

APROXIMACION ESTADISTICA A LA SOLUCION DE SISTEMAS VIBRANTES

Mario L. Alemany¹, Mariano Febbo¹ and Sergio A. Vera¹

¹*Instituto de Mecánica Aplicada (UNS), Universidad Nacional del Sur, Avenida Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina, mfebbo@uns.edu.ar, <http://www.uns.edu.ar>*

Keywords: Modos normales y frecuencias naturales, formulación estadística, cociente de Rayleigh, estados de equilibrio.

Abstract. En este trabajo se obtienen tanto las formas modales como las frecuencias naturales de sistemas simples, sin resolver la ecuación diferencial. Se encuentra la solución del funcional planteado para el sistema a partir de una discretización del dominio. La evolución del dominio discretizado en el espacio de las fases es similar a la de un gas de partículas, lo cual permite la solución del funcional mediante métodos estadísticos. Con los puntos del espacio de las fases, para los cuales la energía potencial del sistema es máxima, se establece el problema análogo al de un gas de partículas interactuantes. El cálculo de las frecuencias naturales y formas modales se corresponde con la situación de equilibrio de este problema análogo. El cociente de Rayleigh interviene en la probabilidad de transición de este nuevo sistema en la búsqueda del equilibrio. Sabiendo que el mínimo de este funcional provee la solución del problema, se propone una minimización utilizando como estrategia un “recocido simulado” (simulated annealing) para encontrar este mínimo. El estado de equilibrio corresponde al estado en donde la temperatura, en el esquema de annealing, es la más baja posible. Este tratamiento de un sistema vibrante permite establecer analogías con la termodinámica y su extensión a problemas más complejos parece posible.

1 INTRODUCTION

El comportamiento dinámico de sistemas que oscilan se representa matemáticamente en términos de ecuaciones diferenciales o por medio de funcionales. Históricamente la primera solución de la ecuación diferencial de la cuerda la obtuvo Lagrange haciendo la discretización del dominio y asimilando el mismo con una cadena de masas y resortes. Es así que se presentan naturalmente la representación de un sistema vibrante como un conjunto de partículas interactuantes y su posible tratamiento estadístico.

Buscar la solución de un problema, desde el punto de vista del funcional, es encontrar una función dentro de un cierto espacio de Hilbert que lo minimice. En este trabajo se presenta una nueva metodología que combina la minimización de un funcional y el tratamiento estadístico-computacional utilizado en las técnicas de resolución numéricas.

La presentación del problema como análogo a un gas de partículas, tiene como objeto la posibilidad de utilizar bases y herramientas de la mecánica estadística del equilibrio.

El esquema de simulated annealing minimiza cierta función objetivo que depende de un gran número de variables, y como su nombre deja entrever se hace una analogía con los procesos de enfriamiento de un sistema. Con esto en mente surge la pregunta y la propuesta: ¿ puede el cociente de Rayleigh ser tomado como función objetivo y obtener los autovalores y autovectores del problema utilizando simulated annealing?.

Con esta propuesta, dentro del esquema de simulated annealing se desarrolla una analogía entre el proceso de búsqueda de mínimo y el proceso de acomodamiento de las moléculas ó partículas, de un material mientras se enfría.

Un aspecto importante de este método consiste en dar interpretación física a ciertos parámetros numéricos del método de simulated annealing.

2 MODELO MATEMATICO

El modelo matemático empleado consiste, en primera medida, en plantear el cociente de Rayleigh para el sistema vibrante considerado. Como segundo paso se discretiza el dominio para evaluar dicho cociente en forma numérica. Discretizar el sistema es simplemente dividir el sistema vibrante en elementos de volumen constituyéndose cada uno de ellos en una partícula puntual de masa m - siendo m la relación entre la masa total del sistema y el número de partículas -. En los sistemas vibrantes que consideraremos, cada una de estas “partículas”, interactúa solamente con los vecinos inmediatos. Por otra parte, la interacción entre elementos es la misma que se utiliza para deducir la ecuación diferencial gobernante del movimiento.

La formulación de Hamilton permite describir este sistema siendo H - dado que el sistema es conservativo:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^n p_i^2 + \frac{M}{n} \sum_{i=1}^{n+1} V_i(q_i, q_{i-1})$$

La evolución de estas “partículas” viene dada por las ecuaciones de Hamilton [Goldstein \(1953\)](#).

Para caracterizar completamente a un sistema vibrante no es necesario conocer la posición y velocidad de cada una de estas “partículas” en cada instante de tiempo. Dado que el movimiento de todo el sistema es armónico, sólo interesa conocer su frecuencia ω o autovalor y su autofunción asociada. Dicha autofunción representa la configuración que toma el sistema vibrante para un dado instante de tiempo, el instante de máxima energía potencial. Si ahora tomamos estos puntos del espacio de las fases, podemos establecer una analogía útil con un gas “partículas” cuya interacción sea de primeros vecinos. La analogía es asociar a cada “partícula” en el in-

stante del máximo de energía potencial del sistema vibrante con una “partícula” del gas de este nuevo sistema análogo.

Por otra parte es sabido que en un gas la condición de equilibrio estable se da para un máximo de entropía, o lo que es equivalente, para un mínimo de alguna de las energías termodinámicas. Matemáticamente: la minimización de un funcional nos lleva a encontrar la situación de equilibrio estable. Para un gas en equilibrio con un baño térmico la función distribución para un punto (n dimensional) en el espacio de fases es:

$$\rho(x_n) \sim e^{-\frac{E_n}{k_b T}}$$

donde E_n es la energía asociada al estado del sistema, k_b una constante universal (cte. de Boltzmann) y T la temperatura.

