Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

November 5, 2023

Problemas de Valor en la Frontera

En física es recurrente resolver problemas de la forma:

$$\begin{cases} x''(t) = f(t, x, x') \\ x(a) = \alpha \quad x(b) = \beta \end{cases}$$

el **método de diferencias finitas** busca aproximaciones de $x'(t)$ y $x(t)$ como como función de valores de $x(t)$. Usando series de Taylor y asumiendo que x(t) es suficientemente diferenciable:

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + \frac{h^2}{2}x''(t) + \frac{h^3}{6}x'''(\xi_1) \tag{1}$$

$$x(t-h) = x(t) - hx'(t) + \frac{h^2}{2}x''(t) - \frac{h^3}{6}x'''(\xi_2) \tag{2}$$

Método de Diferencias Finitas

(1)+(2)

$$x(t+h)+x(t-h)=2x(t)+h^2x''(t)+\mathcal{O}(h^3)$$

de donde:

$$x''(t)\approx\frac{x(t+h)-2x(t)+x(t-h)}{h^2} \tag{3}$$

si expandimos solamente hasta el primer término:

$$x(t+h)=x(t)+hx'(t)+\frac{h^2}{2}x''(\xi_1) \tag{4}$$

$$x(t-h)=x(t)-hx'(t)+\frac{h^2}{2}x''(\xi_2) \tag{5}$$

(4)-(5)

Método de Diferencias Finitas

$$x(t+h) - x(t+h) = 2hx'(t) + \mathcal{O}(h^2)$$

de donde:

$$x'(t) = \frac{x(t+h) - x(t+h)}{2h} \quad \textit{Diferencia Centrada} \tag{6}$$

de (4):

$$x'(t) = \frac{x(t+h) - x(t)}{h} \quad \textit{Diferencia Hacia Adelante} \tag{7}$$

de (5)

$$x'(t) = \frac{x(t) - x(t-h)}{h} \quad \textit{Diferencia Hacia Atrás} \tag{8}$$

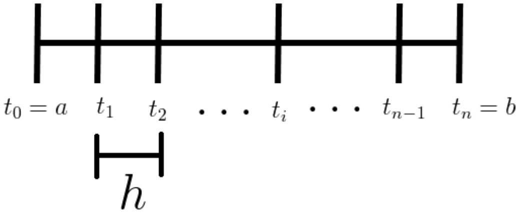
Método de Diferencias Finitas

Así el P.V.F. se transforma en:

$$\begin{cases} \frac{x(t+h)-2x(t)+x(t-h)}{h^2} = f\left(t, x, \frac{x(t+h)-x(t-h)}{2h}\right) \\ x(a) = \alpha \quad x(b) = \beta \end{cases} \tag{9}$$

Método de Diferencias Finitas

Para resolverlo debemos discretizar la función x(t). Dividimos el intervalo $[a, b]$ en n subintervalos de tamaño $h = \frac{b-a}{n}$:



donde $x(t_i) = x_i$ con $t_i = t_0 + ih$ y por notación:

$$\begin{cases} x(t_i + h) = x_{i+1} \\ x(t_i - h) = x_{i-1} \end{cases}$$

Método de Diferencias Finitas

y se cumple:

$$\begin{cases} x(a) = x(t_0) = x_0 \\ x(b) = x(t_n) = x_n \end{cases}$$

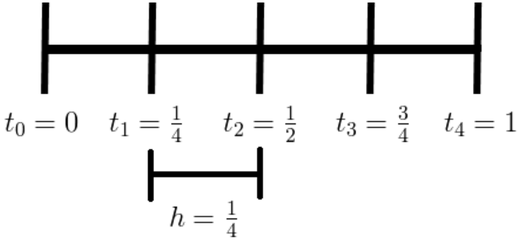
Finalmente definimos:

- t_0 y t_n: extremos del intervalo
- $t_1,\ t_2, \ldots,\ t_{n-1}$: nodos interiores $(n-1)$

Método de Diferencias Finitas

Ejemplo: resolver el P.V.F $\begin{cases} x''(t) + 2x'(t) + 10t = 0 \\ x(0) = 1 \quad x(1) = 2 \end{cases}$ con $h = \frac{1}{4}$.

en diferencias finitas $\begin{cases} \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2} = -2\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2h} - 10t_i \\ x_0 = 1 \quad x_4 = 2 \end{cases}$



