impide intentarlos todos.

Tenga en cuenta que esta tarea será sustentada. Aconsejo no poner código en sus tareas que ustedes no entiendan.

1 (1.3pt) Cantidades conservadas

Simule los siguientes sistemas con el método de su preferencia.

Para cada sistema, grafique en diferentes subplots la solución así como cada una de las cantidades que se indican, en función del tiempo. Su método de solución tiene que asegurar que estas cantidades se conserven aproximadamente, o que al menos no divejan en el intervalo de simulación.

Guarde cada gráfica en `1.X.pdf`, donde X es el subpunto (a,b,c).

1.a Sistema depredador-presa

Las ecuaciones de Lotka-Volterra:

$$\dot{x} = \alpha x - \beta x y$$
$$\dot{y} = -\gamma y + \delta x y$$

describen la dinámica de población donde un depredador y caza una presa x para sobrevivir. La cantidad conservada es: $V = \delta x - \gamma \ln x + \beta y - \alpha \ln y$.

Use las constantes $\alpha = 2, \beta = 1.5, \gamma = 0.3, \delta = 0.4$, y las condiciones iniciales $x_0 = 3$ decazorros, $y_0 = 2$ kiloconejos.

Simule hasta $t = 50$.

1.b Problema de Landau

Si tenemos un campo magnético constante $\vec{B} = B_0 \hat{z}$ y un campo eléctrico que varía espacialmente $\vec{E} = E_0 \sin(kx)\hat{x}$, las ecuaciones de movimiento para una partícula de carga q son:

$$qE_0(\sin(kx) + kx\cos(kx)) = \frac{qB_0}{c}\dot{y} + m\ddot{x} \qquad m\ddot{y} = \frac{qB_0}{c}\dot{x}$$

Asumiendo unidades naturales, tenemos

$$c = 1 \quad q = 7.5284 \quad B_0 = 0.438 \quad E_0 = 0.7423 \quad m = 3.8428 \quad k = 1.0014$$

Simule hasta $t = 30$.

Las cantidades conservadas son el momento conjugado

$$\Pi_y = m\dot{y} - \frac{qB_0}{c}x$$

y la energía total

$$K + U = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - qE_0 x \sin(kx)$$

1.c Sistema binario

Imagínese un universo donde $G = 1$, que tiene dos estrellas de masa $m = 1.7$ ubicadas en $\vec{r}_1 = (0, 0)$ y $\vec{r}_2 = (1, 1)$, con velocidades iniciales $\vec{v}_1 = (0, 0.5)$ y $\vec{v}_1 = (0, -0.5)$.

Estas estrellas se atraen con un potencial gravitacional $V(r) = \frac{Gm}{r}$.

Simule hasta $t = 10$. Las cantidades conservadas son la energía total y el momento angular total del sistema.

2 (1.45pt) Balística

Para innaugurar su 32avo intento de guerra civil, el Coronel Aureliano Buendía, hijo de Úrsula Iguarán y José Arcadio Buendía, ha desenpolvado un cañón de bombarda del viejo batallón, y nos ha asignado la tarea de realizar los cálculos balísticos para su operación.

Nuestro cañón dispara una bala de $m = 10.01$ kg. La velocidad inicial a la que saldrá despedida nuesta bala dependerá de cuánta pólvora le pongamos, logrando hasta 140m/s sin romperse. Somos libres de apuntar el cañón en cualquier ángulo $10° < \theta_0 < 80°$.

Al estar hablando de tanta velocidad, consideramos que el aire hace una fricción líquida (tipo Newton) de la siguiente manera:

$$\vec{F}_{\text{fricción}} = -\beta(y)\ \|v\|^2\ \hat{v}$$

Experimentalmente hemos encontrado que el coeficiente de fricción depende de la altura:

$$\beta(y) = A\left(1 - \frac{y}{B}\right)^C \qquad \text{con} \quad \begin{Bmatrix} A & = & 1.642 \\ B & = & 40.624 \\ D & = & 2.36 \end{Bmatrix}$$

En esta fórmula empírica, la altura debe estar dada en metros. Use 9.773m/s^2 para la gravedad. La altura comienza desde $y = 0$.