Para los sistemas vibrantes, la minimización del funcional definido a partir del cociente de Rayleigh, nos lleva a encontrar la frecuencia fundamental y su correspondiente modo normal de vibración. Es en este lugar donde hacemos uso de la analogía, proponiendo que la función distribución para el sistema vibrante discretizado sea

$$\rho(x_n) \sim e^{-\frac{R_n}{\sigma}}$$

siendo R_n el cociente de Rayleigh correspondiente a x_n y σ un parámetro de control análogo a la temperatura. De esta manera queda así también establecida una correspondencia entre el cociente de Rayleigh y la energía del gas.

La evolución del sistema hacia el equilibrio se puede representar como una cadena de Markov de las configuraciones para distintos σ ; la ecuación que gobierna los procesos Markovianos es la ecuación maestra:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha)}{\partial t} = \sum_{\beta} (-\varphi_{\alpha\beta}\rho_\alpha + \varphi_{\beta\alpha}\rho_\beta)$$

donde:

$\varphi_{\alpha\beta}$ = probabilidad por unidad de tiempo de transición de la configuración α a la configuración β

ρ_β = densidad de probabilidad de que la configuración este en el estado ν^i (cambiando los índices se obtiene el significado de las otras variables)

En el equilibrio $\frac{\partial(\rho_\alpha)}{\partial t} = 0$ entonces:

$$\frac{\rho_\beta}{\rho_\alpha} = \frac{\varphi_{\beta\alpha}}{\varphi_{\alpha\beta}} = e^{-\frac{\Delta R_n}{\sigma}} \quad (1)$$

Si el algoritmo obedece esta condición el método estadístico que se pretende emplear coincidirá con la estadística del equilibrio del ensamble canónico. El algoritmo computacional de Metropolis-Montecarlo [Metropolis et al. \(1953\)](#) cumple con esta condición, esto es:

$$\varphi_{\beta\alpha} \propto \begin{cases} 1, & \Delta R_n \leq 0; \\ e^{-\frac{\Delta R_n}{\sigma}}, & \Delta R_n > 0. \end{cases}$$

De esta forma el método computacional queda completamente justificado, es decir, eligiendo esta probabilidad de transición se asegura la convergencia del sistema simulado hacia el equilibrio. En conclusión encontrar el mínimo del funcional definido a partir del cociente de Rayleigh es equivalente a minimizar la energía termodinámica de un gas cuando la temperatura tiende a 0, o, lo que es lo mismo, encontrar su estado de equilibrio a la temperatura más baja posible.

3 RESOLUCION DEL PROBLEMA

La resolución del problema consistirá en minimizar el funcional de Rayleigh o cociente de Rayleigh, a partir del método de recocido simulado ('simulated annealing') [Kirkpatrick et al. \(1983\)](#). La exploración del espacio de configuraciones consistirá en crear una cadena de Markov con las configuraciones posibles y tomando como probabilidad de transición la dada por la ecuación 1.

3.1 Método de recocido simulado y su aplicación al problema propuesto

El método de recocido simulado consiste en imitar la forma en que la naturaleza logra que los sistemas alcancen el estado de mínima energía a medida que la temperatura tiende a cero. A altas temperaturas, un sistema dado posee fluctuaciones térmicas espontáneas que le permiten explorar todas las configuraciones posibles. A medida que se baja la temperatura, si el descenso es lo suficientemente lento, el sistema se va acomodando de forma natural 'buscando' el mínimo de energía pasando a través de sucesivos estados de equilibrio. Es posible demostrar [Schneider and Morgenstern \(1998\)](#) que cuando la temperatura es cero, el sistema ha sido capaz de encontrar el estado buscado.

El esquema básico del método de recocido simulado consiste en tres pasos fundamentales que son iterados hasta que la temperatura del sistema T o parámetro de control, σ , no permita posteriores decrementos de la energía. Ellos son

- Generación de configuraciones al azar que exploren el espacio de configuraciones de forma eficiente.
- Evaluación de la función objetivo y selección de la nueva configuración conforme al criterio de Metropolis, ver sección 2.
- Enfriamiento del sistema siguiendo un esquema de enfriado

A continuación detallaremos cada uno de los items descriptos.

3.1.1 Generación de configuraciones al azar

Una de las cuestiones fundamentales que tiene el método de recocido simulado para que encuentre el mínimo de forma eficaz es la manera en que explora el espacio de configuraciones (o espacio de posibles soluciones). Los esquemas más usuales de generación de nuevas configuraciones son aquellos en donde la posibilidad 'apartarse' de la configuración anterior depende de la temperatura, es decir, del parámetro de control, [Ceranich et al. \(2001\)](#). A medida que la temperatura desciende, siguiendo el esquema de enfriado, la configuración actual del sistema difiere cada vez en menor medida de la anterior.

La forma que hemos elegido para la generación de posibles soluciones se basa principalmente en este esquema. Primeramente se elige una configuración al azar que permita, en principio, alcanzar a partir de ella cualquier forma de solución (comunmente se elige el valor de una constante más una perturbación aleatoria). Una vez que el algoritmo de recocido simulado comienza a desarrollarse, se va construyendo una cadena de Markov, permitiendo que cada parte en la que se dividió el dominio o 'partícula' pueda aumentar o disminuir su valor en forma aleatoria. La magnitud del cambio o 'salto' esta relacionada con el parámetro de control, permitiendo aleatoriamente mayores saltos cuando σ es alto.

