Métodos numéricos para EDEs

v. 1.1.0

11 de octubre de 2015

Saúl Díaz Infante Velasco

./Imagenes/Introduccion/colloid.jpg

./Imagenes/Introduccion/browngranular-foto2p.jpg

./Imagenes/Introduccion/browngranular-foto2p.jpg

CimatLogo.pdf

Ecuaciones de Movimiento

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \boxed{-\gamma\frac{dx}{dt}} + \boxed{\Gamma(t)}$$

- $x = x(t)$: posición a tiempo t.
- Fuerza de fricción, dónde $\gamma = 6\pi\eta a$, η es la viscosidad laminar del solvente y a radio de la partícula.
- $\Gamma(t)$: efecto estocástico debido a las colisiones.

CimatLogo.pdf

Métodos Steklov

Saúl Díaz Infante Velasco

Ecuaciones de Movimiento

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} + \Gamma(t)$$

- $x = x(t)$: posición a tiempo t.
- Fuerza de fricción, dónde $\gamma = 6\pi\eta a$, η es la viscosidad laminar del solvente y a radio de la partícula.
- $\Gamma(t)$: efecto estocástico debido a las colisiones.

Ecuaciones de Movimiento

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \boxed{-\gamma\frac{dx}{dt}} + \boxed{\Gamma(t)}$$

- $x = x(t)$: posición a tiempo t.
- Fuerza de fricción, dónde $\gamma = 6\pi\eta a$, η es la viscosidad laminar del solvente y a radio de la partícula.
- $\Gamma(t)$: efecto estocástico debido a las colisiones.

Ecuaciones de Movimiento

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = \boxed{-\gamma\frac{dx}{dt}} + \boxed{\Gamma(t)}$$

- $x = x(t)$: posición a tiempo t.
- Fuerza de fricción, dónde $\gamma = 6\pi\eta a$, η es la viscosidad laminar del solvente y a radio de la partícula.
- $\Gamma(t)$: efecto estocástico debido a las colisiones.

Al aplicar eliminación adiabática [?]

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{k_B T} DF + D^{\frac{1}{2}} \xi .$$

- $x = x(t)$: posición a tiempo t.
- k_B, T: k_B constantes de Boltzmann, T temperatura,
- $F = -\frac{dU}{dx}$: fuerza de la partícula inmersa en un potencial U,
- $D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$: coeficiente de difusión,
- ξ : ruido blanco,
  $\mathbb{E}(\xi(t)) = 0, \quad \mathbb{E}(\xi(t)\xi(t')) = 2\delta(t-t').$

Resolvemos $$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{k_B T} DF + D^{\frac{1}{2}} \xi .$$

Para entender los mecanismos de difusión en una suspensión coloidal. *Sin embargo, en la práctica no se tiene solución analítica.*

Euler-Mayurama

$$Y_{j+1}^{(\alpha)}(h) = Y_j^{(\alpha)} + \frac{D}{T} F_j^{(\alpha)} \Delta t + R_j^{(\alpha)} \tag{1}$$

$$\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)}\right] = 0 \tag{2}$$

$$\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)} R_j^{(\beta)}\right] = 2Dh\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} \qquad \alpha, \beta = x, y, z \tag{3}$$

- $Y_j^{(\alpha)}$: posición.
- h : incremento temporal.
- $F_j^{(\alpha)}$: fuerza neta sobre la partícula i en la dirección α.
- $R_j^{(\alpha)}$: ruido blanco discreto, con media y covarianza como en (**??**) y (**??**).
- $D = \dfrac{k_B T}{\gamma}$: coeficiente de difusión de Stokes - Einstein

Euler-Mayurama

$$Y_{j+1}^{(\alpha)}(h) = Y_j^{(\alpha)} + \frac{D}{T} F_j^{(\alpha)} \Delta t + R_j^{(\alpha)} \tag{1}$$

$$\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)}\right] = 0 \tag{2}$$

$$\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)} R_j^{(\beta)}\right] = 2Dh\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} \qquad \alpha, \beta = x, y, z \tag{3}$$

- Es fácil de implementar.
- Trabaja con un tamñao de paso restrictivo.

