

Métodos Computacionales

Problemas con Valores en la Frontera

Agosto 28, 2024

S. Alexis Paz



Departamento de
QUÍMICA TEÓRICA
Y COMPUTACIONAL
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba



hecho con ideogram

Problema con Valores Iniciales (PVI)

$$\frac{d^n y(x)}{dx^n} = F\left(x, y, \dots, \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right) ;$$



$$\frac{dy(x)}{dx} = \mathbf{F}(x, y) ; \quad y(a) = \boldsymbol{\alpha}$$

Condiciones de Cauchy

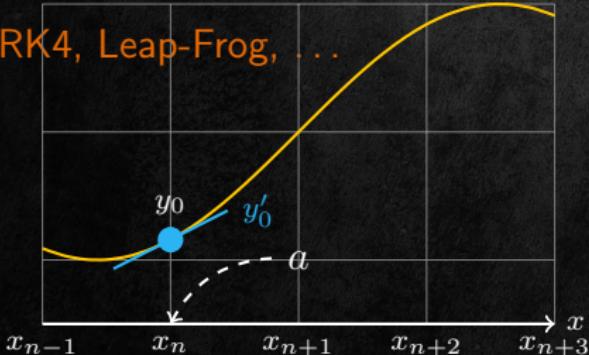
$$y(a) = \alpha_0$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_a = \alpha_1$$

⋮

$$\left. \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} \right|_a = \alpha_{n-1}$$

Euler, RK4, Leap-Frog, ...



Teorema de existencia
y unicidad

Problema con Valores Iniciales (PVI)

$$\frac{d^n y(x)}{dx^n} = F\left(x, y, \dots, \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right) ;$$



$$\frac{dy(x)}{dx} = \mathbf{F}(x, y) ; \quad y(a) = \boldsymbol{\alpha}$$

Condiciones de Cauchy

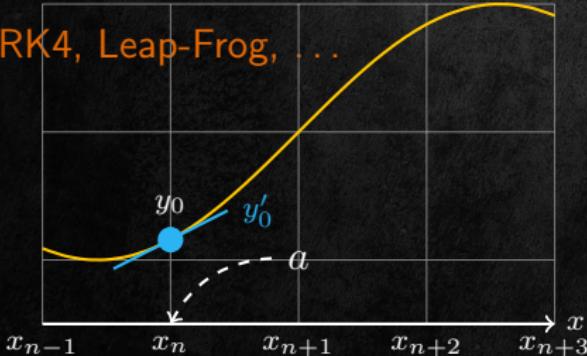
$$y(a) = \alpha_0$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_a = \alpha_1$$

⋮

$$\left. \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}} \right|_a = \alpha_{n-1}$$

Euler, RK4, Leap-Frog, ...



Teorema de existencia
y unicidad

Problema con Valores en la Frontera (PVF)

$$y''(x) = F(x, y, y') \quad ; \quad a \leq x \leq b$$

Dirichlet $y(a) = \alpha$ $y(b) = \beta$

Neumann $\frac{dy}{dx} \Big|_a = \alpha$ $\frac{dy}{dx} \Big|_b = \beta$

Mixta $y(a) = \alpha$ $\frac{dy}{dx} \Big|_b = \beta$

Robin $c_0 y(a) + c_1 \frac{dy}{dx} \Big|_a = \alpha$ $c_2 y(b) + c_3 \frac{dy}{dx} \Big|_b = \beta$

La existencia y unicidad
no son triviales.

Problema con Valores en la Frontera (PVF)

$$y''(x) = F(x, y, y') \quad ; \quad a \leq x \leq b$$

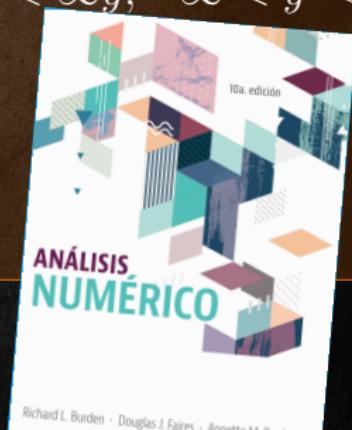
Dirichlet

$$y(a) = \alpha$$

$$y(b) = \beta$$

Teorema de existencia y unicidad

- F continua en $D = \{(x, y, y') | a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty, -\infty < y' < \infty\}$
- $\frac{\partial F}{\partial y}(x, y, y') > 0$
- $\left| \frac{\partial F}{\partial y'}(x, y, y') \right| \leq M$





Unidos hace nos más

ARBA

PVI

Condiciones
Iniciales







Ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$



Ecuación del calor

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$



Ecuación elástica

$$\frac{d^2 v(x)}{dx^2} = \frac{M(x)}{EI}$$



dominio público

EDO 2^{do} orden, lineal

$$a(x) \frac{d^2y}{dx^2} + b(x) \frac{dy}{dx} + c(x)y = f(x) \quad y(x_0) = a, \quad y(x_N) = b$$

