

OPTIMIZACIÓN - 1ER CUATRIMESTRE 2009

Trabajo Práctico 1

MOVIMIENTO ARMONICO AMORTIGUADO

Un cuerpo de masa m acoplado a un resorte, si se desplaza una distancia por abajo de su posición de equilibrio estará sujeto a una fuerza de restauración dada por:

$$F = -kx$$

Escribiendo la segunda ley de Newton en la ecuación anterior se tiene:

$$mx'' = -kx$$

resolviendo esta ecuación, la solución puede expresarse como:

$$x = A \cos(\omega t + \phi)$$

donde A es la amplitud del movimiento, ω es su frecuencia angular y ϕ el angulo de fase que representa el desplazamiento de la particula al tiempo $t = 0$.

Para considerar el efecto de amortiguamiento, se introduce una fuerza de resistencia (amortiguamiento) en la ecuacion de movimiento del oscilador armonico. Esta fuerza es usualmente (aunque no siempre) proporcional a la velocidad instantanea de la particula. Se puede escribir como:

$$mx'' = -ky - by'$$

donde b es una constante positiva, es una medida de la intensidad de la fuerza de amortiguamiento, el término by' representa la fuerza de amortiguamiento.

A esta ecuación se le llama ecuación de movimiento del **oscilador armónico amortiguado**. Se propone una solución de la siguiente forma:

$$x(t) = Ae^{-\frac{bt}{2m}} \cos(\omega t + \phi)$$

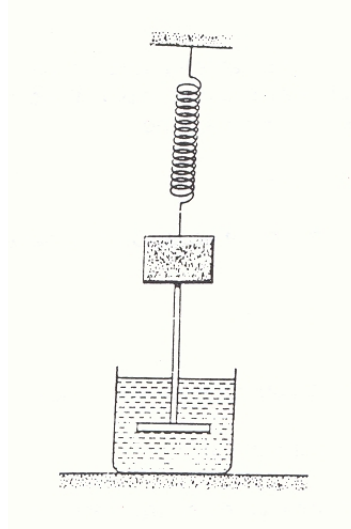
Ejercicio 1 Implementar en `Matlab` un programa que, dados los parámetros de un oscilador armónico amortiguado, realice un gráfico que describa el movimiento del sistema y que tenga como salida además un vector de tiempos aleatorios y sus respectivas posiciones en el tiempo.

Ejercicio 2 Suponiendo $m = 1$ y llamando $\lambda = \frac{b}{2}$. Dada la siguiente tabla de datos recuperados a partir de mediciones de un sistema de oscilador armónico amortiguado, recuperar mediante el método de mínimos cuadrados los valores para los parámetros: La amplitud de movimiento A , la constante de rozamiento λ , la frecuencia natural de oscilación ω y la fase de oscilación ϕ :

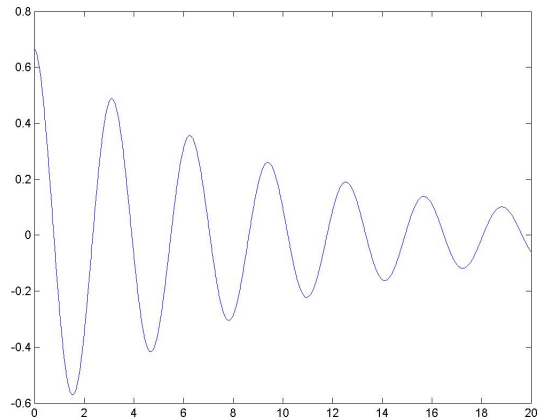
Tabla de datos

i	t_i	$x(t_i)$
1	0.4749	0.3699
2	0.5375	0.3005
3	2.2243	-0.1391
4	2.7173	0.3358
5	2.7438	0.3546
6	2.9862	0.4709
7	3.6263	0.2624
8	3.8373	0.0810
9	3.8458	0.0733
10	5.0135	-0.3328
11	6.7017	0.2284
12	7.9741	-0.2917
13	8.4439	-0.1092
14	8.7473	0.0595
15	9.4231	0.2598
16	10.0389	0.0821
17	10.3906	-0.0833
18	10.4324	-0.1010
19	10.6500	-0.1771
20	11.3011	-0.1764
21	13.2085	0.0503
22	13.4731	-0.0416
23	14.3138	-0.1495
24	14.5158	-0.1135
25	17.4043	-0.1133
26	17.9040	-0.0350
27	18.6773	0.0969
28	18.8477	0.1012
29	19.1466	0.0814
30	19.3833	0.0463

En la figura se muestra un oscilador armónico amortiguado, un disco de masa despreciable se una a la masa y se introduce en un fluido, el que ejerce una fuerza de amortiguamiento.



Aquí el gráfico del movimiento en función del tiempo. usando los mismos parámetros que los de la tabla:



Ejercicio 3 Suponer ahora que al generar la tabla se tuvieron en cuenta posibles errores de medición de los datos (ruido blanco). Agregar este hecho al modelo e intentar recuperar los parámetros. Es decir, ahora la función es de la forma:

$$x(t) = Ae^{-\frac{bt}{2m}} \cos(\omega t + \phi) + \xi$$

En dónde por ejemplo $\xi \sim \mathcal{N}(0, \sigma)$ con σ pequeño o bien $\xi \sim \mathcal{U}[-\varepsilon, \varepsilon]$

POTENCIAL DE LENNARD-JONES

Un par de átomos o moléculas neutros están sujetos a dos fuerzas distintas en el límite de una gran separación y de una pequeña separación: una fuerza atractiva actúa a grandes distancias (fuerza de Van Der Waals, o fuerza de dispersión) y una fuerza repulsiva actuando a pequeñas distancias (el resultado de la sobreposición de los orbitales electrónicos, conocido como la repulsión de Pauli, del Principio de exclusión de Pauli). El Potencial de Lennard-Jones (También conocido como el potencial L-J, el potencial 6-12 o, con menor frecuencia, como el potencial 12-6) es un modelo matemático sencillo para representar este comportamiento. Fue propuesto en 1924 por John Lennard-Jones.

EL potencial L-J es de la forma:

$$V(X, Y) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{|X - Y|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{|X - Y|} \right)^6 \right]$$

donde ϵ es la profundidad del potencial y σ es la distancia (finita) en la que el potencial entre partículas es cero.

Estos parámetros pueden ser ajustados para reproducir datos experimentales o pueden ser deducidos de resultados muy precisos de cálculos de química cuántica. El término $\left(\frac{1}{|X-Y|} \right)^{12}$ describe la **repulsión** y el término $\left(\frac{1}{|X-Y|} \right)^6$ describe la **atracción**.

Si X_1, \dots, X_N son las posiciones en \mathbb{R}^3 de las partículas, la **energía potencial total** es:

$$U(X_1, \dots, X_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(X_i, X_j)$$

Ejercicio 4 Fijando $\epsilon = \sigma = 1$ y dadas N partículas que interactúan entre sí con un potencial de Lennard-Jones, hallar la configuración de mínima energía (el mínimo global). Para $N = 1, 2, 3, 4$ es fácil de resolver sin ayuda de la computadora. Graficar la configuración en el espacio para distintos valores de N .

Observación:

Al momento de buscar el mínimo de una función, tener algoritmos robustos de minimización (método de descenso, Newton) que solo necesiten como input a la función a minimizar y a su gradiente. Tal vez también una tolerancia de error y número de iteraciones, pero que no haya que modificarlo para cada ejemplo.