El oscilador Armónico:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \; ; \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

¿Cómo resolverlo numéricamente? Inspiración: $x(t) = \underbrace{A}\cos(\omega t) + \underbrace{B}\sin(\omega t)$

Constantes con condiciones iniciales

$$f''(t) \simeq \frac{f(t+\delta t) - 2f(t) + f(t-\delta t)}{\delta t^2} \equiv x''(t)$$

$$f'(t) \simeq \frac{f(t+\delta t) - f(t-\delta t)}{2\delta t} \equiv x'(t)$$

$$x(t+\delta t) - 2x(t) + x(t-\delta t) + \omega^2 \delta t^2 x(t) = 0$$

Si $x(t) \equiv \begin{pmatrix} x(0) & x(\delta t) & x(2\delta t) & \dots & x(T) \end{pmatrix}^T$ "Vector Columna" Discretización simétrica.

$\quad\;\; \downarrow \quad\; \downarrow \quad\; \downarrow$

$\quad\;\; x_0 \quad x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_N \; ; \; T = N\delta t$

De la interpretación anterior siendo $t = j\delta t \Rightarrow x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1} + \omega^2\delta t^2 x_j = 0$

Columna $j+1$

$$\begin{pmatrix} 0, 0, \dots 0, 1, -2+\omega^2\delta t^2, 1, 0, \dots, 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{j-2} \\ x_{j-1} \\ x_j \\ x_{j+1} \\ x_{j+2} \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \leftarrow \text{fila } j+1$$

Ahora como es válido para todo j ... Tenemos una matriz

$$\begin{array}{ll} \text{fila } 0 \rightarrow & 1 \begin{pmatrix} -2+\omega^2\delta t^2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2+\omega^2\delta t^2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2+\omega^2\delta t^2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & & & & 1 & -2+\omega^2\delta t^2 \end{pmatrix} 1 \leftarrow \text{fila } N \end{array} \longleftarrow M_{N+1 \times N+1}.$$

finalmente

$$\mathbb{M}\cdot\mathbb{X}=\mathbb{0},$$

cuya solución, si $\mathbb{M}$ es invertible, es cero! ¡No tiene sentido!

Revisando en detalle, la ecuación está equivocada debido a los dos términos "espúreos" el "cero" sería realmente: $(\underline{-x_{-1}}, 0, 0, \ldots, 0, 0, \underline{-x_{N+1}})$

Estos los podemos identificar con las condiciones de frontera: Dirichlet y Neumann

Ejemplo más difícil:

$x(0)=a \longrightarrow x_0=a$

$x'(0)=b \longrightarrow x_1-x_{-1}=2\delta t\, b \Rightarrow x_{-1}=x_1-2b\delta t$

Dado que se satisfaga la "ec. Diferencial discreta" para $j=0$

$x_1-2x_0+x_{-1}+\omega^2\delta t^2 x_0=0$

$\Rightarrow x_{-1}=x_0\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right)-b\delta t$

$x_1=x_0\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right)+b\delta t$

Resumiendo:

$x_0=a$

$x_{-1}=a\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right)-b\delta t$

y... $x_1=a\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right)+b\delta t$ "Sin embargo esto es un desafío..."

La ecuación que tenemos es la siguiente:

$$\mathbb{M}\cdot\mathbb{X}=\begin{pmatrix}-x_{-1}\\0\\0\\\vdots\\0\\0\\-x_{N+1}\end{pmatrix}$$

Sin embargo, sólo tenemos x_{-1} y no tenemos x_{N+1} con lo cual NO podemos resolver el problema. Esta es una de las limitaciones de diferencias finitas. Como tenemos que encontrar x_{N+1} lo conveniente sería conocer la condición de frontera por ejemplo para un tiempo posterior a cero.

Pregunta: ¿Será que tiene otro camino? Respuesta: SI

La respuesta está en la estructura de la "ec. diferencial discretizada"

$$x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1} + \omega^2 \delta t^2 x_j = 0$$ ← Sumamos todas las ec's resultantes para $j=0$ hasta N.

$$\Rightarrow \underbrace{\sum_{j=0}^{N} (x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1})} + \omega^2 \delta t^2 \sum_{j=0}^{N} x_j = 0$$

$$x_{N+1} - x_0 + x_{-1} - x_N + \omega^2 \delta t^2 \sum_{j=0}^{N} x_j = 0$$

De aquí puedo despejar x_{N+1}!

$$\begin{aligned} x_{N+1} &= x_0(1-\omega^2\delta t^2) + x_N(1-\omega^2\delta t^2) - \omega\delta t^2(x_2+x_3+\ldots x \\ &\quad - x_{-1} \\ &= x_0(1-\omega^2\delta t^2) - \omega\delta t^2(x_2+\ldots+x_{N-1}) + x_N(1-\omega^2\delta t^2) \\ &\quad - x_0\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right) + b\delta t \end{aligned}$$

Con lo cual llegamos a nuestra cond. de frontera en el otro extremo dados los puntos anteriores. ¿Cómo queda la ecuación final?

$$\mathbb{M}\mathbb{X} = \begin{pmatrix} ? \\ ? \end{pmatrix}$$ Tenemos dos opciones (o más!)

