Métodos Computacionales

Condición de frontera

Agosto 30, 2023

S. Alexis Paz

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

Condiciones iniciales (orden k)

Cauchy: $y(x_0) = a_0\,, \ \dfrac{\mathrm{d}y(x_0)}{\mathrm{d}x} = a_1\,, \ \ldots\,, \ \dfrac{\mathrm{d}^k y(x_0)}{\mathrm{d}x^k} = a_k$

. . . o en notacion vectorial $\mathbf{y}(x_0) = \mathbf{a}$

Teorema de existencia
y unicidad

Condiciones de frontera (e.g. 2^{do} orden)

Dirichlet: $y(x_0) = a \ , \ y(x_N) = b$

~~Existencia y unicidad~~

Neumann: $\left.\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x_0} = a\,, \ \left.\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x_N} = b$

Robin: $c_0 y(x_0) + c_1 \left.\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x_0} = a\,, \ c_2 y(x_N) + c_3 \left.\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x_N} = a$

EDO 2$^{\text{do}}$ orden

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = F\left(x, y(x), \frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right)$$

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

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

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

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

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = Ef(t) \;\Rightarrow\; f(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

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

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

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) f_n(t) \quad c_n \in \mathbb{C}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f_n(t)}{\mathrm{d}t} = E_n f_n(t) \;\Rightarrow\; f_n(t) = e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

EDO 2$^{\text{do}}$ orden, lineal

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

Diferenciacion Finita

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

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

$$c_0 y_0 + c_1 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = a \qquad c_2 y_N + c_3 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_N = b$$

$$c_0 y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h}\right) = a \qquad c_2 y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h}\right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0 c_1' \qquad y_{N+1} = b' + y_N c_2'$$

2. Expresar Sistema de Ecuaciones

$$\begin{array}{lllll}
n = 0 & y_{-1} A_0 & + y_0 B_0 & + y_1 A_0 & = f_0 \\
n = k & y_{k-1} A_k & + y_k B_k & + y_{k+1} A_k & = f_k \\
n = N & y_{N-1} A_N & + y_N B_N & + y_{N+1} A_N & = f_N
\end{array}$$

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

$$c_0 y_0 + c_1 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = a \qquad\qquad c_2 y_N + c_3 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_N = b$$

$$c_0 y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h}\right) = a \qquad\qquad c_2 y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h}\right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0 c_1' \qquad\qquad y_{N+1} = b' + y_N c_2'$$

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.)

$$c_0 y_0 + c_1 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = a \qquad\qquad c_2 y_N + c_3 \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_N = b$$

$$c_0 y_0 + c_1 \left(\frac{y_0 - y_{-1}}{h}\right) = a \qquad\qquad c_2 y_N + c_3 \left(\frac{y_{N+1} - y_N}{h}\right) = b$$

$$y_{-1} = a' + y_0 c_1' \qquad\qquad y_{N+1} = b' + y_N c_2'$$

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, $b(x) = 0$

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

Numerov

$$y_{n+1}\left(1 + \frac{h^2}{12}P_{n+1}\right) - 2y_n\left(1 - \frac{5h^2}{12}P_n\right) + y_{n-1}\left(1 + \frac{h^2}{12}P_{n-1}\right)$$

$$= \frac{h^2}{12}(R_{n+1} + 10R_n + R_{n-1})$$

PROBLEMA DE AUTOVALORES

$\uparrow$

EDO 2[do] orden, lineal, $b(x) = 0$, $f(x) = 0$ con C. F.

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} + P(x)y = 0 \qquad \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} + P_E(x)y = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} + P(x)y = Ey \qquad \Uparrow$$

$$\Rightarrow \mathbf{H}y = Ey \qquad \Rightarrow ¿E?$$

Numerov

$$y_{n+1}\left(1 + \frac{h^2}{12}P_{E,n+1}\right) - 2y_n\left(1 - \frac{5h^2}{12}P_{E,n}\right) + y_{n-1}\left(1 + \frac{h^2}{12}P_{E,n-1}\right) = 0$$

EDO 2$^{\text{do}}$ orden (e.g. Dirichlet)

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = F\left(x, y(x), \frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right) \qquad y(x_0) = a,\ y(x_n) = b$$

El método del disparo

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_\alpha(x)}{\mathrm{d}x^2} = F\left(x, u_\alpha(x), \frac{\mathrm{d}u_\alpha(x)}{\mathrm{d}x}\right) \qquad u_\alpha(x_0) = a,\ \frac{\mathrm{d}u_\alpha(x_0)}{\mathrm{d}x} = \alpha$$

$$g(\alpha) = u_\alpha(x_N) - b = 0$$

El método del disparo con bisección

1. Elige α_0
2. Resuelve $\frac{\mathrm{d}^2 u_{\alpha_0}(x)}{\mathrm{d}x^2} = F\left(x, u_{\alpha_0}(x), \frac{\mathrm{d}u_{\alpha_0}(x)}{\mathrm{d}x}\right)$ con $x_0 = a$ y $\frac{\mathrm{d}u_{\alpha_0}(x_0)}{\mathrm{d}x} = \alpha_0$ hasta x_N. Puede usarse Euler, RK4, Numerov, etc.
3. Calcula $g(\alpha_0) = u_{\alpha_0}(x_N) - b$
4. Elige α_1, resuelve y calcula $g(\alpha_1)$
5. Actualiza α_1 hasta que $g(\alpha_1)g(\alpha_0) < 0$
6. Realiza biseccion en el intervalo $[\alpha_0, \alpha_1]$ hasta encontrar $g(\alpha) = 0$

El método del disparo con bisección - AUTOVALORES

1. Elige E_0 y... α_0 (no importa: EDO invariante con $cu(x)$ $\forall c$)
2. Resuelve $\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} = P_E(x) y$ con $x_0 = a$, $\frac{\mathrm{d}u_{\alpha_0}(x_0)}{\mathrm{d}x} = \alpha_0$ y $E = E_0$ hasta x_N. Puede usarse Euler, RK4, Numerov, etc.
3. Calcula $g(E_0) = u_{E_0}(x_N) - b$
4. Elige E_1, resuelve y calcula $g(E_1)$
5. Actualiza E_1 hasta que $g(E_1)g(E_0) < 0$
6. Realiza biseccion en el intervalo $[E_0, E_1]$ hasta encontrar $g(E) = 0$

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

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) f_n(t) \qquad c_n \in \mathbb{C}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f_n(t)}{\mathrm{d}t} = E_n f_n(t) \;\Rightarrow\; f_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

Schrödinger

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

Es un problema con condiciones iniciales

en el tiempo $\Rightarrow$ necesito $\Psi(x,0)$

Opción 1: Si puedo expandirla en autofunciones...

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

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

Schrödinger

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

Es un problema con condiciones iniciales

en el tiempo $\Rightarrow$ necesito $\Psi(x,0)$

Opción 2: Es de 1er orden! la resuelvo. . .

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

1. Elegir una base.
2. Diagonalizar $\mathbf{H}$ para tomar la exponencial.

Schrödinger

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

Es un problema con condiciones iniciales

en el tiempo $\Rightarrow$ necesito $\Psi(x,0)$

Opción 3: La trato como cualquier EDO con C. I.

Euler hacia adelante, Euler hacia atras, RK4, etc.

Solo difieren en que debo discretizar tiempo y *espacio*

Debo por tanto elegir una aproximacion para el Laplaciano