Método de Diferencias Finitas

tenemos tres nodos interiores, así que tendremos tres ecuaciones que se obtienen de:

$$\begin{cases} (1+h)x_{i+1} - 2x_i + (1-h)x_{i-1} + 10h^2 t_i = 0 \\ x_0 = 1 \quad x_4 = 2 \end{cases}$$

Para:

$$i = 1 \quad \tfrac{5}{4}x_2 - 2x_1 + \tfrac{3}{4}x_0 + 10h^2 t_1 = 0$$

$$i = 2 \quad \tfrac{5}{4}x_3 - 2x_2 + \tfrac{3}{4}x_1 + 10h^2 t_2 = 0$$

$$i = 3 \quad \tfrac{5}{4}x_4 - 2x_3 + \tfrac{3}{4}x_2 + 10h^2 t_3 = 0$$

Método de Diferencias Finitas

$$i = 1 \quad -2x_1 + \tfrac{5}{4}x_2 + 0 = -\tfrac{29}{32}$$

$$i = 2 \quad \tfrac{3}{4}x_1 - 2x_2 + \tfrac{5}{4}x_3 = -\tfrac{5}{16}$$

$$i = 3 \quad 0 + \tfrac{3}{4}x_2 - 2x_3 = -\tfrac{95}{32}$$

o en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} -2 & \frac{5}{4} & 0 \\ \frac{3}{4} & -2 & \frac{5}{4} \\ 0 & \frac{3}{4} & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{29}{32} \\ -\frac{5}{16} \\ -\frac{95}{32} \end{bmatrix}$$

Teorema de Unicidad

El problema de valor en la frontera $\begin{cases} x''(t) = f(t, x, x') \\ x(0) = 0 \quad x(1) = 0 \end{cases}$

tiene solución única si f_x es no negativa, continua y acotada en la franja infinita $0 < t < 1$ y $-\infty < x < \infty$.

Ecuaciones Diferenciales Parciales

Ecuaciones diferenciales en dos variables con coeficientes constantes:

$$A\mu_{xx} + B\mu_{xy} + C\mu_{yy} + D\mu_x + E\mu_y + F\mu = G(x, y)$$

Clasificación

- elíptica si $B^2 - 4AC < 0$
- hiperbólica si $B^2 - 4AC > 0$
- parabólica si $B^2 - 4AC = 0$

Ecuaciones Diferenciales Parciales

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

- Ecuación de Poisson $\nabla^2\psi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$: en 2D

  $\mu_{xx} + \mu_{yy} = \rho(x,y)$

- Ecuación de Ondas $[\nabla^2 - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}]\psi(\vec{r},t) = g(\vec{r},t)$:

  en 2D $\mu_{xx} = \frac{1}{v^2}\mu_{tt} + g(x,t)$

- Ecuación de Schrödinger $[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}$ o para estados estacionarios: $[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

  en 2D $-\frac{\hbar^2}{2m}(\mu_{xx} + \mu_{yy}) + v(x,y) = E\mu(x,y)$

- Ecuación del Calor $\nabla^2 T(\vec{r},t) - \frac{\rho c}{k}\frac{\partial T(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{q(\vec{r},t)}{k}$

  en 2D $\mu_{xx} = \frac{\rho c}{k}\mu_t - \frac{q(\vec{r},t)}{k}$

Ecuaciones Diferenciales Parciales

- Ecuación de ondas (Hiperbólica):

  $\mu_{xx} = \frac{1}{v^2}\mu_{tt} + g(x,t)$

- Ecuación del calor (Parabólica):

  $\mu_{xx} = \frac{\rho c}{k}\mu_t - \frac{q(\vec{r},t)}{k}$

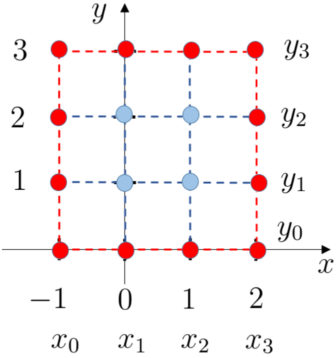
- Ecuación de Poisson (Elíptica):

