

Tema 1 Ecuaciones de oscilación no lineal: Ecuación de Duffing I

Se llama ecuación de Duffing a la ecuación diferencial:

$$x'' + \delta x' - x + x^3 = \gamma \cos(\omega t) \quad (1)$$

que refleja las oscilaciones de un resorte no lineal, sometido a la acción de una fuerza periódica de frecuencia ω e intensidad γ . El resorte está sometido a rozamiento, proporcional a la velocidad, de acuerdo con el término $\delta x'$.

i) Verificar que la ecuación dada corresponde a la situación física descrita.

ii) Escribir la ecuación 1 en la forma de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden.

iii) Escribir un programa que integre el sistema del punto anterior, para cada conjunto de valores δ , γ , ω . Utilizar para ello la rutina RKF45, o bien hacerlo con MATLAB o MATHEMATICA.

iv) Integre con algún dato inicial, por ejemplo $x(0) = 1.8$, $x'(0) = 0$, para los valores:

$$\gamma = 0.3 \quad \omega = 1. \quad \delta = 0.15$$

Realice la integración por un tiempo suficientemente largo. ¿Qué observa? Es muy útil graficar la evolución en el espacio de fases, es decir, graficando x' en función de x . Hágalo. ¿Cuál es el período de la órbita periódica alcanzada? Realice también dibujos de la dependencia temporal de $x(t)$, y de trayectorias en el espacio de fases que tiendan hacia la solución periódica. Interprete.

v) Realice el análisis anterior con los datos

$$\gamma = 0.3 \quad \omega = 1. \quad \delta = 0.22$$

Compare. ¿Cuál es el nuevo período de la solución periódica obtenida?

vi) Trate de obtener una solución periódica con los valores:

$$\gamma = 0.3 \quad \omega = 1. \quad \delta = 0.24$$

¿Qué pasa? ¿Puede asegurar que no existe la solución periódica asintótica?

vii) Para los tres casos anteriores, halle la transformada de Fourier de las soluciones $x(t)$, e interprete.

Tema 2 Problema de Oscilaciones no Lineales: Ecuación de Duffing II

Se llama ecuación de Duffing sin rozamiento a la ecuación diferencial:

$$x'' + ax + bx^3 = F \cos(\omega t) \quad (2)$$

que refleja las oscilaciones de un resorte no lineal, sometido a la acción de una fuerza periódica de frecuencia ω e intensidad F .

i) Verificar que la ecuación dada corresponde a la situación física descrita. Interpretar físicamente el significado del signo de b . ¿Cuál es el signo de a ?

ii) Escribir la ecuación 2 en la forma de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden.

iii) Escribir un programa que integre el sistema del punto anterior, para cada conjunto de valores a , b , ω , F . Utilizar para ello la rutina RKF45, o bien hacerlo con MATLAB o MATHEMATICA.

iv) Resolver analíticamente el correspondiente problema lineal (obtenido haciendo $b = 0$). Observe que si ω es distinta de la frecuencia propia del oscilador, la solución tiene dos términos. Uno de ellos tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$, mientras que el otro es una función periódica de período ω . Es decir, la solución incluye un transitorio, que depende del dato inicial, pero tiende cuando $t \rightarrow \infty$ a una solución periódica forzada por la acción externa. Es decir, la solución asintótica es

$$x(t) = A \cos(\omega t)$$

Verificar que si la frecuencia propia del oscilador tiende a ω , el coeficiente A tiende a infinito. Esta situación se dice *resonancia*.

Dibujar para cada F gráficos de la amplitud de la oscilación en función de la frecuencia de la fuerza externa ω .

v) Considerar ahora el problema no lineal 2. Tratar de obtener la misma información, y analizar qué ocurre en resonancia. Dibujar curvas de la amplitud de oscilación en función de ω para valores fijos de F . Interprete los resultados. Ojo!!!!!!

vi) Esta situación puede ser tratada analíticamente. Ver por ejemplo la *Mecánica* de Landau y Lifchitz, o el libro *Ecuaciones Diferenciales ordinarias* de Roxin y Spinadel. Repita las cuentas allí realizadas para hallar las soluciones periódicas del problema, y trate de obtener numéricamente los mismos resultados.

Tema 3 Ecuaciones en Derivadas Parciales: Método de líneas I

Considerar la ecuación en derivadas parciales:

$$u_t = u_{xx} \quad (3)$$

llamada ecuación del calor, para $x \in [0, 1]$, con condiciones de contorno

$$u(0, t) = 0 \quad u(1, t) = 0 \quad (4)$$

y dato inicial

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) \quad (5)$$

Esta ecuación refleja la evolución de la temperatura en una barra que ocupa el segmento $[0, 1]$, sin pérdidas laterales de calor, y con una temperatura inicial dada por 5. Además los extremos se mantienen a temperatura igual a cero para todo t . El problema con este tipo de condiciones de contorno se denomina problema de Dirichlet. Si en vez de 4 se tienen datos sobre las derivadas:

$$u_x(0, t) = 0 \quad u_x(1, t) = 0 \quad (6)$$

se tiene el llamado problema de Neumann.

i) Para el problema de Dirichlet, convierta el problema con la ecuación en derivadas parciales en un problema para un sistema de ecuaciones ordinarias, de la siguiente manera:

