Instituto Jorge Sabato, 25 años.
Comisión Nacional de Energía atómica.

Modelización de Materiales 2018

Resumen de la Guía 1

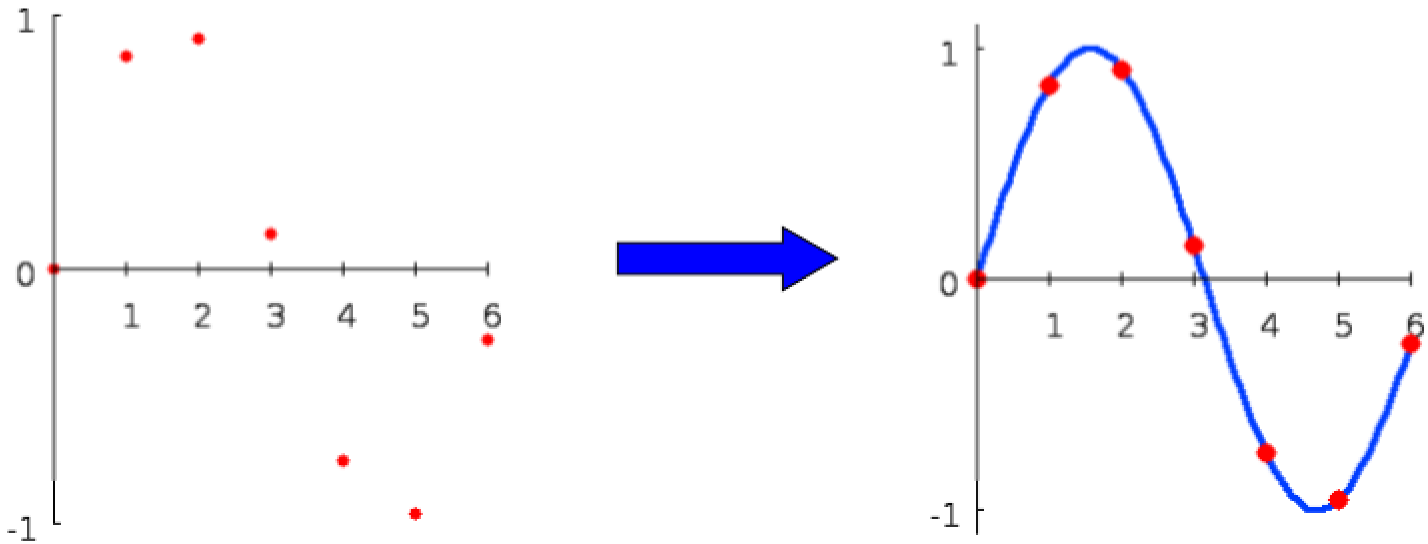
Mariano Forti - Ruben Weht

marianodforti@gmail.com - ruweht@cnea.gov.ar

www.tandar.cnea.gov.ar/~weht/Modelización

https://mdforti.github.io/Modelizacion/

Ejercicio 1: Interpolación



Ejercicio 1: Cuentas

En cada intervalo se aproxima por un polinomio de orden 3

$$f_i(x) = d_i + c_i(x - x_i) + b_i(x - x_i)^2 + a_i(x - x_i)^3 \quad ; \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

4(N-1) incognitas

Que debe pasar por los puntos

$$f_i(x_i) = y_i \quad \Rightarrow d_i = y_i$$ N ecuaciones

Que deben formar una curva continua

$$f_i(x_{i+1}) = f_{i+1}(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

Que deben formar una curva suave

$$f_i'(x_{i+1}) = f_{i+1}'(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

La derivada segunda debe ser continua

$$f_i''(x_{i+1}) = f_{i+1}''(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