Usando **diferencias finitas**, con reglas de 3 puntos:

$$y_{n-1} \left(\frac{a_n}{h^2} - \frac{b_n}{2h} \right) + y_n \left(c_n - \frac{2a_n}{h^2} \right) + y_{n+1} \left(\frac{a_n}{h^2} + \frac{b_n}{2h} \right) + O(h^2) = f_n$$

1. Discretizar las Condiciones de Frontera (C. F.)

$$c_0y_0 + c_1 \left. \frac{dy}{dx} \right|_0 = a \quad c_2y_N + c_3 \left. \frac{dy}{dx} \right|_N = b$$

$$c_0y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h} \right) = a \quad c_2y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h} \right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0c'_1 \quad y_{N+1} = b' + y_Nc'_2$$

2. Expresar Sistema de Ecuaciones

$$\begin{array}{lllll} n = 0 & y_{-1}A_0 & + y_0B_0 & + y_1A_0 & = f_0 \\ n = k & y_{k-1}A_k & + y_kB_k & + y_{k+1}A_k & = f_k \\ n = N & y_{N-1}A_N & + y_NB_N & + y_{N+1}A_N & = f_N \end{array}$$

1. Discretizar las Condiciones de Frontera (C. F.)

$$c_0y_0 + c_1 \left. \frac{dy}{dx} \right|_0 = a \quad c_2y_N + c_3 \left. \frac{dy}{dx} \right|_N = b$$

$$c_0y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h} \right) = a \quad c_2y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h} \right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0c'_1 \quad y_{N+1} = b' + y_Nc'_2$$

2. Expresar Sistema de Ecuaciones

$$\begin{array}{lllll} n=0 & & + y_0 B'_0 & + y_1 A_0 & = f'_0 \\ n=k & y_{k-1} A_k & + y_k B_k & + y_{k+1} A_k & = f_k \\ n=N & y_{N-1} A_N & + y_N B'_N & + & = f'_N \end{array}$$

1. Discretizar las Condiciones de Frontera (C. F.)

$$c_0y_0 + c_1 \left. \frac{dy}{dx} \right|_0 = a \quad c_2y_N + c_3 \left. \frac{dy}{dx} \right|_N = b$$

$$c_0y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h} \right) = a \quad c_2y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h} \right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0c'_1 \quad y_{N+1} = b' + y_Nc'_2$$

2. Expresar Sistema de Ecuaciones

$$\begin{pmatrix} B'_0 & A_0 & & & \\ A_0 & B_1 & A_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{N-1} & B_N & A_N \\ & & & A_N & B'_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f'_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ f'_N \end{pmatrix}$$

EDO 2^{do} orden, lineal, $b(x) = 0$

$$\frac{d^2y}{dx^2} + P(x)y = R(x) \quad P(x) = \frac{c(x)}{a(x)}, \quad R(x) = \frac{f(x)}{a(x)}$$

Numerov

$$\begin{aligned} & y_{n+1} \left(1 + \frac{h^2}{12} P_{n+1} \right) - 2y_n \left(1 - \frac{5h^2}{12} P_n \right) + y_{n-1} \left(1 + \frac{h^2}{12} P_{n-1} \right) \\ &= \frac{h^2}{12} (R_{n+1} + 10R_n + R_{n-1}) + O(h^6) \end{aligned}$$

El método del disparo

Considerando el PVF:

EDO 2^{do}, Dirichlet

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = F\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) \quad ; \quad a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \alpha, y(b) = \beta$$

Resolver una **sucesión** $k = 1, 2, \dots$ de PVI's de la forma:

$$\frac{d^2y_{t_k}(x)}{dx^2} = F\left(x, y_{t_k}, \frac{dy_{t_k}}{dx}\right) \quad ; \quad a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \alpha, \frac{dy_{t_k}}{dx}\Big|_a = t_k$$

Donde t_k es un parámetro introducido para producir variaciones en $\frac{dy_{t_k}}{dx}\Big|_a$ hasta que $y_{t_k}(b) = \beta$

El método del disparo

Considerando el PVF:

EDO 2^{do}, Dirichlet

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = F\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) ; \quad a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \alpha, y(b) = \beta$$