Defina una grilla $0 = x_0 < \dots < x_n = 1$, y defina las funciones incógnita $\phi_i(t)$, $i = 0, \dots, n$, como los valores de la solución $\phi_i(t) = u(x_i, t)$. Verifique discretizando la ecuación 3 que se obtiene un sistema de ecuaciones ordinarias para las ϕ_i , $0 < i < n$. Las condiciones 4 ó 6 pueden ser usadas para generar ecuaciones para ϕ_0 y ϕ_n respectivamente.

ii) Utilice esta técnica para resolver el problema 3, con dato inicial $u(x, 0) = \sin(\pi x)$, y condiciones de contorno 4. Obtenga la solución exacta de este problema, y compare los valores obtenidos para $t = 1$. Analice cómo dependen los errores del paso de la discretización h .

iii) Realice el mismo análisis con la misma ecuación y el mismo dato inicial, pero condiciones de contorno $u(0, t) = 1 = u(1, t)$. ¿Qué ocurre?

iv) Sugiera una manera de implementar las condiciones de contorno 6, resuelva el problema 3, 6, $u(x, 0) = \cos(\pi t)$, numérica y analíticamente, y analice cómo depende el error de la discretización. ¿Qué pasa? ¿Se le ocurre cómo mejorar las cosas?.

Tema 4 Simulación de un ecosistema simple

Considerar un ecosistema simple, que consiste de conejos, que disponen de una cantidad de recursos ilimitada, y de zorros que los depredan para comer. Un modelo clásico de este problema, debido a Volterra, es el siguiente par de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales de primer orden:

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dt} &= 2r - \alpha r f & r(0) &= r_0 \\ \frac{df}{dt} &= -f + \alpha r f & f(0) &= f_0\end{aligned}$$

donde t es el tiempo, $r = r(t)$ es el número de conejos, y $f = f(t)$ es el número de zorros. La constante α es positiva. Cuando $\alpha > 0$ los zorros encuentran a los conejos con una probabilidad que es proporcional al producto de sus cantidades. Esto resulta en una disminución del número de conejos, y por razones menos claras, en un aumento en el número de zorros. ¿Qué ocurre si $\alpha = 0$?

Investigar el comportamiento de este sistema para $\alpha = .01$, y varios valores de r_0 y f_0 , en el intervalo desde 2 ó 3 hasta varios miles. Graficar las situaciones interesantes, e interpretarlas. Incluir gráficos de r vs. f .

i) Calcular la solución con $r_0 = 300$ y $f_0 = 150$. ¿Qué observa? ¿Cuál es aproximadamente el período de la solución?

ii) Calcular la solución con $r_0 = 15$, y $f_0 = 22$. ¿En algún momento la cantidad de conejos se hace menor que 1? ¿Cómo interpretaría esta situación? Hallar condiciones iniciales para las cuales se extingan los zorros. Hallar condiciones iniciales con $r_0 = f_0$ de modo que ambas especies se extingan.

iii) Se han propuesto muchas modificaciones de este sistema simple para reflejar con más precisión lo que ocurre en la naturaleza. Por ejemplo, la modificación

$$\frac{dr}{dt} = 2r \left(1 - \frac{r}{R}\right) - \alpha r f \quad r(0) = r_0$$

impide que el número de conejos pueda hacerse infinito (verifíquelo). Elija un valor razonable de R , y conteste las mismas preguntas que para el sistema inicial. En particular, ¿qué ocurre con las soluciones periódicas?

Tema 5 **Problema de tres cuerpos**

Consideremos dos cuerpos que se mueven sujetos a la atracción gravitatoria mutua, en una órbita periódica (por ejemplo una estrella doble). Si sobre este sistema incide un tercer cuerpo, pueden ocurrir varios fenómenos:

- i) Ionización: en el estado final se tienen tres cuerpos que se alejan indefinidamente.
- ii) Intercambio: si la estrella viajera forma un sistema ligado con una de las estrellas de la estrella doble, mientras la restante se aleja indefinidamente.
- iii) Aproximación: si luego de un tiempo de interacción la estrella viajera se aleja nuevamente.

Este tipo de sistemas es muy sensible a las condiciones iniciales, y tiene muchos parámetros a fijar (masas de las estrellas, velocidades y posiciones iniciales). Aún en problemas donde la mayoría de estos parámetros están fijos, el comportamiento es muy complicado.

- i) Escribir un programa que integre numéricamente las ecuaciones de Newton para los tres cuerpos. Utilice la rutina RKF45, o alguna otra rutina adaptativa. Verifique su correcto funcionamiento para casos en que alguna de las masas sea cero. Halle datos iniciales en que las órbitas sean elipses muy excéntricas, y observe la adecuación del paso de integración a las características de la solución.
- ii) Considerar todas las masas iguales, y que el problema es plano (es decir, todos los cuerpos tienen coordenadas y velocidades iniciales incluidas en un plano). Suponga que dos de las masas están girando inicialmente alrededor de un centro común con una velocidad dada. Suponga además que la velocidad inicial de la otra estrella está fija, y varíe su parámetro de impacto, y el tiempo en que se lanza la estrella viajera (fase orbital). Para este problema de dos parámetros, donde en principio tiene sentido variar el instante inicial dentro del período de la estrella doble, y el parámetro de impacto a lo largo de longitudes del orden de las que separan las componentes de la estrella doble, integrar numéricamente para hacer un mapa donde para cada parámetro de impacto, y tiempo relativo al período se clasifique la situación en i), ii) ó iii).