Euler-Mayurama

$$
\begin{aligned}
Y_{j+1}^{(\alpha)}(h) &= Y_j^{(\alpha)} + \frac{D}{T} F_j^{(\alpha)} \Delta t + R_j^{(\alpha)} && (1) \\
\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)} \right] &= 0 && (2) \\
\mathbb{E}\left[R_j^{(\alpha)} R_j^{(\beta)} \right] &= 2Dh\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} \qquad \alpha, \beta = x, y, z && (3)
\end{aligned}
$$

Existen varios esquemas para discretizar la ecuación ya mencionada [**?**]. Sin embargo, no representan una mejora significativa a la precisión respecto al coste computacional.

En [**?**] usando el **promedio de Steklkov** se logra un esquema en diferencias exacto para resolver EO no lineales de la forma

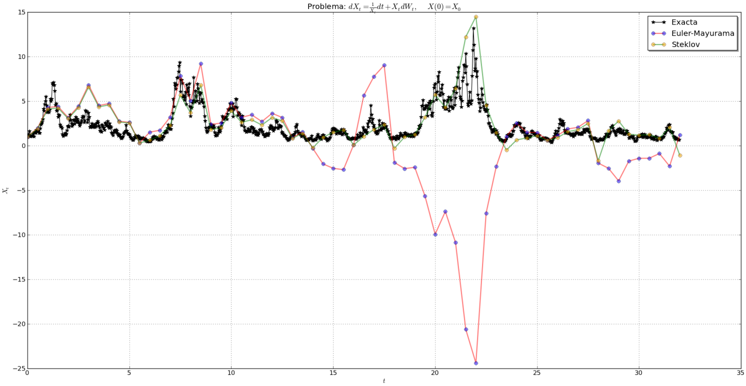
$$\frac{dx}{dt} = f_1(x)f_2(t)$$

$$dX_t = \frac{1}{X_t} + X_t dB_t$$

$$Y_{j+1} = \sqrt{\varphi(h) + Y_j^2} + Y_j \Delta B_j \quad \varphi(h) = 2h$$

$$dX_t = \frac{1}{X_t} + X_t dB_t$$

$$Y_{j+1} = \sqrt{\varphi(h) + Y_j^2} + Y_j \Delta B_j \quad \varphi(h) = 2h$$

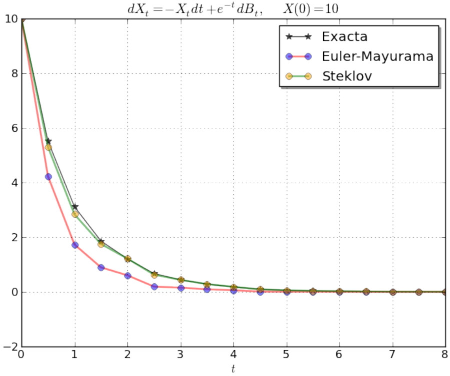


Comparación con EM, $h = 0.5, X_0 = 10$

$$dX_t = -\lambda X_t dt + \mu \exp(-t) dB_t$$

$$\begin{aligned} X_{j+1} =& X_j(1-\lambda\phi(h)) \\ & + \mu \exp(-h)\Delta B_j \end{aligned}$$

$$\phi(h) = \frac{1-\exp(-\lambda h)}{\lambda}$$



Objeivo de esta charla

- Mostrar como adaptamos el promedio de Steklov para aproximar
$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{k_B T} DF + D^{\frac{1}{2}} \xi .$$
- Exhibir la estabilidad lineal de los esquemas propuestos.
- Hablar de las propiedades teóricas que buscamos estudiar.

Con ello buscamos

- Desarrollar bases teóricas para los esquemas Steklov.
- Obtener esquemas que mejoren el tamaño de paso del el método Euler- Mayurama con un costo computacional similar.

CimatLogo.pdf