

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS



**DIFERENCIAS FINITAS EXACTAS
PARA ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES
EN UNA DIMENSIÓN ESPACIAL**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

LICENCIADO EN FÍSICA

PRESENTA:

SAMUEL CARDEÑA SÁNCHEZ

Ensenada, Baja California, México. Agosto de 2008

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS

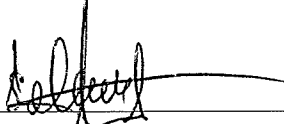
DIFERENCIAS FINITAS EXACTAS
PARA ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES
EN UNA DIMENSIÓN ESPACIAL

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

SAMUEL CARDEÑA SÁNCHEZ

APROBADO POR:



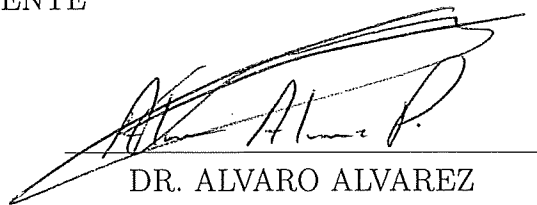
DRA. SELENE SOEORZA CALDERÓN

PRESIDENTE



DR. CLAUDIO ISMAEL
VALENCIA YAVES

SECRETARIO



DR. ALVARO ALVAREZ
PARRILLA

1ER. VOCAL

DEDICATORIA

Para:

Mi madre, en usted he conocido del Amor de Dios

AGRADECIMIENTOS

Estoy plenamente agradecido con Dios. Sin Cristo nada soy, sin Cristo nada tengo.

Le doy las gracias a mi directora de tesis Selene Solorza Calderón, sin ella no hubiera sido posible la realización de este proyecto. Siempre conté con su apoyo, asesorándome y animándome día a día. Gracias Selene.

A mis padres, Salomón y Ma. Eugenia, símbolo de amor y responsabilidad. Mis hermanos Brenda y Salomón que son parte de mí.

A los miembros del comité de tesis: Claudio Valencia, Alvaro Alvarez, y a mis profes Gloria Rubí y Jorge Villavicencio.

A Lysandra mi inspiración, familiares y amigos.

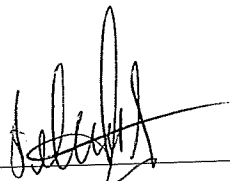
RESUMEN de la Tesis de Samuel Cardaña Sánchez presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física. Ensenada, Baja California, México, agosto de 2008.

DIFERENCIAS FINITAS EXACTAS PARA ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES EN UNA DIMENSIÓN ESPACIAL

Debido a su sencillez de implementar en modelos que involucran ecuaciones diferenciales parciales, los esquemas de diferencias finitas son uno de los métodos más empleados en las simulaciones numéricas. En esta metodología se parte de la hipótesis de que existe una equivalencia entre las derivadas continuas (dominio continuo) y las ecuaciones de diferencias (dominio discreto). Esta "supuesta" equivalencia proviene de truncar expansiones en serie de Taylor de la función a encontrar, lo que obviamente origina que la solución numérica (dominio discreto) sólo sea una aproximación a la solución analítica (dominio continuo). Si en vez de truncar la expansión en serie de Taylor de la función se toma la serie en su entidad completa, ahora sí se tendría una equivalencia apropiada y la solución numérica representaría fielmente a la solución analítica. A los esquemas de diferencias finitas que se construyen tomando en consideración las series de Taylor de la función en su entidad completa se les denomina diferencias finitas exactas.

En este trabajo de tesis se desarrolla una metodología para construir esquemas de diferencias finitas exactas para las ecuaciones de calor, onda, Poisson, Laplace y Schrödinger en una dimensión espacial.

Resumen aprobado:



Dra. Selene Solorza Calderón

ÍNDICE GENERAL

1.. <i>Introducción</i>	1
1.1. <i>Diferencias Finitas</i>	2
1.2. <i>Convergencia y Estabilidad</i>	2
1.3. <i>Diferencias Finitas Exactas</i>	3
<i>Parte I Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP)</i>	5
2.. <i>Ecuación de Calor</i>	8
3.. <i>Ecuación de Onda</i>	15
4.. <i>Ecuación de Poisson</i>	19
4.1. <i>Ecuación de Laplace</i>	22
5.. <i>Ecuación de Schrödinger</i>	24
<i>Parte II Diferencias Finitas (DF)</i>	28
6.. <i>Ecuación de Calor</i>	30
6.1. <i>Ejemplo Numérico</i>	35
7.. <i>Ecuación de Onda</i>	41
7.1. <i>Ejemplo Numérico</i>	42
8.. <i>Ecuación de Poisson</i>	47
8.1. <i>Ejemplos Numéricos</i>	48
8.1.1. $f(x) = q$	48
8.1.2. <i>Ecuación de Laplace ($f(x) = 0$)</i>	49
9.. <i>Ecuación de Schrödinger</i>	52
9.1. <i>Ejemplo Numérico</i>	53

<i>Parte III Diferencias Finitas Exactas (DFE)</i>	55
10..Ecuación de Calor	57
10.1. Ejemplo Numérico	60
11..Ecuación de Onda	63
11.1. Ejemplo Numérico	65
12..Ecuación de Poisson	67
13..Ecuación de Schrödinger	70
13.1. Ejemplo Numérico	71
14..Conclusiones	73

ÍNDICE DE FIGURAS

6.1. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2,1701 \times 10^{-4}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$	37
6.2. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-3}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$	38
6.3. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$	39
6.4. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2}cm$	40
7.1. Posición de la cuerda para $t = 1,25 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$. . .	43
7.2. Posición de la cuerda para $t = 1,55s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$	44
7.3. Posición de la cuerda para $t = 3,80s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$	45
7.4. Posición de la cuerda para $t = 3,80s$ y $\Delta x = 2,0 \times 10^{-2}cm$	46
8.1. Distribución de la temperatura en una varilla sometida a una fuente constante de calor.	49
8.2. Potencial electrostático de un capacitor eléctrico.	51
9.1. Densidad de probabilidad para un electrón que se mueve libremente dentro de una caja unidimensional.	54
10.1. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2}cm$	61
10.2. Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 1,9792 \times 10^{-7}s$ y $\Delta x = 1 \times 10^{-4}cm$	62
11.1. Posición de la cuerda para $t = 3,8s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2}cm$	66
13.1. Densidad de probabilidad para un electrón que se mueve libremente dentro de una caja unidimensional.	72