- iii) Para un parámetro de impacto fijo, hallar en función de la fase orbital el tiempo que tarda la estrella viajera en alejarse nuevamente una distancia R suficientemente grande. Detectar de este modo la tendencia del sistema a permanecer más o menos ligado.
- iv) Incluya en sus programas el cambio de coordenadas al centro de masa de los tres cuerpos, y el cálculo de la energía total, y si desea del impulso angular total, de modo de asegurarse un monitoreo del error total introducido en la solución por la discretización y el redondeo.

Tema 6 Resolución de problemas de contorno: Formación de capas límite

Considerar el siguiente problema de contorno:

$$\epsilon u'' = u' \quad u(0) = 0 \quad u(1) = 1 \quad (\epsilon > 0)$$

i) Hallar su solución analítica, y graficarla para varios valores de ϵ . Por ejemplo, utilice $\epsilon = 1, 0.1, 0.01$. ¿Qué observa? Esta formación de una delgada zona donde la solución varía en forma brusca se denomina una capa límite (debido a que el problema de hallar el movimiento de un fluido poco viscoso cerca de un obstáculo lleva a un problema en algún sentido similar).

ii) Resuelva el problema de contorno por el método de diferencias finitas, para varios valores de ϵ (los anteriores, por ejemplo), y note las fuertes oscilaciones que aparecen discretizando las derivadas en la forma habitual, si la malla de la discretización no es suficientemente fina.

iii) Escriba y resuelva analíticamente la recurrencia que obtiene al aplicar el método de diferencias finitas, y halle la causa de las oscilaciones que se manifiestan. Diga qué rango de valores de h debieran utilizarse de modo de evitar las oscilaciones.

iv) Resolver el problema mediante un método de shooting, con algún método de integración que utilice un paso de integración h fijo. Grafique el error máximo de la solución en función de h . Interprete. Notar de todos modos que la linealidad de la ecuación permite lograr que la estimación de la derivada correcta en el origen pueda ser lograda luego de una sola integración. ¿Se imagina cómo?

v) Trate de extender sus conclusiones al caso del problema de contorno no lineal

$$\epsilon u'' = u'u \quad u(0) = 0 \quad u(1) = 1 \quad (\epsilon > 0)$$

¿Qué clase de problema resulta si quiere plantearlo por diferencias finitas?

Trate de resolver analíticamente el problema, y resuélvalo por el método de corrección de tiro.

Ambos problemas son interesantes, pues se obtienen como soluciones estacionarias del problema de convección difusión

$$u_t + c \frac{\partial u}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

con $0 \leq x \leq 1$, $0 < t$. Reemplazando la constante c por u , se obtiene un caso particular de la ecuación de Navier-Stokes, que gobierna el comportamiento de un fluido incompresible.

Tema 7 Resolución de un problema de datos iniciales para la ecuación de Schroedinger

La ecuación de Schroedinger que da la evolución de la probabilidad de encontrar una partícula en determinado estado de un sistema cuántico, es:

$$i\hbar\Psi_t = \hat{H}\Psi \quad (7)$$

Aquí \hbar es una constante real positiva, $\Psi(x, t)$ es la función de onda del sistema, cuyo módulo cuadrado da la densidad de probabilidad de encontrar el sistema en una configuración determinada. Además \hat{H} es el operador hamiltoniano del sistema.

En el caso de una partícula libre de masa m , moviéndose en una sola dimensión espacial, el operador \hat{H} se reduce a

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Por lo tanto se debe resolver la ecuación en derivadas parciales:

$$i\Psi_t = \frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{xx}$$

i) Considere el método explícito en t :

$$\Psi(x, t+k) = \Psi(x, t) - i \frac{\hbar}{2m} \frac{k}{h^2} [\Psi(x+h, t) - 2\Psi(x, t) + \Psi(x-h, t)]$$

donde h, k son los incrementos en la malla en x y en t respectivamente. Ensáyelo para dato inicial

$$\Psi(x, 0) = \exp(-x^2) \quad x \in [-5, 5]$$

y con datos de contorno $\Psi(-5, t) = \Psi(5, t) = \Psi(\pm 5, 0)$. ¿Qué observa? Ensaye varios valores de h y de k .

ii) Utilice ahora el correspondiente método implícito:

$$\Psi(x, t+k) = \Psi(x, t) - i \frac{\hbar}{2m} \frac{k}{h^2} [\Psi(x+h, t+k) - 2\Psi(x, t+k) + \Psi(x-h, t+k)]$$

para repetir el cálculo anterior. ¿Qué observa?

iii) Realice un análisis de la estabilidad de ambos métodos.