2.a Alcance

Queremos encontrar el alcance máximo horizontal como función de la velocidad inicial. Si no hubiese fricción con el aire, sería 45° sin importar la velocidad. ¿Qué comportamiento se observa en este caso?

Guarde su gráfica de x_{max} vs v_0 en `2.a.pdf`

2.a.1 BONO

Si v_0 no es un número, sino una lista/array/tupla de dos valores, considere éstos como $v_0 \pm \sigma_{v_0}$ y propague el error a su respuesta.

2.b Atinar a un objetivo

Escriba una función `angle_to_hit_target(v0,target_x,target_y)` que dada una velocidad inicial fija, encuentre el ángulo necesario θ_0 para que el cañón atine a un objetivo en las coordenadas `target_x,target_y`, ambas positivas.

Debería probar con varios objetivos, graficar la trayectoria y asegurarse de que su código funciona, pues no queremos decepcionar al general. No necesita guardar estas gráficas.

2.c Varias opciones para disparar

Dado un objetivo (x, y) existen varias combinaciones de v_0 y θ_0 que hacen que el disparo llegue al objetivo. Caracterice este conjunto de soluciones. ¿Qué dimensión tiene? ¿Se le ocurre alguna parametrización?

Cree una gráfica (`2.c.pdf`) de θ_0 vs v_0 que muestre dónde están las condiciones iniciales que atinan al objetivo en $(x, y) = (12\text{m}, 0)$

3 (0.75pt) Molécula diatómica

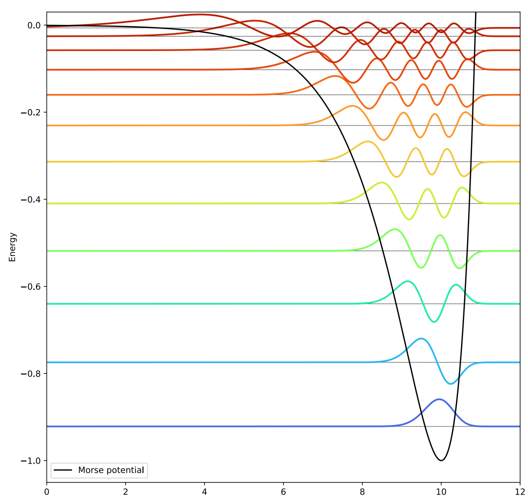
En una molécula diatómica existen potenciales de atracción y de repulsión entre los dos átomos. Un modelo empírico que reproduce bien los resultados experimentales es del de Morse:

$$V(x) = \left(1 - e^{a(x-x_0)}\right)^2 - 1$$

Si tomamos unas unidades donde $\hbar = 0.1$, $a = 0.8$ y $x_0 = 10$, la ecuación de Schrödinger quedaría como:

$$\left(V(x) - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x) = \varepsilon\ \psi(x)$$

Queremos encontrar las energías ε posibles para las partículas atrapadas en este potencial. Para ello usaremos un método conocido como "shooting". Elegimos una energía de prueba ε^*, resolvemos la ecuación diferencial, y si la solución converge, este ε^* es una de las energías. Si no converge, se intenta con otra energía.



Replique el diagrama de la izquierda (`3.pdf`), que ubica cada solución de la ecuación difernecial en su energía correspondiente. Debería normalizar las funciones. No es necesario que use los colores.

Consejos:
- Simule desde $x_1 - 2$ hasta $x_2 + 1$, donde x_1 y x_2 son los dos puntos donde $V(x_{1,2}) = \varepsilon$
- Use un paso máximo de 0.01.
- $\psi(0) = 0$, pero $\psi'(0)$ puede ser cualquier número. Se recomienda uno muy pequeño $\approx 10^{-\text{ algo}}$
- Para evaluar convergencia puede usar la norma del vector de estado: $\{\psi(x), \psi'(x)\}$

Puede probar muchas energías y seleccionar los mínimos locales de esa norma al final de la simulación.

