Métodos Computacionales

Problemas con Valores en la Frontera

Abril 16, 2024

S. Alexis Paz

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

Problema con Valores Iniciales (PVI)

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

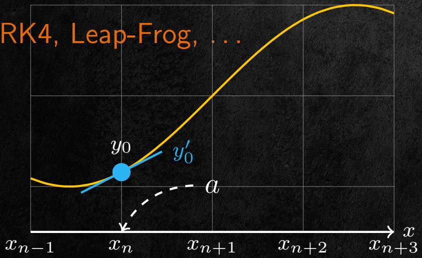
$$\updownarrow$$

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

Condiciones de Cauchy

$$y(a) = \alpha_0$$
$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a = \alpha_1$$
$$\vdots$$
$$\left.\frac{\mathrm{d}^{n-1}y}{\mathrm{d}x^{n-1}}\right|_a = \alpha_{n-1}$$

Euler, RK4, Leap-Frog, ...



Teorema de existencia y unicidad

Problema con Valores Iniciales (PVI)

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

$$\updownarrow$$

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

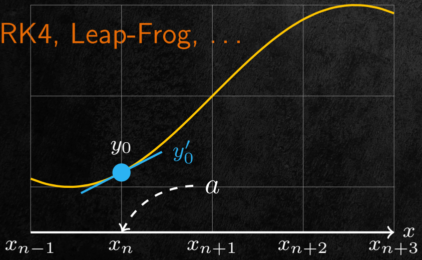
Condiciones de Cauchy

$$\boxed{\begin{aligned} y(a) &= \alpha_0 \\ \left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a &= \alpha_1 \end{aligned}}$$

$$\vdots$$

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

Euler, RK4, Leap-Frog, ...



Teorema de existencia y unicidad

Problema con Valores en la Frontera (PVF)

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

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

Neumann $\quad \left.\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a = \alpha \qquad \left.\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_b = \beta$

Mixta $\quad y(a) = \alpha \qquad \left.\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_b = \beta$

Robin $\quad c_0 y(a) + c_1 \left.\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a = \alpha \qquad c_2 y(b) + c_3 \left.\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_b = \beta$

La existencia y unicidad
no son triviales.

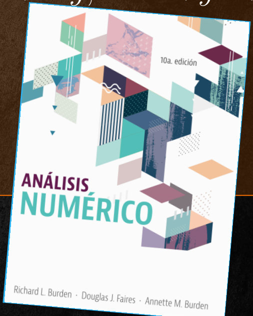
Problema con Valores en la Frontera (PVF)

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

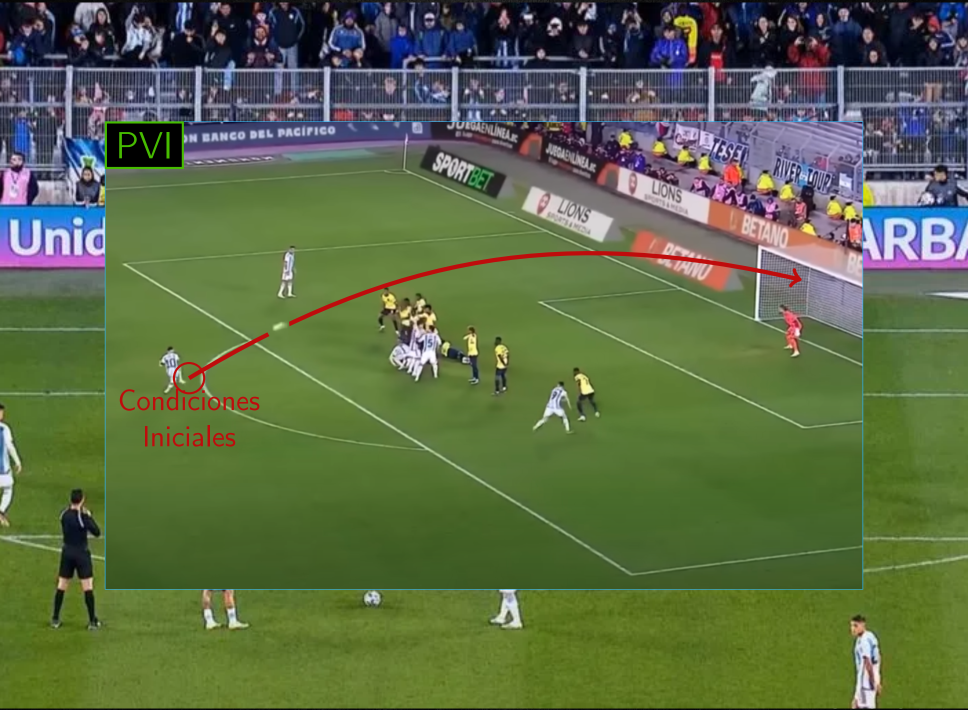
Dirichlet $\qquad y(a) = \alpha \qquad y(b) = \beta$

