# Tarea 2 - Computación Científica y Ciencia de los Datos
# Problema de tres cuerpos con resortes

Prof: Pablo Román

29 de Abril 2024

## 1 Objetivos

Ajustar parámetros a los datos disponibles conociendo las ecuaciones de movimiento del sistema. Para ellos se dispone de métodos perimétricos de ajustes de curvas. Se deberá comprobar la plausibilidad de las ecuaciones movimiento propuestas con experimentos (Gedanken Experiment).

## 2 Contexto

Se dispone de tres masas puntuales numeradas como $(0, 1, 2)$ que interactúan entre si mediante fuerzas lineales (resortes) y sin roce. Inicialmente las tres masas se encuentran en reposo y equilibrio conformando un triángulo equilátero de lado 1 (Fig 1). Las fuerzas de atracción entre pares aumentan linealmente entre ellas con una constante $(k_0, k_1, k_2)$ si aumenta la distancia entre ellas. Consideramos las masas con valor igual a 1. Estas masas se someten

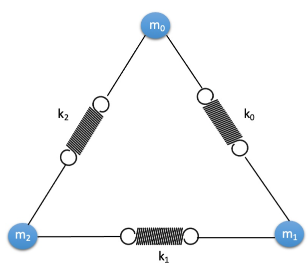


Figure 1: Tres cuerpos con resortes (Fuente: R.G.)

a un movimiento perturbativo en torno a su equilibrio. La geometría del equilibrio la podemos describir en un plano $xy$ con puntos iniciales:

$$X_0(t=0) = (x_0(t=0), y_0(t=0)) \quad =(0, \frac{1}{\sqrt{3}}) \tag{1}$$

$$X_1(t=0) = (x_1(t=0), y_1(t=0)) \quad =(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}) \tag{2}$$

$$X_2(t=0) = (x_2(t=0), y_2(t=0)) \quad =(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}) \tag{3}$$

Con $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ las posiciones de las partículas $0, 1, 2$ respectivamente. Es decir su centro de masa se encuentra en la posición $(0, 0) = \sum_i X_i$. La perturbación se considera como un cambio pequeño en las posiciones iniciales y velocidades iniciales. Esta perturbación la consideramos mediante vectores $R_i$:

$$X_0(t) = R_0(t) + (0, \frac{1}{\sqrt{3}}) \tag{4}$$

$$X_1(t) = R_1(t) + (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}) \tag{5}$$

$$X_2(t) = R_2(t) + (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}) \tag{6}$$

Las fuerzas ejercida sobre una partícula $A$ en posición $P_A$ debido a otra en $P_B$ con una constante k de resorte corresponde a :

$$F = -k(P_A - P_B) \tag{7}$$

Por lo que la fuerza total sobre cada partícula en este sistema es (se suman las dos vecinas):

$$\begin{aligned} F_0 &= -k_0(R_0 - R_1) - k_2(R_0 - R_2) &&= -(k_0 + k_2)R_0 + k_0R_1 + k_2R_2 && (8)\\ F_1 &= -k_0(R_1 - R_0) - k_1(R_1 - R_2) &&= -(k_0 + k_1)R_1 + k_0R_0 + k_1R_2 && (9)\\ F_2 &= -k_2(R_2 - R_0) - k_1(R_2 - R_1) &&= -(k_1 + k_2)R_2 + k_2R_0 + k_1R1 && (10) \end{aligned}$$

La ley de Newton se expresa como $\frac{d^2R_i}{dt^2} = F_i$. Este sistema de ecuaciones tiene solución exacta por ser lineal. Si consideramos las coordenadas $R_i = (rx_i, ry_i)$ y definimos $R = [rx_0, ry_0, rx_1, ry_1, rx_2, ry_2]$, entonces la ecuación diferencial es:

$$\frac{d^2R}{dt^2} + KR = 0 \tag{11}$$

Donde $K$ es una matriz simétrica de $6 \times 6$:

$$\begin{bmatrix} k_0 + k_2 & 0 & -k_0 & 0 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_0 + k_2 & 0 & -k_0 & 0 & -k_2 \\ -k_0 & 0 & k_0 + k_1 & 0 & -k_1 & 0 \\ 0 & -k_0 & 0 & k_0 + k_1 & 0 & -k_1 \\ -k_2 & 0 & -k_1 & 0 & k_1 + k_2 & 0 \\ 0 & -k_2 & 0 & -k_1 & 0 & k_1 + k_2 \end{bmatrix} \tag{12}$$