Sólo para que compruebe sus resultados, las energías de los electrones atrapados en este potencial son, teóricamente

$$\varepsilon_n = \left(2\lambda - n - \frac{1}{2}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{1}{\lambda^2}$$

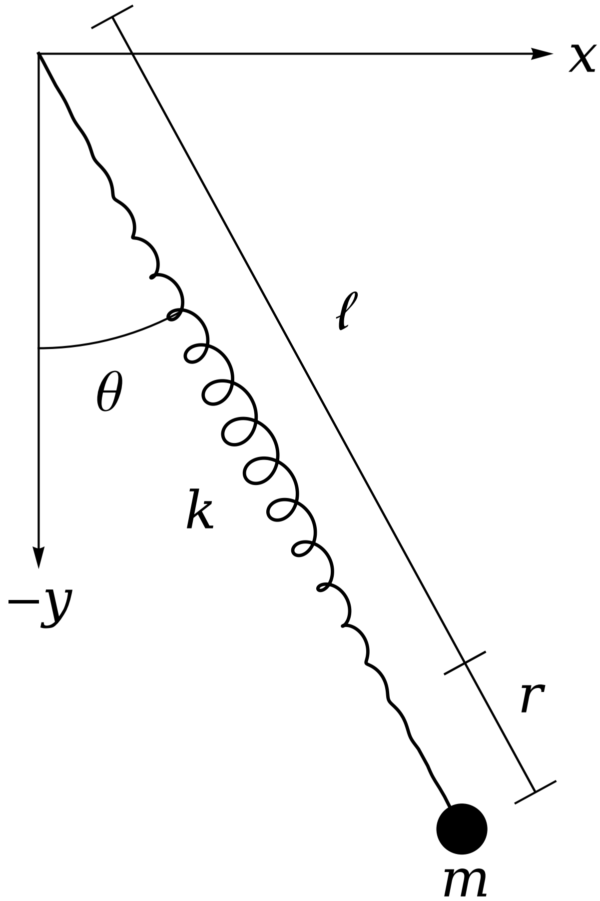
donde $\lambda = 1/(a\hbar)$.

Su código no puede usar esto para encontrar los resultados, pero debe guardar en un archivo de texto (`3.txt`) una tabla con las columnas: n, las energías que usted encontró, las teóricas, y las difernecias porcentuales.

4 (0.75pt) Caos del Péndulo Elástico Planar

En clase hicimos el ejemplo de simular las ecuaciones de movimiento de un péndulo cuya cuerda es elástica, con $\ell = 1$:

$$\begin{aligned}
\dot{\theta} &= \frac{P_\theta}{(r+1)^2} \\
\dot{r} &= P_r \\
\dot{P}_\theta &= -\alpha^2 (r+1)\sin(\theta) \\
\dot{P}_r &= \alpha^2 \cos(\theta) - r + \frac{P_\theta^2}{(1+r)^3}
\end{aligned}$$



Los $P_{r,\theta}$ son momentos relacionados al momento lineal radial y al momento angular. θ es el ángulo, medido desde abajo, y $\alpha = \frac{mg}{kl}$ relaciona las constantes del péndulo con las del resorte, y será nuestra varaible de control.

Dado α, usando las concidiones iniciales

$$\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \quad r = 0, \quad P_\theta = 0, \quad P_r = 0$$

halle el estado del sistema en todos los momentos donde el péndulo pase por $\theta = 0$. Esto se llama una sección de Poincaré. A cada α le correponderá una sección.

Grafique P_r vs r para cada sección, con varios (quizás 20) $\alpha \in [1, 1.2]$, en la misma gráfica, para observar la evolución de estas secciones. Si la sección no es una figura definida, sino que forma puntos dispersos, implica caos en el sistema. Guarde esta gráfica en `4.pdf`.

