Capítulo 3

Métodos Diferenciales

El tema de resolver ecuaciones diferenciales con el uso de computadoras, en una o varias dimensiones es vasto. Una breve introducción y simples ejemplos son dados en ente capítulo.

Ecuaciones diferenciales parciales son resueltas algunas veces por métodos de elemento finito.

3.1. Esquemas de diferencia

3.1.1. Consideraciones elementales

Representaciones de diferencia finita de derivadas son fácilmente obtenidas de la serie de expanción de Taylor.

$$f(x_o + h) = f(x_o) + hf^{'}(x_o) + \frac{h^2}{2}f^{''}(x_o$$

$) + \frac{h^3}{6}f^{'''}(x_o) + \cdots (3.1)$

$$f(x_o - h) = f(x_o) - hf^{'}(x_o) + \frac{h^2}{2}f^{''}(x_o$$

$) - \frac{h^3}{6}f^{'''}(x_o) + \cdots (3.2)$

Resolviendo para la primer derivada encontramos:

$$f^{'}(x_o) = \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h} - \frac{h}{2}f^{''}(x_o$$

$) - \frac{h^2}{6}f^{'''}(x_o) + \cdots (3.3)$

$$f^{'}(x_o) = \frac{f(x_o) - f(x_o - h)}{h} + \frac{h}{2}f^{''}(x_o$$

$) - \frac{h^2}{6}f^{'''}(x_o) + \cdots (3.4)$

3.1.2. Simples Ecuaciones Diferenciales

El tipo más común de ecuación diferencial que ocurre en la ciencia es del segundo orden. Ambas la homogénea y no homogénea variedad son comunes. Dos ejemplos son la ecuación de Newton en mecánica clásica y la ecuación de Schroedinger en mecánica cuántica.

Para la ecuación de Newton,

$$m\ddot{\overrightarrow{r}} = m\frac{d^2\overrightarrow{r}}{dt^2} = F(\overrightarrow{r}), \tag{3.5}$$

es algunas veces conveniente mirar el sistema como dos ecuaciones diferenciales acopladas, es decir,

$$\frac{d\overrightarrow{r}}{dt} = \overrightarrow{v}(\overrightarrow{r}), \tag{3.6}$$

$$\frac{d\overrightarrow{v}}{dt} = \frac{F(\overrightarrow{r})}{m}. \tag{3.7}$$

La ecuación de Schroedinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\bigtriangledown^2 \Psi(\overrightarrow{r}) + V(\overrightarrow{r})\Psi(\overrightarrow{r}) = E\Psi(\overrightarrow{r}), \tag{3.8}$$

se reduce para un potencial central (independiente del ángulo), $V(r)$, al conjunto de ecuaciones uni-dimensionales

$$\frac{d^2U^l(r)}{dr^2} + w_l(r)U^l(r) = 0. \tag{3.9}$$

donde

$$w_l(r) \equiv \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \tag{3.10}$$

$$= k^2 - v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Esta última ecuación para $v(r) = 0$ es equivalente a la ecuación de Bessel's la cual tiene soluciones a funciones cercanas a las funciones de Bessel de orden entero un medio.

Las soluciones computacionales de estas ecuaciones envuelven por definiendo los valores de las funciones en valores discretos sobre una malla (usualmente) de espaciamiento nodal uniforme. Las ecuaciones diferenciales se hacen ecuaciones en diferencias finitas y pueden ser resueltas mediante procedimientos a lo largo de una malla por calculando nuevos valores de la función de valores previos conocidos (condiciones de frontera). Por ejemplo, para la ecuación de Schroedinger (eliminando el super-índice l), podemos escribir la segunda derivada de U usando una aproximación de tres puntos,

$$U_i'' \approx \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2}, \tag{3.11}$$

donde h es el intervalo entre nodos y el sub-índice sobre U etiqueta el punto nodal. La ecuación en diferencias finitas es,

$$\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + w_i U_i = 0 \tag{3.11}$$

o

$$U_{i+1} = 2U_i - U_{i-1} - h^2 w_i U_i. \tag{3.11}$$

Así, dado los valores de U en $i-1$ e i, su nuevo valor $i+1$ puede ser encontrado, entonces el valor en $i+2$, etc. Sólo los dos primeros valores son necesitados para iniciar el método.