3.1.2 Evaluación de la función objetivo y selección de la nueva configuración

Para la selección de las nuevas configuraciones es necesario evaluar ΔR_n , es decir evaluar el funcional en dos configuraciones sucesivas. Para esto el sistema vibrante se “reconstruye” usando *splines cúbicos* (s.c.), con el fin de calcular ΔR_n . En este proceso de interpolación con s. c. se introducen las condiciones de borde del problema. La condición de extremo fijo o más ampliamente, de no desplazamiento del elemento de volumen o “partícula”, se inserta en la selección de la nueva configuración impidiendo el salto en dicho extremo.

Una vez calculado ΔR_n se computa la probabilidad de transición obedeciendo el criterio de *Metropolis* tal como fuera enunciado en la sección 2.

3.1.3 Esquema de enfriado

El esquema de enfriado se ha elaborado de forma diferente a los esquemas de enfriado usuales que proponen disminuciones de la temperatura de forma exponencial cada vez que se acepta una nueva configuración [Ceraníc et al. \(2001\)](#). Nuestro esquema, en cambio, hace clara referencia a la idea básica del método de recocido simulado [Kirkpatrick et al. \(1983\)](#) el cual prevee que la disminución correspondiente de la temperatura del sistema en búsqueda del mínimo de energía se realiza una vez que el mismo haya alcanzado el equilibrio para cada temperatura [Schneider and Morgenstern \(1998\)](#).

Para ello es necesario definir lo que consideraremos como equilibrio para cada valor del parámetro de control o temperatura del sistema. La idea intuitiva de equilibrio estable (en adelante nos referiremos solo a equilibrio) implica que si al sistema se le imprime una perturbación que tiende a alejarlo de la configuración actual, el mismo es capaz de retornar espontáneamente al estado del que partió. En mecánica estadística, donde al sistema se le permite interactuar con un reservorio de energía o baño térmico a una temperatura fija, uno puede decir que se encuentra en un estado de equilibrio si las fluctuaciones propias del sistema que interactúa con el baño promedian a cero. Siguiendo esta idea definiremos equilibrio, para un cierto valor de σ si el número de configuraciones aceptadas que aumentan la ‘energía’ o R en este caso, es del orden del número de configuraciones que disminuyen la misma. Además requeriremos que el número de configuraciones aceptadas sea de un 20%¹ de l número de configuraciones totales, logrando de esta forma que el promedio del cambio en la energía o ΔR entre configuraciones sea del orden de σ . Algorítmicamente, esto es

$$1 - \epsilon < \frac{N^0_{acep-}}{N^0_{acep+}} < 1 + \epsilon \quad (2)$$

donde N^0_{acep-} es el número de configuraciones aceptadas que disminuyen la energía y N^0_{acep+} las que la aumentan y ϵ^2 número que tiende a cero. Y además

$$\frac{N^0_{acep}}{N^0_{tot}} \sim 0.4 \quad (3)$$

donde N^0_{acep} es igual al número total de configuraciones aceptadas ($N^0_{acep-} + N^0_{acep+}$) y N^0_{tot} el número de configuraciones totales.

¹Este número puede modificarse a un 15 o 30% sin afectar en forma sustancial el algoritmo, respetando la idea desarrollada en el texto

²Cualquier valor menor a 0.05 es considerado como válido

Es posible ver este comportamiento para una dada simulación en la figura 1, donde se muestra en el eje de las ordenadas el valor del cociente de Rayleigh R en función del número de iteraciones. Allí se observa que luego de un cierto número de iteraciones $NumEq$ el sistema logra alcanzar el equilibrio. En este caso la temperatura es de $1 \cdot 10^{-4}$

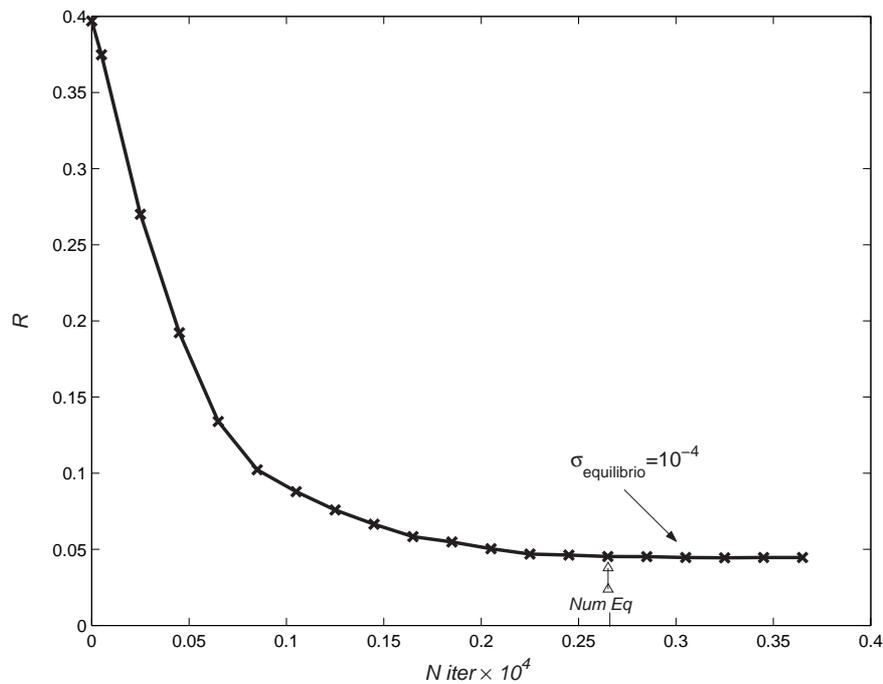


Figure 1: Valores de R en función del número de iteraciones para un dado σ . A partir de $NumEq$ el promedio de las fluctuaciones tiende a cero y puede decirse que el sistema se encuentra en equilibrio.

