Lectura 2.2: Problemas físicos y su descripción matemática

Introducción a las redes neuronales informadas por física
Especialización en Inteligencia Artificial - B52024

Outline

- Principios físicos fundamentales
- Elasticidad
- Ecuaciones de Navier-Stokes
- Ecuación del calor
- Ecuaciones de Maxwell
- Ecuación de onda

Principios físicos fundamentales

Principios de conservación:

- Conservación de la cantidad de movimiento
- Conservación de la masa
- Conservación de la energía
- Conservación de la carga eléctrica

Ecuaciones de continuidad:

- Describe el transporte de una cierta cantidad física
- **Formas locales fuertes de las leyes de conservación**

Ecuación de continuidad

- Sea una cantidad "q" que puede moverse o "fluir" (masa, energía, etc)
- Densidad de flujo "\rho": cantidad "q" por unidad de volumen (prop. intensiva)
- Flujo "**j**": campo vectorial que describe cómo se mueve esa cantidad "q"
- Ejemplo: si la velocidad del flujo es "**u**", entonces **j**=\rho **u**

$$\boxed{\frac{dq}{dt} + \oint_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = \Sigma}$$

Forma integral

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = \sigma}$$

Forma diferencial

Ecuación de continuidad

- Si la cantidad “q” se conserva, la ecuación de continuidad se expresa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

Conservación de la masa en un fluido

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

Conservación de la energía

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0$$

Aplicación en problemas físicos

Elasticidad

- Estudia cuerpos deformables de volumen constante
- Elasticidad lineal: pequeñas deformaciones, y relación lineal entre tensiones y deformaciones
- Elasticidad no lineal: grandes deformaciones, y relación no lineal entre tensiones y deformaciones
- EDPs que relacionan el balance de momento lineal, las relaciones desplazamiento-deformación, y las relaciones constitutivas

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}$$ Balance de momento (Cauchy)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \tfrac{1}{2}\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u} + (\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u})^{\mathrm{T}}\right]$$ Desplazamiento-deformación

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathsf{C} : \boldsymbol{\varepsilon},$$ Relación constitutiva

Elasticidad lineal en coordenadas cartesianas

Balance de momento (Cauchy)

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + F_x = \rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}$$
$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + F_y = \rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2}$$
$$\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + F_z = \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}$$