Resolver una **sucesión** $k = 1, 2, \dots$ de PVI's de la forma:

$$\frac{d^2y_{t_k}(x)}{dx^2} = F\left(x, y_{t_k}, \frac{dy_{t_k}}{dx}\right) ; \quad a \leq x \leq b$$

$$y(a) = \alpha, \frac{dy_{t_k}}{dx}\Big|_a = t_k$$

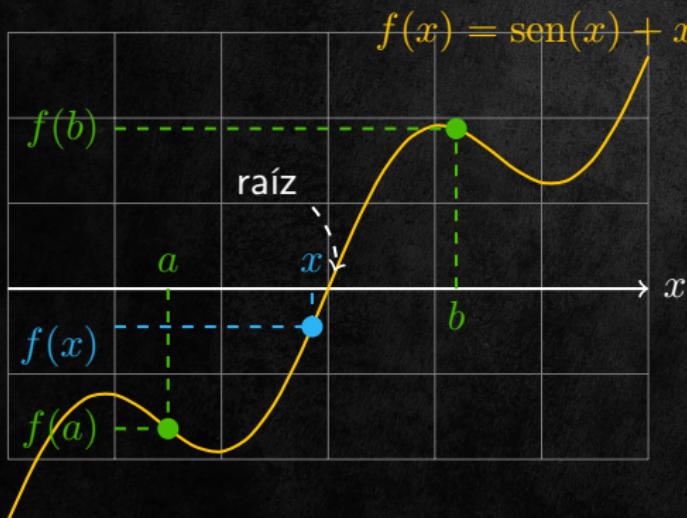
Donde t_k es un parámetro introducido para producir

variaciones en $\frac{dy_{t_k}}{dx}\Big|_a$ hasta que $y_{t_k}(b) = \beta$

Raíces de
 $D(t) = y_t(b) - \beta$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T .
2. Calcula $x \leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x .
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \leftarrow x$, sino $a \leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



```
import numpy as np

f = lambda x : np.sin(x)+x

a=-1.5; b=1.2; et=0.4
x=(a+b)/2

while b-a>et:
    if f(a)*f(x)<=0:
        b=x
    else:
        a=x
    x=(a+b)/2

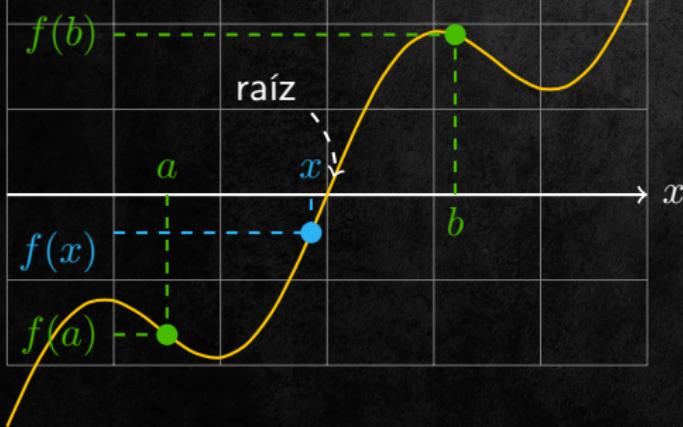
print(x)
```

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T .
2. Calcula $x \leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x .
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \leftarrow x$, sino $a \leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.

$$D(t) = y_t(b) - \beta$$

$$f(x) = \operatorname{sen}(x) + x$$



```
import numpy as np
f = D(t)
a=-1.5; b=1.2; et=0.4
x=(a+b)/2

while b-a>et:
    if f(a)*f(x)<=0:
        b=x
    else:
        a=x
    x=(a+b)/2

print(x)
```

Dado el PVF con $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$,

Definición de disparo

integrar el PVI equivalente con $\frac{dy}{dx}\Big|_a = t$ usando Euler, RK4, Nume-rov, o cualquier otro algoritmo hasta obtener $y_t(b)$

El método del disparo con bisección

1. Disparo con t_i y calculo $D(t_i) = y_{t_i}(b) - \beta$.

Si $|D(t_i)| < \epsilon_T$, $y_{t_i} \sim$ solución del PVF.

2. Disparo con t_d y calculo $D(t_d) = y_{t_d}(b) - \beta$.

Si $|D(t_d)| < \epsilon_T$, $y_{t_d} \sim$ solución del PVF.

3. Si $D(t_i)D(t_d) > 0$, variar t_d y volver al paso 2. $k \Leftarrow 0$.

4. $k \Leftarrow k + 1$. Disparo con $t_k = \frac{t_i + t_d}{2}$ y calculo $D(t_k) = y_{t_k}(b) - \beta$.

Si $|D(t_k)| < \epsilon_T$, $y_{t_k} \sim$ solución del PVF.

5. Si $D(t_k)D(t_i) \leq 0$ entonces $t_d \Leftarrow t_k$, sino $t_i \Leftarrow t_k$.

6. Volver al paso 4.

Dado el PVF con $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$,

Definición de disparo

integrar el PVI equivalente con $\frac{dy}{dx} \Big|_a = t$ usando Euler, RK4, Nume-rov, o cualquier otro algoritmo hasta obtener $y_t(b)$

El método del disparo con bisección

1. Disparo con t_i y calculo $D(t_i) = y_{t_i}(b) - \beta$.

Si $|D(t_i)| < \epsilon_T$, $y_{t_i} \sim$ solución del PVF.