Retornando al esquema de enfriado, una vez que se ha alcanzado el equilibrio para un cierto valor de σ , el sistema está apto para ser enfriado nuevamente.

3.1.4 Temperatura Inicial

La temperatura inicial del algoritmo se elige haciendo una primera exploración de prueba del espacio de configuraciones, eligiendo arbitrariamente un valor de 'salto' y eligiendo una probabilidad de transición $\tilde{\varphi}_{\nu\nu^i} = 0.8$ de acuerdo con la siguiente ecuación.

$$T_0 = -\frac{\delta R}{\ln(\tilde{\varphi}_{\nu\nu^i})} \quad (4)$$

siend δR el promedio del incremento en R en la exploración de prueba comentada anteriormente. Esta es una selección clásica de la temperatura inicial que puede verse en Ceranic et al. (2001)

3.1.5 Temperatura Final

La temperatura final es la temperatura a la cual se da por concluido el algoritmo de minimización. Idealmente esta temperatura debería ser 0. Como eso es imposible desde un punto de vista computacional, se debe elegir algún criterio de finalización del mismo. Existen diversos criterios en la literatura que consisten en limitar el tiempo de cálculo, elegir un cierto número

máximo de iteraciones, etc. De todos ellos nosotros elegiremos uno propio y es el siguiente. El proceso de enfriado termina y con él, el algoritmo de recocido simulado, cuando, eligiendo de antemano una cantidad determinada de cifras significativas, el valor de la cifra significativa de menor orden promedia a cero, mientras que las anteriores no cambian, cualquiera sea el salto permitido a una dada temperatura.

4 RESULTADOS

En esta sección mostraremos los resultados de las simulaciones elegidas, correspondientes a casos sencillos de sistemas vibrantes con distintas condiciones de borde. La minimización del funcional, propuesta para cada caso en particular, nos dará como resultado el autovalor más bajo o fundamental y su correspondiente modo normal que se obtienen a partir de una configuración inicial elegida completamente al azar. A continuación se detallan los casos estudiados y la función de partida a la que se hacía referencia.

1. Cuerda con extremos fijos. Función de partida constante + ruido.
2. Cuerda con un extremo fijo y otro libre. Función de partida constante + ruido.
3. Viga con extremos empotrados. Función de partida seno.
4. Viga con extremos empotrados. Función de partida seno + ruido.

4.1 Cuerda con extremos fijos

Para obtener la solución al problema planteado, el algoritmo se inicia con una configuración elegida en forma arbitraria para mostrar la versatilidad del mismo. En este caso se ha elegido como función de partida una constante + ruido, como se puede ver en la figura 2 *config inicial*. El número de partículas elegido para inicializar el algoritmo fue 16, respetando el criterio que se enunciará más adelante y la longitud de la cuerda fue de $L = 15$. Los demás parámetros de la cuerda fueron elegidos de forma tal de que $c = \sqrt{T/\mu} = 1$. En la misma figura se pueden ver configuraciones intermedias, que se van pareciendo a la autofunción del problema, a medida que el algoritmo va convergiendo hacia la solución para diferentes temperaturas. La configuración final resulta de haber detenido el algoritmo según el criterio enunciado para la elección de la temperatura final. Los valores numéricos de las configuraciones mostradas en la figura 2, se muestran en la tabla 1

config	R	σ	salto $y_i = f(x_i)$	N_{iter}
inicial	0.396959	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	0
interm 1	0.083343	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^3$
interm 2	0.048746	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^3$
interm 3	0.045338	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^3$
final 16	0.0438711	$1 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^4$

Table 1: Valores del cociente de Rayleigh para las configuraciones mostradas en la figura 2 con $N_{part} = 16$. También se muestran el arámetro de control asociado, el salto y el número de iteraciones a partir de la configuración inicial.

Una vez que el algoritmo se lentifica y no es posible un mayor decremento de la función energía o Rayleigh en un tiempo razonable, se pensó en solucionar el problema de la siguiente forma. Se duplica la discretización del dominio, es decir la cantidad de "partículas" tantas veces

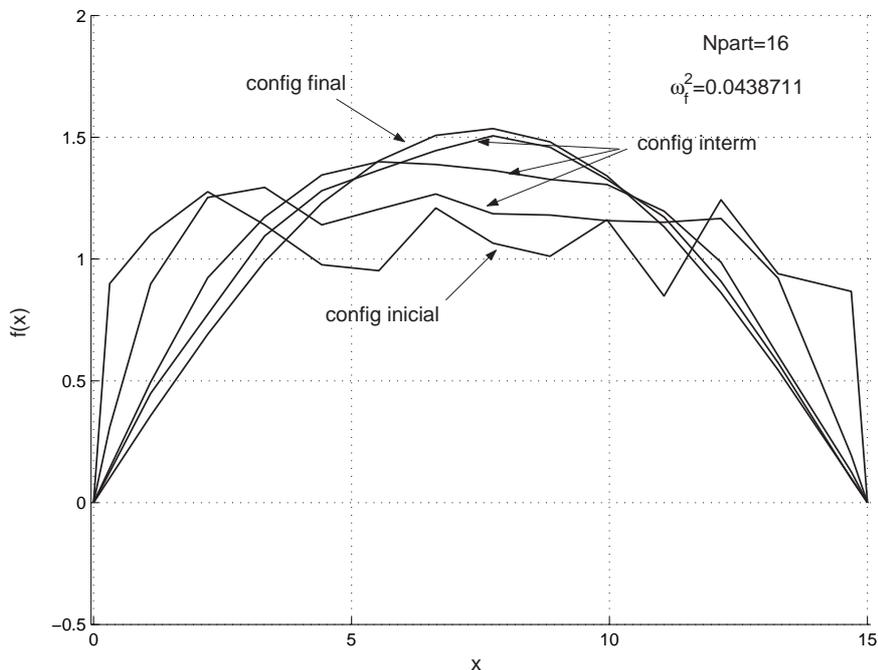


Figure 2: Configuración inicial, final e intermedias en la convergencia hacia el mínimo del cociente de Rayleigh para una cuerda con extremos fijos con $N_{part}=16$.