Tema 8 Cálculo de Integrales por medio del método de Monte Carlo

Las técnicas basadas en el Método de Monte Carlo, emplean números aleatorios (o pseudo-aleatorios) para resolver una variada gama de problemas. En lo que sigue se propone el estudio de algunas aplicaciones al cálculo de integrales. El software para computadoras provee normalmente rutinas que proporcionan secuencias de números aleatorios distribuidos uniformemente en el $[0, 1]$. En Matlab, las sentencias *rand*, *rand(m,n)*, producen un número aleatorio o una matriz de $m \times n$ de números aleatorios con distribución uniforme en el $[0, 1]$, respectivamente.

i) Sean x_1, \dots, x_n una sucesión de números aleatorios con distribución uniforme en el $[0, 1]$. Verifique que una aproximación a la integral de una función f se puede obtener mediante:

$$\int_0^1 f(x) dx \sim \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

Utilice esta aproximación para varios n , en casos en que conozca la integral, y obtenga expresiones para el error en función de n .

ii) La extensión de estas ideas a m dimensiones es trivial:

$$\int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x^1, \dots, x^m) \sim \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i^1, \dots, x_i^m)$$

donde (x_i^1, \dots, x_i^m) , $i = 1 \dots n$ es una sucesión de m -uplas de elementos aleatorios con distribución uniforme en el $[0, 1]$. Use esta aproximación para calcular integrales en varias dimensiones, compare en algunos casos con las soluciones exactas, y grafique el error en función de n . Aplique esta técnica al cálculo de volúmenes en varias dimensiones.

iii) Compare, para obtener errores del mismo orden, el costo del método de Monte Carlo, con el costo de un método más tradicional (Simpson, o trapecios). En particular, es interesante analizar esto en función de la dimensión del espacio. Por ejemplo, intente aproximar el volumen de la bola unitaria en \mathbb{R}^m , mediante el método de Monte Carlo, y calculando integrales iteradas por el método que prefiera (¿conoce la respuesta exacta a este problema?).

iv) Un último ejemplo, no relacionado con integrales. Es el llamado problema de la aguja de Buffon. Suponga que tiene una hoja rayada, y una aguja de longitud igual a la distancia entre las rayas. Estime numéricamente la probabilidad de que la aguja, al ser arrojada al azar sobre la hoja rayada, intersecte alguna de las rayas. Si se anima, demuestre que dicha probabilidad es $2/\pi$. Grafique el error en función del número de tiradas.

Tema 9 Cálculo de autovalores para la ecuación de Schroedinger

El cálculo de autovalores para la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo tiene una gran importancia teórica y práctica. Se proponen en lo que sigue algunas formas simples de calcular los autovalores y autofunciones, que pueden ser fácilmente implementadas en Matlab.

Formalmente, el problema de calcular los autoestados de una partícula en un potencial consiste en hallar las soluciones Ψ_n , y los correspondientes autovalores E_n , del siguiente problema:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U(x, y, z))\Psi = 0$$

en todo \mathbb{R}^3 o en un dominio Ω con ciertas condiciones de contorno en el borde de Ω . El potencial $U(x, y, z)$ es una función dada de antemano.

i) Conociendo las autofunciones y autovalores del potencial de un oscilador armónico en una dimensión espacial, comparar las soluciones exactas con las soluciones aproximadas calculadas por diferencias finitas. Analizar en particular la dependencia del error en las primeras autofunciones con el paso de la malla de diferencias. Analizar la dependencia del error con el tamaño del dominio elegido. Analizar el error en los autovalores, para una malla fija.

ii) Trate de encontrar las autofunciones por un método de 'corrección de tiro'. Por ejemplo, aprovechando la simetría $x \rightarrow -x$, arranque del origen con valor 1 y derivada cero, para un determinado valor E . Integrando para x mayores, ajuste E de tal modo que la solución se mantenga acotada.

iii) Calcule aproximaciones de los autovalores y autofunciones por el método de Galerkin, con funciones de prueba adecuadas.

Tema 10 Comparación de métodos de integración: Un Ejemplo

Considere un péndulo de longitud L y masa m , tomando como coordenada el ángulo θ respecto de la vertical, con $\theta = 0$ correspondiendo al péndulo puesto para arriba.

i) Verifique que la ecuación de movimiento del péndulo es

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = \frac{g}{L} \sin(\theta)$$

ii) Considere los siguientes métodos para integrar una ecuación diferencial de segundo orden, donde u representa la velocidad ($\dot{\theta}$) y x la coordenada, y h es el paso de integración en t .

$$\begin{cases} u^{(n+1/2)} = u^{(n-1/2)} + hf^{(n)} \\ x^{(n+1)} = x^{(n)} + hu^{(n+1/2)} \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} x_p = x_n + hu_n \\ u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2}(f(x_n) + f(x_p)) \\ x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(u_n + u_{n+1}) = x_p + \frac{h^2}{4}(f(x_n) + f(x_p)) \end{cases} \quad (9)$$

Halle el error local de truncado de ambos métodos.

iii) Halle la recurrencia que se genera al aplicar cada uno de estos métodos a la ecuación del péndulo. Halle los puntos fijos cada uno de las recurrencias y decida si son estables o no, y si es posible, calcule también los puntos de período 2.

iv) Para distintos valores de h , haga mapas de las iteraciones, comenzando con varios valores iniciales distintos. Compare ambos métodos, y compare con las trayectorias que supone debieran ocurrir para el problema exacto.

v) Esto es sólo un esquema general, consúltenme para más detalles.

Referencias

R.H.Miller. A Horror Story about integration methods. J. Comp. Phys. 93, 469- 476 (1991).