Ejercicio 1: Sistema Lineal

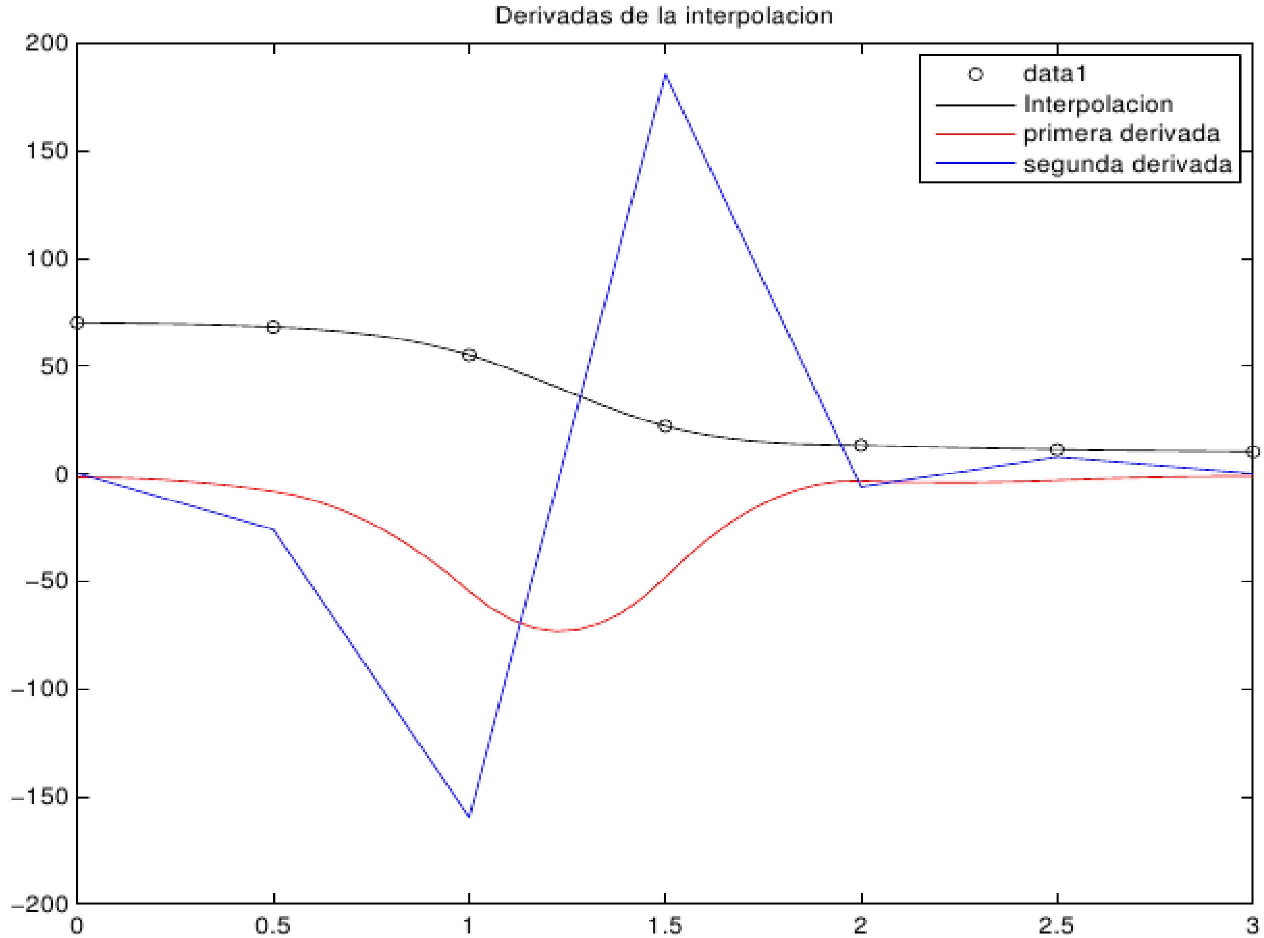
$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h_1 & 2\left(h_2+h_1\right) & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & h_2 & 2\left(h_3+h_2\right) & h_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3} & 2\left(h_{N-2}+h_{N-3}\right) & h_{N-2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2} & 2\left(h_{N-1}+h_{N-2}\right) & h_{N-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-2} \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix}
=
$$

$$
3\begin{pmatrix}
0 \\
\dfrac{y_3-y_2}{h_2}-\dfrac{y_2-y_1}{h_1} \\
\vdots \\
\dfrac{y_N-y_{N-1}}{h_{N-1}}-\dfrac{y_{N-1}-y_{N-2}}{h_{N-2}} \\
0
\end{pmatrix}
$$

Ejercicio 1: Varias soluciones Posibles

$$f'_i(x) = c_i + 2b_i(x - x_i) + 3a_i(x - x_i)^2 \quad ; \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

$$f''_i(x) = 2 * b_i + 6 * a_i(x - x_i) \quad ; \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$