1. INTRODUCCIÓN

La mayoría de las propiedades cualitativas y cuantitativas de algún determinado fenómeno físico se pueden representar mediante ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, con condiciones iniciales y de frontera válidas en algún dominio. El siguiente paso es encontrar la solución a dicho problema, sin embargo, esta etapa es una de las más complicadas ya que sólo un número limitado de estos modelos matemáticos cuenta con solución analítica [3]. Cuando nos enfrentamos a este problema, lo más usual es recurrir a técnicas numéricas que nos permitan describir a groso modo la forma de la solución del fenómeno físico en cuestión. Para esto, es muy común discretizar el dominio de la solución, en donde el conjunto infinito de números que representan en su totalidad a la función o las funciones incógnitas del problema a resolver son sustituidas mediante un número finito de parámetros. Aunque esta técnica puede envolver un número grande de elementos y de operaciones algebraicas, gracias a los avances computacionales, calcularlos toma tiempos relativamente muy cortos [4]. Sin embargo, cabe hacer notar que la solución obtenida mediante esta representación discreta por lo regular suele ser sólo una aproximación a la solución analítica.

Uno de los métodos más empleados para resolver numéricamente problemas que involucran ecuaciones diferenciales es el de diferencias finitas, debido a su sencillez en la implementación computacional.

1.1. *Diferencias Finitas*

El método de diferencias finitas consiste en sustituir las derivadas parciales presentes en el modelo matemático (dominio continuo) por un número finito de ecuaciones algebraicas (dominio discreto). Ahora, el valor de los puntos seleccionados en el dominio discreto se convierten en las incógnitas, en lugar de la distribución espacial continua de la variable dependiente. Entonces, en lugar de resolver una ecuación diferencial el problema se replanteó a resolver un sistema de ecuaciones algebraicas, que para asegurar que su solución concuerde con la solución analítica de la ecuación diferencial, debe de satisfacer las condiciones de estabilidad y convergencia.

1.2. *Convergencia y Estabilidad*

La condición de convergencia no siempre es fácil de verificar, ya que en ella se establece que la solución numérica tienda a la solución analítica conforme incrementa el número de iteraciones en el esquema de recurrencia [4]. Esto se puede demostrar en forma general sólo en algunos casos, como los problemas que se plantean en este trabajo.

Para que un esquema de recurrencia sea estable se debe de cumplir que la solución numérica permanezca acotada conforme se incrementa el número de iteraciones en dicho esquema.

Cuando se trabaja con diferencias finitas una consecuencia inmediata de la condición de estabilidad es que los errores, intrínsecos en su construcción, deben permanecer acotados conforme el número de iteraciones tiende a infinito. Esta condición es de gran importancia, ya que se restringe el tamaño de paso o de muestreo (distancia entre los puntos) al discretizar el dominio continuo, y se le denomina condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy en honor a Richard Courant, Kurt Friedrichs y Hans Lewy que la describieron en 1928 [4].

1.3. *Diferencias Finitas Exactas*

En la actualidad, ¿existe un método numérico que permita encontrar la solución discreta a aquellos modelos que involucren ecuaciones diferenciales parciales sin la necesidad de preocuparse por satisfacer las condiciones de estabilidad y convergencia? Dicha necesidad surge de la forma en que se construyen los esquemas de diferencias finitas, es decir, de utilizar las series de Taylor (de la función incógnita) truncadas. En el momento en que se pueda integrar en el esquema discreto la serie completa y al utilizar las relaciones presentes entre la función y sus derivadas, automáticamente se incluiría en la representación discreta toda la información planeada desde un inicio, por lo que al resolver este esquema discreto su solución sería equivalente a la solución continua, es por eso que a este tipo de representaciones se les conoce como diferencias finitas exactas (DFE). De esta manera, implícitamente

te los esquemas de diferencias finitas exactas son estables y convergen a la solución buscada, por lo que automáticamente son independientes del tamaño de muestreo [5].

El objetivo de este trabajo de tesis es desarrollar una metodología para construir esquemas de diferencias finitas exactas. Realizar un análisis de los errores intrínsecos en dichos esquemas y compararlos con los de los esquemas tradicionales. Y mediante ejemplos numéricos para las ecuaciones de calor, onda, Poisson, Laplace y Schrödinger, mostrar cómo prácticamente los errores generados con los esquemas de diferencias finitas exactas son prácticamente nulos.

Esta tesis está dividida en tres partes y cada una de ellas está escrita de manera independiente, esto con la finalidad de que el lector pueda enfocarse al capítulo de su interés sin la necesidad de estar constatando datos de los capítulos anteriores.

En la primera parte (capítulo 2 al 5) se presenta la forma estandar de obtener la solución analítica para las ecuaciones de calor, onda, Poisson, Laplace y Schrödinger. En la segunda parte (capítulo 6 al 9) se construyen los esquemas de diferencias finitas tradicionales, posteriormente se aplican estas representaciones a problemas de importancia al área de la física y se realiza el análisis de error de la solución numérica. En la tercera parte (capítulo 10 al 13) se muestra cómo se construyen los esquemas de diferencias finitas exactas y se aplican a los mismos problemas físicos de la segunda parte de este trabajo, para realizar una comparación entre las soluciones numéricas de los esquemas tradicionales y de los exactos.

Parte I

ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES (EDP)

La mayoría de los fenómenos físicos se pueden representar mediante ecuaciones diferenciales parciales, en particular las de segundo orden se clasifican habitualmente dentro de tres tipos [6]:

- Parabólicas: Ecuación de calor.
- Hiperbólicas: Ecuación de onda.
- Elípticas: Ecuación de Poisson y Laplace.

La disipación de calor en una varilla o el flujo de calor a través de una pared delgada son ejemplos típicos que se modelan con la ecuación de calor. La ecuación de onda surge casi inevitablemente en el estudio de fenómenos que involucren la propagación de ondas en un medio continuo, por ejemplo, las olas de un océano, las ondas acústicas y electromagnéticas en la atmósfera, o las ondas elásticas en un cuerpo sólido. Problemas de electrostática, gravitación, ingeniería mecánica y física teórica son tratados mediante la ecuación de Poisson.

Otra ecuación muy importante en el campo de la física es la ecuación de Schrödinger, al establecer que sea independiente del tiempo, con ella se modela el comportamiento de las partículas en escalas atómicas, moviéndose libremente o bajo la influencia de algún potencial electrostático en forma escalonada, barrera, caja, etc. Las aplicaciones de esta ecuación forman parte de la evolución primordial en los avances tecnológicos.

A continuación se mostrará la manera típica de construir la solución analítica de la ecuación de calor, de onda, de Poisson y Schrödinger.

