

Índice de contenido

Introducción	2
Análisis de Estabilidad Caso de Euler.....	3
Resultados.....	4
Caso (i)	4
Caso (ii).....	4
Caso (iii).....	4
Gráficos $x(t)$, $y(t)$ y $E(x(t),y(t))$	5
Euler.....	5
Runge-Kutta 2.....	6
Runge-Kutta 4.....	6
Nyström.....	7
Conclusiones.....	7

Introducción

En la teoría de la mecánica cuántica es común el estudio de partículas que interactúan en un potencial de doble pozo. Una de las características de estos modelos atómicos es la conservación de la energía. Si el potencial es del tipo

$$V(x) = \frac{1}{4} \cdot b \cdot x^4 - \frac{1}{2} \cdot a \cdot x^2 + \frac{1}{4}$$

resuelva la ecuación diferencial ordinaria de 2do. orden:

$$m \cdot \ddot{x} = a \cdot x - b \cdot x^3 \quad (1)$$

y demuestre analíticamente (físicamente) que conserva la energía.

Luego resuelva la ecuación numéricamente por los métodos de Euler, Runge-Kutta de orden 2 y Runge-Kutta de orden 4 expresando la ecuación como un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden.

Utilice algún método que conserve la energía para resolver directamente la ecuación (1)

Los valores a utilizar para efectuar estos cálculos son:

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \frac{a}{m} \cdot x - \frac{b}{m} \cdot x^3 \end{cases} \quad (2)$$

$$a = 1$$

$$b = 1$$

$$m = 1$$

y las siguientes condiciones iniciales:

$$\text{i)} \quad \begin{cases} x(0) = 0.5 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

$$\text{ii)} \quad \begin{cases} x(0) = 1 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

$$\text{iii)} \quad \begin{cases} x(0) = 1.5 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Análisis de Estabilidad Caso de Euler

Ecuaciones sin perturbar:

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= x_n + h y_n \\Y_{n+1} &= y_n + h(x_n - x_n^3)\end{aligned}$$

Ecuaciones Perturbadas:

$$\begin{aligned}x_{n+1} + \delta_{n+1} &= X_n + \delta_n + h(Y_n + \epsilon_n) \\Y_{n+1} + \epsilon_{n+1} &= Y_n + \epsilon_n + h((X_n + \delta_n) - (X_n + \delta_n)^3)\end{aligned}$$

Si se dan estas situaciones, puedo eliminar lo que aparece tachado

$$X_n \rightarrow \delta_n \ll 1$$

$$Y_n \rightarrow \epsilon_n \ll 1$$

$$\begin{aligned}x_{n+1} + \delta_{n+1} &= X_n + \delta_n + h(Y_n + \epsilon_n) \\Y_{n+1} + \epsilon_{n+1} &= Y_n + \epsilon_n + h((X_n + \delta_n) - (X_n + \delta_n)^3) \\Y_{n+1} + \epsilon_{n+1} &= Y_n + \epsilon_n + h((X_n + \delta_n) - (X_n^3 + 3X_n^2\delta_n + 3X_n\delta_n^2 + \delta_n^3))\end{aligned}$$

Resto las Perturbadas menos las ecuaciones sin perturbar:

$$\begin{aligned}\delta_{n+1} &= \delta_n + h\epsilon_n \\\epsilon_{n+1} &= \epsilon_n + h(\delta_n - (3X_n^2\delta_n + 3X_n\delta_n^2 + \delta_n^3))\end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \delta_{n+1} \\ \epsilon_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ h(1 - 3X_n^2) & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta_n \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

$$\det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & h \\ h(1 - 3X_n^2) & 1 - \lambda \end{pmatrix} = 0 = (1 - \lambda)^2 - h^2(1 - 3X_n^2) = \lambda^2 - 2\lambda + 1 - h^2(1 - 3X_n^2)$$

$$\lambda = \frac{2}{2} \pm \frac{\sqrt{4 - 4(1 - h^2(1 - 3X_n^2))}}{2}$$

$$\lambda = 1 \pm \sqrt{h^2(1 - 3X_n^2)} = 1 \pm h\sqrt{1 - 3X_n^2}$$

Luego el Radio espectral :

$$\phi(n) \simeq 1 + h \rightarrow \text{si } X_n \rightarrow 0$$

ESTABLE si $h = 0 \rightarrow$ ABSURDO

Resultados

Sólo mostramos el valor en $t=20$, se anexan los valores en todo valor de t .

