Tarea 2 - Computación Científica y Ciencia de los Datos
Medio elástico discreto

Prof: Pablo Román

28 de Abril 2025

1 Objetivos

Ajustar parámetros a los datos disponibles hasta cierto error, conociendo las ecuaciones de movimiento del sistema. Para ello, se dispone de métodos paramétricos de ajuste de curvas. Se deberá comprobar la plausibilidad de las ecuaciones de movimiento propuestas con experimentos (Gedanken Experiment).

2 Contexto: Medio elástico

Un medio elástico se puede aproximar mediante un conjunto de masas conectadas por resortes. Este modelo dependerá entonces de las constantes de los resortes. Por ejemplo, un modelo elástico de una placa metálica que tiene una fisura o imperfección, todas las constantes serán iguales, salvo en el lugar donde se encuentra agrietado el material. Si se pudiese encontrar su ubicación, entonces se podría reparar o reemplazar la pieza. Esto tiene aplicaciones en partes de aviones o barcos, o modelamiento elástico de suelos. En la figura (1) tenemos 3×3 masas

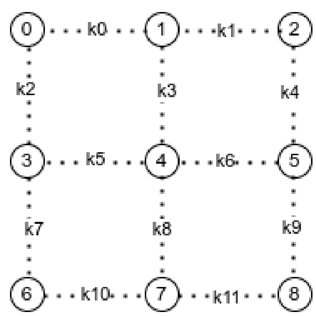

Figure 1: Un modelo de 3×3 masas con resortes

y 10 resortes solo conectados a ciertos vecinos en forma de cuadrícula.

Se dispone de $n \times n$ masas puntuales numeradas como aparece en la figura que interactúan entre sí mediante fuerzas lineales (resortes) y sin roce. Inicialmente, las masas se encuentran en reposo y equilibrio conformando una malla regular de lado d (Fig 1). Las fuerzas de atracción entre pares aumentan linealmente entre ellas con una constante $(k_0, \ldots, k_{M-1})$ (En este caso son M=12) si aumenta la distancia entre ellas. Consideramos las masas iguales con valor igual a 1.

Estas masas se someten a un movimiento en torno a su equilibrio. La geometría del equilibrio la podemos describir en un plano xy con puntos iniciales ubicados en la grilla. La ubicación de cada masa se puede parametrizar, por ejemplo, como $(x_0 + i * d, y_o + j * d)$ donde (x_0, y_0) es la masa numerada por $i = 0, j = 0$ en la esquina inferior izquierda. Hay muchas formas de numeración y depende de la implementación particular cómo usarlas.

Consideremos $(x_0, y_0), \ldots, (x_{n-1}, y_{n-1})$ las posiciones de las partículas cuando están en equilibrio y reposo, claramente se pueden numerar de otra forma. Notar que su centro de masa $(X^{CM}, Y^{CM}) = \sum_i (x_i, y_i)$. Inicialmente $t = 0$ el sistema se encuentra a cierta distancia R^o de las posiciones de reposo (x_i, y_i) y con velocidades iniciales $V^o = (vx_i, vy_i)$. El movimiento de cada masa se considera desde su posición de equilibrio, es decir, la ubicación de la masa i es $(x_i, y_i) + R_i$.

Las fuerzas ejercidas sobre una partícula A en posición P_A debido a otra en P_B con una constante k de resorte corresponden a :

$$F = -k(P_A - P_B) \tag{1}$$

Por lo que la fuerza total sobre cada partícula en este sistema se construye sumando cada fuerza con las masas vecinas. Se puede notar que se forma un patrón el cual se debe programar para este ejercicio.

$$\begin{aligned}
F_0 &= -k_0(R_0 - R_1) - k_2(R_0 - R_3) = -(k_0 + k_2)R_0 + k_0R_1 + k_2R_3 \\
F_1 &= -k_0(R_1 - R_0) - k_1(R_1 - R_2) - k_3(R_1 - R_4) = -(k_0 + k_1 + k_3)R_1 + k_0R_0 + k_1R_2 + k_3R_4 \\
F_2 &= -k_1(R_2 - R_1) - k_4(R_2 - R_5) = -(k_1 + k_4)R_2 + k_1R_1 + k_4R_5 \\
F_3 &= -k_2(R_3 - R_0) - k_5(R_3 - R_4) - k_7(R_3 - R_6) = -(k_2 + k_5 + k_7)R_3 + k_2R_0 + k_5R_4 + k_7R_6 \\
F_4 &= -k_3(R_4 - R_1) - k_5(R_4 - R_3) - k_6(R_4 - R_5) - k_8(R_4 - R_7) = \\
&= (k_3 + k_5 + k_6 + k_8)R_4 + k_3R_1 + k_5R_3 + k_6R_5 + k_8R_7 \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{2}$$