2. Disparo con t_d y calculo $D(t_d) = y_{t_d}(b) - \beta$.

Si $|D(t_d)| < \epsilon_T$, $y_{t_d} \sim$ solución del PVF.

3. Si $D(t_i)D(t_d) > 0$, variar t_d y volver al paso 2. $k \leftarrow 0$.

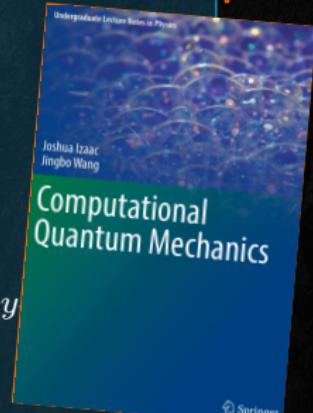
4. $k \leftarrow k + 1$. Disparo con $t_k = \frac{t_i + t_d}{2}$ y calculo $D(t_k) = y$

Si $|D(t_k)| < \epsilon_T$, $y_{t_k} \sim$ solución del PVF.

5. Si $D(t_k)D(t_i) \leq 0$ entonces $t_d \leftarrow t_k$, sino $t_i \leftarrow t_k$.

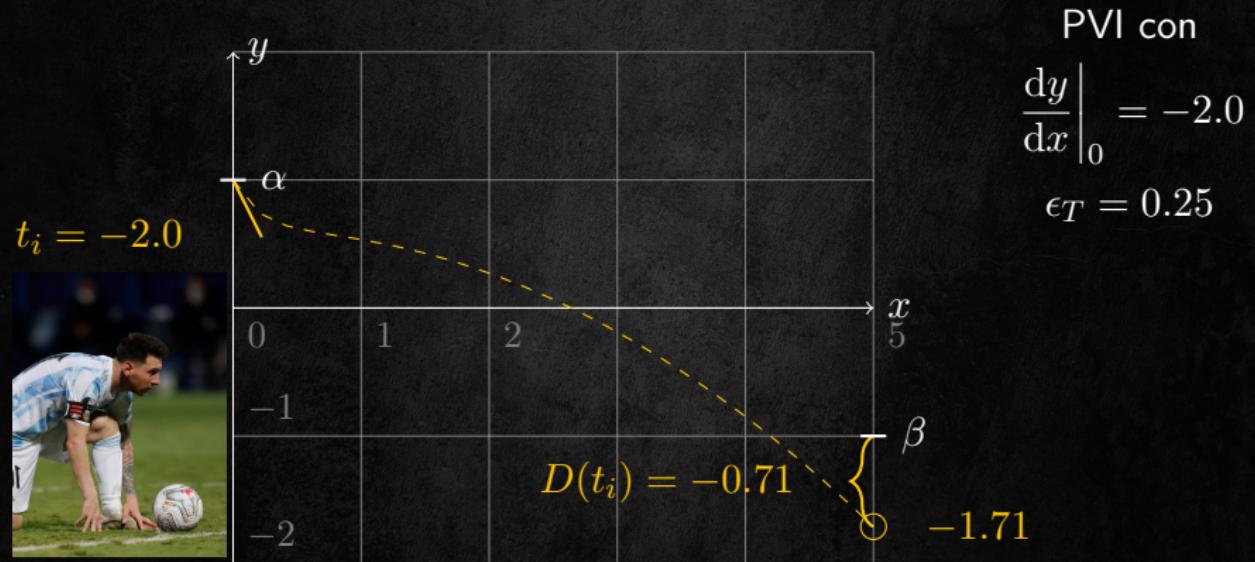
6. Volver al paso 4.