Caso (i)

$h = 1$

Euler-11: 9.22337E13

RK2-11: 9.22337E13

RK4-11: 0.1139

Nystrom-11: 0.06509

$h = 0.1$

Euler-12: 34.76666

RK2-12: 0.00291

RK4-12: 0.0

Nystrom-12: 1.7E-4

$h = 0.01$

Euler-13: 0.05318

RK2-13: 6E-5

RK4-13: 4E-5

Nystrom-13: 4.5E-4

Caso (ii)

$h = 1$

Euler-21: 0.0

RK2-21: 0.0

RK4-21: 0.0

Nystrom-21: 0.0

$h = 0.1$

Euler-22: 0.0

RK2-22: 0.0

RK4-22: 0.0

Nystrom-22: 0.0

$h = 0.01$

Euler-23: 0.0

RK2-23: 0.0

RK4-23: 0.0

Nystrom-23: 0.0

Caso (iii)

$h = 1$

Euler-31: 9.22337E13

RK2-31: 9.22337E13

RK4-31: 9.22337E13

Nystrom-31: 0.5296

$h = 0.1$

Euler-32: 9.22337E13

RK2-32: 0.0153

RK4-32: 5E-5

Nystrom-32: 0.00156

$h = 0.01$

Euler-33: 0.14175

RK2-33: 2E-5

RK4-33: 5E-5

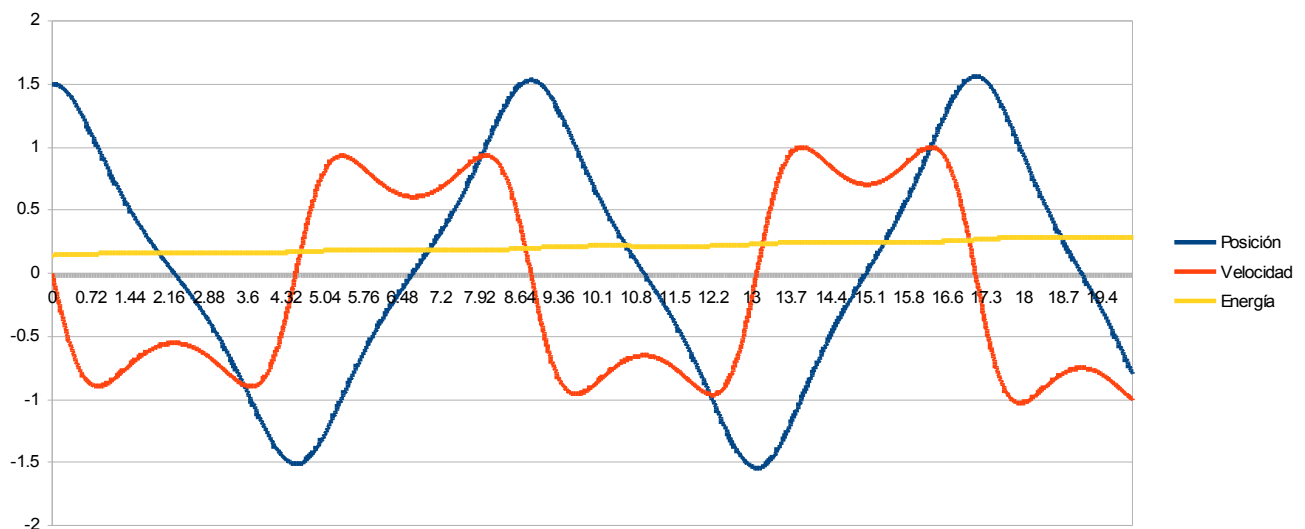
Nystrom-33: 0.00297

Gráficos $x(t)$, $y(t)$ y $E(x(t),y(t))$.