Ejercicio 1: Varias Soluciones Posibles

$$xo \in [x_i, x_{i+1}] \Rightarrow F(x_i) \cdot F(x_{i+1}) \leq 0$$

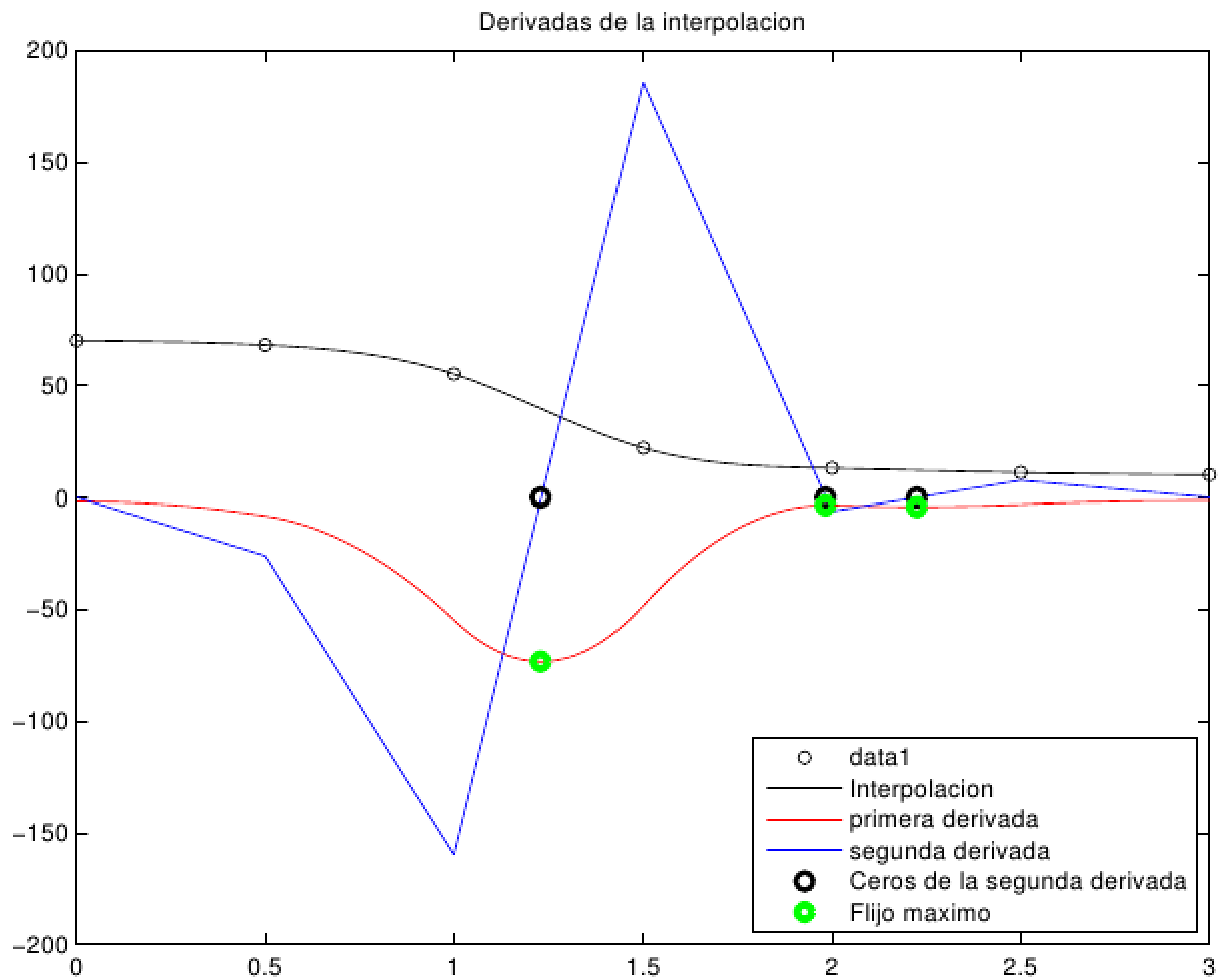
Este gráfico está bien para ilustrar el cumplimiento de las condiciones impuestas a los polinomios, pero la deri vada de los polinomios no necesariamente es una buena aproximación a las derivadas de la función. Por ejemplo, fijate que esa derivada segun da tiene varios ceros aunque la función tenga un único punto de inflección.