2. ECUACIÓN DE CALOR

La ecuación de calor en una dimensión espacial está dada por

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.1)$$

donde $u(x, t)$ representa la temperatura en el objeto unidimensional en el tiempo t y la posición x , y c es la constante de difusión de calor.

Supondremos que el objeto se encuentra aislado, por lo tanto $u(x, t)$ satisface las siguientes condiciones de frontera

$$u(0, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2.2)$$

$$u(L, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2.3)$$

donde L es la longitud.

Además, asumiremos que se tiene una distribución de temperatura inicial de la forma $f(x)$, entonces $u(x, t)$ satisface la siguiente condición inicial

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 < x < L. \quad (2.4)$$

Si a $u(x, t)$ la podemos separar en dos funciones: X y T , de tal manera que la función X sólo dependa de la variable x y la función T sólo dependa de la variable t (método conocido como separación de variables), entonces a la solución de la ecuación diferencial (2.1) la podemos escribir como

$$u(x, t) = X(x)T(t). \quad (2.5)$$

Como $u(x, t)$ es solución de la ecuación (2.1), entonces (2.5) debe satisfacerla. Al sustituir (2.5) en (2.1) se obtiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} (X(x)T(t)) = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (X(x)T(t)), \quad (2.6)$$

como $T(t)$ es independiente de x entonces $\frac{\partial}{\partial t} (X(x)T(t)) = X(x) \frac{dT(t)}{dt}$. Análogamente $\frac{\partial^2}{\partial x^2} (X(x)T(t)) = T(t) \frac{d^2 X(x)}{dx^2}$, y después de dividir (2.6) entre (2.5), la ecuación (2.6) se reescribe como

$$\frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = c^2 \frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2}. \quad (2.7)$$

El miembro izquierdo de (2.7) sólo depende de la variable t , mientras que el derecho es función solamente de x , por lo que esta igualdad se satisface únicamente si ambos miembros tienen el mismo valor constante. Por simplicidad en los cálculos posteriores se toma como constante a $-\omega^2$, es decir, la ecuación(2.7) es válida sólo si se cumple que

$$\frac{1}{c^2 T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -\omega^2. \quad (2.8)$$

Entonces, a la ecuación (2.8) la podemos separar en dos ecuaciones diferenciales ordinarias que satisfacen

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -\omega^2, \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{c^2 T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = -\omega^2. \quad (2.10)$$

Por lo tanto, se ha transformado el problema original, de encontrar la solución de la ecuación de calor (2.1), a encontrar la solución de dos ecuaciones diferenciales ordinarias independientes cuyas soluciones se obtienen sencillamente.

La solución para la ecuación (2.9) es

$$T(t) = Ce^{-c^2\omega^2 t}, \quad (2.11)$$

y la de la ecuación (2.10) es

$$X(x) = \tilde{A}e^{i\omega x} + \tilde{B}e^{-i\omega x}. \quad (2.12)$$

Usando la relaciones

$$\begin{aligned} e^{i\xi y} &= \cos(\xi y) + i\operatorname{sen}(\xi y), \\ e^{-i\xi y} &= \cos(\xi y) - i\operatorname{sen}(\xi y), \end{aligned} \quad (2.13)$$

en la ecuación (2.12), y después de agrupar apropiadamente, esta se reescribe como

$$X(x) = A\cos(\omega x) + B\sen(\omega x), \quad (2.14)$$

donde $A = \tilde{A} + \tilde{B}$ y $B = i(\tilde{A} - \tilde{B})$.

Sustituyendo las ecuaciones (2.11) y (2.14) en (2.5), tenemos que la solución de la ecuación de calor (2.1) es

$$u(x, t) = [A\cos(\omega x) + B\sen(\omega x)] e^{-c^2\omega^2 t}. \quad (2.15)$$

Hasta aquí, sólo se ha obtenido la forma general de la solución de la ecuación de calor, sin embargo, el problema de interés es estudiar cómo se distribuye la temperatura en un cuerpo aislado dada una distribución inicial, por lo que es necesario que (2.15) satisfaga las condiciones de frontera (2.2-2.3) e inicial (2.4).

Aplicando la condición (2.2) en la ecuación (2.15) obtenemos que

$$\begin{aligned} 0 = u(0, t) &= [A\cos(\omega 0) + B\sen(\omega 0)] e^{-c^2\omega^2 t} \\ &= Ae^{-c^2\omega^2 t}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

y, como ω y c son constantes arbitrarias, entonces $A = 0$. Por lo que (2.15) se simplifica a

$$u(x, t) = B\sen(\omega x) e^{-c^2\omega^2 t}. \quad (2.17)$$

Además, como el objeto se encuentra aislado en su extremo derecho (2.3), entonces de la ecuación (2.17) obtenemos que

$$0 = u(L, t) = B \operatorname{sen}(\omega L) e^{-c^2 \omega^2 t}, \quad (2.18)$$

la constante B no puede ser cero, ya que $u(x, t) \neq 0$ para todo $t \geq 0$, lo que implica que

$$\operatorname{sen}(\omega L) = 0, \quad (2.19)$$

como L es una constante arbitraria, la ecuación (2.19) restringe los valores de ω a

$$\omega_n = \frac{n\pi}{L}, \quad (2.20)$$

donde n es un número entero. Entonces, se han obtenido los siguientes valores discretos para ω y $u(x, t)$:

$$\begin{array}{ll} \vdots & \vdots \\ \omega_{-n} = -\frac{n\pi}{L}, & u_{-n}(x, t) = B_{-n} \operatorname{sen}\left(-\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-c^2\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 t}, \\ \vdots & \vdots \\ \omega_{-1} = -\frac{\pi}{L}, & u_{-1}(x, t) = B_{-1} \operatorname{sen}\left(-\frac{\pi}{L}x\right) e^{-c^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 t}, \\ \omega_0 = 0, & u_0(x, t) = B_0, \\ \omega_1 = \frac{\pi}{L}, & u_1(x, t) = B_1 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{L}x\right) e^{-c^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 t}, \\ \vdots & \vdots \\ \omega_n = \frac{n\pi}{L}, & u_n(x, t) = B_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-c^2\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 t}, \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

con $\dots, B_{-n}, \dots, B_{-1}, B_0, B_1, \dots, B_n, \dots$ constantes arbitrarias. Tomando la combinación lineal de todas las soluciones $u_n(x, t)$ se construye la solución general para la ecuación de calor (2.1), que satisface las condiciones de frontera (2.2) y (2.3), es decir,

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) e^{-c^2 \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 t}. \quad (2.21)$$

Pero, todavía falta que (2.21) satisfaga la condición inicial (2.4), entonces se debe cumplir que

$$f(x) = u(x, 0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right), \quad (2.22)$$

aprovechando que las funciones $\operatorname{sen}(q\pi x)$, con q un número racional, forman una base ortogonal para el dominio de los números reales, multiplicamos la ecuación (2.22) por $\operatorname{sen} \left(\frac{p\pi}{L} x \right)$, esto es

$$f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi}{L} x \right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi}{L} x \right), \quad (2.23)$$

donde p es un número entero. Ahora, al integrar la ecuación (2.23) sobre su periodo $(-L$ a $L)$ y al utilizar la propiedad de simetría de las funciones sinusoidales, el valor de la constante B_n es

$$B_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx, \quad (2.24)$$

donde n es un número entero.