Tema 11 Un sistema autónomo de segundo orden

Consideremos el problema de un planeador en el plano vertical xz , suponiendo que la fuerza de resistencia del aire es proporcional al cuadrado de la velocidad de vuelo, y que el ángulo de ataque del planeador es independiente del régimen de vuelo. Con estas suposiciones, los coeficientes aerodinámicos de la fuerza de resistencia del aire C_1 y de la fuerza de sustentación de las alas del planeador C_2 son constantes. Escribiendo las ecuaciones de movimiento del centro de masa del planeador, proyectando sobre la tangente y la normal a la trayectoria, se tiene:

$$\begin{aligned} m \frac{dv}{dt} &= -mg \sin(\theta) - \frac{1}{2} \rho S C_1 v^2 \\ mv \frac{d\theta}{dt} &= -mg \cos(\theta) + \frac{1}{2} \rho S C_2 v^2 \end{aligned} \tag{10}$$

donde m es la masa del planeador, S la superficie de las alas, ρ es la densidad del aire, g la aceleración de la gravedad, y donde las incógnitas son v el módulo de la velocidad, y θ el ángulo que forma la tangente a la trayectoria con el eje de las x .

Introduciendo las magnitudes adimensionales (verificar)

$$y = v \sqrt{\frac{\rho S C_2}{2mg}} \quad \tau = t \sqrt{\frac{\rho g S C_2}{2m}} \quad a = \frac{C_1}{C_2}$$

se pueden reescribir las ecuaciones (10) en la forma

$$\dot{y} = -\sin(\theta) - ay^2 \quad \dot{\theta} = \frac{y^2 - \cos(\theta)}{y} \tag{11}$$

Notar que las trayectorias sólo dependen del parámetro positivo a . Considere sólo la región $y \geq 0$ (correspondiente al planeador avanzando para adelante).

i) Suponga $a = 0$ (no hay rozamiento). Halle numéricamente las trayectorias del sistema en la superficie del cilindro. Identifique puntos de equilibrio, y confírmelos analíticamente. Si puede hallar analíticamente las trayectorias, hágalo. Identifique cada uno de los diferentes regímenes de vuelo.

ii) Suponga ahora $a > 0$. Realice numéricamente un mapa de las trayectorias del sistema en la superficie del cilindro, para varios valores de a , e identifique nuevos puntos de equilibrio. Halle analíticamente la posición de dichos puntos de equilibrio. Describa las trayectorias posibles, ¿El planeador tiende a comportarse de algún modo particular? Identifique las trayectorias estables.

Tema 12 Resolución de la ecuación de Laplace por medio de Monte Carlo

Considere la ecuación de Laplace en 2-D:

$$\Delta u = 0, \quad x \in \Omega$$

con condición de contorno

$$u|_{\partial\Omega} = g(x)$$

Esta ecuación modela por ejemplo el potencial eléctrico dentro de un dominio Ω cuyo contorno se encuentra a potencial $g(x)$, o el estado estacionario de la temperatura en el dominio Ω cuando el borde se mantiene a temperatura $g(x)$.

El algoritmo de Monte Carlo consiste en lo siguiente. A partir de la discretización por diferencias finitas de la ecuación de Laplace, sobre una malla suficientemente fina, obtener probabilidades de transición entre los nodos. Para conocer el valor de la solución en un nodo de la malla, se larga una partícula desde ese nodo y se la hace evolucionar de acuerdo a las probabilidades de transición calculadas, hasta que choca con el borde, almacenándose el valor del dato de contorno en ese punto. Se repite este procedimiento con una cantidad M de partículas, y se estima el valor de la solución como el promedio de esos valores.

En lo siguiente se propone calcular la solución del Laplaciano en algún dominio del plano. En particular, hallar la solución en la corona circular $\Omega = 1 \leq r \leq 3, 0 \leq \theta < 2\pi$ de la ecuación de Laplace con dato de contorno $u(r = 1, \theta) = 4, u(r = 3, \theta) = 6$.

i) Defina una malla rectangular, por ejemplo $x_i = -3 + 6i/N, y_i = -3 + 6i/N$, con N un valor adecuado (podría comenzar con $N \sim 10$, por ejemplo).

ii) La discretización habitual del laplaciano conduce a la siguiente ecuación:

$$\Delta u \sim \frac{u_{i+1,j} + u_{i,j+1} + u_{i-1,j} + u_{i-1,j-1} - 4u_{i,j}}{h^2} = 0$$

lo que da las siguientes probabilidades de transición: *una partícula en el nodo i, j tiene probabilidad $1/4$ de pasar a cualquiera de los cuatro nodos adyacentes.*

iii) Utilice estas probabilidades de transición y el procedimiento descrito anteriormente para calcular la solución en el punto $(x, y) = (2, 0)$. Compare con la solución exacta $4 + 2 \log(2)/\log(3)$. Repita este cálculo para varios valores de N , y para varios números diferentes de partículas (valores de $M \sim 1000$ o mayores, podrían ser adecuados). Haga gráficos del error en función de N y de M . Si lo desea, experimente con algún otro dominio, donde no sea fácil calcular la solución analítica.