  $\mu_{xx} + \mu_{yy} = \rho(x,y)$

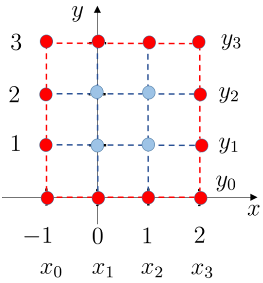
Ecuaciones Diferenciales Parciales

Ejemplo: solucionar el P.V.F

$$\begin{cases} \mu_{xx} + \mu_{yy} = 6x + 12y & (x,y) \in int(\mathcal{R}) \\ \mu(x,y) = 3 + x^3 & (x,y) \in \partial\mathcal{R} \\ \mathcal{R} = (x,y) \in \mathbb{R}^2 / -1 \leq x \leq 2, \ \ 0 \leq y \leq 3 & h = k = 1 \end{cases}$$



Ecuaciones Diferenciales Parciales



$$\text{Nodos exteriores:}\begin{cases}(x_0,y_0) & (x_1,y_0) & (x_2,y_0) & (x_3,y_0)\\ (x_0,y_1) & (x_1,y_3) & (x_2,y_3) & (x_3,y_1)\\ (x_0,y_2) & & & (x_3,y_2)\\ (x_0,y_3) & & & (x_3,y_3)\end{cases}$$

$$\text{Nodos internos:}\begin{cases}(x_1,y_1) & (x_2,y_1)\\ (x_1,y_2) & (x_2,y_2)\end{cases}$$

Nodos totales=16

Ecuaciones Diferenciales Parciales

Escribiendo en diferencias finitas:

$$\mu_{xx} = \frac{\mu(x+h,y) - 2\mu(x,y) + \mu(x-h,y)}{h^2}$$

$$\mu_{yy} = \frac{\mu(x,y+k) - 2\mu(x,y) + \mu(x,y-k)}{k^2}$$

y definiendo

$$\begin{cases} \mu(x,y) = \mu_{i,\,j} \\ \mu(x+h,y) = \mu_{i+1,\,j} \\ \mu(x-h,y) = \mu_{i-1,\,j} \\ \mu(x,y+k) = \mu_{i,\,j+1} \\ \mu(x,y-k) = \mu_{i,\,j-1} \end{cases}$$

es posible discretizar el P.V.F con $h = 1$, $k = 1$ así:

$$\begin{cases} \mu_{i+1,\,j} - 2\mu_{i,\,j} + \mu_{i-1,\,j} + \mu_{i,\,j+1} - 2\mu_{i,\,j} + \mu_{i,\,j-1} = \\ \quad \mu_{i+1,\,j} - 4\mu_{i,\,j} + \mu_{i-1,\,j} + \mu_{i,\,j+1} + \mu_{i,\,j-1} = 6x_i + 12y_j \\ \mu(x_i, y_i) = 3 + x_i^3 \end{cases}$$

donde

$$\begin{cases} i = 1 \wedge j = 1, 2 \\ i = 2 \wedge j = 1, 2 \end{cases} \quad \text{Nodos internos}$$

$$\begin{cases} i = 0 \wedge j = 0, 1, 2, 3 \\ i = 1 \wedge j = 0, 3 \\ i = 2 \wedge j = 0, 3 \\ i = 3 \wedge j = 0, 1, 2, 3 \end{cases} \quad \text{Nodos externos}$$

evaluemos en los nodos externos:

$$\begin{array}{lll}
\mu_{0,0} = 3 - 1 = 2 & \mu_{1,0} = 3 & \mu_{3,0} = 11 \\
\mu_{0,1} = 2 & \mu_{1,3} = 3 & \mu_{3,1} = 11 \\
\mu_{0,2} = 2 & \mu_{2,0} = 4 & \mu_{3,2} = 11 \\
\mu_{0,3} = 2 & \mu_{2,3} = 4 & \mu_{3,3} = 11
\end{array}$$