Entonces, la solución de la ecuación de calor

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \\ u(0, t) &= u(L, t) = 0, \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad 0 < x < L,\end{aligned}\tag{2.25}$$

donde c y L son números reales, y $f(x)$ es una función conocida, esta dada por

$$\begin{aligned}u(x, t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) e^{-c^2 \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 t}, \\ B_n &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx.\end{aligned}\tag{2.26}$$

3. ECUACIÓN DE ONDA

La ecuación de onda en una dimensión espacial esta dada por

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.1)$$

donde $u(x, t)$ representa la posición del objeto unidimensional en el tiempo t y la posición x , y c es la velocidad con que se mueve dicho objeto. Supondremos que está fijo en los extremos, entonces $u(x, t)$ satisface las siguientes condiciones de frontera

$$u(0, t) = 0, \quad t > 0, \quad (3.2)$$

$$u(L, t) = 0, \quad t > 0, \quad (3.3)$$

donde L es la longitud.

Si se tiene un desplazamiento inicial de la forma $f(x)$ y velocidad inicial $g(x)$, entonces $u(x, t)$ satisface las siguientes condiciones iniciales

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 < x < L, \quad (3.4)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = g(x), \quad 0 < x < L, \quad (3.5)$$

donde $f(x)$ y $g(x)$ son funciones conocidas.

Por el método de separación de variables, la ecuación de onda (3.1) se puede reescribir como

$$\frac{1}{T(t)} \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = -\alpha^2, \quad (3.6)$$

donde se propuso que $u(x, t) = X(x)T(t)$ y α es la constante de separación de variables.

De la ecuación (3.6) se obtienen las dos siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias independientes

$$\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} = -\alpha^2, \quad (3.7)$$

$$\frac{1}{c^2 T(t)} \frac{d^2 T(t)}{dt^2} = -\alpha^2, \quad (3.8)$$

cuyas soluciones generales, respectivamente, son

$$X(x) = \tilde{A}e^{i\alpha x} + \tilde{B}e^{-i\alpha x} = A\cos(\alpha x) + B\sin(\alpha x), \quad (3.9)$$

$$T(t) = \tilde{D}e^{i\alpha ct} + \tilde{F}e^{-i\alpha ct} = D\cos(\alpha ct) + F\sin(\alpha ct), \quad (3.10)$$

donde $A = \tilde{A} + \tilde{B}$, $B = i(\tilde{A} - \tilde{B})$, $D = \tilde{D} + \tilde{F}$, $F = i(\tilde{D} - \tilde{F})$.

Por lo que la solución general a la ecuación de onda (3.1) es

$$u(x, t) = [A\cos(\alpha x) + B\sin(\alpha x)] [D\cos(\alpha ct) + F\sin(\alpha ct)]. \quad (3.11)$$

Al utilizar las condiciones iniciales (3.2) y (3.3) en la ecuación (3.11), se tiene que $A = D = 0$, entonces (3.11) se simplifica como

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \left[A_n \cos \left(\frac{n\pi}{L} ct \right) + B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} ct \right) \right], \quad (3.12)$$

donde $A_n = B_n D_n$ y $B_n = B_n F_n$.

Ahora, al usar la condición inicial (3.4) en (3.12), se tiene que

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) A_n, \quad (3.13)$$

y debido a que las funciones sinusoidales forman una base ortogonal para el dominio de los reales, se llega a que

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx. \quad (3.14)$$

Análogamente, de la condición inicial (3.5) se implica que

$$B_n = \frac{2}{cn\pi} \int_0^L g(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx. \quad (3.15)$$

Entonces, la solución de la ecuación de onda

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} &= c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \\
 u(0, t) &= 0, \quad t > 0, \\
 u(L, t) &= 0, \quad t > 0, \\
 u(x, 0) &= f(x), \quad 0 < x < L, \\
 \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} &= g(x), \quad 0 < x < L,
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

donde c y L son números reales, y $f(x)$ y $g(x)$ son funciones conocidas, es

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \left[A_n \cos \left(\frac{n\pi}{L} ct \right) + B_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} ct \right) \right], \tag{3.17}$$

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx, \tag{3.18}$$

$$B_n = \frac{2}{cn\pi} \int_0^L g(x) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) dx. \tag{3.19}$$

4. ECUACIÓN DE POISSON

La ecuación de Poisson unidimensional es

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -f(x), \quad (4.1)$$

donde $f(x)$ es una función conocida.

Supondremos que el objeto $u(x)$ tiene extremos en x_1 y x_2 , y que en dichos extremos tiene valores fijos, es decir, que satisface las siguientes condiciones de frontera

$$\begin{aligned} u(x_1) &= u_1, \\ u(x_2) &= u_2, \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde u_1 y u_2 son constantes reales.

Dado que la ecuación de Poisson (4.1) depende únicamente de una variable, basta con integrar dos veces con respecto a la variable para obtener su solución, es decir,

$$u(x) = - \int_{x_1}^{x_2} \left(\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx \right) dx, \quad (4.3)$$

La función $f(x)$ puede tomar múltiples formas, bien pudiera ser alguna función

trigonométrica, exponencial o algún polinomio de grado n . Primeramente, supondremos que $f(x)$ es una constante q , entonces de (4.3) obtenemos que

$$u(x) = -q\frac{x^2}{2} + Ax + B, \quad (4.4)$$

donde A y B son constantes de integración.