Tema 13 Oscilaciones de una membrana cuadrada I

El problema de la oscilación de una membrana cuadrada fija por sus bordes, puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas:

$$u_{tt} = c^2 \Delta u \quad (x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1]$$

con condición de contorno:

$$u|_{\partial\Omega} = 0$$

Los datos iniciales adecuados son por ejemplo la posición inicial de la membrana, y su velocidad.

i) Discretice el dominio con una malla $(x_i, y_j) = (i/N, j/N)$, $0 \leq i, j \leq N$, y el tiempo $t_k = kdt$. Siendo las incógnitas $u_{i,j}^n = u(x_i, y_j, t_n)$, los valores de la función en los nodos de la malla, la ecuación puede discretizarse

$$u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j}^{n-1} - 2u_{i,j}^n = \frac{c^2 dt^2}{h^2} [u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n - 2 + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n] \quad (12)$$

donde $h = 1/N$. Por lo tanto, suponiendo conocidos la posición de la membrana en a tiempo 0 y a tiempo $-dt$, se puede calcular la posición para cualquier t_k posterior. La solución a tiempo cero se conoce por el dato inicial. La condición inicial en la derivada respecto del tiempo le permite plantear una ecuación adicional

$$u_{i,j}^1 - u_{i,j}^{-1} = 2dt \frac{du}{dt}(x_i, y_i, t_0)$$

de la cual despejar el valor de $u_{i,j}^{-1}$. Reemplazando este valor en la ecuación 12, para $n = 0$, se obtiene el valor de u_1 .

ii) Escriba un programa que resuelva el problema de la membrana, con dato de contorno 0, y para datos iniciales cualesquiera. Grafique las soluciones para algunos casos que le interesen.

iii) Calcule la solución a tiempo 1 correspondiente a una membrana con posición inicial

$$u_0(x, t) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$$

y velocidad inicial cero. Comparando con la solución exacta $u(x, y, t) = \sin(\sqrt{2}\pi ct) \sin(\pi x) \sin(\pi y)$, grafique los errores en función de h , dt . ¿Cuál es el orden de convergencia del método?

iv) Si se anima, calcule las autofunciones del problema (esto le va a dar los modos normales de oscilación). Hasta podría hacer una animación, para ver la oscilación en el tiempo.... ¡Consulte!

Tema 14 Ecuación de Burgers

Considerar la ecuación en derivadas parciales de primer orden:

$$u_t + uu_x = 0 \quad x \in \mathbb{R}, t > 0$$

con dato inicial

$$u(x, 0) = u_0(x) \geq 0$$

y condiciones de contorno:

$$u(-\infty, t) = u_0(-\infty)$$

i) Utilizar como dato inicial $u_0(x) = \frac{e^x}{1 + e^x}$.

Resolver utilizando el método explícito de primer orden en t :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t u_i^n \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right)$$

Piense cómo implementar las condiciones de contorno. ¿Necesita una condición de contorno a la derecha? Utilice $\Delta x = 0.1$. Pruebe con valores de $\Delta t = 0.2$, y $\Delta t = 0.05$. ¿Qué observa?

ii) Repetir el análisis para $u_0(x) = \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}}$.

iii) Para el problema del ítem ii) utilizar el esquema explícito con "upwind":

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t u_i^n \left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \right)$$

Utilizar $\Delta x = 0.1$, y $\Delta t = 0.1$, $\Delta t = 0.01$, y $\Delta t = 0.001$ Analizar los resultados.

En todos los casos, dibujar los perfiles $u(\cdot, t)$ obtenidos a varios tiempos diferentes, y compararlos. Analizar la influencia del dato de contorno, y de qué depende la aparición de un shock.

Tema 15 Ecuaciones en Derivadas Parciales: Método de líneas II

Considerar la ecuación en derivadas parciales:

$$u_t = u_{xx} \quad (13)$$

llamada ecuación del calor, para $x \in [0, 1]$, con condiciones de contorno

$$u(0, t) = 0 \quad u(1, t) = 0 \quad (14)$$

y dato inicial

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) \quad (15)$$

Esta ecuación refleja la evolución de la temperatura en una barra que ocupa el segmento $[0, 1]$, sin pérdidas laterales de calor, y con una temperatura inicial dada por 15. Además los extremos se mantienen a temperatura igual a cero para todo t . El problema con este tipo de condiciones de contorno se denomina problema de Dirichlet. Si en vez de 14 se tienen datos sobre las derivadas:

$$u_x(0, t) = 0 \quad u_x(1, t) = 0 \quad (16)$$

se tiene el llamado problema de Neumann.

i) Para el problema de Dirichlet, convierta el problema con la ecuación en derivadas parciales en un problema para un sistema de ecuaciones ordinarias, de la siguiente manera:

Defina una grilla $0 = x_0 < \dots < x_n = 1$, y defina las funciones incógnita $\phi_i(t)$, $i = 0, \dots, n$, como los valores de la solución $\phi_i(t) = u(x_i, t)$. Verifique discretizando la ecuación 13 que se obtiene un sistema de ecuaciones ordinarias para las ϕ_i , $0 < i < n$. Las condiciones 14 ó 16 pueden ser usadas para generar ecuaciones para ϕ_0 y ϕ_n respectivamente.

ii) Utilice esta técnica para resolver el problema 13, con dato inicial $u(x, 0) = \sin(\pi x)$, y condiciones de contorno 14. Obtenga la solución exacta de este problema, y compare los valores obtenidos para $t = 1$.

iii) Analice cómo depende el tiempo de integración del paso de la malla h . ¿Qué observa? ¿A qué se debe? Trate de implementar un algoritmo que no sufra estos problemas, y repita los cálculos con él.