Ahora realicemos en análisis en los nodos internos:

para $i = 1 \;\wedge\; j = 1$

$$\mu_{2,1} - 4\mu_{1,1} + \mu_{0,1} + \mu_{1,2} + \mu_{1,0} = 6x_1 + 12y_1$$

$$-4\mu_{1,1} + \mu_{1,2} + \mu_{2,1} = 7$$

para $i = 1 \quad \wedge \quad j = 2$

$$\mu_{2,2} - 4\mu_{1,2} + \mu_{0,2} + \mu_{1,3} + \mu_{1,1} = 6x_1 + 12y_2$$
$$\mu_{1,1} - 4\mu_{1,2} + \mu_{2,2} = 19$$

para $i = 2 \quad \wedge \quad j = 1$

$$\mu_{3,1} - 4\mu_{2,1} + \mu_{1,1} + \mu_{2,2} + \mu_{2,0} = 6x_2 + 12y_1$$
$$\mu_{1,1} - 4\mu_{2,1} + \mu_{2,2} = 3$$

para $i = 2 \quad \wedge \quad j = 2$

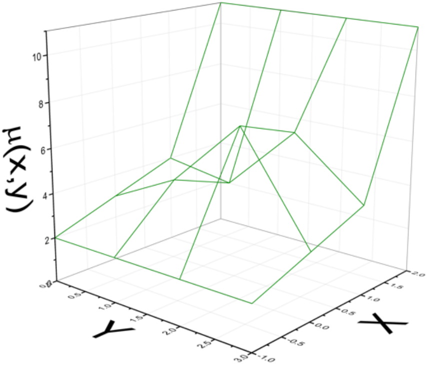
$$\mu_{3,2} - 4\mu_{2,2} + \mu_{1,2} + \mu_{2,3} + \mu_{2,1} = 6x_2 + 12y_2$$
$$\mu_{1,2} + \mu_{2,1} - 4\mu_{2,2} = 15$$

y así construimos un sistema matricial con incógnitas $\mu_{1,1}, \mu_{1,2}, \mu_{2,1}, \mu_{2,2}$

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{1,1} \\ \mu_{1,2} \\ \mu_{2,1} \\ \mu_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 19 \\ 3 \\ 15 \end{bmatrix}$$

Ecuaciones Diferenciales

	1	2	3	4
1	2	2	2	2
2	3	4.5	7.5	3
3	4	3.5	6.5	4
4	11	11	11	11



Similarmente se pueden discretizar las ecuaciones hiperbólicas y parabólicas:

Hiperbólicas (de ondas):

$$\begin{cases} \mu_{tt} = v^2 \mu_{xx} \\ \mu(0,t) = 0 \wedge \mu(a,t) = 0 \\ \mu(x,0) = f(x) \\ \mu_t(x,0) = g(x) \end{cases}$$

en diferencias finitas:

$$\frac{\mu_{i,\ j+1} - 2\mu_{i,\ j} + \mu_{i,\ j-1}}{k^2} = v^2 \frac{\mu_{i+1,\ j} - 2\mu_{i,\ j} + \mu_{i-1,\ j}}{h^2}$$

$$\mu_{i,\ j+1} - 2\mu_{i,\ j} + \mu_{i,\ j-1} = r^2(\mu_{i+1,\ j} - 2\mu_{i,\ j} + \mu_{i-1,\ j}) \ \ r = \frac{vk}{h} \leq 1$$

Parabólicas (de calor):

$$\begin{cases} \mu_t(x,t) = v^2\mu_{xx} \\ \mu(x,0) = f(x) \\ \mu(0,t) = g_1(t) \\ \mu(a,t) = g_1(t) \end{cases}$$

en diferencias finitas:

$$\frac{\mu_{i,\ j+1}-\mu_{i,\ j}}{k} = v^2\frac{\mu_{i+1,\ j}-2\mu_{i,\ j}+\mu_{i-1,\ j}}{h^2}$$

$$\mu_{i,\ j+1} - \mu_{i,\ j} = r(\mu_{i+1,\ j} - 2\mu_{i,\ j} + \mu_{i-1,\ j}) \qquad r = \frac{v^2k}{h^2} \quad 0 \leq r \leq \frac{1}{2}$$

Método de Elementos Finitos

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

$\diamond$ Se escribe el problema en forma débil, por ejemplo, la ecuación de Schrödinger.:

$$\hat{H}\psi = E\psi \rightarrow F[\psi] = \int \psi[\hat{H} - E]\psi d\tau = 0.$$

$\diamond$ Se particiona el dominio de trabajo en elementos (creando nodos).
$\diamond$ Se definen condiciones de frontera.
$\diamond$ Se propone funciones interpolantes con coeficientes variacionales.
$\diamond$ Se obtiene un sistema de ecuaciones con los coeficientes para reproducir localmente la solución.

Método de Elementos Finitos