Teorema de existencia y unicidad

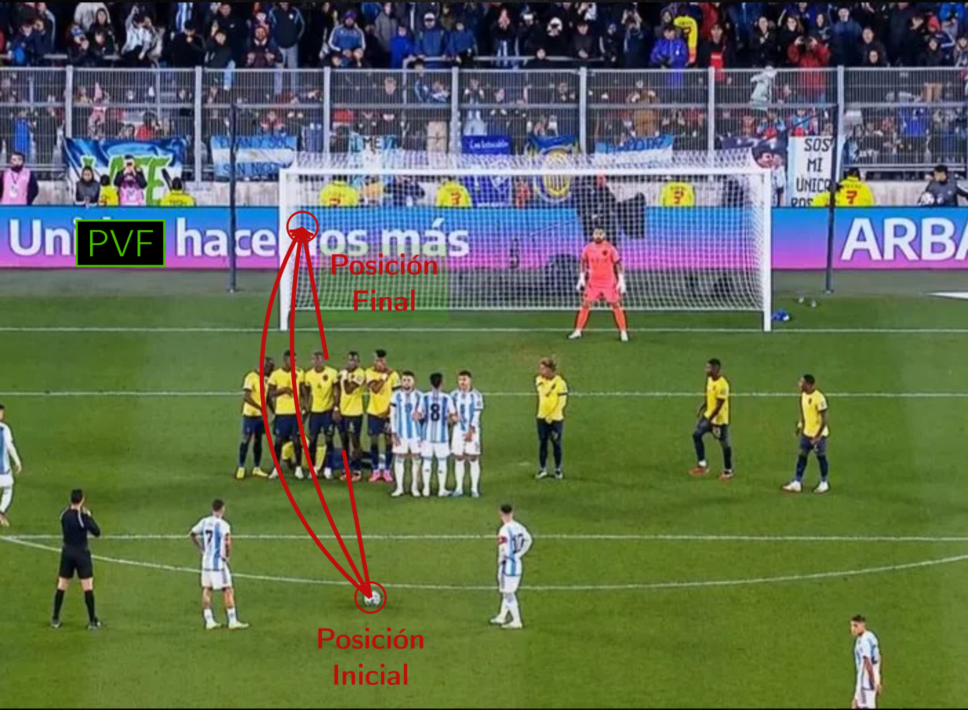
- F continua en $D =$
  $\{(x, y, y')|a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty y, -\infty < y' < \infty\}$
- $\dfrac{\partial F}{\partial y}(x, y, y') > 0$
- $\left|\dfrac{\partial F}{\partial y'}(x, y, y')\right| \leq M$




Unidos hacemos más
ARBA
SOS
MI
UNICO


PVI
Condiciones
Iniciales
SPORTBET
LIONS
BETANO


PVF
Valores Finales
Valores Iniciales


PVF
Posición Final
Posición Inicial

Ecuación de onda

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

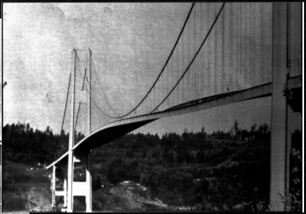
Ecuación del calor

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

Ecuación elástica

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

domínio público



domínio público

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.)

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

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

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

2. Expresar Sistema de Ecuaciones

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

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$^{\text{do}}$ 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

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

Considerando el PVF:

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

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

Resolver una **sucesión** $k = 1, 2, \ldots$ de PVIs de la forma:

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

$$y(a) = \alpha, \left.\frac{\mathrm{d}y_{t_k}}{\mathrm{d}x}\right|_a = t_k$$

Donde t_k es un parámetro introducido para producir variaciones en $\left.\frac{\mathrm{d}y_{t_k}}{\mathrm{d}x}\right|_a$ hasta que $y_{t_k}(b) = \beta$

El mé

EDO

Considerando el PVF:

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

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

Resolver una **sucesión** $k = 1, 2, \ldots$ de PVIs de la forma:

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

$$y(a) = \alpha, \left.\frac{\mathrm{d}y_{t_k}}{\mathrm{d}x}\right|_a = t_k$$

Donde t_k es un parámetro introducido para producir variaciones en $\left.\frac{\mathrm{d}y_{t_k}}{\mathrm{d}x}\right|_a$ hasta que $y_{t_k}(b) = \beta$