como sea necesario. Para este problema se ha considerado razonable cuadruplicar el número inicial. De esta forma se logró no solo mayor precisión sino también menor tiempo para lograr dicha precisión. En la figura 3 se muestra la autofunción del problema en línea llena y la función que resulta de la minimización con cruces. También es posible observar el autovalor exacto y el que se obtuvo, resultando en acuerdo hasta la cuarta cifra significativa o equivalente a un error del 0.01%. Los parámetros finales del algoritmo se observa en la tabla 2

config	R	σ	salto $y_i = f(x_i)$	N_{iter}
final 64	0.0438650	$1 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^4$
exacto	0.0438649	–	–	–

Table 2: Valores del cociente de Rayleigh y demás parámetros de interés para la configuración final mostrada en la figura 3 con $N_{part}=64$. También se muestra el autovalor exacto.

4.2 Cuerda con un extremo fijo y el otro libre

En este caso también se ha elegido como función de partida una constante + ruido con la diferencia de que uno de los extremos se ha dejado libre, como se puede ver en la figura 4 *config inicial*. El número de partículas elegido fue el mismo que en el caso anterior, 16 y la longitud de la viga fue de $L = 15$. Los demás parámetros de la cuerda fueron elegidos de forma tal de que $c = \sqrt{T/\mu} = 1$, como en el caso anterior. En la misma figura se pueden ver configuraciones intermedias, que se van pareciendo a la autofunción del problema, a medida que el algoritmo va convergiendo hacia la solución a medida que baja la temperatura. La configuración final resulta de haber detenido el algoritmo según el criterio enunciado para la elección de la temperatura final. Los valores numéricos de las configuraciones mostradas en la figura 4, se muestran en la tabla 3

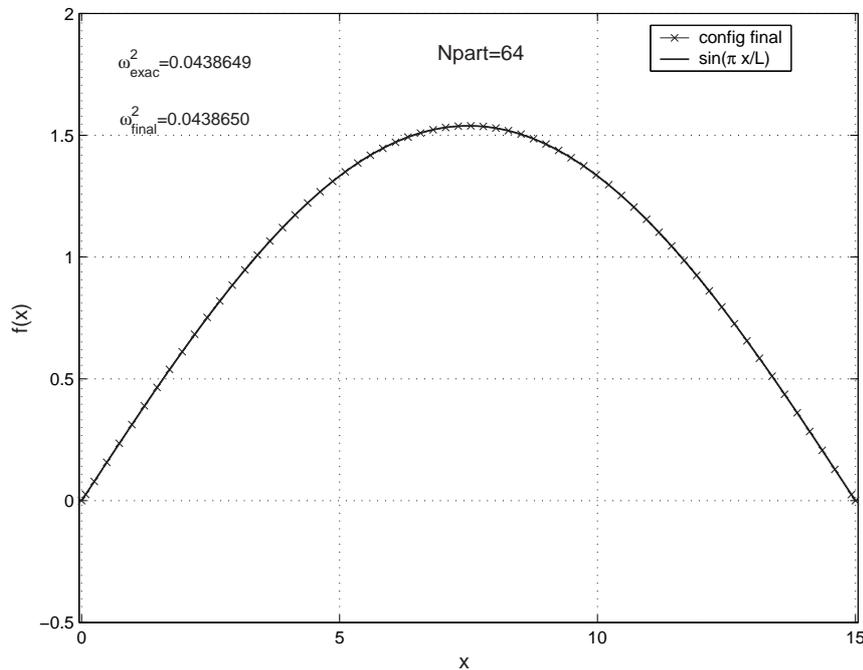


Figure 3: Configuración final \times (cruz) y solución exacta $-$ (línea llena) del problema de una cuerda con extremos fijos con N part=64.

config	R	σ	salto $y_i = f(x_i)$	N iter
inicial	0.326688	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-1}$	0
interm 1	0.022052	$1 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^3$
interm 2	0.015429	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^3$
interm 3	0.011952	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^3$
final 16	0.011001	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^4$

Table 3: Valores del cociente de Rayleigh para las configuraciones mostradas en la figura 4 con N part= 16. También se muestran el parámetro de control asociado (temperatura), el salto y el número de iteraciones a partir de la configuración inicial.

De la misma forma que en el caso de la cuerda con extremos fijos, se ha considerado mejorar la precisión del algoritmo aumentando el número de partículas a 4 veces su valor de inicio, es decir N part=64. Con este número se obtuvo la configuración final que se puede observar en la figura 5 donde también se muestra el autovalor exacto y el obtenido por el método propuesto. Allí se advierte que la diferencia se da en la sexta cifra significativa, un error considerablemente menor que en el caso de tener N part=16.

