

Física computacional 2021 - Instituto Balseiro

Trabajo práctico 1

Diferencias finitas - EDO

Entregar los problemas señalados con un cuadradito negro.

Il Suponga que, como efecto colateral de la vacuna anticovid, se ha olvidado la derivada del $\sin(x)$. Calcúlela en $x = \pi/6$, usando las fórmulas de diferencias finitas a o(h) (adelantada), $o(h^2)$ (centrada) y $o(h^4)$ (también centrada). Grafique el error

 $\epsilon = \left| \frac{d\sin(x)}{dx} - \cos(x) \right|$

en función de h. Hágalo en precisión simple y doble, y señale la diferencia entre los errores de redondeo y de truncamiento. (Conviene graficar en loglog.)

2 Usando el método de Euler, integre las ecuaciones de movimiento del oscilador armónico:

 $\frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -x.$

Elija la condición inicial x(0) = 1, p(0) = 1 y resuelva hasta un tiempo fijo t = 31, empleando distintos pasos de tiempo h. Grafique la trayectoria en el espacio de fases, y compárela con la trayectoria analítica. Calcule la energía mecánica de la solución numérica en función del paso de tiempo, y compárela con la verdadera.

3 Considere el siguiente modelo de un sistema de reacciones químicas:

$$\frac{dx}{dt} = a - (b+1)x + x^2y,\tag{1}$$

$$\frac{dy}{dt} = bx - x^2y,\tag{2}$$

donde x e y son las concentraciones, y a y b son parámetros. Resuelva numéricamente el sistema con un método RK4, y grafique las trayectorias en el espacio de fases (x,y). Considere los siguientes casos.

- a) Para a=b=1, y usando pasos $h=0.1,\ 0.2,\ 0.5$ y 1.0, muestre numéricamente que las soluciones numéricas convergen al equilibrio, incluso para los pasos grandes.
- b) Para $a=1,\,b=3$, muestre (numéricamente) que el equilibrio es inestable y que las trayectorias tienden a un ciclo límite. Pruebe distintas condiciones iniciales (tanto dentro del ciclo y cerca del punto fijo, como fuera de él). Use pasos h=0.1 y mayores, con cuidado. Verifique

1/2 Instituto Balseiro

que a partir de cierto valor de h las soluciones numéricas divergen. Los sistemas no lineales son la peste.

Modifique el programa del problema anterior para que use un paso adaptativo. Es decir, sea y_1 la solución usando paso h e y_2 usando h/2. Considere su diferencia:

$$\Delta = |y_2 - y_1|,$$

y una tolerancia $\epsilon=10^{-5}$. Programe la siguiente estrategia para ajustar el paso h:

- a) Si $\Delta < \epsilon/2$: acepto y_2 y multiplico el paso por 1.5.
- b) Si $\epsilon/2 < \Delta < \epsilon$: acepto y_2 y mantengo el paso.
- c) Si $\epsilon < \Delta$: rechazo y_2 , divido el paso por 1.5 y vuelvo a calcular.

Para $a=1,\,b=3$, grafique las soluciones numéricas x(t) e y(t) y la trayectoria en el espacio de fases, señalando cómo se adapta el paso en los regímenes de variación rápida del oscilador.

Contando la cantidad de pasos en un ciclo, estime la ventaja del algoritmo con respecto a un RK4 de paso fijo con la misma precisión (necesitará un $h \approx 0.01$).

Considere una tolerancia distinta ($\epsilon = 10^{-2}$, ponele) y discuta las diferencias.

Si tiene ganas, considere también otros valores del factor de multiplicación del paso (en muchos libros recomiendan el valor 2 en lugar de 1.5, por ejemplo). ¿Qué ocurre con la discretización del tiempo?

Instituto Balseiro 2/2