Al usar las condiciones de frontera (4.2) en la ecuación (4.4), se genera el siguiente sistema de dos ecuaciones lineales con dos incógnitas

$$\begin{aligned} u_1 &= -q\frac{x_1^2}{2} + Ax_1 + B, \\ u_2 &= -q\frac{x_2^2}{2} + Ax_2 + B, \end{aligned} \quad (4.5)$$

que al resolverlo las constantes A y B , en términos de x_1 , x_2 , u_1 , u_2 y q , se expresan como

$$\begin{aligned} A &= \frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1} + \frac{q}{2}(x_2 + x_1) \\ B &= \frac{u_1 x_2 - u_2 x_1}{x_2 - x_1} - \frac{q}{2} \frac{x_2^2 x_1 - x_1^2 x_2}{x_2 - x_1}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Entonces, la solución de la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -q,$$
$$u(x_1) = u_1, \tag{4.7}$$

$$u(x_2) = u_2, \tag{4.8}$$

donde q , x_1 , x_2 , u_1 y u_2 son números reales, es

$$u(x) = -\frac{q}{2}x^2 + \left[\frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1} + \frac{q}{2}(x_2 + x_1) \right] x + \frac{u_1x_2 - u_2x_1}{x_2 - x_1} - \frac{q}{2} \frac{x_2^2x_1 - x_1^2x_2}{x_2 - x_1}. \tag{4.9}$$

4.1. Ecuación de Laplace

La ecuación de Laplace es un caso particular de la ecuación de Poisson tomando a $f(x) = 0$, es decir,

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = 0. \quad (4.10)$$

Como la segunda derivada de la función $u(x)$ es cero, entonces su primera derivada es una constante A , es decir,

$$\frac{du(x)}{dx} = A, \quad (4.11)$$

Al integrar la ecuación (4.11) con respecto a x , se obtiene que la solución general de dicha ecuación es

$$u(x) = Ax + B, \quad (4.12)$$

donde B es la constante de integración.

Al utilizar las condiciones de frontera (4.2) en la ecuación (4.12), se obtiene el siguiente sistema de dos ecuaciones lineales con dos incógnitas

$$\begin{aligned} u_1 &= Ax_1 + B, \\ u_2 &= Ax_2 + B, \end{aligned} \quad (4.13)$$

que resolviéndolo, se expresan los valores de las constantes A y B en términos de las

constantes conocidas x_1 , x_2 , u_1 y u_2 , como

$$\begin{aligned} A &= \frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1}, \\ B &= \frac{u_1 x_2 - u_2 x_1}{x_2 - x_1}. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Entonces, la solución de la ecuación de Laplace

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} &= 0, \\ u(x_1) &= u_1, \\ u(x_2) &= u_2, \end{aligned} \tag{4.15}$$

donde x_1 , x_2 , u_1 y u_2 son números reales, es

$$u(x) = \left(\frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1} \right) x + \frac{u_1 x_2 - u_2 x_1}{x_2 - x_1}. \tag{4.16}$$

5. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión espacial esta dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (5.1)$$

donde $\psi(x)$ representa la amplitud de probabilidad de encontrar a la partícula en el punto x , m es la masa de dicha partícula, E es su energía asociada, $V(x)$ es la energía potencial o diferencia de potencial al que pudiera estar sujeta la partícula y \hbar es la constante de Planck ($\hbar = 1,05 \times 10^{-34} J \cdot s$).

En esta tesis, se restringirá a la partícula a moverse libremente ($V(x) = 0$) dentro de una caja unidimensional de longitud L , esto significa que fuera de la caja la probabilidad de encontrar a la partícula es cero. Entonces la ecuación (5.1) se simplifica como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (5.2)$$

y si se fijan las paredes de la caja en $x = 0$ y $x = L$, las condiciones de frontera son

$$\psi(0) = 0, \quad (5.3)$$

$$\psi(L) = 0. \quad (5.4)$$

La solución general de la ecuación de Schrödinger (5.2) es

$$\psi(x) = \tilde{A}e^{ikx} + \tilde{B}e^{-ikx} = A\cos(kx) + B\sin(kx), \quad (5.5)$$

donde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $A = \tilde{A} + \tilde{B}$ y $B = i(\tilde{A} - \tilde{B})$. A k se le conoce como número de onda y es un número real, puesto que E lo es.

Al usar la condición de frontera (5.3) en la ecuación (5.5) se obtiene que $A = 0$, por lo que (5.5) se simplifica a

$$\psi(x) = B\sin(kx), \quad (5.6)$$

y de la condición de frontera (5.4) se implica que

$$\sin(kL) = 0. \quad (5.7)$$

Entonces, la ecuación (5.7) no se satisface para valores arbitrarios de E , sino únicamente para aquellos valores discretos de E tales que,

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad (5.8)$$

donde n es un número entero positivo. El valor de $n = 0$ se elimina porque, en este caso, $\psi(x) = 0$ en cualquier lugar, lo que implicaría que la partícula no está en la caja. Entonces, las funciones de onda de los estados estacionarios que corresponden a estos valores son

$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right), \quad (5.9)$$

Como las funciones de los estados estacionarios son ortonormales, se tiene que

$$\int_0^L \psi_p^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{pn} \equiv \begin{cases} 1, & p = n \\ 0, & p \neq n \end{cases} \quad (5.10)$$

donde δ_{pn} es la delta de Kronecker. Entonces, normalizando las funciones de onda (5.9), obtenemos

$$1 = \int_0^L \left[A_n \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \right]^2 dx = A_n^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi} \operatorname{sen} \left(\frac{2n\pi}{L} x \right) \right]_0^L = A_n^2 \frac{L}{2}.$$

Por lo que

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}. \quad (5.11)$$

De aquí se deduce que A es cualquier número complejo con valor absoluto $\sqrt{\frac{2}{L}}$; todos los valores diferentes de A proporcionan el mismo estado físico, por lo que por simplicidad elijiremos el valor real $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

Entonces, la solución de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x) \quad (5.12)$$

$$\psi(0) = 0, \quad (5.13)$$

$$\psi(L) = 0,$$

es

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right), \quad (5.14)$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Parte II

DIFERENCIAS FINITAS (DF)

Las diferencias finitas es una metodología que por su sencillez es muy utilizada en la actualidad para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. En esencia, lo que se hace es discretizar el dominio y buscar la solución en dichos puntos mediante un algoritmo de recurrencia que se construye al reemplazar las derivadas continuas por sus correspondientes ecuaciones de diferencias. Esta simple sustitución genera un esquema de diferencias finitas (EDF) cuya solución discreta será una buena aproximación a la solución de la ecuación diferencial siempre y cuando se escoja el espaciamiento del dominio apropiadamente. Para saber si el espaciamiento es el apropiado el esquema de recurrencia debe de satisfacer un criterio de estabilidad, sin embargo, en la mayoría de los casos determinar la condición de estabilidad es un proceso tedioso y complicado.