Pistas:

- Para poder ver figuras debe solucionar hasta un tiempo grande, $t_{\max} \approx 10^4$. Pruebe usar `joblib` para correr su código en paralelo, y que no tenga que esperar tanto.
- Use eventos.

BONO: ¿Es capaz de determinar algorítmicamente cuáles α producen caos y cuáles no?

5 (0.75pt) Circuito genético oscilatorio

Sea $m_i(t)$ proporcional a la cantidad de moléculas de ARN mensajero (mRNA) codificando cierto gen i, y sea $p_i(t)$ la cantidad de proteínas traducidas por el ribosoma usando dicho mRNA, se usa la siguiente ecuación de acción de masas para modelar un sistema de tres genes:

$$\frac{\mathrm{d}m_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\alpha}{1 + p_{i-1}^n} + \alpha_0 - m_i$$

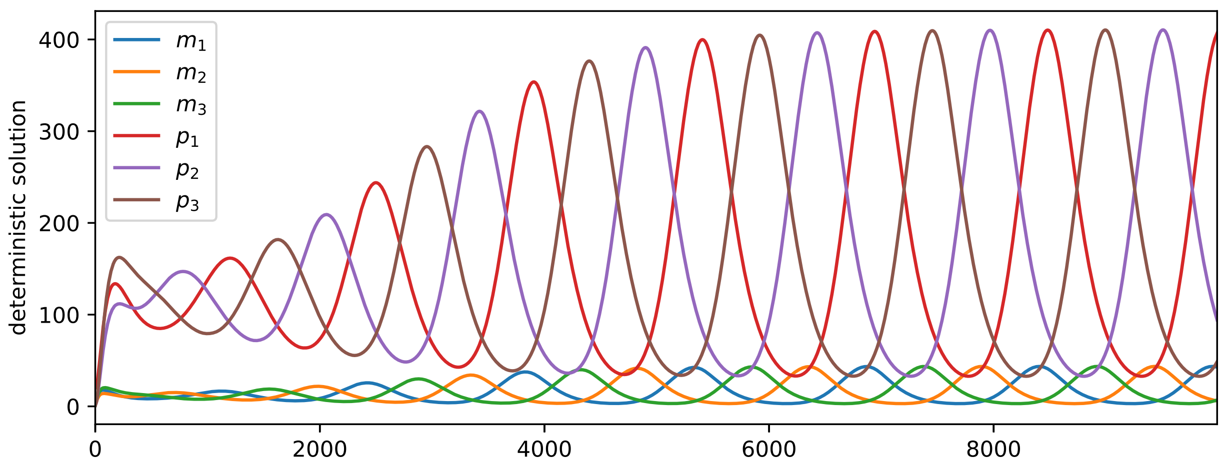
$$\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = -\beta(p_i - m_i)$$

Donde $i \in \{1, 2, 3\}$, y se entiende cíclicamente que $p_0 \equiv p_3$.

Usando $\alpha_0 = \alpha/1000$ y $n = 2$, encuentre la amplitud de oscilación final (después de ≈ 10 oscilaciones) de p_3 para cada combinación de parámetros α y β. Puede simular hasta $t \approx 400$.

Considere $\alpha \in [1, 10^5]$ y $\beta \in [1, 100]$, logarítmicamente espaciados.

Grafique (`5.pdf`) usando `pcolormesh` o `contourf`; α en el eje x, β en el y, y el color como el logaritmo de la amplitud.



6 (0.75pt) Teoría de vigas quasiestáticas

Tenemos una viga de metal fijada a un muro por un extremo, pero libre en el otro extremo. Sobre la viga se posa un bulto de cemento, y queremos calcular la deformación de la viga.