Newton-Raphson



Ejemplo

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$

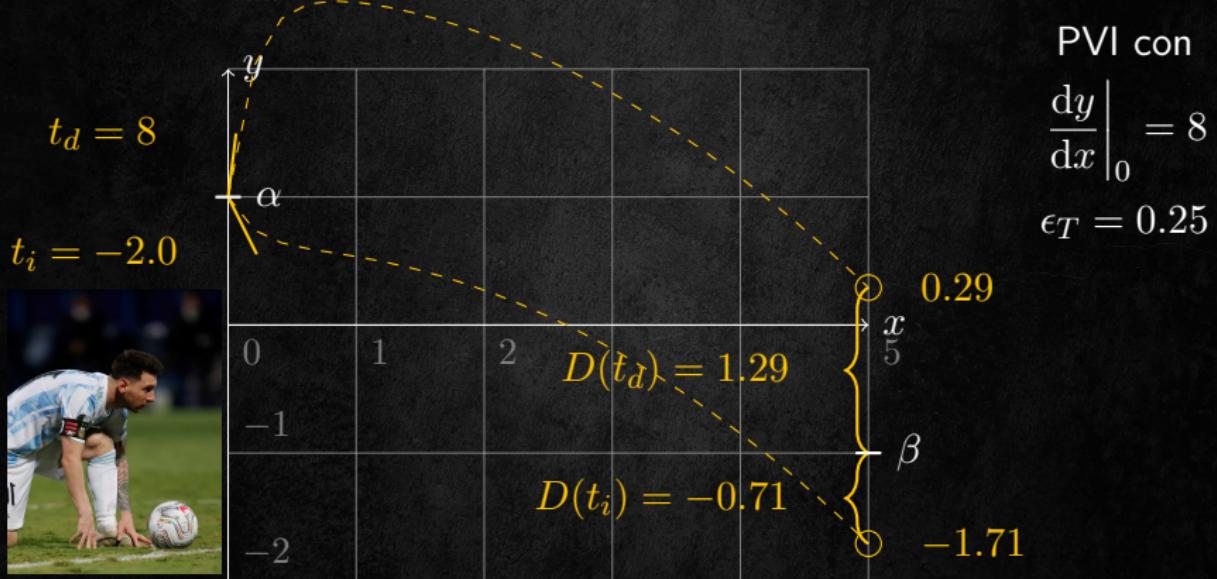


1. Disparo con t_i y calculo $D(t_i) = y_{t_i}(b) - \beta$.

Si $|D(t_i)| < \epsilon_T$, $y_{t_i} \sim$ solución del PVF.

Ejemplo

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$

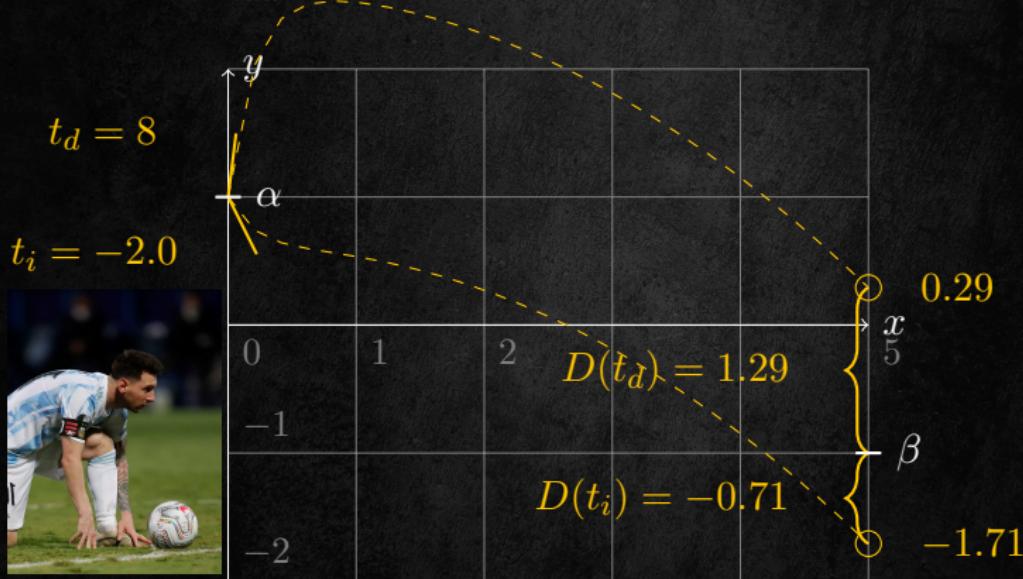


2. Disparo con t_d y calculo $D(t_d) = y_{t_d}(b) - \beta$.

Si $|D(t_d)| < \epsilon_T$, $y_{t_d} \sim$ solución del PVF.