Ceros malos:

```
>> zomx

zomx =

    1.2298
    1.9823
    2.2247

fx >>
```

Flujo

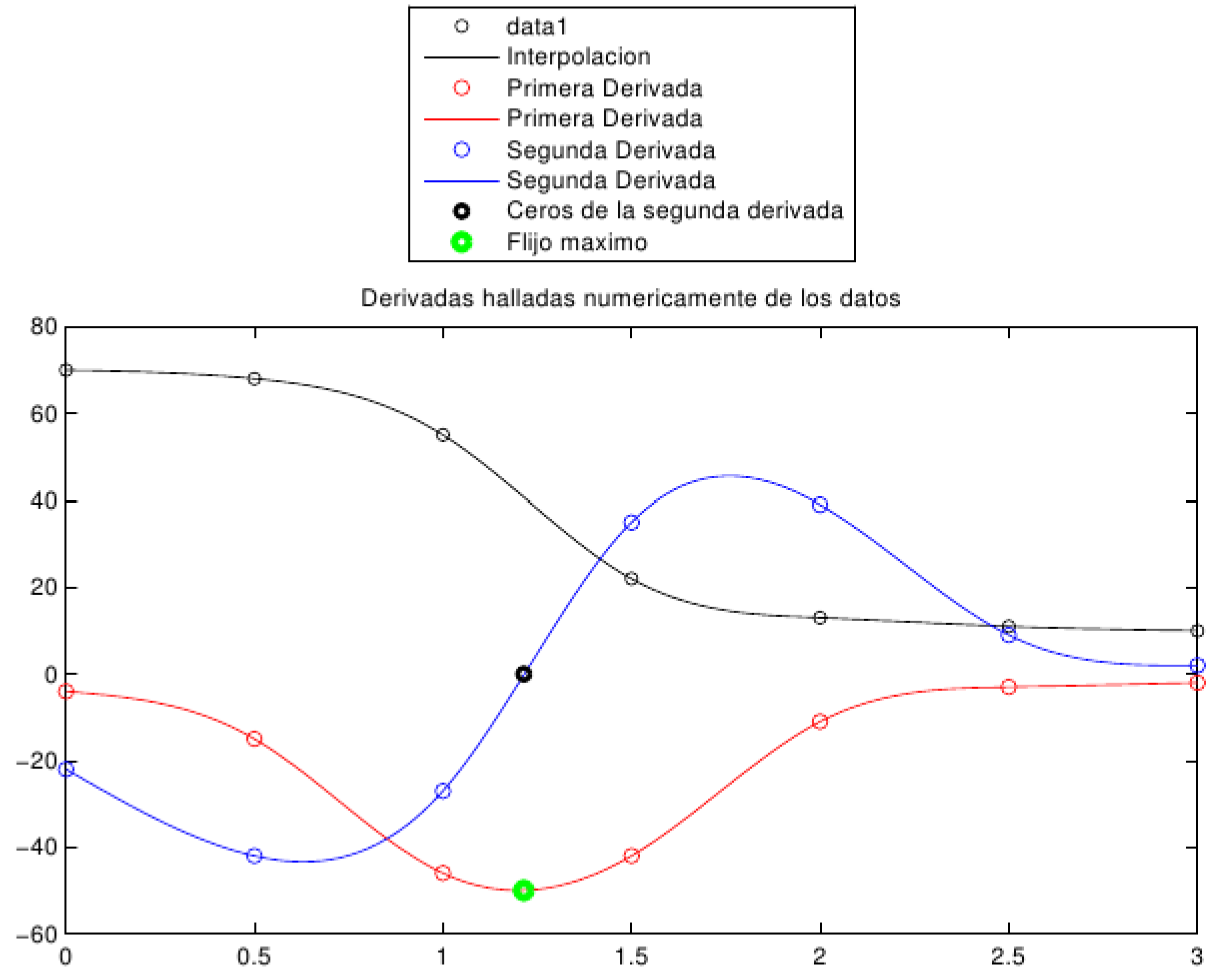
```
>> DYom

DYom =

  -73.3144   -3.5336   -4.2959
```



Ejercicio 1: Varias Soluciones posibles

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} + interpolación$$

```
zox =

    1.2146


DYo =

  -49.9587
```



Ejercicio 2: Integración

Integración de una función distribución:

$$dF = 200\left(\frac{z}{(5+z)}\right)\exp(-2z/30)\,dz$$

$$F = \int_{0}^{30} dF$$

$$d = \left(\frac{1}{F}\right)\int_{0}^{30} z\,dF$$

Ejercicio 2: Integración

$$I^{Trapecios}_{N\,intervalos} = \frac{1}{2}\left(\frac{b-a}{N}\right)\left(f(a)+2\sum_{j=2}^{N} f(x_j)+f(b)\right)$$