La ley de Newton por cada masa i se expresa como $\frac{d^2R_i}{dt^2} = F_i$. Este sistema de ecuaciones tiene solución analítica por ser lineal. Si consideramos las coordenadas $R_i = (rx_i, ry_i)$ y redefinimos $R = [rx_0, ry_0, \ldots, rx_{n^2-1}, ry_{n^2-1}]$ con dimensión $2n^2$, entonces la ecuación diferencial es:

$$\frac{d^2R}{dt^2} + KR = 0 \tag{3}$$

Donde K es una matriz simétrica de tamaño $2n^2 \times 2n^2$. En el caso del ejemplo (Fig. 1) se trata de una matriz de tamaño 18×18. La formación de esta matriz está completamente determinada por la suma de fuerzas en cada masa. Las masas de las 4 esquinas tienen 2 conexiones, el resto de las masas del borde tienen 3, y las del interior tienen 4. Dependiendo de cómo se ordenan todas las coordenadas de las masas en el vector R, va a ser como se disponen las constantes k en la matriz. Otra observación es que dicha matriz K contiene muchos valores iguales a cero, porque los vecinos de una masa son a lo más 4 y con el resto de las n^2 masas no tienen conexión. Otro detalle a observar es que las mismas constantes se aplican en la coordenada x e y de una misma masa en R. Por lo que se repite dos veces el valor dependiendo en qué lugar se encuentre la coordenada x e y en R. La matriz en su diagonal contiene la suma de los valores de k vecinos, es decir, en el lugar (i, i) contiene la suma de los valores de k vecinos. Finalmente, es posible demostrar que esta matriz tiene muchas simetrías, en particular es simétrica $K_{ij} = K_{ji}$.

La ecuación lineal de segundo grado tiene soluciones oscilatorias y lineales dependiendo de los valores propios de la matriz K. Una solución de esta se puede expresar como $R = Ae^{i\omega t}$, donde A es un vector de las mismas dimensiones de R. Lo cual deja la ecuación como $KA = -\omega^2 A$. Lo anterior indica que A es un vector propio de la matriz K y $-\omega^2$ es su correspondiente valor propio de K. En general se considera que existe un conjunto de $2n^2$ vectores y valores propios. Dichos valores y vectores propios pueden obtenerse en forma numérica utilizando la función numpy.linalg.eig. Notar necesariamente van a existir valores propios ceros ($KA = 0, \omega = 0$), en ese caso la ecuación diferencial es $\frac{d^2R}{dt^2} = 0$. Esto significa que en ese caso las soluciones son $R = R^0 + V^0 t$ que es el caso del movimiento uniforme. Cada vector propio es ortogonal a otro distinto y deben tener norma 1.

La solución a este problema para $\omega_i \neq 0$ es oscilatoria y depende de constantes q_k complejas sumadas con los vectores propios asociados a las frecuencias no nulas:

$$R(t) = \mathrm{Re}(\sum_k A_k(a_k \cos(w_k t) + b_k \sin(w_k t))) \tag{4}$$

En el caso de las frecuencias $\omega_i = 0$ la solución es lineal en t más una constante y sumados en los vectores propios asociados a las frecuencias nulas. Con constantes c_k, d_k reales.