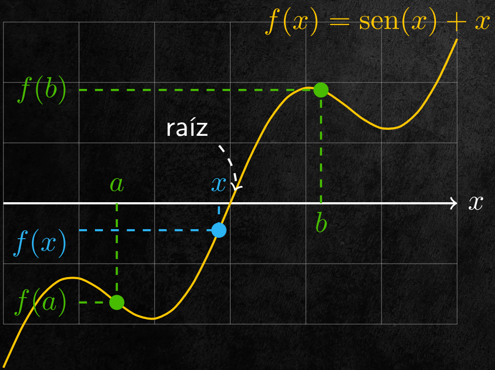
Raíces de

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

CLASE ANTERIOR

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.



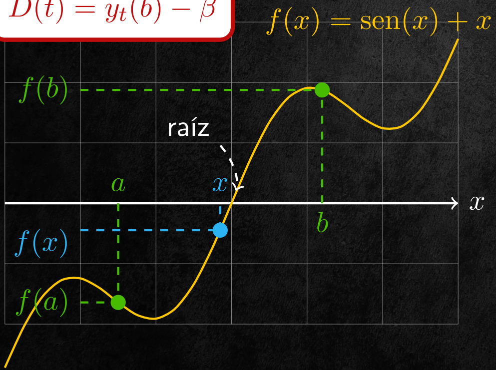

```python
import numpy as np

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)
```

CLASE ANTERIOR

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.

$$\boxed{D(t) = y_t(b) - \beta}$$




```python
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)
```

Definición de disparo

Dado el PVF con $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$, integrar el PVI equivalente con $\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a = t$ usando Euler, RK4, Numerov, 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 $t_k = \dfrac{t_i + t_d}{2}$ 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.

Definición de disparo

Dado el PVF con $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$, integrar el PVI equivalente con $\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_a = t$ usando Euler, RK4, Numerov, 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. $k \Leftarrow 0$.

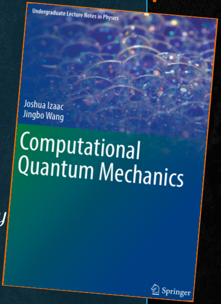
4. $k \Leftarrow k + 1$. Disparo con $t_k = \dfrac{t_i + t_d}{2}$ y calculo $D(t_k) = y$

   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

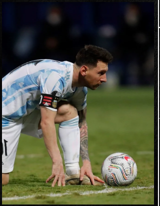
$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = -5\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$

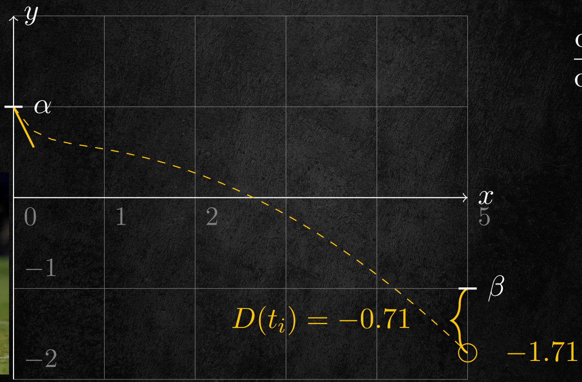
PVI con

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = -2.0$$

$$\epsilon_T = 0.25$$

$t_i = -2.0$





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

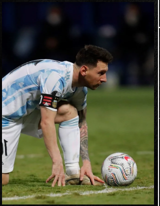
   Si $|D(t_i)| < \epsilon_T$, $y_{t_i} \sim$ solución del PVF.

