

Practica 4. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias I: el método de Euler.

Dr. Ramón Carrillo Bastos

Física Computacional

1. Partícula clásica en una caja unidimensional

Considere una partícula atrapada en una caja unidimensional, tal como se muestra en la figura 1. Dicha partícula se mueve libremente sobre el eje x , para $0 < x < L$. La energía potencial bajo la cual se efectúa el movimiento es

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ +\infty & \text{otro caso} \end{cases} \quad (1)$$

de manera que la fuerza dado por

$$F = -\frac{dV}{dx}. \quad (2)$$

será cero dentro de la caja e infinita en las paredes de la caja. Esto, ocasionará que la velocidad de la partícula cambie instantaneamente de signo cada que colisione con una pared. A $t = t_0$, la partícula se encuentra caracterizada por la posición inicial $x = x_0$ y por la velocidad inicial v_0 . Estas, constituyen las condiciones iniciales del problema.

1. Contruya un programa que permita calcular la posición de la partícula y su velocidad usando el método de Euler, considerando los cambios en el signo de la velocidad debido a las colisiones con las paredes. obtenga resultados para $L = 10$ m, $x_0 = 0$ m, $v_0 = 2$ m/s, $t_0 = 0$ s, $t_f = 20$ s y $\delta t = 0.001$ s. Grafique la posición, $x(t)$, y la velocidad, $v(t)$, como función del tiempo.
2. Discuta e interprete los resultados obtenidos.
3. Calcule $x(t)$ y $v(t)$ utilizando otros parámetros.

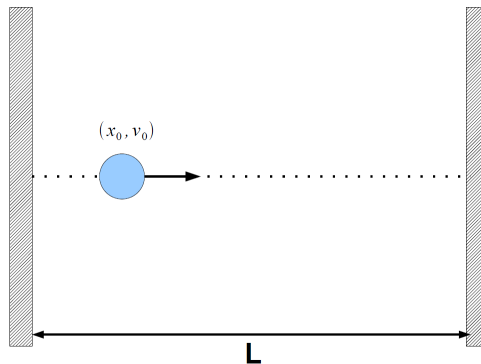


Figura 1: Partícula en caja unidimensional.

2. Partícula en una caja Bidimensional

Una partícula es confinada a moverse sobre un plano cuya área se encuentra definida por los lados $0 < x < L_x$ y $0 < y < L_y$ (ver figura 2). Cuando la partícula choca con las fronteras, rebota elásticamente. Las colisiones de la partícula con las paredes de la caja se modelarán a través de la reflexión de la componente de velocidad normal a la superficie con la que interacciona. La partícula comienza su movimiento a t_0 en $(x_0; y_0)$, a través de un programa computacional basado en el método de Euler, calcule se la trayectoria hasta un tiempo t_f , en donde es necesario tomar un paso de tiempo δt .

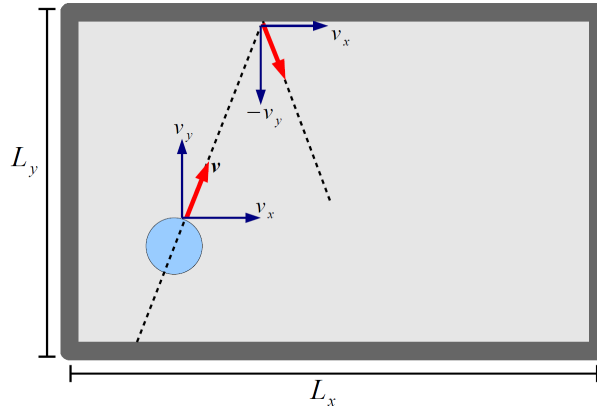


Figura 2: Partícula en caja bidimensional.

1. Modificar el programa de la partícula en 1D para el caso en 2D.
2. Calcular las posiciones $x(t)$, $y(t)$ y las velocidades $v_x(t)$ y $v_y(t)$.
3. Introducir un contador que registre las colisiones en la dirección x y otro para la dirección y .
4. Graficar cada cantidad.
5. Obtener la trayectoria de la partícula, es decir, graficar $x(t)$ Vs $y(t)$.
6. Dibujar el espacio fase.
7. Discutir los resultados.

3. Caja con Campo eléctrico.

1. Caja unidimensional. Considere que la partícula tiene carga q y que existe un campo eléctrico constante descrito por el potencial $V = qE_0x$.
 - a) Reproduzca los resultados de la sección 1 para este caso.
 - b) Presente otras gráficas que considere pertinentes.
 - c) Discute y analice sus resultados.
2. Caja bidimensional. considere que la partícula tiene carga q y que existe un campo eléctrico constante descrito por el potencial $V = qE_0^x x + qE_0^y y$.
 - a) Reproduzca los resultados de la sección 1 para este caso.
 - b) Presente otras gráficas que considere pertinentes.
 - c) Discute y analice sus resultados.

Teoría

La derivada adelantada

Para solucionar ecuaciones del tipo

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = g(\alpha). \quad (3)$$

Es necesario evaluar numéricamente la derivada. La definición formal de derivada es

$$f'(\alpha) \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\alpha + h) - f(\alpha)}{h}. \quad (4)$$

donde h es el incremento o paso en la variable α . Usando el desarrollo en serie de Taylor, escribimos

$$f(\alpha + h) = f(\alpha) + hf'(\alpha) + \frac{h^2}{2}f''(\alpha) + \dots \quad (5)$$

Una manera alternativa, equivalente a la serie de Taylor y que se usa en análisis numérico es

$$f(\alpha + h) = f(\alpha) + hf'(\alpha) + \frac{h^2}{2}f''(\tau) \quad (6)$$

donde τ es algún valor entre α y $\alpha + h$. En esta última expresión no hemos despreciado ningún término (aún). El teorema garantiza que existe τ sin embargo no sabemos cuál es. Despejamos f' de la ecuación anterior para obtener

$$f'(\alpha) = \frac{f(\alpha + h) - f(\alpha)}{h} - \frac{h}{2}f''(\tau). \quad (7)$$

Con $\alpha \leq \tau \leq \alpha + h$. Esta ecuación se conoce como la derivada adelantada (*forward derivative*). El último término de la derecha es el error de truncamiento introducido por el truncamiento en la serie de Taylor. Usualmente se escribe

$$f'(\alpha) = \frac{f(\alpha + h) - f(\alpha)}{h} - O(h). \quad (8)$$

Método de Euler

Suponga se tiene una ecuación diferencial de la forma

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = g(\alpha). \quad (9)$$

El método de Euler consiste en aproximar, usando la derivada adelantada, la función para un paso posterior:

$$f(\alpha + h) = f(\alpha) + hg(\alpha) + O(h^2). \quad (10)$$