$$R(t) = \sum_k A_k(c_k + d_k t) \tag{5}$$

Las constantes pueden obtenerse de las condiciones iniciales (posición R^o y velocidades iniciales V^o):

$$R(t = 0) = R^o \tag{6}$$

$$\frac{dR}{dt}(t = 0) = V^o \tag{7}$$

Utilizando la ortonormalidad de vectores propios se puede despejar las constantes quedando:

$$R(t) = (A@f(t)@A^T@R^o) + (A@g(t)@A^T@V^o) \tag{8}$$
$$f(t)_{ii} = \cos(\omega_i t) \tag{9}$$
$$f(t)_{ij} = 0;\ i \neq j \tag{10}$$
$$g(t)_{ii} = \begin{cases} \sin(\omega_i t)/\omega_i, & \text{if } \omega_i \neq 0; \\ t & \text{if not} \end{cases} g(t)_{ij} = 0;\ i \neq j \tag{11}$$
$$\tag{12}$$

Donde $A = [A_0, \ldots, A_M]$ es la matriz donde las columnas son los vectores propios, A^T es su transpuesta, @ es el producto matricial (matriz-matriz o matriz-vector), $\omega = [\omega_0, \ldots, \omega_5]$ es el vector columna de la raíz de los valores propios, diag(v) la matriz que contiene a v como diagonal y cero en el resto. f y g son vectores cuya componente i es función de t y depende de la frecuencia ω_i. Al aplicar las funciones a un vector se aplican elemento a elemento como en numpy. Notar que si $t = 0$ entonces $\cos(0) = 1$ y $\sin(0) = 0$, entonces la matriz diagonal es la identidad y la otra es 0. De ocurrir eso $A * A^T$ es la matriz identidad por lo que se recuperan las condiciones iniciales anteriores.

3 Datos y cálculos necesarios

Existen N mediciones de posiciones R de las masas en tiempos regularmente espaciado desde $t_i = 0$ hasta $t = t_f$. Cada medición tiene un ruido Gaussiano con varianza σ^2. Además se entrega la velocidad inicial V^o. Suponga que las constantes de resorte son del orden de la unidad.

4 Experimentos a realizar

Debe concebir un conjunto de datos por ud mismo que sea demostrativo para la implementación que debe realizar. No se permite el uso de loop de Python en lo posible.

1. (1 pto) Documente en forma clara y prolija en jupyter notebook la resolución de sus tarea y experimentos realizados. Describa en detalle su enfoque utilizado e interprete claramente sus resultados y supuestos. Limite su documentación, aproximadamente a 8 hojas carta sin gráficos. Ejemplifique mediante gráficos y animaciones (matplotlib.animate). Un gráfico bien desarrollado vale más que mil palabras (o nulo si no es autoexplicativo).

2. (2.5 pto) Desarrolle una función que simule la trayectoria exacta del sistema retornando un arreglo de $(2n^2, N)$ que representa un vector R columna por cada N valor de tiempo. Esta funcion recibe como argumento los valores de posición y velocidad iniciales. Experimente con dicha función (Método:Gedankenexperiment) graficando/animando las trayectorias, genere 6 experimentos y deben ser claramente convincentes. Deben ser 3 experimentos que muestren movimiento uniforme del centro de masa y otros 3 cuya velocidad del centro de masa sea 0 y puramente oscilatorio. Debe mostrar en ambos casos, para $n < 5$, para $n \in [5, 10]$ y para $n \in [50, 100]$

3. (1 pts) Desarrolle una función que ajuste la constante de los resortes en el caso que sean todos iguales en función de los datos. Asuma conocidas la posición y velocidades iniciales (randomizadas). Encuentre la cantidad de mediciones necesarias para el cual la función anterior entregue un resultado con un error de 0.1 Explique porque debiese operar correctamente. Debe realizarlo para $n = 60$.

4. (1.5 pts) Desarrolle una función que entregue tres constantes de resortes. Se consideran todos los resortes conectados a masas con indices $i + k <= 3n/4$ constante igual a k_0, si $3n/4 < i + j < 5n/4$ constante igual a k_1 y para $i + j >= 5n/4$ constante igual a k_1. Debe generar datos, fitear $k_0, k_1, k2$ con error de 0.1 para $n = 60$.

5. (1 pts Bonus) Debe considerar fitear la forma de la curva y el valor de las constantes que siguen resortes con constantes k_1 y considerando el resto de las constantes iguales a k_0 con un error de 0.1 en torno de la curva. Considere que sigue una curva cuadrática.

5 Entrega

Debe subir su Jupyter Notebook de colab en classroom con plazo al día Jueves 2 de Junio antes de las 23:55 hrs. Se descuenta 1 punto por día de atraso.