4.3 Viga con ambos extremos empotrados

A diferencia de los casos anteriores se ha elegido como función de partida a la función seno para mostrar que el método propuesto no requiere como función de partida una función con valores aleatorios. En la figura 6 se puede ver la configuración inicial *config inicial* como también configuraciones intermedias *config interm* y por último la configuración final *config final*. Para esta simulación el número de partículas elegido fue el mismo que en el caso anterior, 16 y la longitud de la viga fue de $L = 15$. Los demás parámetros de la viga fueron elegidos de forma tal de que $c = \sqrt{EI/\rho A} = 1$. Los valores numéricos de las configuraciones mostradas

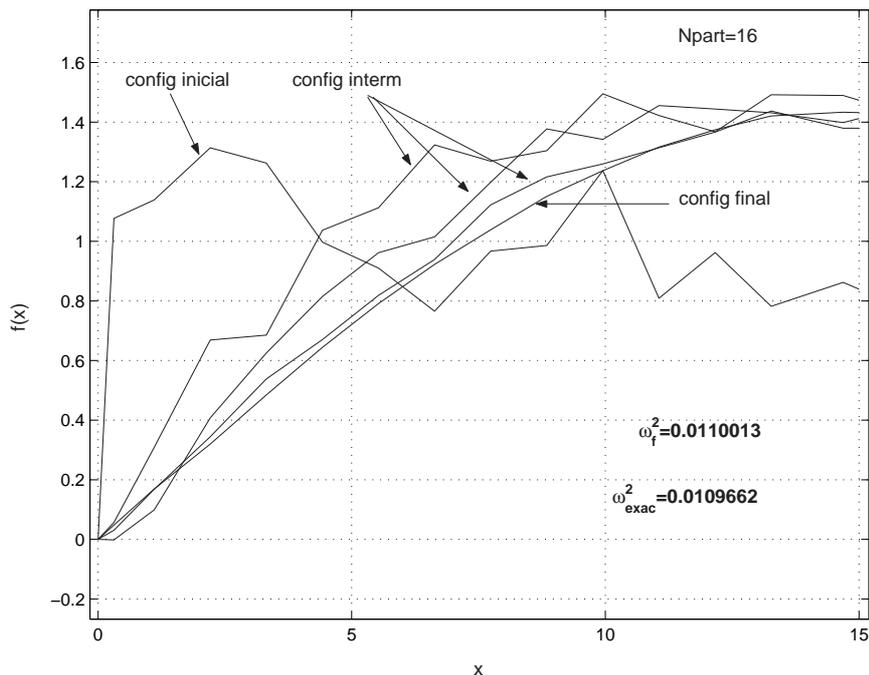


Figure 4: Configuración inicial, final e intermedias en la convergencia hacia el mínimo del cociente de Rayleigh para una cuerda con un extremo fijo y el otro libre; N part=16.

en la figura 6, se muestran en la tabla 4

config	R	σ	salto $y_i = f(x_i)$	$N\ iter$
inicial	0.0372191	$5 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-5}$	0
interm 1	0.0168120	$1 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^4$
interm 2	0.0144376	$7.5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^4$
interm 3	0.0123598	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$2.5 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^4$
final 16	0.0098999	$1 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^5$

Table 4: Valores del cociente de Rayleigh para las configuraciones mostradas en la figura6 con N part= 16. También se muestran el parámetro de control asociado (temperatura), el salto y el número de iteraciones a partir de la configuración inicial.

Para lograr aumentar la precisión en este caso se quintuplico la cantidad de partículas respecto de su valor de inicio llegándose a N part=128. Con este número se obtuvo la configuración final que se puede observar en la figura 7 donde también se muestra el autovalor exacto y el obtenido por el método propuesto. Allí se advierte que la diferencia se da en la cuarta cifra significativa, lográndose un error menor que en el caso de tener N part=16.

Por último se intenta mostrar la versatilidad del método propuesta en la obtención de la autofunción de la viga biempotrada inicializando al algoritmo con una función completamente al azar. La misma se muestra en la figura 8 como así también configuraciones intermedias a medida que el algoritmo busca el mínimo del funcional. En la tabla 5 se muestran los valores de las configuraciones mencionadas como así también el cociente de Rayleigh y el número de iteraciones.

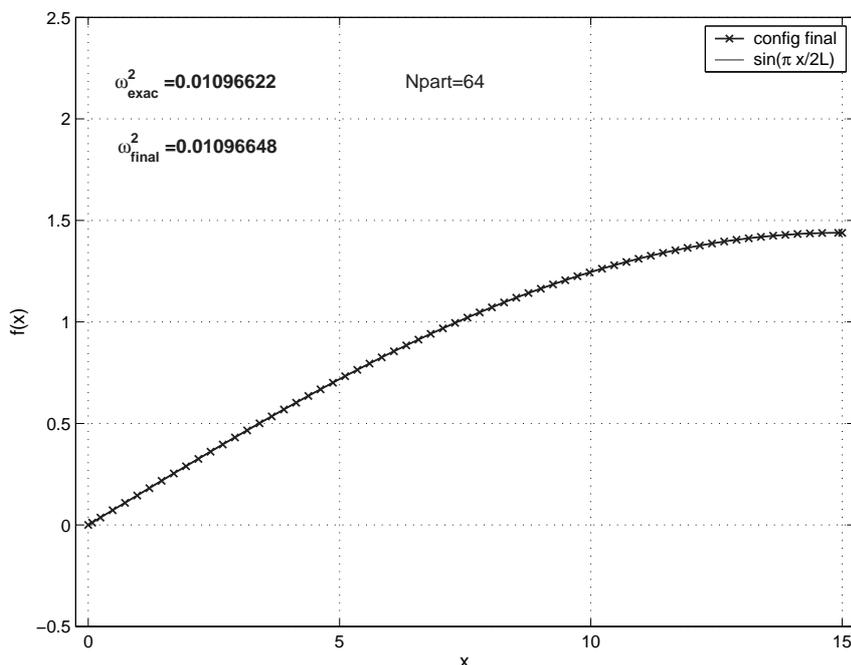


Figure 5: Configuración final \times (cruz) y solución exacta $-$ (línea llena) del problema de una cuerda con un extremo fijo y el otro libre con $N_{part}=64$.

config	R	σ	salto $y_i = f(x_i)$	N_{iter}
inicial	3454.36	$1 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-2}$	0
interm 1	0.0798979	$1 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^5$
final 16	0.0099757	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^6$

Table 5: Valores del cociente de Rayleigh para las configuraciones mostradas en la figura 8 con $N_{part}=16$. También se muestran el parámetro de control asociado (temperatura), el salto y el número de iteraciones a partir de la configuración inicial.