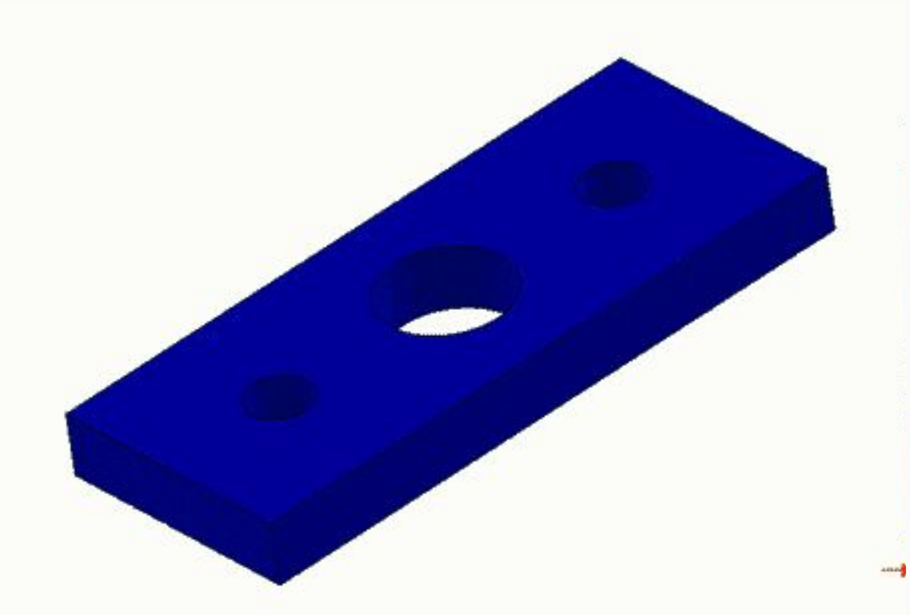
Desplazamiento-deformación

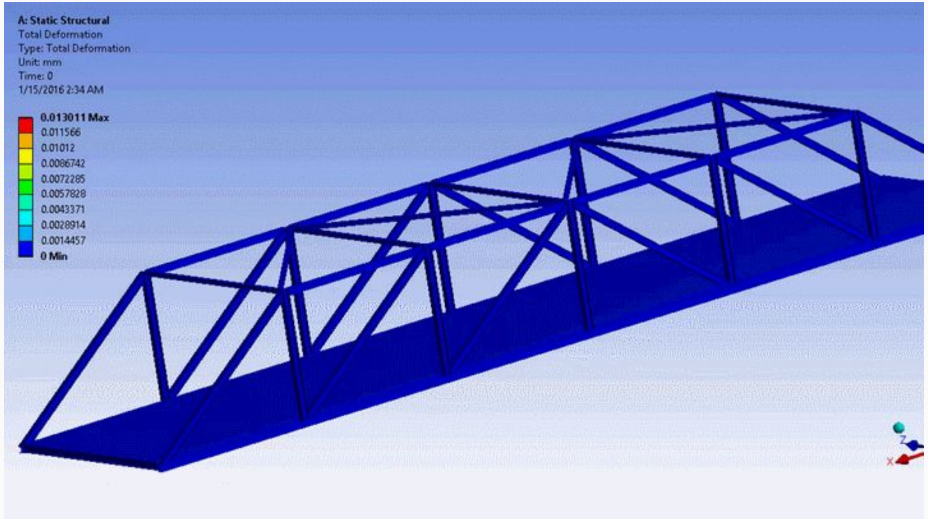
$$\epsilon_x = \frac{\partial u_x}{\partial x} \qquad \gamma_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}$$
$$\epsilon_y = \frac{\partial u_y}{\partial y} \qquad \gamma_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}$$
$$\epsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z} \qquad \gamma_{zx} = \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z}$$

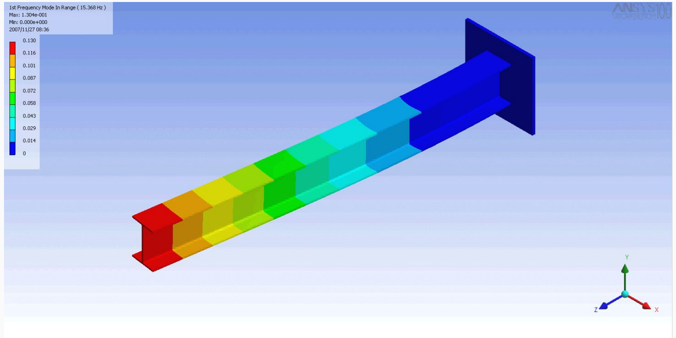
Relación constitutiva

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\, \varepsilon_{kl}$$

Elasticidad lineal: ejemplos







Ecuaciones de Navier-Stokes

- Conjunto de EDPs que describen el movimiento de sustancias fluidas viscosas
- Expresan matemáticamente el balance de momento lineal, balance de energía, y conservación de la masa
- La solución implica encontrar el campo de velocidades del fluido en cualquier punto e instante de tiempo, al igual que el campo de presiones
- 7th Millenium Prize Problem (Clay Mathematics Institute): demostrar la existencia de soluciones suaves en 3D en cualquier punto del dominio (premio: US$1M!!)
- Pocas soluciones analíticas disponibles → Métodos numéricos (bajo ciertas hipótesis y restricciones, PINN)

Ecuaciones de Navier-Stokes

No linealidad

- Presente en prácticamente todos los casos (excepto en flujo de Stoke 1D), debido a la aceleración convectiva
- Hace que los problemas sean difíciles (o imposibles) de resolver.
- Contribuye a la turbulencia