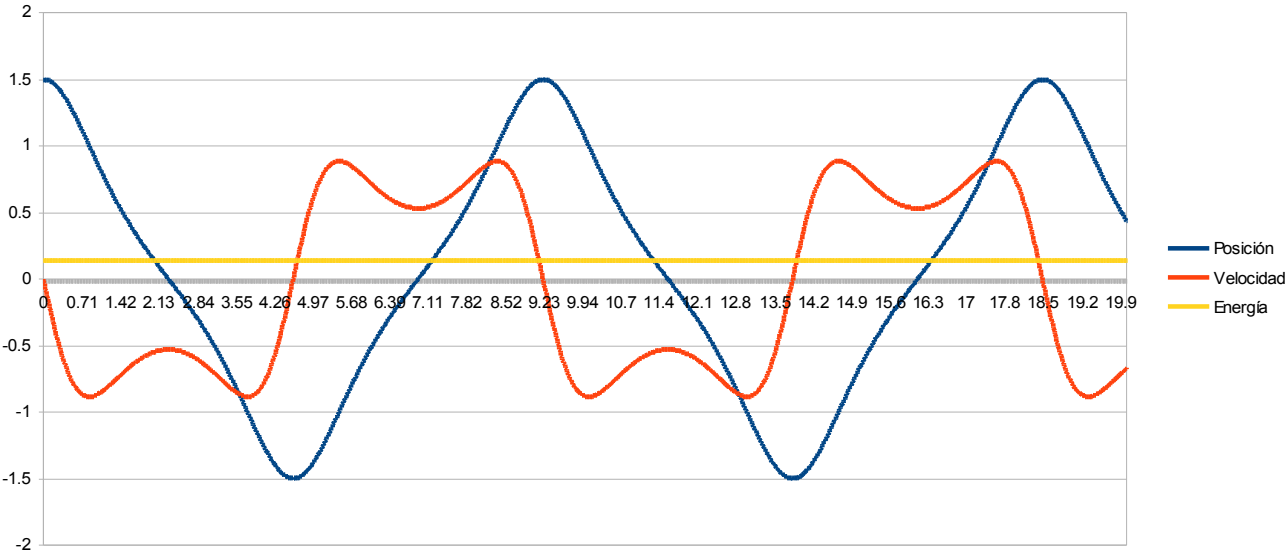
Para facilitar la visualización se mostrarán los gráficos de Euler, Runge-Kutta 2 , Runge-kutta 4 y Nystrom según el “mejor” de los casos, concondiciones iniciales (iii) y con $h = 0.01$

$$\text{iii)} \begin{cases} x(0) = 1.5 \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