La deformación horizontal u_x y la deformación vertical u_y de un punto se la viga con coordenadas (x, y) vienen dadas por:

$$u_x(x, y) = -y\phi(x) \qquad u_y(x, y) = w(x)$$

donde las funciones ϕ y w deben cumplir las ecuaciones de Timoshenko-Ehrenfest:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(EI\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right) = q(x) \qquad \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}x} = \phi - \frac{1}{\kappa AG}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(EI\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)$$

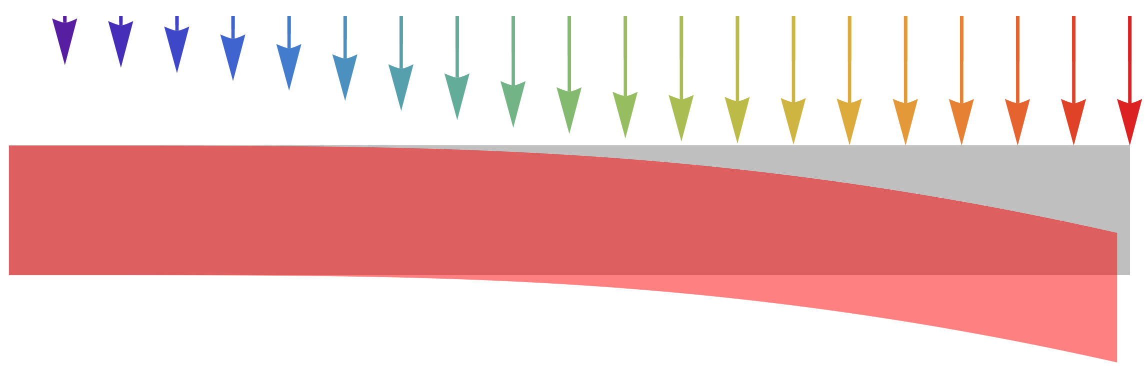
uno de los pocos ejemplos de sistemas de orden 4 aplicables a la ingeniería. $A = 1$ es el área transversal, $G = 1$ es el módulo de cizalla, $E = 1$ es el módulo elástico, $I = 1$ es el segundo momento de inercia, $\kappa = \frac{5}{6}$ es una constante que depende del tipo de viga, y $q(x)$ es el perfil de fuerza que se aplica en cada punto de la viga.

Para este ejercicio tendremos una viga de largo 1, es decir $x \in [0, 1]$, cuya superficie superior tiene $y = 0.2$ e inferior $y = -0.2$. La fuerza aplicada en nuestro caso vendrá dada por la función beta incompleta regularizada:

$$q(x) = \mathrm{betainc}(3, 6, x)$$

que pueden encontrar en `scipy.special` bajo ese nombre.

Grafique (`6.pdf`) la viga antes y después de habérsele aplicado la fuerza:



Pista: cuando uno no sabe qué hacer, muchas veces es prudente que las condiciones iniciales sean todas cero.

7 (0.75pt) Perfil de densidad estelar

Si decimos que una estrella es un gas con ecuación de estado $P \propto \rho^{1+\frac{1}{n}}$, y consideramos a la gravedad como fuerza que se opone a la presión, llegaremos eventualmente a que la densidad (adimensionalizada) de la estrella $\theta(r)$ cumple con la ecuación diferencial de Lane-Endem:

$$\frac{1}{x^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^2\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right) = -\theta(x)^n$$

Este n que aparece en la ecuación de estado se llama índice politrópico.

Con las condiciones iniciales $\theta(0) = 1$ y $\theta'(0) = 0$, queremos hallar un x_* tal que $\theta(x_*) = 0$; este será el radio de la estrella.

Con estas soluciones se pueden hallar la masa total $M \propto -x_*^2\theta'(x_*)$ y la relación densidad central a densidad promedio de la estrella $\frac{\rho_c}{\langle\rho\rangle} = -\frac{1}{3}\left(\frac{x_*}{\theta'(x_*)}\right)$

Complete la siguiente tabla:

Índice n	**Radio**	**Masa**	**$\rho_c/\langle\rho\rangle$**
0.0	2.44949	4.89898	1.00000
1.0			
1.5		3.14159	
2.0			
3.0	6.89685		
4.0			622.40788
5.0			

Y expórtela como `7.csv`

Pista: $\theta''(0) = -\frac{1}{3}$; BONO: ¿por qué?