Turbulencia

- Comportamiento caótico dependiente del tiempo, asociado a los efectos inerciales del fluido (número de Reynolds)
- La solución numérica requiere el planteo promediado en el tiempo RANS + modelos de turbulencia específicos (k-\omega, k-\epsilon)
- No es posible en problemas prácticos hacer DNS

Ecuaciones de Navier-Stokes

Conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

Conservación de la cantidad de movimiento (Cauchy):

"Derivada material"

$$\frac{\mathbf{Du}}{\mathrm{D}t} = \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{g}.$$

Tensor de tensiones de Cauchy: parte volumétrica (presión) y parte deviatórica (\tau)

Fuerzas de cuerpo

Cauchy momentum equation *(conservation form)*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\,\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho\,\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho\,\mathbf{a}$$

Aceleración convectiva

Cauchy momentum equation *(convective form)*

$$\rho\frac{\mathbf{Du}}{\mathrm{D}t} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho\,\mathbf{a}$$

Ecuaciones de Navier-Stokes: flujo compresible

Linear stress constitutive equation*(expression similar to the one for elastic solid)*

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = -p\mathbf{I} + \lambda\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}$$

Navier–Stokes momentum equation (*convective form*)

$$\rho\frac{\mathrm{D}\mathbf{u}}{\mathrm{D}t} = \rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}\right) = -\nabla p + \nabla\cdot\left\{\mu\left[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^{\mathrm{T}} - \tfrac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right]\right\} + \nabla[\zeta(\nabla\cdot\mathbf{u})] + \rho\mathbf{a}.$$

Navier–Stokes momentum equation (conservative form)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) + \nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + [p - \zeta(\nabla\cdot\mathbf{u})]\mathbf{I} - \mu\left[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^{\mathrm{T}} - \tfrac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right]\right) = \rho\mathbf{a}.$$

Ecuaciones de Navier-Stokes: flujo incompresible

“Flujo incompresible” no implica “fluido incompresible”

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

(Campo solenoidal) Significa que la densidad no cambia con el tiempo en un volumen de control que se mueve con el fluido: la velocidad se ajusta al cambio de volumen.

Incompressible Navier–Stokes equations with uniform viscosity (*convective form*)

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \mathbf{f}.$$

Ecuaciones de Navier-Stokes: coordenadas cartesianas

$$
\begin{aligned}
x:\ & \rho\left(\partial_t u_x + u_x\,\partial_x u_x + u_y\,\partial_y u_x + u_z\,\partial_z u_x\right) \\
& \quad = -\partial_x p + \mu\left(\partial_x^2 u_x + \partial_y^2 u_x + \partial_z^2 u_x\right) + \frac{1}{3}\mu\,\partial_x\left(\partial_x u_x + \partial_y u_y + \partial_z u_z\right) + \rho g_x \\
y:\ & \rho\left(\partial_t u_y + u_x\partial_x u_y + u_y\partial_y u_y + u_z\partial_z u_y\right) \\
& \quad = -\partial_y p + \mu\left(\partial_x^2 u_y + \partial_y^2 u_y + \partial_z^2 u_y\right) + \frac{1}{3}\mu\,\partial_y\left(\partial_x u_x + \partial_y u_y + \partial_z u_z\right) + \rho g_y \\
z:\ & \rho\left(\partial_t u_z + u_x\partial_x u_z + u_y\partial_y u_z + u_z\partial_z u_z\right) \\
& \quad = -\partial_z p + \mu\left(\partial_x^2 u_z + \partial_y^2 u_z + \partial_z^2 u_z\right) + \frac{1}{3}\mu\,\partial_z\left(\partial_x u_x + \partial_y u_y + \partial_z u_z\right) + \rho g_z.
\end{aligned}
$$

