UNIVERSIDAD DE CHILE

Universidad de Chile

FI3104-1

Métodos Numéricos para la Ciencia y la Ingeniería

Tarea Final Métodos Numéricos

Autor:
Benjamín Mancilla Vera

22 de julio de 2022

Índice

Pregunta 1

Se tiene una EDP de tipo reacción-difusión, la cual para ser resuelta se debe implementar el metodo de Crank-Nicolson. Este consiste en discretizar las derivadas parciales, para obtener así una expresión para cada posición en el tiempo futuro según variables conocidas, especialmente la solución en el tiempo pasado, muy parecido a RK4.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \tag{1}$$

En las ecuaciones 2 y 3 se muestra la discretización para la derivada parcial en el tiempo y la doble derivada espacial respectivamente.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} \tag{2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2\Delta x^2}(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n + U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) \tag{3}$$

Luego remplazando en la EDP y considerando $\sigma = \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2}$ se obtiene un problema lineal, el cual tiene la forma $U^{n+1} = A^{-1}(BU^n + f^n)$, donde A y B son matrices trigonales que representan la dependencia espacial entre posiciones vecinas, U son vectores que representan la solución dado un tiempo n y f^n el vector que representa el impacto de $f(u)$ a la solución en el tiempo, por lo que sus componentes tienen la forma $\Delta t f(U_i^n)$. Debido a que generalmente las condiciones de borde son fijas, la dimensión del problema lineal se suele reducir en 2, ya que se extraen las filas que resuelven el problema para U_0^{n+1} y U_{N-1}^{n+1}.

$$A = \begin{bmatrix} -\sigma & 1+2\sigma & -\sigma & & & 0 \\ 0 & -\sigma & 1+2\sigma & -\sigma & & \\ & & \ddots & & & \\ & & -\sigma & 1+2\sigma & -\sigma & 0 \\ 0 & & & -\sigma & 1+2\sigma & -\sigma \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} \sigma & 1-2\sigma & \sigma & & & 0 \\ 0 & \sigma & 1-2\sigma & \sigma & & \\ & & \ddots & & & \\ & & \sigma & 1-2\sigma & \sigma & 0 \\ 0 & & & \sigma & 1-2\sigma & \sigma \end{bmatrix}$$

Para este caso se define la matriz trigonal ya mencionada, al igual el sistema lineal. Basta con conocer el valor de σ, la condicion inicial, las condiciones de borde y el ancho de cada unidad en las grillas, lo cual se define a criterio propio.

Para la pregunta 1 $\Delta x = 0{,}002$, $\Delta t = 0{,}008$, $D = \gamma$, $f(u) = \mu u(1-u)$, CB: $u(0,t) = 1$ y $u(1,t) = 0$ y CI: $u(x,0) = e^{-x^2/0{,}1}$. Estos datos simplemente se remplazan el algoritmo ya explicado, y se grafican los resultados cada cierto tiempo.

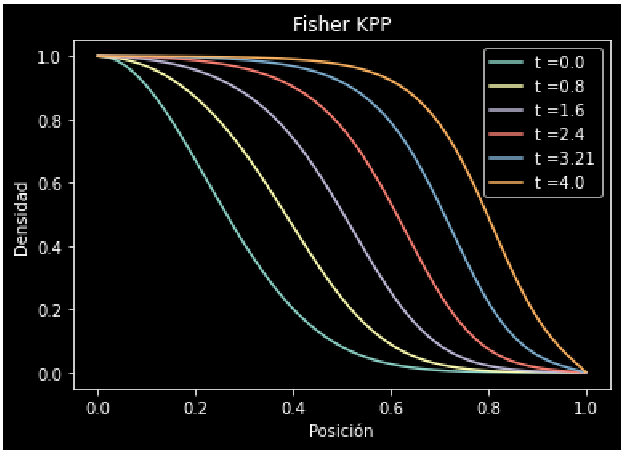

Figura 1: Densidad de población 1D en distintos tiempos

Como se puede ver, la densidad siempre es 1 en x = 0 y 0 en x = 1, por lo que cumple las condiciones de borde. Debido a la naturaleza de la ecuación que describe esta densidad, la población no le gusta estar junta (factor $-\mu u^2$, por lo que existirá un constante desplazamiento para alejarse de x=0, esto se manifiesta como la evolución de la curva a lo largo del tiempo, como se puede ver, esta cada vez se encuentra más a la derecha y abarca una mayor área, eso significa que a partir de un punto donde constantemente se está generando población, esta se esparcirá a lo largo del espacio, creciendo constantemente. Este resultado es esperable si se compara con el comportamiento real de una población animal.