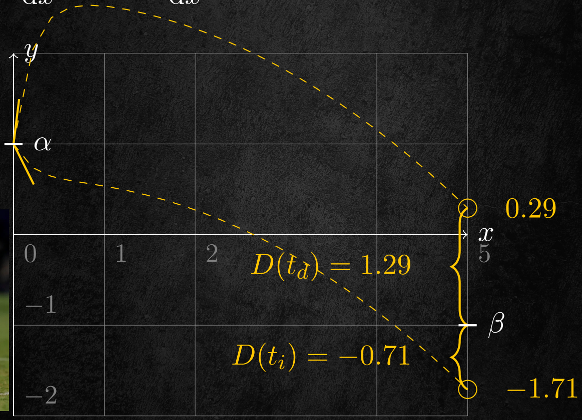
Ejemplo

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

$t_d = 8$

$t_i = -2.0$





PVI con

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = 8$$

$$\epsilon_T = 0.25$$

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

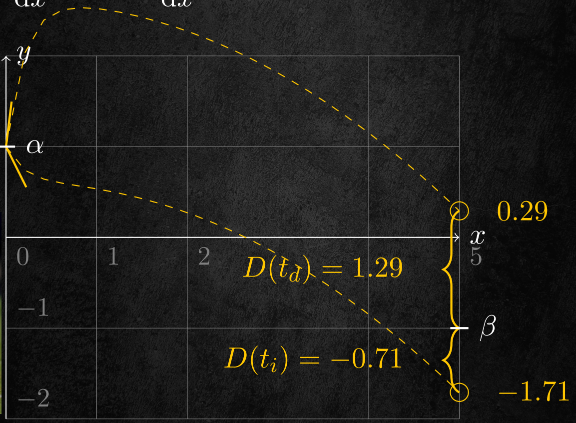
   Si $|D(t_d)| < \epsilon_T$, $y_{t_d} \sim$ solución del PVF.

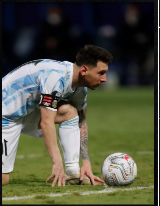
Ejemplo

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

$t_d = 8$

$t_i = -2.0$

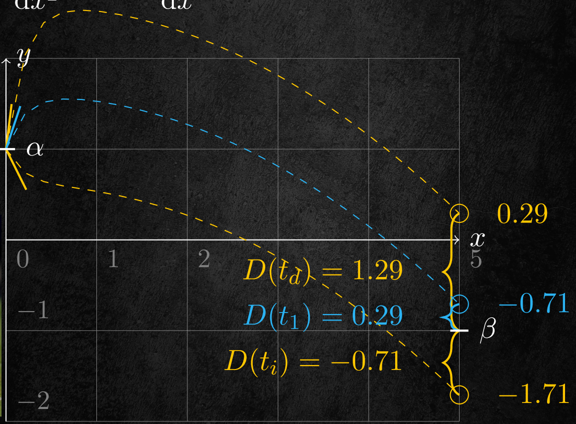


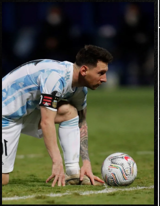


3. Si $D(t_i)D(t_d) > 0$, variar t_d y volver al paso 2. $k \Leftarrow 0$.

Ejemplo

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





PVI con

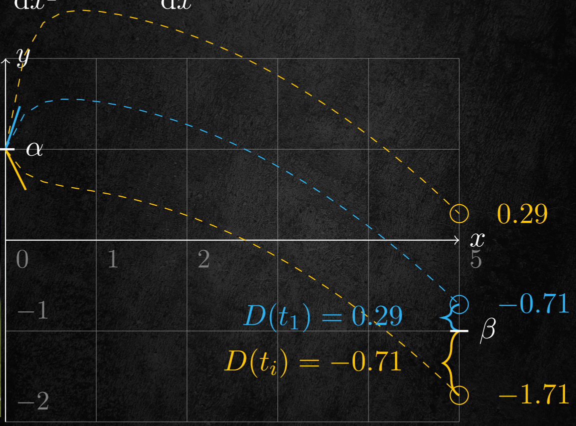
$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = 3$$

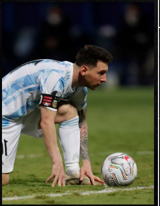
$$\epsilon_T = 0.25$$

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

Ejemplo

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





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.

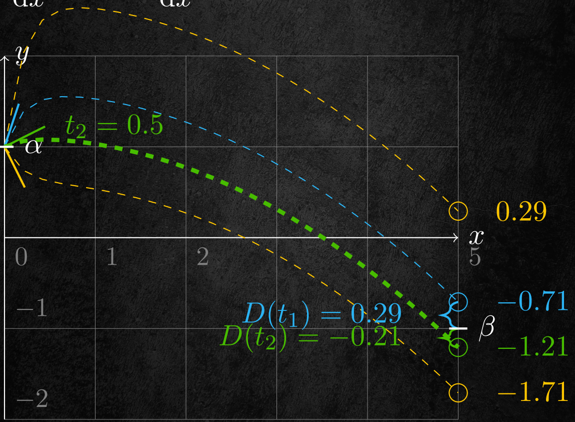
Ejemplo

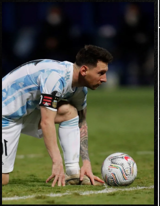
$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} = -5\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} - x \quad ; \quad y(0) = 1 \quad ; \quad y(5) = -1$$