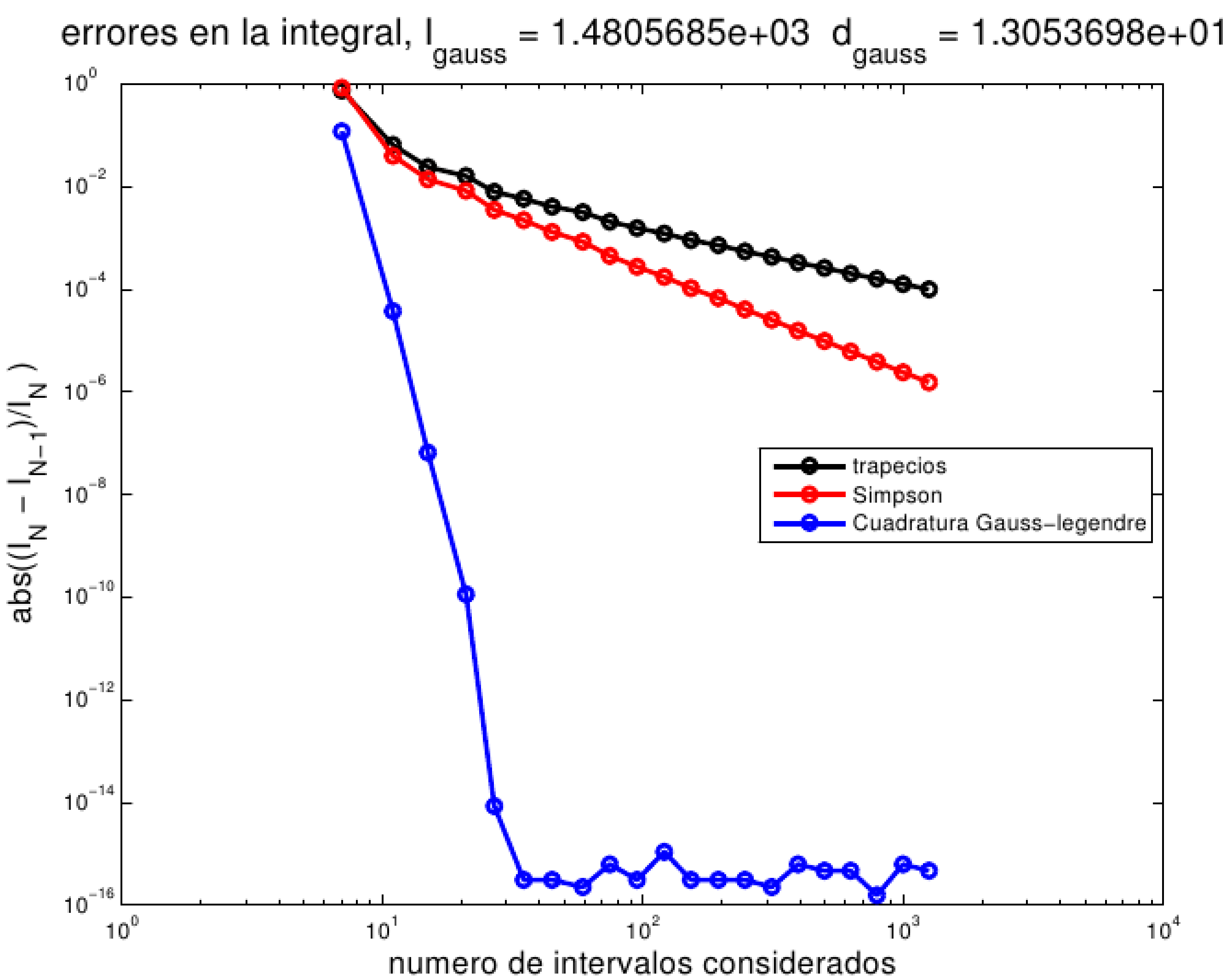
$$I^{Simpson}_{N\,intervalos} = \frac{1}{3}\left(\frac{b-a}{N}\right)\left(f(a)+4\sum_{j=3,\,impar}^{N} f(x_j) + 2\sum_{j=2,\,pares}^{N-1} f(x_j)+f(b)\right)$$

$$I^{Gauss}_{N\,intervalos} = \sum_{j=1}^{N+1} W_j f(t_j)$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\sum_{j=1}^{N+1} W_j = \int_{-1}^{1} dt \\
\sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j = \int_{-1}^{1} t\,dt \\
\sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j^2 = \int_{-1}^{1} t^2\,dt \\
\vdots \\
\sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j^{2N+1} = \int_{-1}^{1} t^{2N+1}\,dt
\end{array}\right.$$

Subrutina lgwt de matlabcentral

Ejercicio 2: Resultado y Error



Ejercicio 3: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

- Ecuación Diferencial: $$\frac{d\,y}{dx} = 4\,e^{0.8\,x} - 0.5\,y$$

$$\frac{d\,y}{d\,t} = \tilde{F}(x\,,\,y) = 4\,e^{0.8\,x} - 0.5\,y$$

- Solución Teórica: $$y(x) = \frac{4}{1.3}\left(e^{0.8\,x} - e^{-0.5\,x}\right) + 2\,e^{-0.5\,x}$$

Ejercicio 3: Integración de la ecuación

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{d\,t} = \tilde{F}\left(t_{i-1}, y_{i-1}\right)$$