Ejemplo

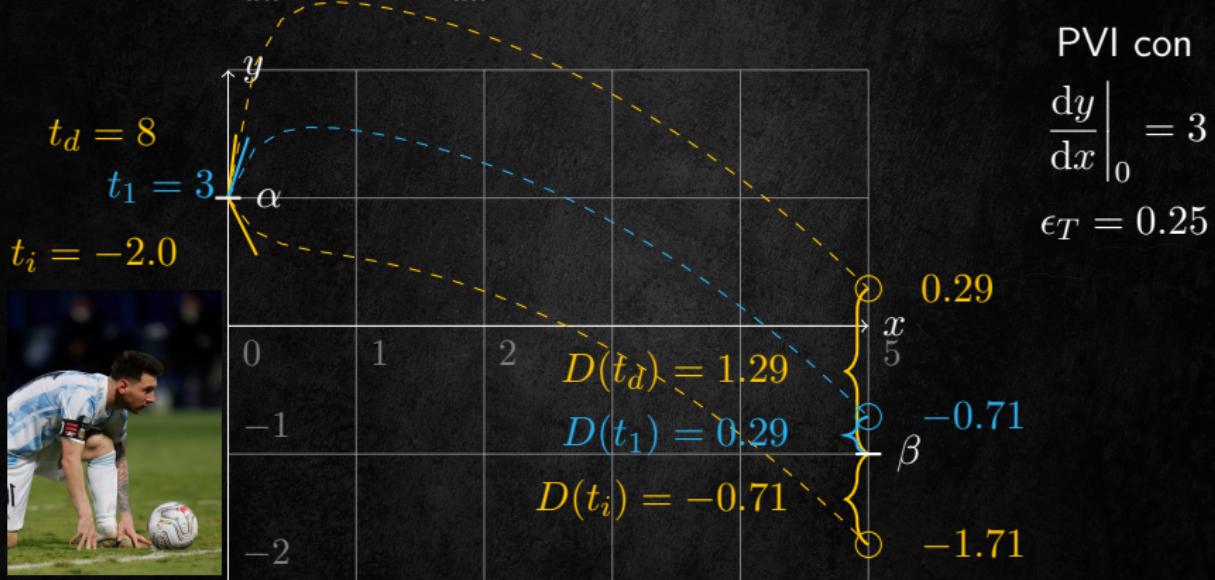
$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$



3. Si $D(t_i)D(t_d) > 0$, variar t_d y volver al paso 2. $k \leftarrow 0$.

Ejemplo

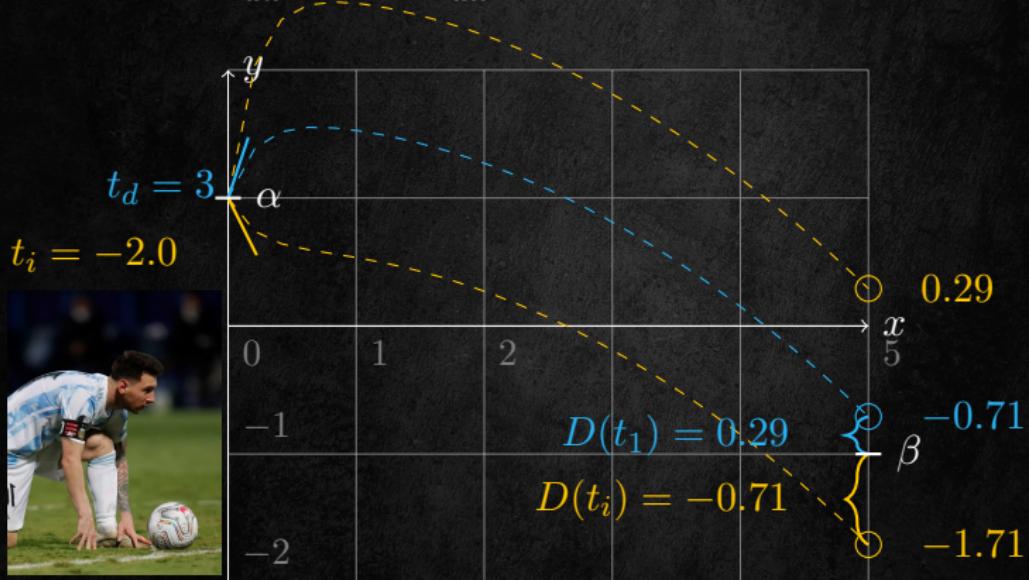
$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$



4. $k \Leftarrow k + 1$. Disparo con $t_k = \frac{t_i + t_d}{2}$ y calculo $D(t_k) = y_{t_k}(b) - \beta$.
 Si $|D(t_k)| < \epsilon_T$, $y_{t_k} \sim$ solución del PVF.

