ReportePDEs
Física Computacional

Marcel Herrera Rendón 219221966

30 de Abril de 2021

1. Introducción del reporte

A lo largo de los últimos ejercicios de clases trabajamos en la resolución de problemas de modelado de fenómenos físicos (difusión del calor, ecuación de onda, entre otras cosas) que tenían que ver con ecuaciones diferenciales de tres tipos parabólicas, hiperbólicas y elípticas. La manera de solucionar dichas ecuaciones diferenciales fue como es propio de la materia física computacional, mediante la automatización de métodos tales como diferencias finitas, método pseudoespectral, entre otros.

2. Descripción de las tres grandes familias de Ecuaciones Diferenciales Parciales: Parabólica, Hiperbólicas y Elípticas.

Las ecuaciones diferenciales parciales son omnipresentes en los campos científicos de orientación matemática, como la física y la ingeniería. Por ejemplo, son fundamentales en la comprensión científica moderna del sonido, el calor, la difusión, la electrostática, la electrodinámica , la dinámica de fluidos , la elasticidad , la relatividad general y la mecánica cuántica. En matemáticas una ecuación en derivadas parciales (a veces abreviada como EDP o PDE en inglés) es esa ecuación diferencial que sus incógnitas son funciones de varias variables independientes, con la particularidad de que en dicha ecuación figuran además de las propias funciones también sus derivadas. Tienen que existir funciones de al menos dos variables independientes. O bien una ecuación que involucre una función matemática "u" de múltiples variables independientes x, y, z, . . . , y las derivadas parciales de u respecto de esas variables.

1. Parabólica

Se dice que es parabólica como parabólica si los coeficientes satisfacen $B^2 - AC = 0$ en

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F = 0$$

La ecuación diferencial parcial parabólica más básica sería una función u(x,y) de dos variables reales independientes x e y.

2. Hiperbólicas

Una ecuación hiperbólica en derivadas parciales es una ecuación diferencial en derivadas parciales de segundo orden del tipo:

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F = 0$$

en la cual la matriz:

$$Z = \begin{matrix} a & b \\ c & d \end{matrix} \tag{1}$$

Sus coeficientes pueden ser constantes o funciones continuas en las variables (x,y) además tiene un determinante negativo.

3. Elípticas

Una ecuación elíptica en derivadas parciales es una ecuación diferencial parcial tal que los coeficientes de las derivadas de grado máximo son positivas. Se trata de la aplicación de un operador elíptico, un operador diferencial definido sobre un espacio de funciones que generaliza al operador de Laplace.

Por ejemplo, una ecuación elíptica de segundo orden tiene la forma:

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F = 0$$

en la cual la matriz:

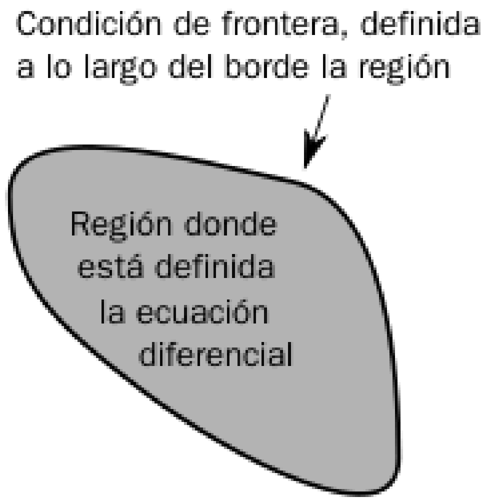
$$Z =$$

$$\begin{matrix} a & b \\ c & d \end{matrix} (2)$$

Se define positiva.

3. Descripción de los tres tipos de Condiciones a la Frontera: Dirichlet, Neumann y Robin (mixto).

Un problema de valor de frontera se le llama al conjunto de una ecuación diferencial y a las condiciones de frontera o contorno. Una solución de un problema de condiciones de frontera es la solución de una ecuación diferencial que también satisface condiciones de frontera.



1. Dirichlet

Es cuando en una ecuación diferencial ordinaria o una en derivadas parciales, se le especifican los valores de la solución que necesita la frontera del dominio.

2. Neumann

En matemáticas, la condición de frontera de Neumann (o de segundo tipo) es un tipo de condición de frontera o contorno, llamada así en alusión a Carl Neumann.Se presenta cuando a una ecuación diferencial ordinaria o en derivadas parciales, se le especifican los valores de la derivada de una solución tomada sobre la frontera o contorno del dominio.

3. Robin (mixto)

En matemáticas, una condición de frontera mixta para una ecuación diferencial en derivadas parciales indica que se utilizan diferentes condiciones de frontera o contorno sobre partes diferentes de la frontera del dominio de la ecuación. En otras palabras es cuando conbinas condiciones de frontera.

4. Descripción del Método de Diferencias Finitas

Se utiliza para en base a puntos conocidos sabiendo el valor de una función se puede inferir el valor de la función en puntos cercanos esto sirve porque mediante series de Taylor se puede aproximar las derivadas en una ecuación lo que sería por así decirlo la pendiente en cada punto de la función. Hay método de diferencias finitas hacia enfrente, hacia atrás y el mejor de todos sería centrado. La implementación de dicho método permite hallar la solución a diferentes ecuaciones diferenciales de manera numérica.