En esta sección se describirá el procedimiento estándar para construir esquemas de diferencias finitas para las ecuaciones de calor, onda, Poisson y Schrödinger. Se estudiarán ejemplos numéricos típicos para cada una de ellas, que son de relevancia en el área de la física, y posteriormente se realizará el análisis de los errores generados por dichos esquemas.

6. ECUACIÓN DE CALOR

La ecuación diferencial parcial que describe un proceso de difusión de calor en una dimensión espacial es

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (6.1)$$

donde $u(x, t)$ representa el calor en el objeto unidimensional en el tiempo t y la posición x , y c es la constante de difusión de calor.

La metodología estandar para la construcción de los esquemas de diferencias finitas es reemplazar cada una de las derivadas parciales de la ecuación (6.1) por sus respectivas ecuaciones de diferencias. Dichas diferencias se obtienen de un desarrollo en serie de Taylor de la función a determinar, en este caso $u(x, t)$.

El desarrollo en serie de Taylor para una función en dos variables [1], $u(x, t)$, continua e infinitamente derivable alrededor del punto (x_0, t_0) está dada por

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = & u(x_0, t_0) + \left[(x - x_0) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \Big|_{(x_0, t_0)} + (t - t_0) \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Big|_{(x_0, t_0)} \right] \\
 & + \left[\frac{(x - x_0)^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Big|_{(x_0, t_0)} + (x - x_0)(t - t_0) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x \partial t} \Big|_{(x_0, t_0)} \right. \\
 & \left. + \frac{(t - t_0)^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \Big|_{(x_0, t_0)} \right] + \dots \\
 & + \left[\frac{1}{n!} \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} (x - x_0)^{n-j} (t - t_0)^j \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial x^{n-j} \partial t^j} \Big|_{(x_0, t_0)} \right] + \dots, \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

donde $\binom{n}{j}$ es el coeficiente binomial dado por

$$\binom{n}{j} = \frac{n!}{j!(n-j)!}. \quad (6.3)$$

Primeramente se construirá la ecuación de diferencias para $\frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$, la manera tradicional de hacerlo es tomar el desarrollo en serie de Taylor de $u(x, t + \Delta t)$ alrededor del punto (x, t) , suponiendo que Δt es un número real infinitamente pequeño, entonces al usar la ecuación (6.2) se tiene que

$$\begin{aligned}
 u(x, t + \Delta t) = & u(x, t) + \Delta t \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial t^3} + \dots \\
 & + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial t^n} + \dots, \quad (6.4)
 \end{aligned}$$

posteriormente se despeja $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}$ y se reagrupan los términos apropiadamente para reescribir a la ecuación (6.4) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = & \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} - \Delta t \left[\frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\Delta t}{3!} \frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial t^3} + \dots \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t^{(n-2)}}{n!} \frac{\partial^n u(x,t)}{\partial t^n} + \dots \right], \end{aligned} \quad (6.5)$$

Por hipótesis Δt es infinitesimalmente pequeño, entonces en la ecuación (6.5) el término multiplicado por Δt tiende a cero conforme Δt tienda a cero, y esto se reescribe en notación compacta como

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (6.6)$$

Si $O(\Delta t)$ es cero, entonces se tendría una representación exacta de la derivada parcial en el dominio discreto. Sin embargo, en la mayoría de los casos $O(\Delta t)$ es diferente de cero, por lo que

$$DP = DF + O(\Delta t),$$

donde DP representa a la diferencial parcial, DF a la ecuación de diferencias y $O(\Delta t)$ al término del error de la aproximación.

Como en la ecuación de diferencias (6.6), $O(\Delta t)$ tiende a cero conforme Δt tiende a cero, entonces se dice que el error de aproximación de (6.6) es lineal. Cuando el esquema de diferencias tenga un error de aproximación $O(\Delta t^n)$, entonces se dirá que el esquema de diferencias tiene un error de aproximación de orden n .

Para construir la ecuación de diferencias de $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$, la forma tradicional de hacerlo es usar la expansión en serie de Taylor de $u(x + \Delta x, t)$ y de $u(x - \Delta x, t)$ alrededor del punto (x, t) , es decir

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x, t) &= u(x, t) + \Delta x \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \dots \\ &+ \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial x^n} + \dots, \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} u(x - \Delta x, t) &= u(x, t) - \Delta x \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \dots \\ &+ (-1)^n \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial x^n} + \dots, \end{aligned} \quad (6.8)$$

para después sumarlas y obtener

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) &= 2 \left[u(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} + \dots \right. \\ &\left. + \frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} u(x, t)}{\partial x^{(2n)}} + \dots \right], \end{aligned} \quad (6.9)$$

además de suponer que Δx es un número real infinitamente pequeño. Posteriormente, en la ecuación (6.9) se despeja $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$ y se reagrupan términos apropiadamente, para llegar a

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &= \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} \\ &- \Delta x^2 \left[\frac{2}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} + \dots + \frac{2\Delta x^{(2n-2)}}{(2n)!} \frac{\partial^{(2n)} u(x, t)}{\partial x^{(2n)}} + \dots \right], \end{aligned} \quad (6.10)$$

que en notación compacta se reescribe como

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2), \quad (6.11)$$

Discretizando el espacio y el tiempo como

$$\begin{aligned}x &\equiv k\Delta x, \\t &\equiv n\Delta t,\end{aligned}\tag{6.12}$$

donde k y n son números enteros. Entonces, Δx representa el muestreo en el espacio y Δt el del tiempo

Con base en la discretización anterior, se define a la función $u(x, t)$ en los puntos discretos como

$$u(x, t) \equiv u_k^n,\tag{6.13}$$

es decir, describimos la temperatura del objeto en el punto k -ésimo después de n -pasos en el tiempo.

Al utilizar la definición (6.13) en las ecuaciones de diferencias (6.6) y (6.11), estas se reescriben como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t},\tag{6.14}$$

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2}.\tag{6.15}$$

A las ecuaciones de la forma (6.14) se les llama diferencias progresivas, debido a que para calcular la derivada parcial se utiliza el valor de la función en un punto progresivo ($n + 1$). A las ecuaciones de la forma (6.15) se les conoce como diferen-

cias centradas, porque aquí se utiliza el valor de la función en un punto progresivo $(k + 1)$ y uno regresivo $(k - 1)$. De manera análoga se pueden construir ecuaciones de diferencias de diferente orden.