La ecuación lineal de segundo grado tiene soluciones oscilatorias. 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 $KA = \omega^2 A$. Se debe notar que $A$ es un vector propio y $\omega^2$ es su correspondiente valor propio de $K$. En general se considera que existe un conjunto de 6 vectores y valores propios. Dado el avance en computación simbólica existen soluciones para dicho vectores y valores propios en forma explicita. Los valores propios son:

$$\omega_0^2 = \omega_1^2 = 0 \tag{13}$$

$$\omega_2^2 = \omega_3^2 = a - b \tag{14}$$

$$\omega_4^2 = \omega_5^2 = a + b \tag{15}$$

donde

$$b = \sqrt{k_0^2 - k_0k_1 - k_0k_2 + k_1^2 - k_1k_2 + k_2^2} \tag{16}$$

$$a = k_0 + k_1 + k_2 \tag{17}$$

Notar que se repiten los valores propios lo que se denomina degeneración. Cada valor propio degenerado tiene varios vectores propios. Los vectores propios son denominados modos normales de oscilación (`https://en.wikipedia.org/wiki/Normal_mode`) ya que oscilan con una sola frecuencia si se preparan condiciones iniciales que se muevan como dichos vectores. Los correspondientes vectores propios son:

$$\text{Si } c = k_2^2 - k_0k_1 - k_2b$$

$$c' = k_2^2 - k_0k_1 + k_2b$$

$$A_1 = [0, 1, 0, 1, 0, 1] \tag{18}$$

$$A_2 = [1, 0, 1, 0, 1, 0] \tag{19}$$

$$A_3 = [0, \frac{(b - k_0)(b - k_1)}{c}, 0, \frac{k_0^2 - k_1k_2 - k_0b}{c}, 0, 1] \tag{20}$$

$$A_4 = [\frac{(b - k_0)(b - k_1)}{c}, 0, \frac{k_0^2 - k_1k_2 - k_0b}{c}, 0, 1, 0] \tag{21}$$

$$A_5 = [0, \frac{(b + k_0)(b + k_1)}{c'}, 0, \frac{k_0^2 - k_1k_2 + k_0b}{c'}, 0, 1] \tag{22}$$

$$A_6 = [\frac{(b + k_0)(b + k_1)}{c'}, 0, \frac{k_0^2 - k_1k_2 + k_0b}{c'}, 0, 1, 0] \tag{23}$$

Cada vector propio es ortogonal a otro distinto y deben tener norma 1. Las ecuaciones anteriores no muestran normalización. Por ejemplo $A_1$ tiene norma $\sqrt(3)$. Cada uno de los vectores anteriores debe normalizarse (dividir por su norma).

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

$$R(t) = \mathrm{Re}(\sum_k q_k A_k e^{iw_k t}) \tag{24}$$

En el caso de las frecuencias $\omega_i = 0$ la solución es lineal en $t$ mas constante sumado en los vectores propios asociados a las frecuencias nulas. Con constantes $u_k^0, u_k^1$ reales.

$$R(t) = \sum_k A_k(u_k^0 + u_k^1 t) \tag{25}$$

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

$$R(t=0) = R^o \tag{26}$$

$$\frac{dR}{dt}(t=0) = V^o \tag{27}$$

Utilizando la ortonormalidad de vectores propios se puede despejar la la parte real e imaginaria de $q_k$ y los dos otros vectores quedando:

$$R(t) = (A * f^M(t) * A^T * R^o) + (A * g^M(t) * A^T * V^o) \tag{28}$$

$$f^M(t) = \mathrm{diag}(f(t)) \tag{29}$$

$$f(t)_i = \begin{cases} \cos(\omega_i t), & \text{if } \omega_i \neq 0; \\ 1 & \text{if not} \end{cases} \tag{30}$$

$$g^M(t) = \mathrm{diag}(g(t)) \tag{31}$$

$$g(t)_i = \begin{cases} \sin(\omega_i t), & \text{if } \omega_i \neq 0; \\ t & \text{if not} \end{cases} \tag{32}$$

Donde $A = [A_0, \ldots, A_5]$ es la matriz donde las columnas con 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 raíces de los valores propios, $\mathrm{diag}(v)$ 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 $\omega_i$. 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 $N = 10000$ mediciones de posiciones $X$ de las masas en tiempos regularmente espaciado desde $t_i = 0$ hasta $t = t_f$. Cada medición tiene un ruido Gaussiano con varianza $\sigma^2$ de 0.0001. 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 salvo en el cálculo de N.

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 sus resultados. Limite su documentación, aproximadamente a 8 hojas carta sin gráficos. Ejemplifique mediante gráficos. Un gráfico bien desarrollado vale más que mil palabras (o nulo si no es autoexplicativo).

2. (1 pto) Desarrolle una función que simule la trayectoria exacta del sistema retornando los vectores de tiempos y coordenadas (T, X) dado los valores de posición y velocidad iniciales. Experimente con dicha función (Método:Gedankenexperiment) graficando las trayectorias, genere 4 experimentos y deben ser claramente convincentes.

3. (2 pts) Desarrolle una función que entregue 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 el $N$ para el cual la función anterior entregue un resultado con un error de 0.001 Explique porque debiese operar correctamente.

4. (2 pts) Desarrolle una función que entregue dos constantes de resortes si se supone que dos son iguales y la tercera es ligeramente superior a las otras. Asuma conocidas la posición y velocidades iniciales (randomizadas). Encuentre el $N$ para el cual la función anterior entregue un resultado con un error de 0.001 Explique porque debiese operar correctamente.

5. (1,5 pts de bonus, puede terminar con un 8,5) Desarrolle una función que entregue tres constantes de resortes si se supone que son todas distintas y no son conocidas ni la posición ni las velocidades iniciales (todo randomizado). Explique porque debiese operar correctamente.

# 5 Entrega

Debe subir su Jupyter Notebook en classroom con plazo al día Jueves 23 de Mayo antes de las 23:55 hrs.