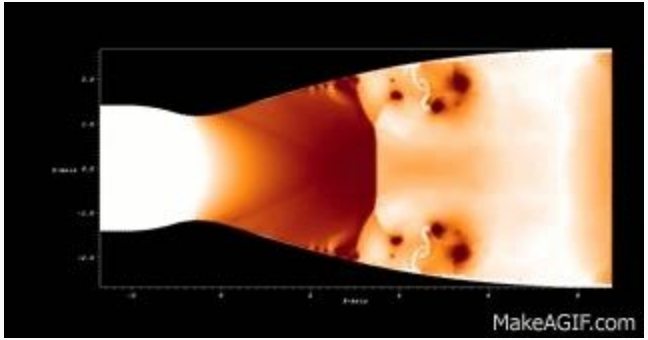
$$
\partial_t \rho + \partial_x(\rho u_x) + \partial_y(\rho u_y) + \partial_z(\rho u_z) = 0.
$$

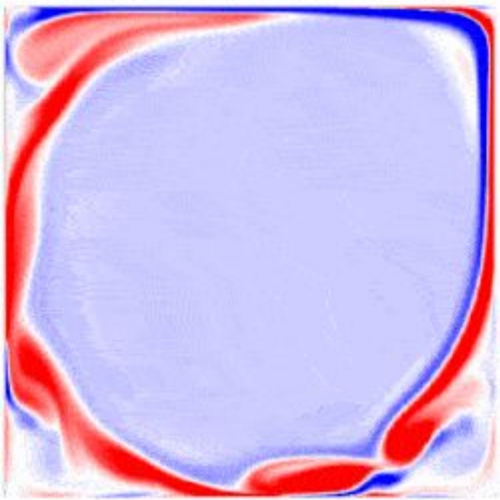
Ecuaciones de Navier-Stokes: en hidrostática de mecánica de fluidos…

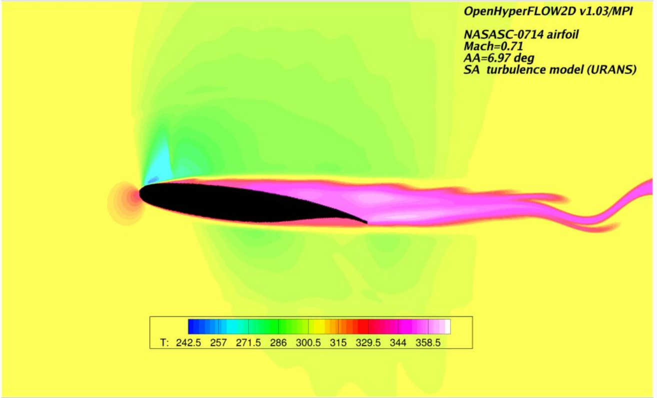
$$
\begin{aligned}
x:\ & \rho\left(\cancel{\partial_t u_x} + u_x\, \cancel{\partial_x u_x} + u_y\, \cancel{\partial_y u_x} + u_z\, \cancel{\partial_z u_x}\right) \\
& = -\cancel{\partial_x p} + \mu\left(\cancel{\partial_x^2 u_x} + \cancel{\partial_y^2 u_x} + \cancel{\partial_z^2 u_x}\right) + \frac{1}{3}\mu\, \partial_x\left(\cancel{\partial_x u_x} + \cancel{\partial_y u_y} + \cancel{\partial_z u_z}\right) + \cancel{\rho g_x} \\
y:\ & \rho\left(\cancel{\partial_t u_y} + u_x \cancel{\partial_x u_y} + u_y \cancel{\partial_y u_y} + u_z \partial_z \cancel{u_y}\right) \\
& = -\partial_y p + \mu\left(\cancel{\partial_x^2 u_y} + \cancel{\partial_y^2 u_y} + \cancel{\partial_z^2 u_y}\right) + \frac{1}{3}\mu\, \partial_y\left(\cancel{\partial_x u_x} + \cancel{\partial_y u_y} + \cancel{\partial_z u_z}\right) + \rho g_y \\
z:\ & \rho\left(\cancel{\partial_t u_z} + u_x \cancel{\partial_x u_z} + u_y \cancel{\partial_y u_z} + u_z \partial_z \cancel{u_z}\right) \\
& = -\cancel{\partial_z p} + \mu\left(\cancel{\partial_x^2 u_z} + \cancel{\partial_y^2 u_z} + \cancel{\partial_z^2 u_z}\right) + \frac{1}{3}\mu\, \partial_z\left(\cancel{\partial_x u_x} + \cancel{\partial_y u_y} + \cancel{\partial_z u_z}\right) + \cancel{\rho g_z}.
\end{aligned}
$$