TEMA 16 Método de las potencias para el cálculo de autovalores de una matriz

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diagonalizable (i.e., existe una base de autovectores) con la propiedad que tiene un solo valor propio de módulo máximo, entonces podemos ordenar sus autovalores de la siguiente manera:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$$

Consideramos un vector $v \in \mathbb{R}^n$, cualquiera no nulo, y la sucesión dada por

$$v_k = A^k v'$$

Aunque en general **no vale** que $v_k \rightarrow w$, lo que sí es cierto es que a medida que $k \rightarrow +\infty$, los vectores v_k se van alineando con el autovector w del autovalor 1, con la única limitación que el vector inicial no sea ortogonal a w (para la demostración ver Kincaid, Análisis Numérico, pg 234 en adelante).

A partir de esto podemos obtener el valor de λ_1 mediante el cociente de Rayleigh:

$$\lambda_1 = \text{frac}\langle Aw, w \rangle \langle w, w \rangle.$$

Un método práctico para el cálculo de w y de λ_1 es, sabiendo que $v_k = \lambda_1^k(w + \varepsilon^k)$, (donde $\varepsilon^k \rightarrow 0$), podemos considerar una función lineal cualquiera $\phi(x)$ (por ejemplo la que evalúa una coordenada de un vector), entonces

$$r_k := \frac{\phi(v_{k+1})}{\phi(v_k)} = \lambda_1 \frac{\phi(w) + \phi(\varepsilon^{k+1})}{\phi(w) + \phi(\varepsilon^k)} \rightarrow \lambda_1. \quad (17)$$

En la implementación práctica también conviene ir normalizando los v_k para descartar los casos en que los v_k convergen a 0, o divergen en módulo.

Matrices simétricas Si $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es simétrica y supongamos que tiene sus n autovalores de distintos módulos $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n| \geq 0$

entonces por el método antes descripto podemos calcular λ_1 y w_1 : Queremos hallar un método que nos permita calcular los otros autovalores. Para esto usamos el siguiente resultado:

Si A es como en el párrafo anterior, definimos $v_1 = \frac{w_1}{\|w_1\|}$ entonces la matriz

$$A - \lambda_1 v_1 v_1^t$$

es simétrica y tiene por autovalores a $0, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ (verifíquelo). Además, si v_2 es el autovector de B asociado al autovalor λ_2 , es también autovector de A asociado al mismo autovalor.

Por lo tanto, para calcular λ_2 podemos aplicarle el método a B : ¡Cómo seguiría para calcular λ_3 y todos los demás autovalores?.

Aceleración (Aitken)

Si $(r_k)_k$ es la sucesión de (17), consideremos la nueva sucesión

$$s_k = \frac{r_k r_{k+2} - r_{k+1}^2}{r_{k+2} - 2r_{k+1} + r_k}.$$

La sucesión $s_k \rightarrow \lambda_1$ y lo hace más rápido que r_k .

Ejemplos

En cada uno de los siguientes casos encuentre el autovalor de módulo mayor y su correspondiente autovector. Si la matriz es simétrica encuentre todos los autovalores. Muestre en una tabla como se comporta el error del método e intente deducir empíricamente cuál es el orden del mismo. Repita la estimación para la sucesión de Aitken:

1. $A = \begin{pmatrix} 6 & 5 & -5 \\ 2 & 6 & -2 \\ 2 & 5 & -1 \end{pmatrix}$, comenzando en $v = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Sugerencia: tome como función lineal para el cálculo práctico a $\phi(x_1, x_2, x_3) = x_2$.

2. $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$. Elija el vector inicial v y la función ϕ .

TEMA 17 Método de descenso más rápido y del gradiente conjugado para la resolución de sistemas lineales

Dado el sistema $Ax = b$ con A matriz simétrica y definida positiva, sabemos que (ver Kincaid, Análisis Numérico, pag. 210 en adelante) resolver este sistema es equivalente a minimizar la forma cuadrática:

$$q(x) = \langle x, Ax \rangle - 2\langle x, b \rangle.$$

El método del descenso más rápido consiste en dar una sucesión de valores x_k tal que $q(x_{k+1}) \leq q(x_k)$ y que la igualdad sólo se produzca en algún caso especial. La idea genérica es obtener x_{k+1} a partir de x_k y de otro vector v_k que puede ya estar dado o que se lo vaya construyendo durante la evolución del método. Lo que se busca es minimizar la forma cuadrática $q(x)$ si nos movemos desde x en una dirección v , es decir que se minimiza la función de una variable $q(x + tv)$ en la variable t ; tenemos que el mínimo sobre este rayo se produce si $\hat{t} = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle}$ y por lo tanto

$$q(x + \hat{t}v) = q(x) - \langle v, b - Ax \rangle^2 / \langle v, Av \rangle$$

A partir de esto, se genera la sucesión

$$x_{k+1} = x_k + t_k v_k$$

donde $t_k = \langle v_k, b - Ax_k \rangle / \langle v_k, Av_k \rangle$ y la sucesión v_k es una conveniente (esta elección es la que da origen a los distintos métodos).

Descenso más rápido El método del descenso más rápido se define tomando $v_k = -\nabla q(x_k)$ (o un múltiplo positivo de él). La practicidad del método reside en que el residuo $r_k = b - Ax_k$ apunta en la dirección de $-\nabla q(x_k)$ (comprobarlo), por lo tanto tomamos $v_k = \frac{r_k}{\|r_k\|}$ para generar la sucesión aproximante x_k .