Euler

$$Y_i = Y_{i-1} + dt\ \tilde{F}\left(t_{i-1}, v_{i-1}\right)$$

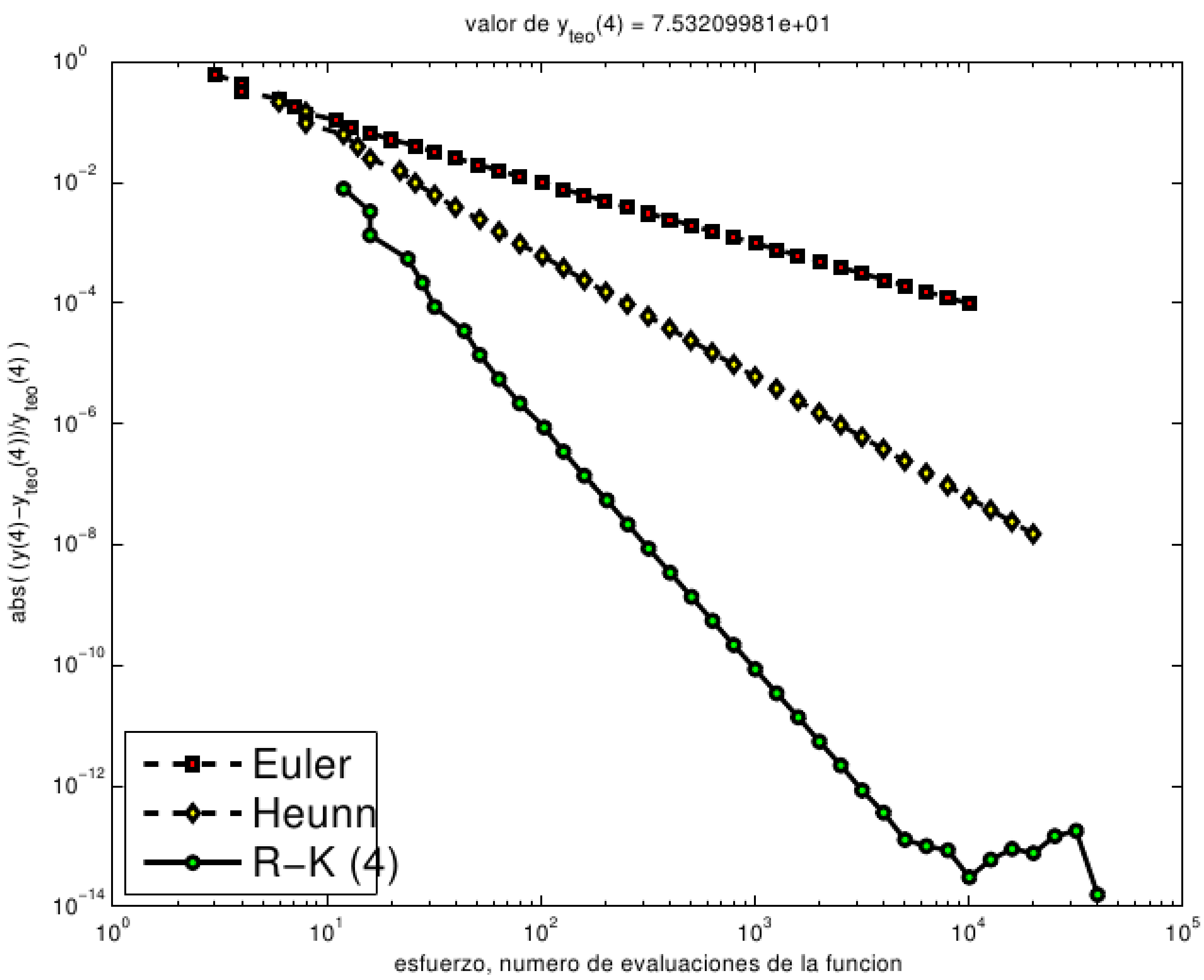
Heun

$$k_1 = \tilde{F}\left(t_{i-1}, y_{i-1}\right)$$
$$k_2 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + dt, y_{i-1} + k_1\,dt\right)$$
$$y_i = y_{i-1} + \frac{1}{2}\,dt\left(k_1 + k_2\right)$$

R-K

$$k_1 = \tilde{F}\left(t_{i-1}, Y_{i-1}\right)$$
$$k_2 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + \frac{1}{2}dt, Y_{i-1} + \frac{1}{2}k_1\,dt\right)$$
$$k_3 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + \frac{1}{2}dt, Y_{i-1} + \frac{1}{2}k_2\,dt\right)$$
$$k_4 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + dt, Y_{i-1} + k_3\,dt\right)$$
$$Y_i = Y_{i-1} + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2\mathrm{k}_2 + 2\,k_3 + k_4\right)dt$$

Ejercicio 3: Solución y error



Instituto Jorge Sabato, 25 años.
Comisión Nacional de Energía atómica.

Modelización de Materiales 2018

Resumen de la Guía 1

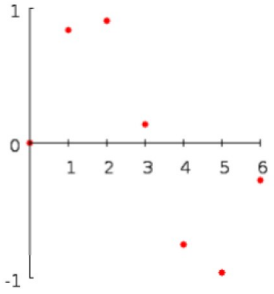
Mariano Forti - Ruben Weht

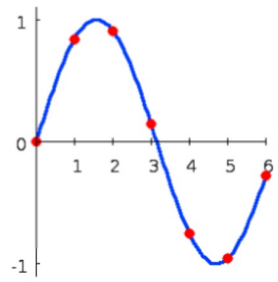
marianodforti@gmail.com - ruweht@cnea.gov.ar

www.tandar.cnea.gov.ar/~weht/Modelización

https://mdforti.github.io/Modelizacion/

Ejercicio 1: Interpolación





Ejercicio 1: Cuentas

En cada intervalo se aproxima por un polinomio de orden 3

$$f_i(x) = d_i + c_i(x - x_i) + b_i(x - x_i)^2 + a_i(x - x_i)^3 \quad ; \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

4(N-1) incognitas

Que debe pasar por los puntos

$$f_i(x_i) = y_i \quad \Rightarrow d_i = y_i$$ N ecuaciones

Que deben formar una curva continua

$$f_i(x_{i+1}) = f_{i+1}(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

Que deben formar una curva suave

$$f_i{}'(x_{i+1}) = f_{i+1}{}'(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