Pregunta 2

El problema consiste básicamente en una EDO de orden 2, pero con la diferencia que la función que describe la EDO es una integral. Esto simplemente representa una mayor complejidad en el codigo, ya que se requiere usar Simpson de 2 dimensiones para el paso RK4.

Como ya se ha visto anteriormente, esto problema se resuelve con RK4 vectorial, ya que la EDO es de orden 2, y, por lo tanto, también afecta la contribución de la primera derivada, la velocidad en este caso.

La función para el paso RK4 consiste en una vectorial, donde el término para la primera derivada es simplemente la velocidad, y para la posición se tendría la integral con los límites del enunciado. Luego se deja correr el RK4 hasta que la solución entregue un número negativo, esto quiere decir que la partícula pasa por el eje x, y, por lo tanto, pasa por 0, que es lo que se pide, esta técnica se parece a la de Newton cuando se buscan raíces, esto solo es una observación.

Se obtiene que el tiempo para que la partícula pase por 0 es de 5.13 segundos aproximadamente, luego de esto, la partícula comienza a desacelerar hasta llegar a -H para luego devolverse y tener la dinámica de un movimiento armónico simple, que es lo que se espera de un potencial de este tipo sin que exista amortiguamiento o fuerzas externas que frenen o inyecten energía indefinidamente al sistema.

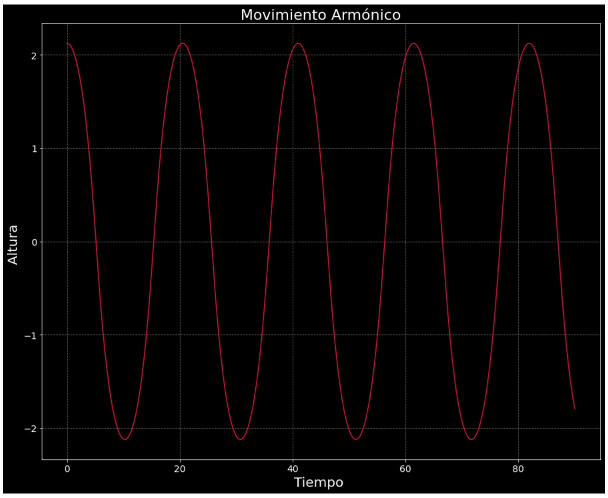

Figura 2: MAS

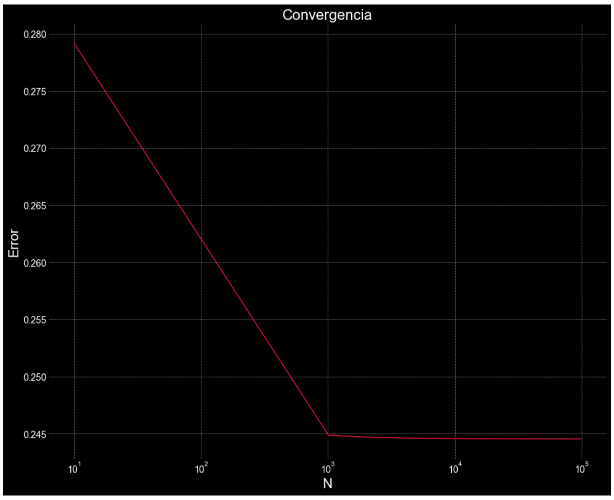

Figura 3: Convergencia de integral numérica con analítica.

Se puede apreciar en la figura 3 que el error se reduce muy lentamente para valores de n mayor 1000, por lo tanto, se determina que esta magnitud es adecuada, ya que para valores mayores se pierde mucho tiempo de procesamiento por una reducción pobre del error.

Pregunta 3

Se tiene un paquete de onda de con forma gaussiana en una grilla 1D, además se inyecta un potencial constante igual 2 entre las posiciones 2 y 4. Se desea estudiar la dinámica de esta onda cuántica en este medio, la ecuación que describe físicamente el problema es la ecuación de Schrödinger simplificada mostrada en la ecuación 4.

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i}{2}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} - iV(x)\psi(x,t) \tag{4}$$

Se tiene un problema de EDP igual al de la pregunta 1, por lo que se procede de la misma manera. En este caso $\Delta x = 0{,}05$, $\Delta t = 0{,}02$, $D = \frac{i}{2}$, $f(u) = -iV(x)\psi(x,t)$, CB: $u(-10,t) = 0$ y $u(10,t) = 0$ y CI: $\psi(x,0) = e^{-(x^2)/(0{,}5^2)}e^{ix}$.