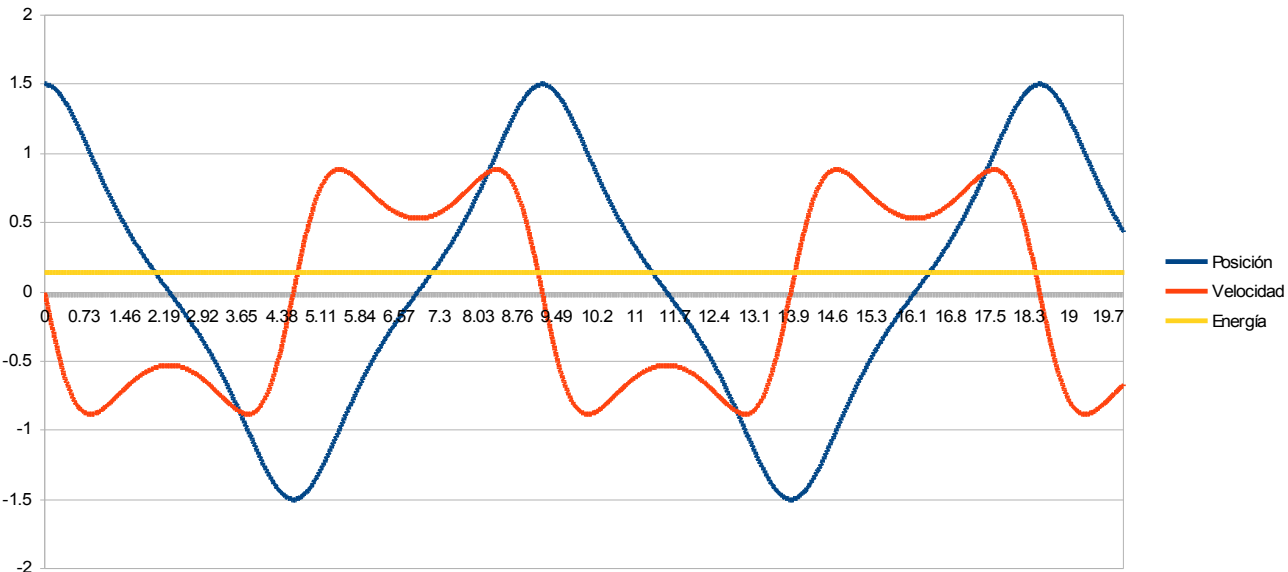
Euler



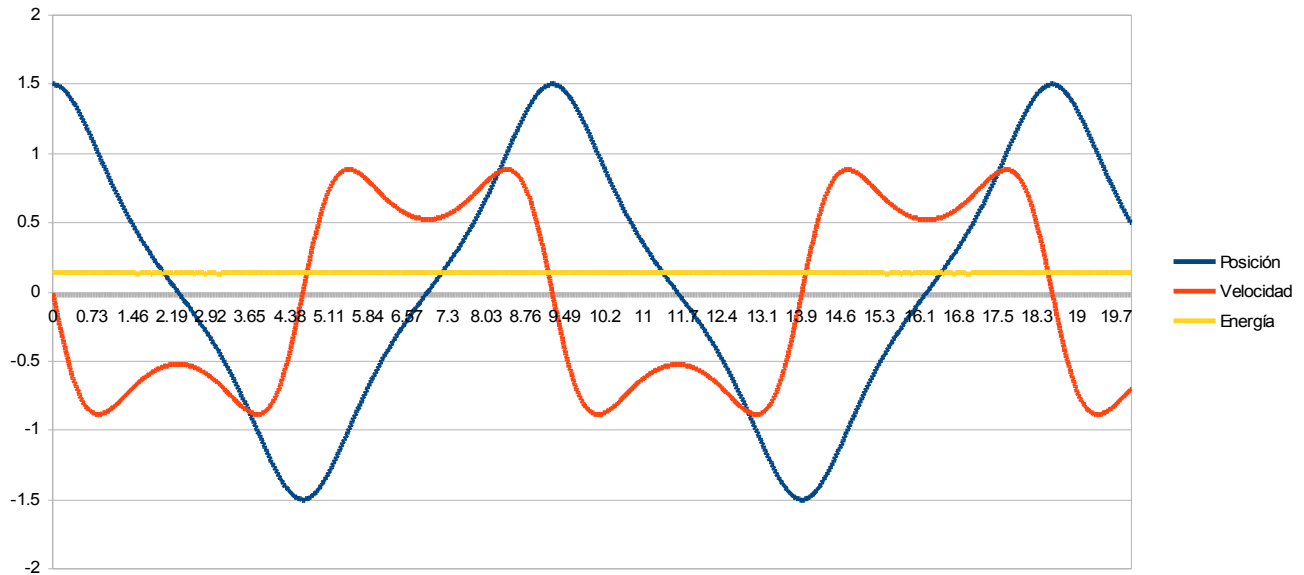
Runge-Kutta 2



Runge-Kutta 4



Nyström



Nota: Los datos desde donde se tomaron los siguientes gráficos se encuentran detallados en </graficos-metodo-33/Graficos> dentro de </docs/>

Conclusiones

Se puede apreciar que Euler obtiene los peores resultados. Como se demostró más arriba, dicho método no es estable, lo que además se puede apreciar en sus gráficos. Se ve a simple vista que en este caso parece no haber conservación numérica de la Energía.

Con respecto a los métodos, Euler, cuyo orden de consistencia es uno, se puede ver como casi nunca es bueno, y a medida que dicho orden mejora (2 en Runge-Kutta-2 y 4 en Runge-Kutta-4), los resultados son cada vez más exactos, también como era de esperarse.

En cuanto a los pasos de cálculo (h), es notorio en todos los casos, cómo un menor paso, da un resultado más exacto, lo que era esperable ya que el problema se evalúa en rangos menores de t (dado que $t = t_0 + n \cdot h$)