Entonces, al sustituir las ecuaciones (6.14) y (6.15) en la ecuación de calor (6.1), su representación mediante diferencias finitas de orden $O(\Delta t, \Delta x^2)$ es

$$u_k^{n+1} = \rho (u_{k+1}^n + u_{k-1}^n) + (1 - 2\rho)u_k^n, \quad (6.16)$$

donde

$$\rho = \frac{c^2 \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}, \quad (6.17)$$

es conocida como la condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy [2].

6.1. Ejemplo Numérico

Se quiere analizar cómo se distribuye la temperatura en una barra de cobre ($c = 1,2\text{cm}^2/\text{s}$) de un centímetro de longitud, de sección transversal uniforme, material homogéneo y perfectamente aislada. Además, asumiremos que la dimensión de la sección transversal es tan pequeña que puede considerarse que la temperatura es constante en cualquier punto de dicha sección. Por lo que, la ecuación (6.1) modela este fenómeno y debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$u(0, t) = 0,$$

$$u(1, t) = 0,$$

para todo $t > 0$. Además, la barra tiene la siguiente forma inicial sinusoidal

$$u(x, 0) = \text{sen}(n\pi x),$$

donde $0 < x < 1$ y n es un número entero.

Por lo que la función (2.25) que describe cómo se distribuye la temperatura en cada punto de la barra y en todo tiempo es

$$u(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{sen}(n\pi x) e^{-c^2(n\pi)^2 t}. \quad (6.18)$$

Para realizar el análisis de los errores intrínsecos en el esquema de diferencias finitas (6.16), primeramente se fijará el muestreo en el espacio (Δx) y se variará el valor de ρ de manera que se satisfaga la condición CFL (6.17). Al seleccionar $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2} \text{cm}$ y $\rho = \frac{1}{2}$ se tiene que $\Delta t = 2,1701 \times 10^{-4} \text{s}$, con $\rho = \frac{1}{4}$ se implica que $\Delta t = 1,0851 \times 10^{-4} \text{s}$ y para $\rho = \frac{1}{8}$ se obtiene $\Delta t = 5,4253 \times 10^{-5} \text{s}$.

En la figura 6.1(a) se muestra la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $2,1701 \times 10^{-4} \text{s}$. En línea continua negra se grafica la solución analítica (6.17), en línea discontinua roja, azul y magenta la solución del esquema de diferencias finitas (6.16) con ρ igual a $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y $\frac{1}{8}$, respectivamente. A simple vista, las tres soluciones numéricas son iguales a la solución analítica. En la figura 6.1(b) se muestra en línea continua roja, azul y magenta, el error absoluto porcentual de las soluciones numéricas para ρ igual a $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ y $\rho = \frac{1}{8}$, respectivamente. Aunque la diferencia entre la solución analítica y las numéricas es del mismo orden, claramente se

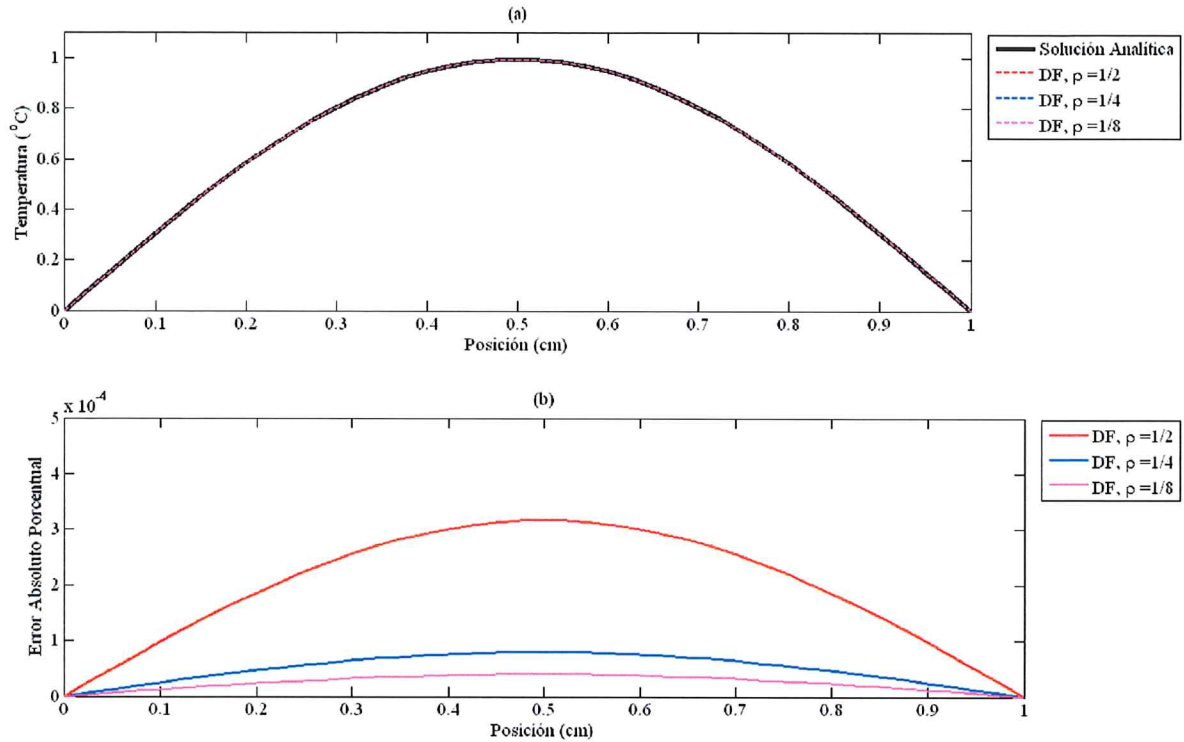


Fig. 6.1: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2,1701 \times 10^{-4} s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2} cm$.

ve que el esquema con $\rho = \frac{1}{2}$ es el que más difiere de la solución analítica y que para $t = 2,1701 \times 10^{-4} s$ conforme ρ tiende a cero la solución numérica se asemeja a la analítica.

En la figura 6.2(a) se presenta la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $2 \times 10^{-3} s$. La figura 6.2(b) muestra que el error absoluto porcentual se incrementó con el tiempo, y que el esquema con $\rho = \frac{1}{2}$ es el que más difiere de la solución analítica.

