Métodos Numéricos A - Proyecto

Ejercicio 1

Consideremos una cadena lineal de N tanques conectados, numerados de 1 a N donde cada tanque i posee una concentración desconocida c_i. Cada tanque i intercambia fluido con sus vecinos inmediatos $i-1$ y $i+1$ a través de conductos principales, con un caudal proporcional a q_1. Además, debido a conexiones auxiliares de by–pass, cada tanque intercambia fluido con los tanques ubicados dos posiciones antes y después ($i-2$ y $i+2$), con un caudal proporcional a q_2.

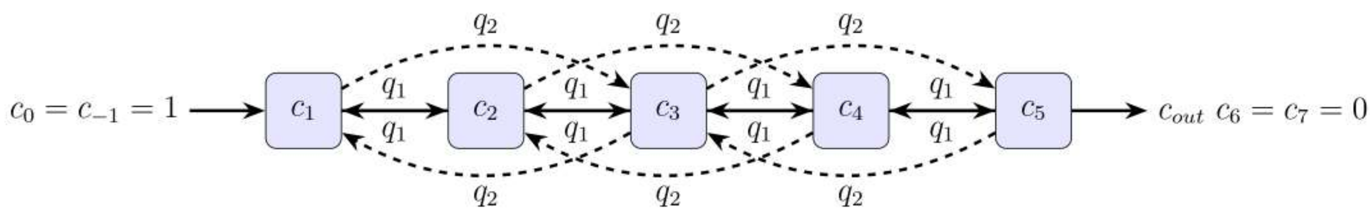

Figura 1: Ejemplo con 5 nodos

En el régimen estacionario, y bajo el supuesto de mezcla perfecta en cada tanque, el balance de masa para la concentración c_i en el tanque i (con $3 \leq i \leq N-2$) puede expresarse como:

$$q_2 c_{i-2} + q_1 c_{i-1} - (2q_1 + 2q_2)c_i + q_1 c_{i+1} + q_2 c_{i+2} = s_i, \qquad i = 1, 2, \dots, N,$$

donde s_i representa las contribuciones debidas a las condiciones de contorno y posibles fuentes externas. En este trabajo vamos a considerar $s_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, N$

Para los tanques ubicados en los extremos, se asume que las concentraciones de entrada y salida son conocidas:

$$c_0 = c_{-1} = c_{\text{in}}, \qquad c_{N+1} = c_{N+2} = c_{\text{out}}.$$

Este esquema de ecuaciones algebraicas lineales da lugar a una matriz pentadiagonal al expresar el sistema en la forma matricial $A\mathbf{c} = \mathbf{b}$, donde $\mathbf{c} = [c_1, c_2, \dots, c_N]^T$.

Condiciones de contorno

Para cerrar el sistema es necesario especificar condiciones de concentración en los extremos de la cadena. Supondremos valores impuestos conocidos:

$$c_{-1} = c_0 = c_{\text{in}}, \qquad c_{N+1} = c_{N+2} = c_{\text{out}},$$

donde c_{in} representa la concentración impuesta en el extremo de entrada y c_{out} la concentración impuesta en el extremo de salida.

En los casos en los que aparezcan índices fuera del dominio físico (por ejemplo, $c_{-1}, c_0, c_{N+1}, c_{N+2}$), estos términos se trasladan al lado derecho de la ecuación formando parte del vector $\mathbf{b}$, ya que corresponden a valores conocidos.

De este modo, las ecuaciones para los tanques interiores conducen a una estructura pentadiagonal de la matriz A, mientras que las filas correspondientes a los primeros y últimos tanques incluyen en el vector $\mathbf{b}$ los efectos adicionales de las condiciones de contorno.

El resultado final es el sistema lineal:

$$A\mathbf{c} = \mathbf{b},$$

1. Implemente en Octave una función que genere automáticamente la matriz A y el vector $\mathbf{b}$ para cualquier valor de N, q_1, q_2, c_{in} y c_{out}. Esta función debe crear dos versiones de la matriz A:

   - matriz completa (densa)
   - matriz dispersa pentabanda

   En Octave se sugiere la función:

   ```
   A = spdiags([e e e e e], -2:2, N, N);
   ```

   Guarde la función en un archivo llamado `crear_sistema.m`.

2. Construya la matriz A y el vector $\mathbf{b}$ para el caso $N = 1000$. con los siguientes datos:

   $$q_1 = 1{,}0, \quad q_2 = 0{,}3, \quad c_{\text{in}} = 1{,}0, \quad c_{\text{out}} = 0{,}0.$$

   Para resolver el sistema deberá utilizar dos métodos directos:

   - Factorización LU
   - Factorización LU con pivoteo parcial

   Consigna: explorar condicionamiento variando q_1 y q_2

   Para estudiar la sensibilidad numérica del sistema pentadiagonal ante la variacón de los coeficientes de acoplamiento, realice los siguientes experimentos:

   a) Tome $N = 1000$ y el caso base $q_1 = 1{,}0,\ q_2 = 0{,}3$. Arme la matriz A (sparse y densa) y el vector $\mathbf{b}$.

   b) Para cada par de valores de la lista siguiente resuelva el sistema $A\mathbf{c} = \mathbf{b}$ con cada método directo y registre:

   - Número de condición: $\kappa(A) = \text{cond}(A)$.
   - Residuo: $\|A\mathbf{c} - \mathbf{b}\|_2$.:
   - Tiempo de cómputo para la factorización y solución (use `tic/toc`).
   - Error relativo frente a la solución de referencia $\mathbf{c}_{\text{ref}}$ (elegida como la solución con $q_1 = 1,\ q_2 = 0{,}3$):

   $$\text{err\_rel} = \frac{\|\mathbf{c} - \mathbf{c}_{\text{ref}}\|_2}{\|\mathbf{c}_{\text{ref}}\|_2}.$$

c) Valores de prueba recomendados para (q_1, q_2):

$$(1, 0{,}1),\ (1, 0{,}5),\ (1, 0{,}9),\ (1, 0{,}99),\ (1, 0{,}999),\ (1, 1{,}0),\ (1, 1{,}5),\ (0{,}01, 1).$$

d) Discuta la relación observada entre $\kappa(A)$ y el error relativo. ¿Se observa amplificación del ruido en las soluciones cuando $\kappa(A)$ es grande?

Discuta la relación entre condicionamiento y estabilidad.

Representación Gráfica

Grafique c_i versus i para:

- cada método directo empleado
- cada variación realizada en los parámetros.

Asegúrese de que el gráfico incluya:

- título descriptivo
- leyenda diferenciando métodos y parámetros

¿Qué relación observa entre el comportamiento del gráfico y las modificaciones realizadas a los parámetros?

Criterios de Evaluación

- Correcta implementación de los métodos numéricos.
- Calidad del código y documentación.
- Análisis crítico de resultados.
- Presentación técnica y claridad.

Ejercicio 2

Estimación de deformación en una viga mediante mínimos cuadrados y factorización QR

En ensayos de resistencia de materiales, una tarea esencial es calibrar sensores de deformación (extensómetros) para verificar su precisión al medir la respuesta de una viga sometida a carga. La teoría de flexión para una viga simplemente apoyada y cargada en su centro establece que la deformación en la fibra extrema es aproximadamente proporcional al momento flector:

$$\epsilon = \frac{My}{EI},$$

donde E es el módulo de Young, I el momento de inercia, M el momento flector aplicado, y y la distancia desde el eje neutro a la fibra considerada.

En la práctica, los sensores presentan ruido y no linealidades, por lo que se requiere ajustar un modelo basado en datos experimentales.

Objetivo

Utilizar datos de carga aplicada y deformación medida para ajustar un modelo que relacione carga y deformación mediante el método de los mínimos cuadrados, empleando factorización QR (incluyendo la implementación manual de Gram–Schmidt modificada).

Datos

Se proporciona un archivo `viga_datos.xlsx` con dos columnas:

- F (N): carga aplicada en el centro de la viga
- ε ($\mu\varepsilon$): deformación medida mediante extensometría en la fibra superior

La viga y el sensor generan mediciones con ruido experimental y pequeñas desviaciones respecto del modelo ideal.

Tareas

1. Importe los datos desde el archivo Excel en Octave.
2. Plantee el modelo lineal
$$\epsilon = aP + b$$
y construya la matriz del sistema sobredeterminado.
3. Implemente el método de Gram–Schmidt modificado para obtener la factorización QR.
4. Resuelva el problema de mínimos cuadrados usando dicha factorización.
5. Resuelva nuevamente utilizando la función nativa `qr()` de Octave y compare resultados (norma del error residual y error cuadrático medio)
6. Repita los incisos anteriores con un modelo cuadrático
$$\epsilon = aP^2 + bP + c$$
7. Grafique los datos experimentales y las curvas ajustadas.
8. Realice pequeñas modificaciones arbitrarias en los datos del archivo excel y registre los resultados (norma del error residual)

Analizar y discutir los resultados obtenidos considerando los siguientes puntos:

- **Calidad del ajuste:** Evaluar la calidad del ajuste calculando e interpretando el error cuadrático medio (MSE) y analizando los residuales gráficamente (por ejemplo, gráfico de residuales vs carga). Discutir si la magnitud y el patrón de los residuos indican un modelo adecuado o la presencia de sesgos sistemáticos.

- **Comparación entre modelos lineal y cuadrático:** Comparar ambos modelos mediante los valores de error, comportamiento de los residuales y superposición gráfica de las curvas ajustadas con los datos experimentales. Comentar en qué rango de cargas cada modelo representa mejor la relación carga–deformación y justificar la elección del modelo más apropiado.

- **Ruido y errores experimentales:** Describir el posible efecto del ruido en los datos sobre los parámetros estimados. Identificar al menos dos fuentes reales de error experimental (por ejemplo, resolución del sensor, variaciones en la aplicación de carga, histeresis del material) y explicar cómo podrían influir en los residuales y en la estabilidad del modelo.

Como guía para el análisis observe patrones en los residuales y relacione con el modelo aplicado. Considere:

- Residuales aleatorios $\Rightarrow$ causa posible $\Rightarrow$ ruido experimental
- Tendencias sistemáticas $\Rightarrow$ causa posible $\Rightarrow$ modelo insuficiente o no linealidades
- Mejor desempeño del modelo cuadrático $\Rightarrow$ causa posible $\Rightarrow$ posible curvatura o ruido amplificado
- Alta sensibilidad de los coeficientes al ruido $\Rightarrow$ causa posible $\Rightarrow$ posible inestabilidad numérica

Entrega

El informe debe incluir:

- Gráfico de datos, ajustes y residuales.

- Comparación entre modelos

- Análisis crítico.

Criterios de Evaluación

- Correcta implementación de los métodos numéricos.
- Calidad del código y documentación.
- Análisis crítico de resultados.
- Presentación técnica y claridad.