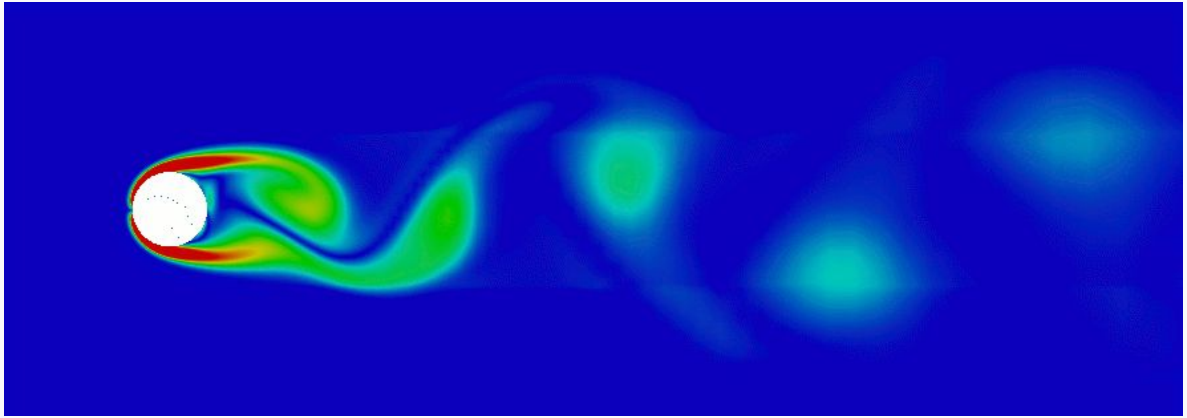
$$p = p_0 + \rho g h$$

Ecuaciones de Navier-Stokes: algunos ejemplos









Ecuación del calor

- EDP que describe la transferencia de calor en medios continuos

- Ley de Fourier general: $\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{k}\nabla u$

$$\boldsymbol{k} = \begin{pmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{pmatrix}$$

Tensor de conductividad, material anisótropo

$$\boldsymbol{k} = k\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tensor de conductividad, material isótropo

- Conservación de la energía

Ecuación del calor

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) = \dot{q}_V$$

(material isotrópico no homogéneo, régimen transiente)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \nabla^2 u = \dot{q}_V$$

(material isotrópico homogéneo, régimen transiente), \alpha: difusividad térmica

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \rightarrow -\alpha \nabla^2 u = \dot{q}_V$$

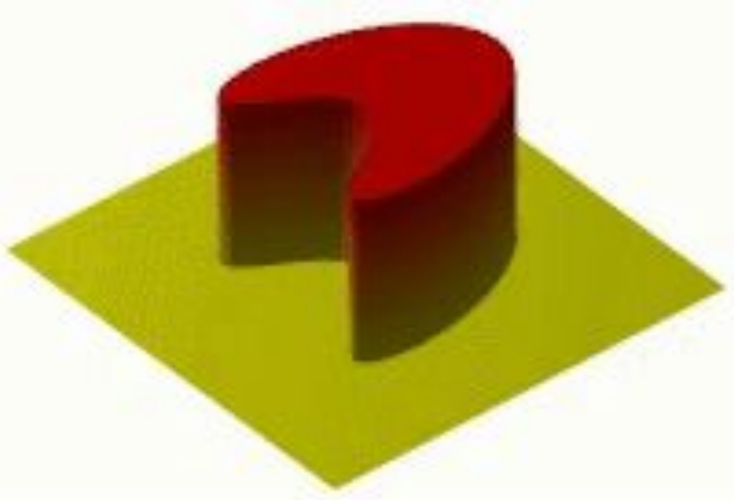
(material isotrópico homogéneo, régimen estacionario). Ec. de Poisson

$$\dot{q}_V = 0 \rightarrow \nabla^2 u = 0$$

(material isotrópico homogéneo, régimen estacionario, fuente nula). Ec. de Laplace