Ejemplo

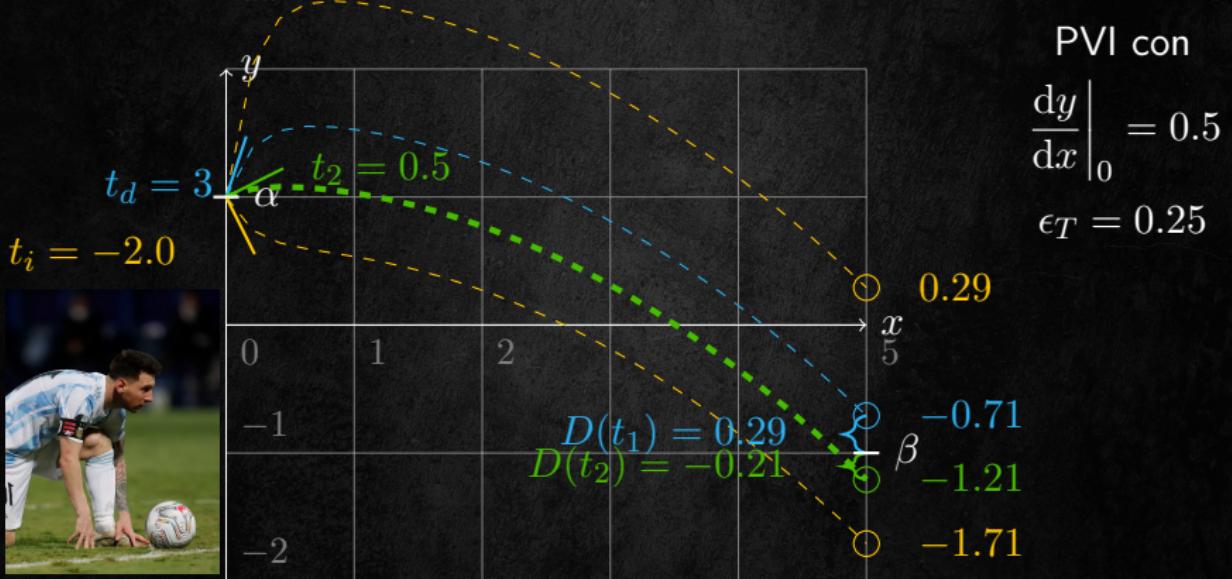
$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$



5. Si $D(t_k)D(t_i) \leq 0$ entonces $t_d \Leftarrow t_k$, sino $t_i \Leftarrow t_k$.
6. Volver al paso 4.

Ejemplo

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = -5 \frac{dy}{dx} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$



4. $k \leftarrow k + 1$. Disparo con $t_k = \frac{t_i + t_d}{2}$ y calculo $D(t_k) = y_{t_k}(b) - \beta$.
 Si $|D(t_k)| < \epsilon_T$, $y_{t_k} \sim$ solución del PVF.

Mecánica Cuántica

Postulado 1

Todo estado cuántico está representado por un vector normalizado perteneciente a un espacio de Hilbert complejo y separable \mathcal{H} .

Postulado 2

Los observables de un sistema están representados por operadores lineales hermíticos.

Postulado 3

Cuando un sistema está en el estado normalizado $|\psi\rangle$, la medida de un observable dará como resultado el valor propio a , con una probabilidad $P_{A|\psi\rangle} = |\langle a|\psi\rangle|^2$, donde $|a\rangle$ es el vector propio correspondiente a a .

Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t).$$

Hamiltoniano independiente del tiempo

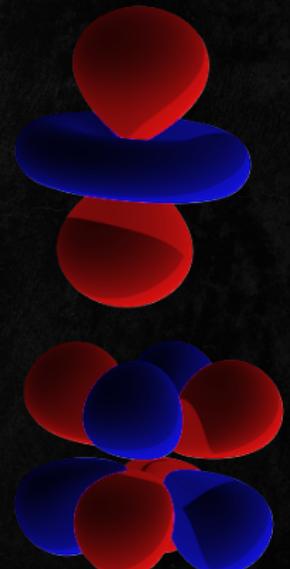
Asumiendo $\Psi(x, t) = \psi(x)f(t)$

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{-\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = E$$

↗ ↘

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$



Adaptado de Vmaiimir, CC SA 4.0

Problema de autovalores

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad \text{Lineal, Homogénea.}$$

¿Partícula en caja
de ancho L ?

$$\boxed{V(x) = 0}$$

$$\phi(0) = 0 \qquad \qquad \phi(L) = 0$$

¿Resolvamos el PVI con $\psi'_t(0) = t$?

¡Un momento! $c\psi(x)$ es también solución.

\Rightarrow existe c_t tal que $\psi'_t(0) = t = c_t\psi'(0)$ y $\psi_t(x) = c_t\psi(x)$.

Además $\psi'_t(L) = c_t\psi(L) = 0$ y $c_t \neq 0\dots$

Cualquier disparo resuelve el PVF.

Problema de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad \text{Lineal, Homogénea.}$$

Partícula confinada
cualquier $V(x)$

A diagram showing a rectangular potential barrier $V(x)$ with height indicated by two vertical arrows. The left boundary condition $\phi(0) = 0$ is shown with an arrow pointing up from the x-axis. The right boundary condition $\phi(L) = 0$ is also shown with an arrow pointing up from the x-axis.

$$V(x) =$$
$$\phi(0) = 0 \qquad \phi(L) = 0$$

¿Resolvamos el PVI con $\psi'_t(0) = t$?