4.4 Análisis de la convergencia

El algoritmo converge hacia la solución del problema con una velocidad inversamente proporcional a la cantidad de “partículas” o elementos de volumen considerados. Es decir, para lograr un algoritmo veloz, es aconsejable discretizar el dominio en unos pocos elementos ($\sim 10^1$). De esta forma se obtiene por un lado que los cambios en la función a minimizar sean mayores entre una configuración y la siguiente, respecto de elegir un número grande de elementos y por el otro una aceleración del algoritmo debido a la menor cantidad de operaciones que realiza el ordenador.

El uso de splines cúbicos para el cálculo de ΔR_n , permite además, lo que se da por llamar “**redimensionamiento estable**”, y es simplemente alterar la discretización aumentando el número de “partículas”. Las cantidad de ellas que se agregan, siguiendo la reconstrucción hecha mediante los *s.c.*, no alteran sustancialmente ni la forma ni el autovalor. Esta técnica permite mejorar notablemente la precisión final de los resultados.

Obviamente, al considerar una mayor cantidad de partículas el algoritmo se lentifica y en alguna instancia del mismo se debe optar entre seguir aumentando la precisión, aumentando la

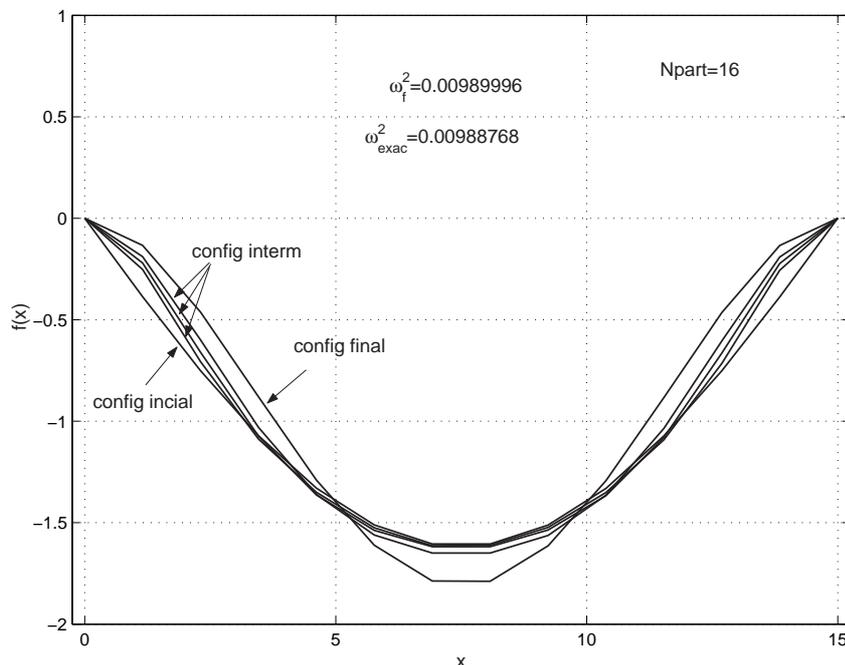


Figure 6: Configuración inicial, final e intermedias en la convergencia hacia el mínimo del cociente de Rayleigh para una viga con ambos extremos empotrados partiendo de una configuración senoidal; $N_{part}=16$.

discretización, o acelerando el proceso de convergencia disminuyendo la misma.

4.5 Modos superiores de vibración

Una cuestión fundamental sobre la cual no nos hemos referido aun es la posibilidad de extender el algoritmo para obtener autovalores distintos del fundamental. Como es sabido el mínimo absoluto del cociente de Rayleigh nos da el autovalor fundamental del sistema considerado. El método hasta aquí propuesto provee no solamente dicho autovalor sino también la correspondiente autofunción. Por lo tanto, así planteado, no es posible obtener los demás autovalores. No obstante, si se explora el espacio de configuraciones de forma tal de que en esa búsqueda todas las configuraciones seleccionadas sean ortogonales respecto de dicha autofunción, el mínimo así obtenido provee la solución buscada [Rektorys \(1977\)](#). Este último proceso descrito es el que se conoce como ortogonalización de Gram-Schmidt [Golub and F. van Loan \(1989\)](#).

5 CONCLUSIONES

En el trabajo se ha propuesto un método estocástico para obtener aproximaciones de la frecuencia y modo fundamental de sistemas vibrantes elementales- cuerda, viga- pero es una metodología aplicable para encontrar modos y frecuencias superiores en forma directa. También se puede aplicar a problemas de mayor dimensionalidad, como placas y membranas, con un aumento de la complejidad computacional del algoritmo. Se ha propuesto una analogía entre un gas de partículas en contacto con un reservorio térmico y el conjunto de partículas que resulta de la discretización del dominio espacial. A raíz de esta analogía se muestra que el cociente de Rayleigh juega el papel de la energía del sistema de partículas interactuantes.