Ecuación del calor

- En régimen transiente la ecuación es parabólica. En régimen estacionario es elíptica.
- Máximos locales de temperatura se difunden hacia los alrededores de forma suave (ídem con mínimos locales)
- También pueden presentarse casos no lineales (por ejemplo, en solidificación de metales)



Fuente: Wikipedia

Ecuaciones de Maxwell

Conjunto de EDP de 2do orden acopladas que describe la interacción y propagación mutua de campos eléctricos y magnéticos, y con respecto a cargas y corrientes

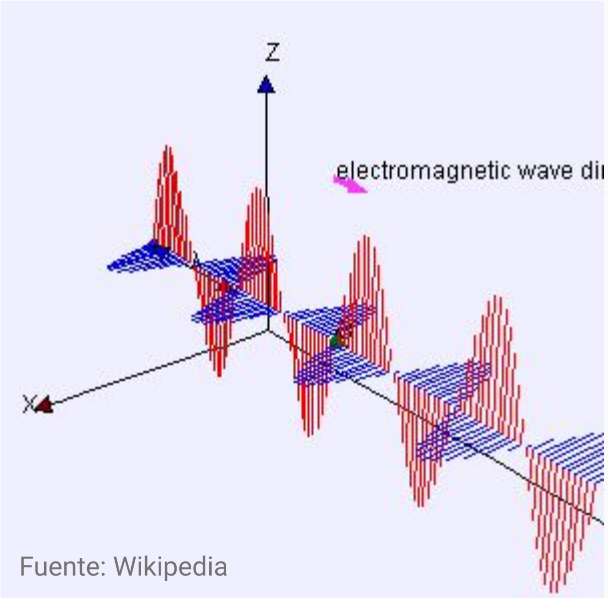
Name	Integral equations	Differential equations
Gauss's law	$\oiint_{\partial\Omega} \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} = \frac{1}{\varepsilon_0} \iiint_{\Omega} \rho \, \mathrm{d}V$	$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$
Gauss's law for magnetism	$\oiint_{\partial\Omega} \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} = 0$	$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
Maxwell–Faraday equation (Faraday's law of induction)	$\oint_{\partial\Sigma} \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\ell} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \iint_{\Sigma} \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}$	$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
Ampère–Maxwell law	$\oint_{\partial\Sigma} \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\ell} = \mu_0 \left(\iint_{\Sigma} \mathbf{J} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} + \varepsilon_0 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \iint_{\Sigma} \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} \right)$	$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$

Fuente: Wikipedia

Ecuaciones de Maxwell

En ausencia de cargas y de corrientes, las ecuaciones de Maxwell representan ondas electromagnéticas:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{E} = 0,$$
$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{B} = 0.$$



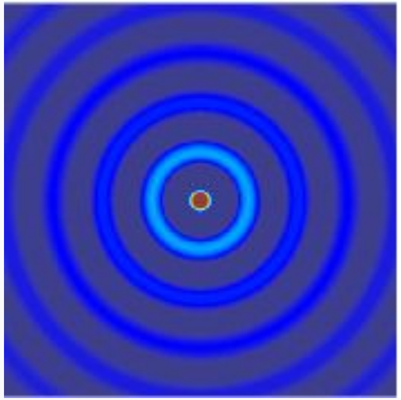
Fuente: Wikipedia

Ecuación de onda

- EDP de 2do orden que describe ondas viajeras u ondas estacionarias mecánicas (sonido, sísmicas, elásticas o electromagnéticas)
- Ecuación hiperbólica
- Obtenida originalmente a partir de la ley de Hooke

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)}$$

Fuente: Wikipedia



Fuente: Wikipedia

¿Dudas o preguntas?