La derivada segunda debe ser continua

$$f_i{}''(x_{i+1}) = f_{i+1}{}''(x_{i+1})$$ N-2 ecuaciones

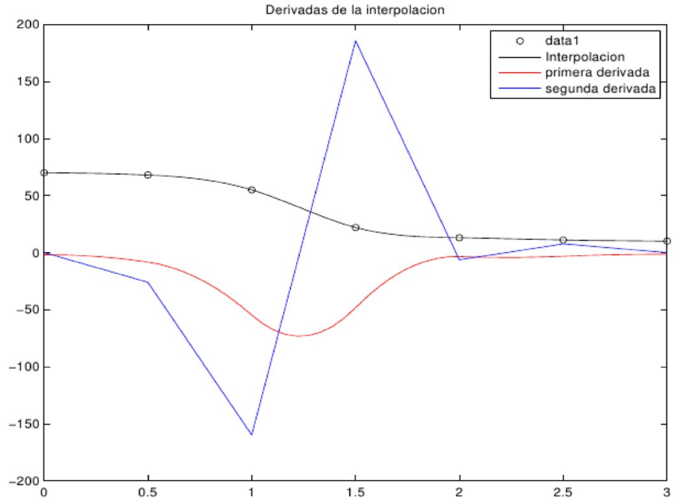
Ejercicio 1: Sistema Lineal

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h_1 & 2(h_2+h_1) & h_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & h_2 & 2(h_3+h_2) & h_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3} & 2(h_{N-2}+h_{N-3}) & h_{N-2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2} & 2(h_{N-1}+h_{N-2}) & h_{N-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-2} \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix}
=
3\begin{pmatrix} 0 \\ \dfrac{y_3-y_2}{h_2}-\dfrac{y_2-y_1}{h_1} \\ \vdots \\ \dfrac{y_N-y_{N-1}}{h_{N-1}}-\dfrac{y_{N-1}-y_{N-2}}{h_{N-2}} \\ 0 \end{pmatrix}
$$

Ejercicio 1: Varias soluciones Posibles

$$f'_i(x)=c_i+2b_i(x-x_i)+3a_i(x-x_i)^2 \quad ; \quad x\in[x_i, x_{i+1}]$$

$$f''_i(x)=2*b_i+6*a_i(x-x_i) \quad ; \quad x\in[x_i, x_{i+1}]$$



Ejercicio 1: Varias Soluciones Posibles

$$xo \in [x_i, x_{i+1}] \;\Rightarrow F(x_i) \cdot F(x_{i+1}) \leq 0$$

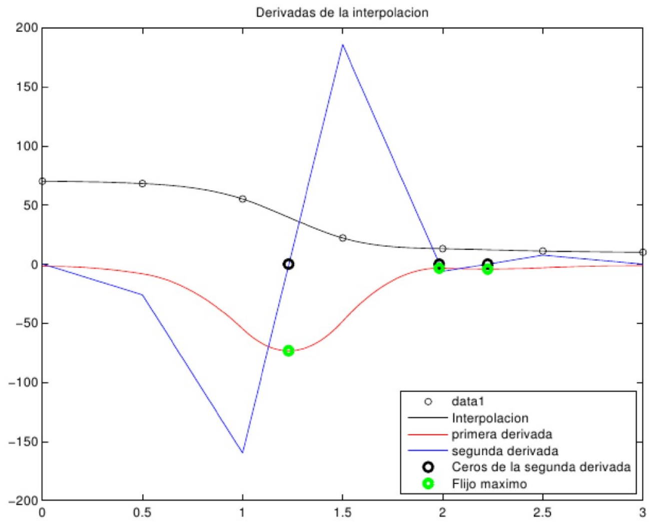
Este gráfico está bien para ilustrar el cumplimiento de las condiciones impuestas a los polinomios, pero la deri vada de los polinomios no necesariamente es una buena aproximación a las derivadas de la función. Por ejemplo, fíjate que esa derivada segun da tiene varios ceros aunque la función tenga un único punto de inflección.

Ceros malos:

```
>> zomx

zomx =

    1.2298
    1.9823
    2.2247

fx >>
```

Flujo

```
>> DYom

DYom =

  -73.3144   -3.5336   -4.2959
```

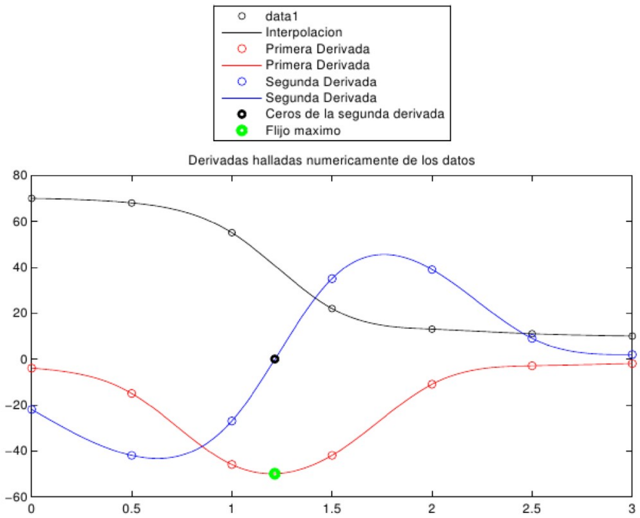


Ejercicio 1: Varias Soluciones posibles

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} + interpolación$$

```
zox =

    1.2146
```

```
DYo =

  -49.9587
```