En general, podemos reescribir

$$\mathbb{M}\mathbb{X} = \mathbb{W} + \mathbb{\Lambda}\mathbb{X} \Rightarrow (\mathbb{M}-\mathbb{\Lambda})\mathbb{X} = \mathbb{W}$$

Resumamos:

$$\begin{aligned} x_0 &= a \\ x_{-1} &= x_0\left(1-\frac{\omega^2\delta t^2}{2}\right) - b\delta t \\ x_{N+1} &= -x_0\frac{\omega^2\delta t^2}{2} - \omega^2\delta t^2(x_2+\ldots+x_{N-1}) + x_N(1-\omega^2\delta t^2) + b\delta t \end{aligned}$$

El juego definiendo x_{-1} y x_{N+1} es como encontramos las condiciones favorables para resolver el problema!

Ver archivo diferenciación.ipynb

Precisión Arbitraria en Derivadas

$$f(t+l\delta t) = f(t)l^0 + \frac{f'(t)}{1!}\delta t\, l^1 + \frac{f''(t)}{2!}\delta t^2 l^2 + \frac{f'''(t)}{2!}\delta t^2 l^3 + \dots + \frac{f^{(n)}(t)}{n!}\delta t^n l^n + \dots$$

Dado $l \in \{l_0, l_1, l_2, \dots\} \equiv \mathcal{L}$ será que

$$¿\sum_{l\in\mathcal{L}} a_l f(t+l\delta t) = \frac{f^{(m)}(t)}{m!}\delta t^m \;?$$ "Tiene un error" $\Rightarrow +O(\delta t^?)$

Si interpretamos la serie como un vector, podríamos estar frente a otro problema Lineal! ¿No les parece que las matrices aparecen por todas partes?

$$f(t+l\delta t) \equiv (l^0, l^1, l^2, \dots)$$ Hay que truncar uno

$$\frac{f^{(m)}(t)}{m!} \equiv (\underbrace{0, 0, \dots, 0}_{m+1\text{'ésimo}}, 1, 0, \dots)$$

¡Ya estamos listos!

$$\overbrace{\begin{pmatrix} l_0^0 & l_1^0 & l_2^0 & \cdots & l_n^0 & \cdots \\ l_0^1 & l_1^1 & l_2^1 & \cdots & l_n^1 & \cdots \\ l_0^2 & l_1^2 & l_2^2 & \cdots & l_n^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ l_0^n & l_1^n & l_2^n & \cdots & l_n^n & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}^{F} \begin{pmatrix} a_{l_0} \equiv a_0 \\ a_{l_1} \equiv a_1 \\ a_{l_2} \equiv a_2 \\ \vdots \\ a_{l_n} \equiv a_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \leftarrow \text{fila } m+1$$

× Al truncar fijo la cota mínima de precisión $O(\delta t^{n+1})$

× ¡Aparecen otra vez esas matrices de Vandermonde!

× ¿l pueden ser cualquier #! ¿Se podrán complejos?

$\Rightarrow$ Solo tengo que escoger un número apropiado de l's

Ejemplo: * $\mathcal{L} = \{-1, 0, 1\}$ ≡ ¡Leapfrog y Verlet! $n = 2$

* $\mathcal{L} = \{0, 1, 2\} \Rightarrow$ Forward Difference $n = 2$

* $\mathcal{L} = \{-2, -1, 0\} \Rightarrow$ Backwards Difference $n = 2$

Ejemplo 1:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{-1} \\ a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix}$$

Invirtiendo

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & +1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow f(x) = f(x)$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & +1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \Rightarrow f'(x)\,\delta x = \frac{f(x+\delta x) - f(x-\delta x)}{2}$$

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & +1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1/2 \\ -1 \\ +1/2 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{f''(x)}{2!}\delta x^2 = \frac{f(x+\delta x) - 2f(x) + f(x-\delta x)}{2}$$

① mínimo δx^3