Implementando Crank-Nicolson obtenemos las soluciones para todas las posiciones y tiempos definidos por las grillas. Luego usamos estas y el módulo al cuadrado de la solución para realizar un scatter plot, también conocido como colormap. El resultado se presenta en la figura **??**.

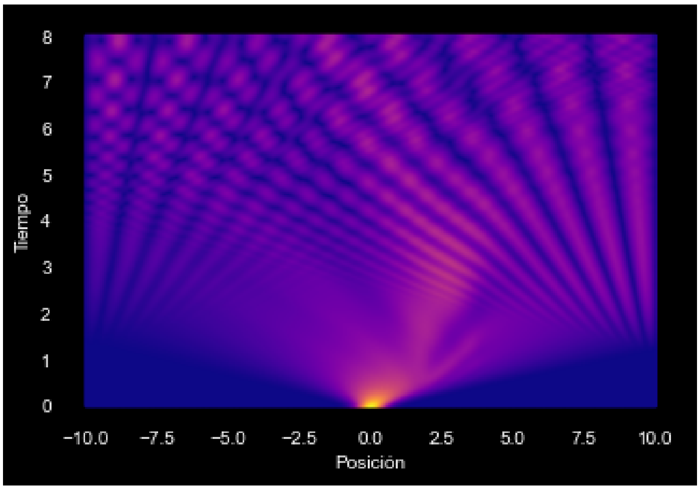

Figura 4: Scatter Plot de la magnitud de la onda al cuadrado.

Se pueden apreciar 2 patrones distintos para los tiempos más cercanos a 8, el primero es el de la izquierda de menor intensidad, y el de la derecha de mayor intensidad. Estos patrones representan la onda reflejada por el cambio de medio debido al potencial, la izquierda es la reflejada, que en este caso debe ser más débil que la transmitida, mientras que la derecha es la anterior dicha, que claramente presenta mayor intensidad, ya que aumentan su energía debido al potencial que se le está aplicando.

Pregunta 4

Numéricamente el problema se reduce a definir el campo eléctrico y magnético para luego remplazarlo en las 6 ecuaciones (3 por el número de partículas y 2 por eje x e y), luego el problema se soluciona con *odeint* gracias a la ecuaciones bien definidas, la condiciones iniciales y el tiempo en que se quiere correr la simulación.

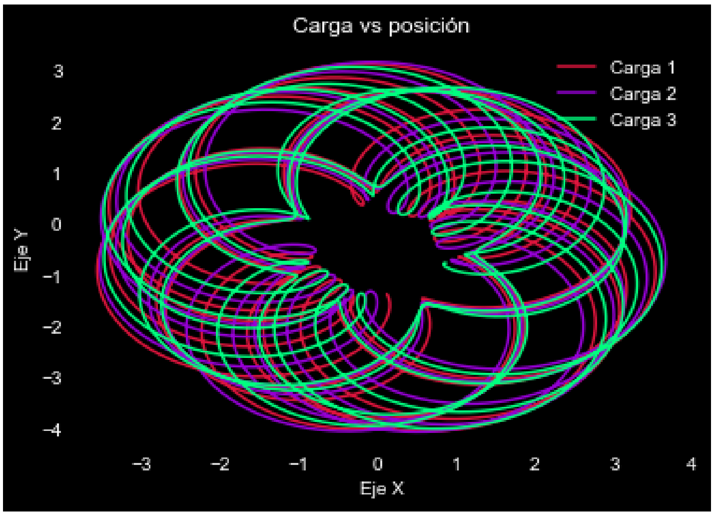

Figura 5: Cargas en el plano XY

Nótese que las cargas tienen una especie de movimiento circular deformado, esto ocurre gracias al campo magnético. Sin embargo, por culpa de que hay más de 1 carga en el sistema, se produce un campo magnético que obliga a interactuar a las partículas entre ellas, además, este es variable, ya que depende de las distancias entre las partículas, por lo que cambia constantemente, aumentando cuando se acercan, y disminuyendo cuando se alejan. En este caso, como las cargas y las masas son iguales, las cargas se repelen de igual manera, lo que genera 3 patrones iguales desfasados.

Debido al campo eléctrico variable se tienen los arcos de la figura, los cuales perturban evidentemente la esperada ruta circular debido al campo magnético. Por lo tanto, debido a la suma de estos dos comportamientos se tiene la forma de la figura, que es básicamente un movimiento oscilatorio entre las 3 partículas mientras giran constantemente debido al campo magnético, algo parecido a un MAS dentro de otro MAS.