Ejercicio 2: Integración

Integración de una función distribución:

$$dF = 200\left(\frac{z}{(5+z)}\right)\exp(-2z/30)\,dz$$

$$F = \int_{0}^{30} dF$$

$$d = \left(\frac{1}{F}\right)\int_{0}^{30} z\,dF$$

Ejercicio 2: Integración

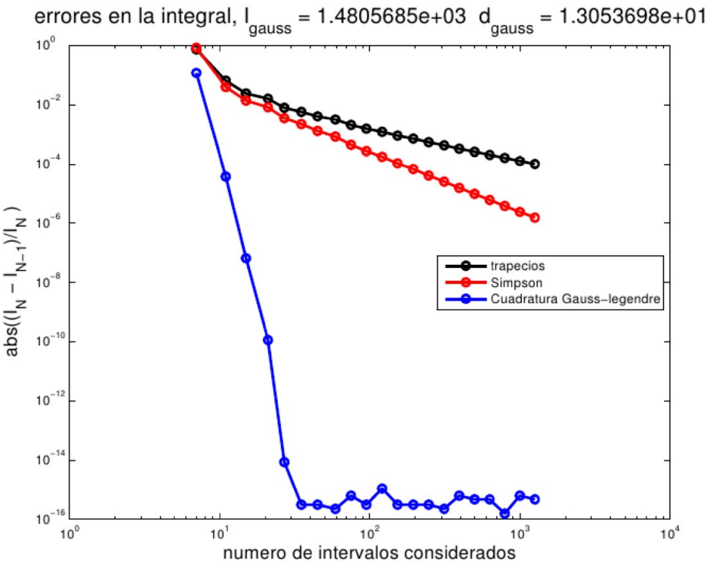
$$I_{N\,intervalos}^{Trapecios} = \frac{1}{2}\left(\frac{b-a}{N}\right)\left(f(a) + 2\sum_{j=2}^{N} f(x_j) + f(b)\right)$$

$$I_{N\,intervalos}^{Simpson} = \frac{1}{3}\left(\frac{b-a}{N}\right)\left(f(a) + 4\sum_{j=3,\,impar}^{N} f(x_j) \;+\; 2\sum_{j=2,\,pares}^{N-1} f(x_j) + f(b)\right)$$

$$I_{N\,intervalos}^{Gauss} = \sum_{j=1}^{N+1} W_j f(t_j) \;\longrightarrow\; \left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^{N+1} W_j = \int_{-1}^{1} dt \\ \sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j = \int_{-1}^{1} t\, dt \\ \sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j^2 = \int_{-1}^{1} t^2\, dt \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{N+1} W_j t_j^{2N+1} = \int_{-1}^{1} t^{2N+1}\, dt \end{array} \right.$$

Subrutina lgwt de matlabcentral

Ejercicio 2: Resultado y Error



Ejercicio 3: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

- Ecuación Diferencial: $\frac{d\,y}{dx}=4\,e^{0.8\,x}-0.5\,y$

$$\frac{d\,y}{d\,t}=\tilde{F}(x\,,\,y)=4\,e^{0.8\,x}-0.5\,y$$

- Solución Teórica: $y(x)=\frac{4}{1.3}\left(e^{0.8x}-e^{-0.5\,x}\right)+2\,e^{-0.5\,x}$

Ejercicio 3: Integración de la ecuación

$$\frac{y_i - y_{i-1}}{dt} = \tilde{F}(t_{i-1}, y_{i-1})$$

Euler

$$Y_i = Y_{i-1} + dt \ \tilde{F}(t_{i-1}, v_{i-1})$$

Heun

$$k_1 = \tilde{F}(t_{i-1}, y_{i-1})$$
$$k_2 = \tilde{F}(t_{i-1} + dt, y_{i-1} + k_1 dt)$$
$$y_i = y_{i-1} + \frac{1}{2} dt (k_1 + k_2)$$

R-K

$$k_1 = \tilde{F}(t_{i-1}, Y_{i-1})$$
$$k_2 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + \frac{1}{2} dt, Y_{i-1} + \frac{1}{2} k_1 dt\right)$$
$$k_3 = \tilde{F}\left(t_{i-1} + \frac{1}{2} dt, Y_{i-1} + \frac{1}{2} k_2 dt\right)$$
$$k_4 = \tilde{F}(t_{i-1} + dt, Y_{i-1} + k_3 dt)$$
$$Y_i = Y_{i-1} + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) dt$$

Ejercicio 3: Solución y error