Para ilustrar el método, considera el cálculo de las funciones de Ricatti-Bessel. Iniciamos por realizando un espacio,

```
dimension u(0:4,0:200), r(0:200)
```

definiendo la malla y los parámetros,

```
n=200
ak=1.
h=0.1
r(0)=0.
do i=1,n
r(i)=r(i-1)+h
enddo
```

y eligiendo los valores iniciales para cada l,

```
do 1 il=0,4
sl=il
u(il,0)=0.
u(il,1)=sj(il+1,ak*h)*ak*h       ! esto es algo razonable
```

donde hemos asumido que SJ es una subroutina la cual regresa el valor de las funciones esféricas de Bessel para dado un l y ρ. Ahora pasamos a lo largo de la malla.

```
    do 2 i=1, n-1
    w(i)=ak**2-sl*(sl+1.)/r(i)**2
    u(il,i+1)=2.*u(il,i)-u(il,i-1)-h**2*w(i)*u(il,i)
2   continue
1   continue
```

Capítulo 3: Métodos Diferenciales

Revisar la expansión de Taylor de una función alrededor de un punto $+h$ ó $-h$.

Sea una función, $f(x)$, la expandimos a órdenes de tres.

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3) \rightarrow (1)$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + O(h^3) \rightarrow (2)$$

Sumamos las ecuaciones (1) y (2), observamos que se elimina la primer derivada:

$$f(x_0+h) + f(x_0-h) = 2f(x_0) + h^2 f''(x_0)$$

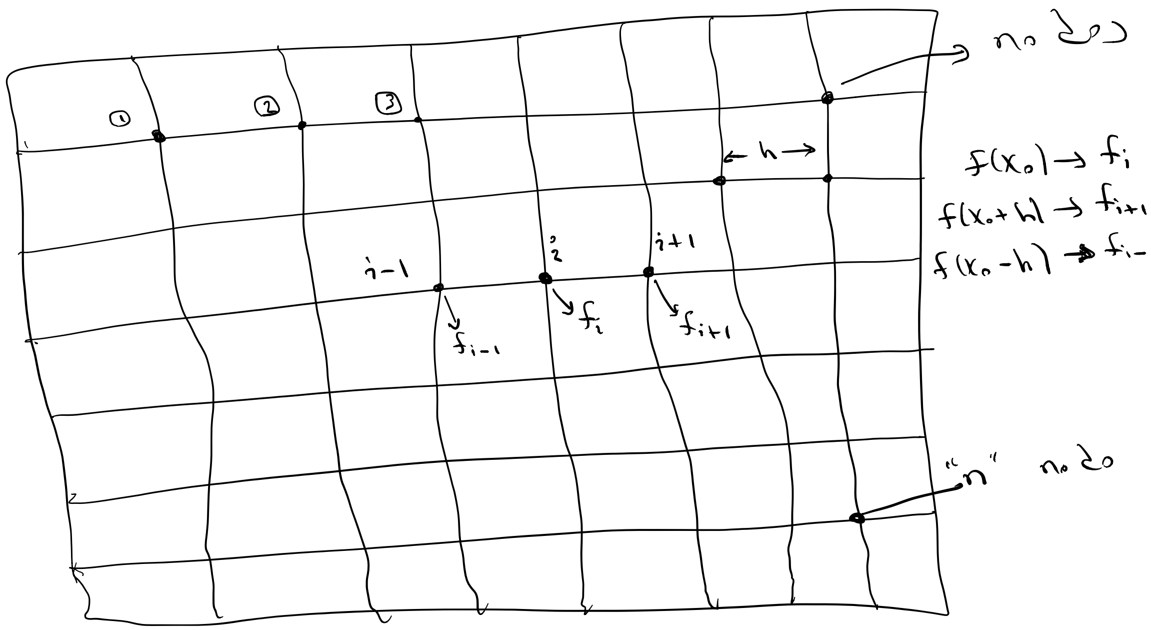
$$\boxed{f''(x_0) = \frac{f(x_0+h) + f(x_0-h) - 2f(x_0)}{h^2}} \rightarrow (3)$$

Restamos las ecuaciones (1) y (2) para obtener la primer derivada:

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2hf'(x_0)$$

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}} \rightarrow (4)$$

Tenemos una malla con "n" puntos y espaciamiento entre cada nodo de "h":



```
c    Resolviendo la ecuación del pendulo simple para pequeñas
oscilaciones

      implicit real*8 (a-h,o-z)
      dimension w(0:200),u(0:4,0:200),t(0:200)   ! se definen las w, t
hasta 200 entradas
      real g,l,h                           ! se definen las constantes
      integer n,ak

      n=20                     ! se resuelven las ecuaciones con 20
puntos en la malla
      ak=1
      h=0.1              ! es la distancia entre cada nodo, 0.1
      t(0)=0.            ! el tiempo en el origen inicia con 0, en el
origen
      g=9.8
      l=0.3

      do i=1,n           ! Este lazo divide la parte radial en .1 .2
hasta 2 segundos
      t(i)=t(i-1)+h             ! t(0)=0, t(1)=0.1, t(2)=0.2,... ,
t(200)=19.9  segundos
      enddo                      ! termina el lazo

      do 1 il=1,1               ! Se hace para l=1

      sl=il                      ! cambio de variable de sl a il
      u(il,0)=0.         ! Onda inicial tiene un valor de 0 en el
origen
      u(il,1)=0.015              ! Al moverse el pendulo tiene el
valor inicial de un arco=0.015

      do 2 i=1,n-1               ! Este lazo calcula la ec. (3.11)
para las u's en los puntos 2 hasta 9
      w(i)=g/l           ! u(il,2),.., u(il,9), y el valor de w(i) del
pendulo simple


      u(il,i+1)=2.*u(il,i)-u(il,i-1)-h**2*w(i)*u(il,i)     ! resuelve
las u's recursivamente


      print 28, t(i),u(il,i)              ! imprime el tiempo y la
ecuación diferencial

   28  format(f8.2,f10.4)
    2  continue

    1  continue
       end
```

Tenemos la ecuación diferencial de segundo orden en la forma:

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \omega_1(r)\frac{dU(r)}{dr} + \omega_2(r)U(r) = 0 \quad \rightarrow (*)$$

En la malla y usando la expansión de Taylor:

$$U_i'' \approx \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} \quad y \quad U_i' \simeq \frac{U_i - U_{i-1}}{2h}$$

La ecuación diferencial $(*)$ toma la forma,

$$\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + \omega_{1i}\left[\frac{U_i - U_{i-1}}{2h}\right] + \omega_{2i}U_i = 0$$

Despejando U_{i+1}:

$$\boxed{U_{i+1} = 2U_i - U_{i-1} - \frac{\omega_{1i}h}{2}\left[U_i - U_{i-1}\right] - h^2\omega_{2i}U_i}$$

```
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      dimension w1(0:200),w2(0:200),u(0:4,0:200),t(0:200)
      real h
      integer n,ak
      n=50
      ak=1
      h=0.1
      t(0)=0.
      do i=1,n
      t(i)=t(i-1)+h
      enddo
      do 1 il=1,1
      sl=il
      u(il,0)=5.0
      u(il,1)=5.55
      do 2 i=1,n-1
      w1(i)=14.0
      w2(i)=18.0*18.0
      u(il,i+1)=2.*u(il,i)-u(il,i-1)-w1(i)*h*0.5*(u(il,i)-u(il,i-1))-
h**2*w2(i)*u(il,i)
      print 28, t(i),u(il,i)
   28 format(f8.2,f25.4)
    2 continue
    1 continue
      end
```

Ejemplo:

Sea una oscilación amortiguada de frecuencia angular propia ω_0=100 rad/s, y cuya constante de amortiguamiento γ=7.0 s^{-1}. Sabiendo que la partícula parte de la posición x_0=5 con velocidad inicial nula, v_0=0, escribir la ecuación de la oscilación amortiguada.

La frecuencia angular de la oscilación amortiguada ω es

$$\omega = \sqrt{100^2 - 7^2} = 99.75 \text{ rad/s}$$

$5=A\cdot \text{sen}j$
$0=-7A\cdot \text{sen}j +99.75\cdot A\cdot \cos j$

La ecuación de la oscilación amortiguada es

$x=5.01\cdot \exp(-7t)\cdot \text{sen}(99.75t+1.5)$

Como vemos la amplitud A no es 5 ni la fase inicial φ es $\pi/2$, como en las oscilaciones libres