¡Un momento! $c\psi(x)$ es también solución.

\Rightarrow existe c_t tal que $\psi'_t(0) = t = c_t\psi'(0)$ y $\psi_t(x) = c_t\psi(x)$.

Además $\psi'_t(L) = c_t\psi(L) = 0$ y $c_t \neq 0\dots$

Cualquier disparo resuelve el PVF.

Problema de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad \text{Lineal, Homogénea.}$$

Partícula confinada
cualquier $V(x)$

A diagram showing a rectangular potential barrier $V(x)$. The left boundary is at $x=0$ and the right boundary is at $x=L$. The potential $V(x)$ is represented by a blue circle containing a checkmark, indicating it is non-zero between $x=0$ and $x=L$. Arrows point upwards from the boundaries at $x=0$ and $x=L$, with the text $\phi(0) = 0$ and $\phi(L) = 0$ respectively.

¡Obvio! es numérico

*¡Nos interesa
conocer E!*

Problema de autovalores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad \text{Lineal, Homogénea.}$$

Partícula confinada
cualquier $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$
$$\phi(0) = 0 \quad \phi(L) = 0$$

¡Obvio! es numérico

Cada disparo tiene el mismo $\psi'_t(x) = c$ pero $E = t_k$

Luego podemos normalizar ψ_t para aproximar la función de onda.

Dinámica Cuántica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \mathbf{H}\Psi(x, t).$$

Nos visita
un/una especialista

¿Es parcial? Naaa... EDO1 (en t), y con $\Psi(x, 0)$ un PVI

Opción 1: Euler, RK4, Leap-Frog...

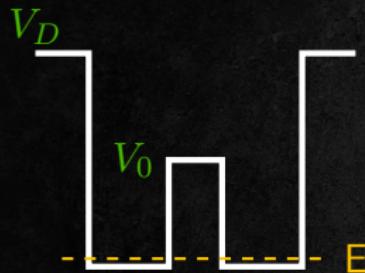
Opción 2: $\Psi(x, t) = e^{-i\mathbf{H}t/\hbar} \Psi(x, 0)$ (propagador)

Elegir una base para \mathbf{H} y diagonalizar.

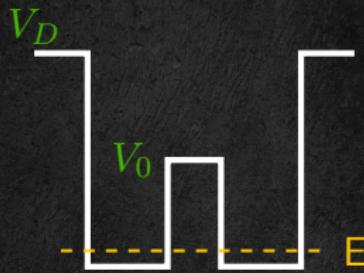
Opción 3: Aproximo por diferencias finitas (Crank-Nicolson).

Opción 4: $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x) \Rightarrow \Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

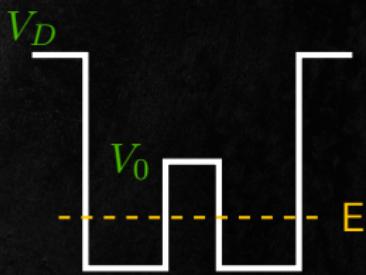
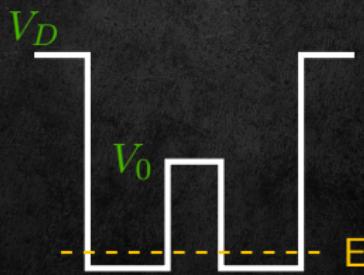
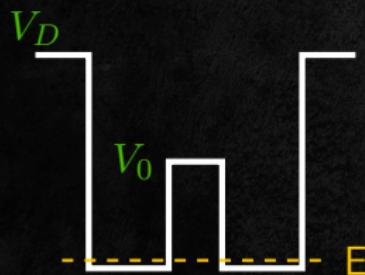
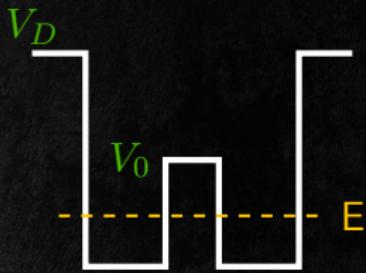
$n = 1$



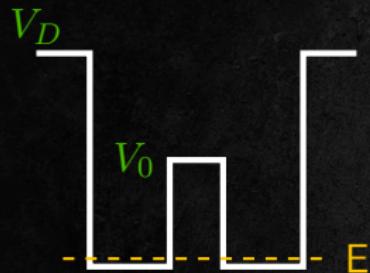
$n = 2$



$n = 8$



$$n = 1$$



Shcrödinger:

$$i\hbar \frac{d\Psi(x,t)}{dt} = -H(x)\Psi(x,t)$$

Solucion general:

$$\Psi(x,t) := \sum_i^2 c_i \psi_i(x) e^{-iE_i t/\hbar}$$