PVI con

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|_0 = 0.5$$

$$\epsilon_T = 0.25$$





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

Schrödinger

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

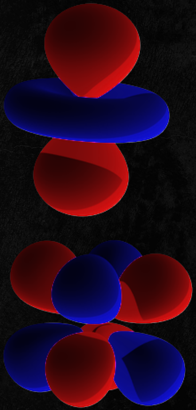
Hamiltoniano independiente del tiempo

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

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

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

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



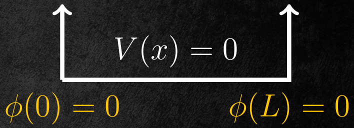
Adaptado de Vmaiamir, CC SA 4.0

Problema de autovalores

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0$$

Lineal, Homogénea.

¿Partícula en caja de ancho L?



¿Resolvamos el PVI con $\psi_t'(x) = t$?

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

Entonces $\psi_t'(0) = c_t\psi'(0)$ y $\psi_t(x) = c_t\psi(x)$.

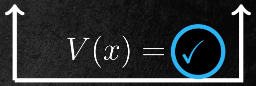
Además $c_t\psi_t(L) = \psi(L) = 0$ y $c_t \neq 0\ldots$

Cualquier disparo resuelve el PVF.

Problema de autovalores

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

Partícula confinada cualquier $V(x)$



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

¿Resolvamos el PVI con $\psi_t'(x) = t$?

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

Entonces $\psi_t'(0) = c_t\psi'(0)$ y $\psi_t(x) = c_t\psi(x)$.

Además $c_t\psi_t(L) = \psi(L) = 0$ y $c_t \neq 0\ldots$

Cualquier disparo resuelve el PVF.

¡Nos interesa conocer E!

Problema de autovalores

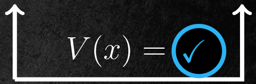
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0$$

Lineal, Homogénea.

Partícula confinada cualquier $V(x)$

$\downarrow$

¡Obvio! es numérico



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

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

Nos visita un/una especialista

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

Es EDO 1^er en $t \Rightarrow$ PVI, necesito $\Psi(x,0)$

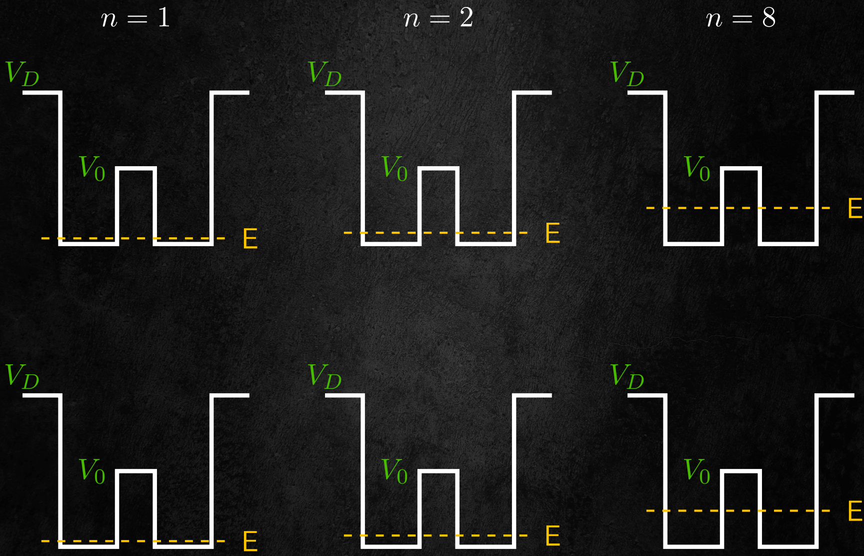
Opción 1: Euler, RK4, Leap-Frog...

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

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

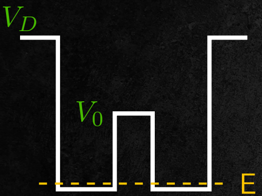
Opción 3: Aproximo por diferencias finitas (Crank-Nicolson).

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



Peacock-López *et al.* Chem. Educator 2006(11)383

$n = 1$

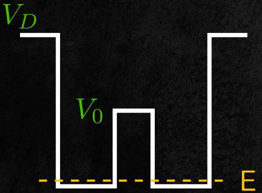


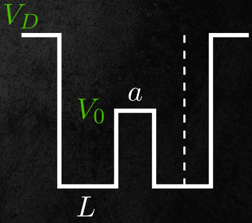
Shcrödinger:

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

Solucion general:

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





Peacock-López *et al.* Chem. Educator 2006(11)383