

Análisis Numérico I (75.12) - Curso 7
Primer Cuatrimestre 2010
Trabajo Práctico Número 2

Objetivo

Estudiar el comportamiento de los métodos numéricos para la resolución de un Problema de Valores Iniciales (P.V.I.) de tipo conservativo.

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

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

Utilice algún método que conserve la energía para resolver directamente la ecuación (1) (consulte con la cátedra si tiene dudas).

Los valores a utilizar para efectuar estos cálculos son:

$$\begin{aligned} a &= 1 \\ b &= 1 \\ m &= 1 \end{aligned}$$

y las siguientes condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad & \begin{cases} x(0) = 0.5 \\ y(0) = 0 \end{cases} \\ \text{ii)} \quad & \begin{cases} x(0) = 1 \\ y(0) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

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

Desarrollo

Se pide lo siguiente:

- 1) Resolver el sistema de (2) por los métodos de Euler, Runge-Kutta de orden 2 y 4 efectuando los cálculos hasta $t=20$ con pasos de cálculo $h=1$, $h=0.1$ y $h=0.01$.
- 2) Resolver el sistema de (1) por un método visto en la guía 10 efectuando los cálculos hasta $t=20$ con pasos de cálculo $h=1$, $h=0.1$ y $h=0.01$.
- 3) En ambos casos comparar la energía a $t=0$ con la obtenida a $t=20$. Comparar acorde al paso de cálculo y al método.
- 4) Analizar los resultados, comparar los errores en la energía debidos a la consistencia de los métodos y a la estabilidad en forma empírica. Graficar $x(t)$, $y(t)$ y $E(x(t),y(t))$.
- 5) ¿ Qué sucede con la frecuencia característica ? ¿ Es igual para (i), (ii) e (iii)?

Consideraciones

El Trabajo Práctico debe incluir las siguientes secciones:

- 1) Introducción: descripción del problema planteado y del análisis de consistencia y estabilidad teórico.
- 2) Desarrollo: código fuente en el lenguaje elegido para el desarrollo del trabajo. Cada función desarrollada debe contener un encabezado que describa el propósito de dicha función.
- 3) Resultados: impresión de los mismos (gráficos).
- 4) Análisis: a efectuarse sobre los resultados obtenidos en función de los problemas planteados (comparar con solución exacta).
- 5) Conclusiones: con relación al análisis realizado y a la precisión de los resultados obtenidos. Es importante ver ventajas y desventajas de los métodos planteados.

Fecha de entrega viernes 24 de Junio de 2010