Dirección conjugada La idea es considerar una base $\{u_1, \dots, u_n\}$ ortogonal según el producto interno $\langle u, v \rangle_A = \langle u, Av \rangle$, entonces vale que la secuencia dada por

$$x_k = x_{k-1} + \frac{\langle b - Ax_{k-1}, u_k \rangle}{\langle u_k, Au_k \rangle} \quad 1 \leq k \leq n,$$

arrancando desde un punto x_0 cualquiera. Una gran ventaja de este método es que, en teoría, en n pasos alcanza la solución del sistema, pero en la práctica es muy sensible a los errores.

Gradiente conjugado Se basa en la idea anterior pero no da a priori una base $\{u_1, \dots, u_n\}$ ortogonal según A ; sino que va construyéndola con la propiedad adicional que la sucesión de residuos $r_k = b - Ax_k$ forman un sistema ortogonal en el sentido usual: $\langle r_i, r_j \rangle = 0$ si $i \neq j$.

El algoritmo es el siguiente: se arranca de un x_0 cualquiera, se define $r_0 = b - Ax_0$ y $v_0 = r_0$: En el paso k -ésimo ya tenemos definido x_k , r_k y v_k ; para pasar al $k + 1$ -ésimo se define siguiendo el orden,

$$\begin{aligned} t_k &= \frac{\langle r_k, r_k \rangle}{\langle r_k, Av_k \rangle} \\ x_{k+1} &= x_k + t_k v_k \\ r_{k+1} &= r_k - t_k Av_k \\ s_k &= \frac{\langle r_{k+1}, r_{k+1} \rangle}{\langle r_k, r_k \rangle} \\ v_{k+1} &= r_{k+1} + s_k v_k, \end{aligned}$$

y se para la iteración cuando r_k es suficientemente pequeño en la norma usual.

Ejemplos Resuelva cada uno de los siguientes sistemas por los distintos métodos que se mencionaron, y también por los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel. Compara la velocidad de convergencia de todos ellos.:

1. $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ -2 & -10 & 0 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -12 \\ 2 \end{pmatrix}$, comenzando en $v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.
2. $Ax = b$ en donde A es la matriz de Hilbert de $n \times n$ y $b_i = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^n a_{ij}$.

TEMA 18 **Oscilaciones de una membrana cuadrada II- Método de separación de variables**

El problema de la oscilación de una membrana cuadrada ...ja por sus bordes, puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas con condición de contorno:

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2 \Delta u & (x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (18)$$

Aquí el operador $\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$. Los datos iniciales adecuados son por ejemplo la posición inicial de la membrana, y su velocidad inicial. Sin pérdida de generalidad supondremos que $c = 1$: Resolviendo por el método de separación de variables se buscan soluciones de la forma $U(t, x, y) = T(t)Z(x, y)$; de modo que

$$\frac{T''(t)}{T(t)} = \frac{\Delta Z(x, y)}{Z(x, y)} = \lambda,$$

para alguna constante λ . Usando la condición de contorno tenemos que

$$Z|_{\partial\Omega} = 0$$

es decir que λ es un autovalor de la ecuación de Laplace con datos de contorno Dirichlet homogéneo

$$\begin{cases} \Delta Z - \lambda Z = 0 & (x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ Z|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (19)$$

Se sabe que la ecuación (19) tiene una sucesión de autovalores negativos $\{\lambda_n\}_n$ con correspondientes autofunciones $Z_n(x, y)$ y que $\lambda_n \rightarrow -\infty$ cuando $n \rightarrow +\infty$. La correspondiente función T_n es una solución de la ecuación

$$T'' - \lambda_n T = 0$$

Si $\lambda_n = -\omega_n^2$ resulta que $T_n(t) = a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)$, y de este modo, las soluciones de (18) son de la forma

$$u(t, x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)) Z_n(x, y) \quad (20)$$

donde los valores a_n y b_n se obtienen a partir de las condiciones iniciales. A los autovalores λ_n se los llama los *modos normales de oscilación*.

Para hallar las soluciones en la forma (20) necesita calcular los autovalores λ_n y las autofunciones Z_n del problema de Laplace.

Ejercicios Introduzca una discretización del dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ con una malla $(x_i, y_j) = (i/N, j/N)$, $0 \leq i, j \leq N$. Llamamos $h = 1/N$.

Ejercicio 1: Cálculo de los λ_n y los Z_n :

Discretizamos la ecuación (19) sobre la malla introducida y obtenemos el esquema

$$\frac{z_{i+1,j} - 2z_{i,j} + z_{i-1,j}}{h^2} + \frac{z_{i,j+1} - 2z_{i,j} + z_{i,j-1}}{h^2} = \lambda z_{i,j} \quad i, j = 1, \dots, N.$$

1. Reescribir esto como un problema lineal $Az = z$.
2. Aplicando el método de las potencias aproximar el primer autovalor de A y la primera autofunción. Probar con distintos valores de h .
3. Iterar el método de las potencias para hallar $\lambda_1, \lambda_2 \dots$ y sus correspondientes autofunciones.

Ejercicio 2: Introduzca los autovalores y las autofunciones halladas en el ejercicio anterior en la expresión (20) para resolver el problema con dato inicial

$$u_0(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$$

y velocidad inicial cero (es decir $u_t(0, x, y) = 0$).

Introduciendo una discretización en el tiempo obtenga una animación usando el comando *movie* de Matlab (ver también el comando *getframe*).

TEMA 19 **Descomposición en Valores Singulares**

Pedir Material

TEMA 20 **Splines Cúbicos**

Pedir Material