No se proclama que esta metodología sea más eficiente que las tradicionales, desde un punto de vista computacional, pero si arroja resultados igualmente precisos y además provee una nueva

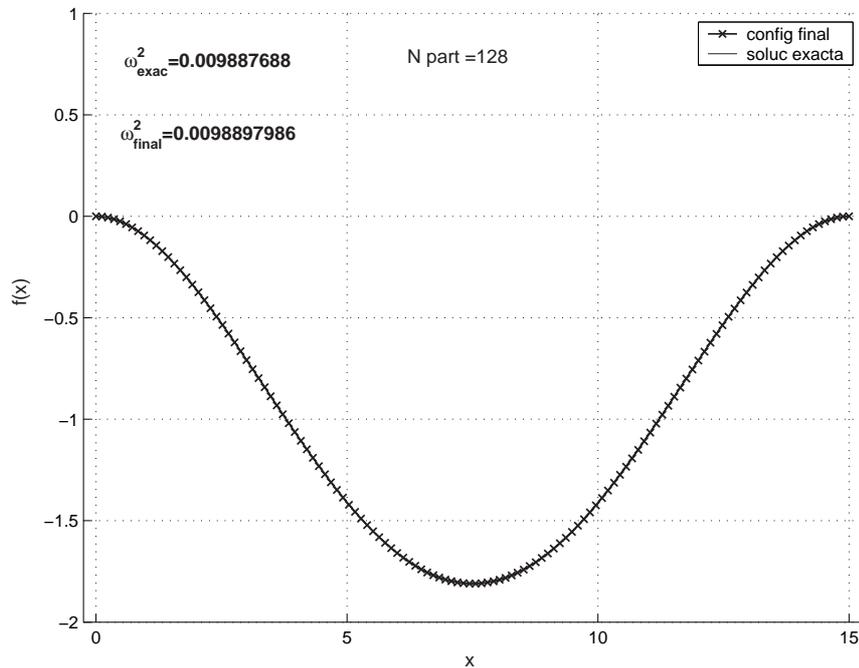


Figure 7: Configuración final \times (cruz) y solución exacta $-$ (línea llena) del problema de una viga con ambos extremos empotrados partiendo de una función senoidal; $N \text{ part}=128$.

manera de abordar el problema que amplía el horizonte de esquemas de soluciones para resolver problemas vedados en los métodos tradicionales.

Por último, y no por eso menos importante, se puntualiza que este trabajo muestra los pasos iniciales que se realizaron, con la posibilidad de que esto se vea reflejado en cierta falta de rigurosidad en algunos aspectos del mismo. No obstante los resultados obtenidos justifican, en un principio, el tratamiento y la implementación del método.

6 AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado gracias a la financiación de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (PICT13-13033) y por la Secretaría General de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional del Sur en el Departamento de Física (PGI 24/F032 Director: C. A. Rossit). M. Febbo agradece el auspicio del CONICET a través de una beca posdoctoral.

REFERENCES

- B. Ceranic, C. Fryer, and R. W. Baines. An application of simulated annealing to the optimum design of reinforced retaining structures. *79:1569–1581*, 2001.
- H. Goldstein. *Classical Mechanics*, volume I. Addison Wesley, 1953.
- G. H. Golub and Ch. F. van Loan. *Matrix Computations*, volume I. The John Hopkins University Press, 1989.
- S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Finite differences and finite volumes. two old friends. *Science*, *220:671–680*, 1983.
- A. Metropolis, W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, H. Teller, and E. Teller. Equation of static calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, *21:1087–1092*, 1953.
- K. Rektorys. *Variational methods in mathematics, science and engineering*, volume I. D. Reidel Pub. Co., 1977.

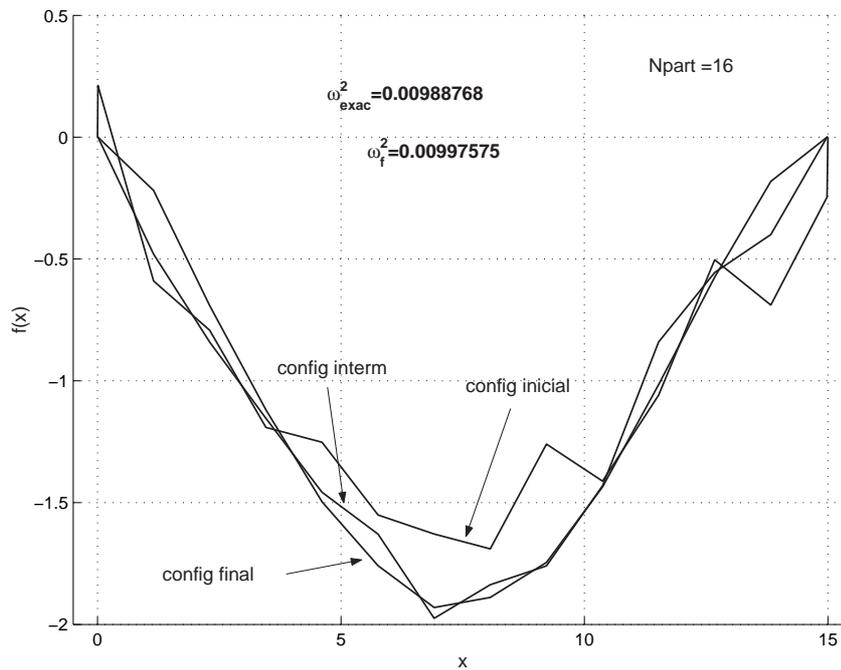


Figure 8: Configuración inicial, final e intermedias en la convergencia hacia el mínimo del cociente de Rayleigh para una viga con ambos extremos empotrados partiendo de una configuración al azar; N part=16.

J. Schneider and I. Morgenstern. Bouncing towards the optimum: Improving the results of monte carlo optimization algorithms. *Physical Review E*, 58:5085–5095, 1998.