5. Solución de ecuaciones

1. Solución de la Ecuación del Calor: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución. Enlace a la sesión de Jupyter de la Actividad 10 en Github.

Aceder al repsitorio aquí:

https://github.com/mariron42/FisicaComputacional-1/tree/main/Actividad

Básicamente usamos diferencias finitas hacia enfrente en el tiempo y centradas en el espacio. Creamos una mallan en la que discretizamos espacio t tiempo. En nuestro caso el ejercicio fue con una barra de metal de largo L entonces x(0 a L) y pues el tiempo fue t(De 0 a t) separadas por sus respectivas diferencias. Entonces los incrementos son el tiempo es $k = \Delta t$ y en el espacio $h = \Delta x$. Por lo que la ecuación para el calor es:

$$\frac{u(x,t+k)-u(x,t)}{k} = \kappa \frac{u(x+h,t)-2u(x,t)+u(x-h,t)}{h^2} + \mathcal{O}(h^3,k^2)$$

Con error de $\mathcal{O}(h^3,k^2)$ aproximadamente ese orden. Por lo que llegamos a una suerte de molécula computacional definiendo la temperatura en un punto como: $(x,t) = (jh,nk)$, por $u(x_j,t_n) = u_j^n$ Después para resolver dicha ecuación utilizamos el método de diferencias finitas. Que mediante series de Taylor conociendo el estado del punto anterior se pueden aproximar el estado de los puntos cercanos siguientes y así sucesivamente.

2. Solución de la Ecuación de Onda: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución.Enlace a la sesión de Jupyter de la Actividad 11 en Github.

Aceder al repsitorio aquí:

https://github.com/mariron42/FisicaComputacional-1/tree/main/Actividad

La ecuación de onda :

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

Necesitamos el valor de la constate c (raíz cuadrada de la velocidad de propagación) además que definamos condiciones iniciales, dos derivadas de segundo orden en t y dos de segundo orden en el espacio ósea a la frontera, esto para encontrar una solución a la ecuación de onda. Haremos una malla, en la que el incremento en dirección x y k. Calcularemos el primer nivel de u(x,k) usando las condiciones iniciales definidas aplicando el esténcil de 4 puntos que vimos en la actividad 10. Usando diferencias finitas podemos sacar las segundas derivadas necesarias. Sin embargo, para los puntos en los que se puede usaremos un esténcil de 5 puntos. Utilizando esta técnica se podría obtener los valores de los puntos a lo largo de la malla.

3. Solución de la Ecuación de Poisson: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución. Enlace a la sesión de Jupyter de la Actividad 12 en Github.

Aceder al repsitorio aquí:

https://github.com/mariron42/FisicaComputacional-1/tree/main/Actividad

La ecuación de poisson

$$-\nabla^2 u(x, y, z) = f(x, y, z)$$

Es la generalización de la ecuacción de Laplace

$$\nabla^2 u = 0$$

No nesesitamos una condición inicial, porque no hay dependencia en el tiempo. Sólo requerimos conocer los valores a la frontera. Se puede resolver mediante condicciones en la forntera tipo Neumann se soluccionan mediante diferencias dinitas y estenciles de 5 puntos. Se realizan calculos matriciales y se obtiene una solcción que de hecho está en el repsitorio.

6. Resumen y conclusiones

En estas tres actividades solucionamos ejercicios que tenían que ver con el empelo de ecuaciones diferenciales para la modelación de fenómenos físicos: parabólicas, hiperbólicas y elíptica. Con las que empezamos modelando la difusión del calor, continuamos con la ecuación de onda y terminamos con la ecuación de Poisson. En todos estos ejercicios se empleó el método de diferencias finitas ya que es muy útil para aproxima numéricamente pues está hecho en base a las series de Taylor siendo estás una de las herramientas matemáticas más relevantes. Se usaron diferencias finitas, hacia atrás adelante y centras esta última fue la que más se utilizó. Vimos cómo crear moléculas computacionales y usarlas en la simulaciones y cómo modelar dichos fenómenos pero para ser sinceros no le entendí bien, me gustaría haber tenido más tiempo para ver todo con mayor detenimiento aún así creo que me llevo un gran aprendizaje y espero seguir adelante en este mundo del física computacional.

7. Bibliografía empleada.

https://en.wikipedia.org/wiki/Partial$_{d}ifferential_{e}quation$
$https://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_{m}ethods_{f}or_{p}artial_{d}ifferential_{e}quations$
$https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_{d}ifference_{m}ethod$
$https://en.wikipedia.org/wiki/Heat_{e}quation$
$https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_{e}quation$
$https://en.wikipedia.org/wiki/Poisson$
$https://es.wikipedia.org/wiki/Condici$
$https://es.wikipedia.org/wiki/Condici$
$https://es.wikipedia.org/wiki/Condici$