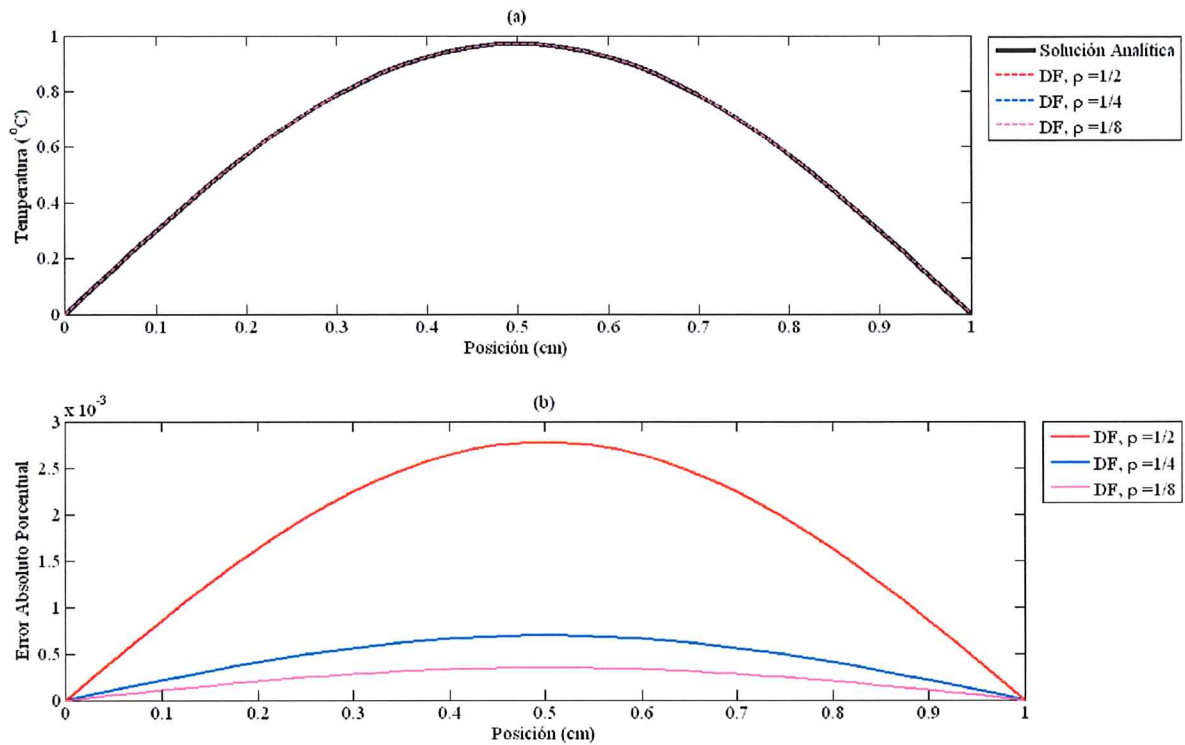


Fig. 6.2: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-3}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$.

En la figura 6.3(a) se presenta la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $2 \times 10^{-2}s$. La figura 6.3(b) muestra que el error absoluto porcentual nuevamente se incrementó con el tiempo y que el esquema de diferencias finitas con $\rho = \frac{1}{2}$ sigue siendo el que más difiere de la solución analítica.

Ahora, para el valor de $\Delta x = 2,0 \times 10^{-2}$ con $\rho = \frac{1}{2}$ se tiene que $\Delta t = 1,3889 \times 10^{-4}$, $\rho = \frac{1}{4}$ implica que $\Delta t = 6,9444 \times 10^{-5}$ y $\rho = \frac{1}{8}$ se obtiene que $\Delta t = 3,4722 \times 10^{-5}$. En la figura 6.4(a) se presenta la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $2 \times 10^{-2}s$. La figura 6.4(b) muestra que el error absoluto porcentual disminuyó de aproximadamente 0,025 (figura 6.3) a 0,015, sin embargo, nuevamente el esquema

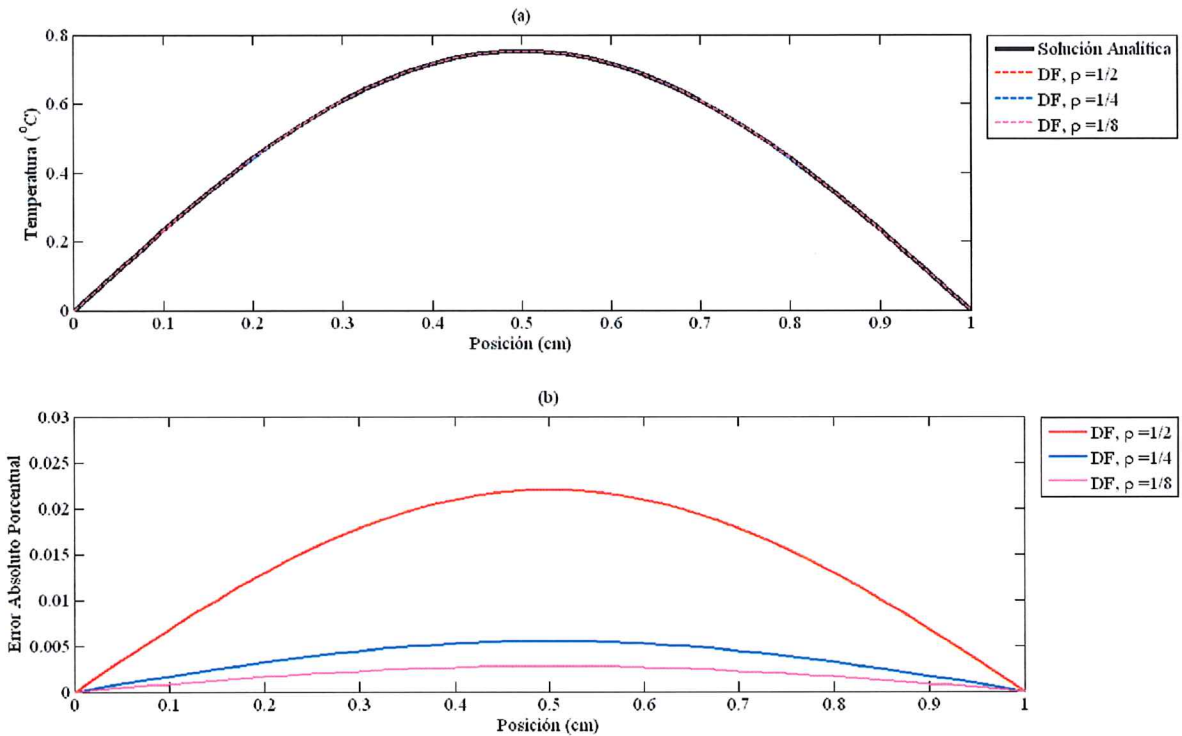


Fig. 6.3: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$.

con $\rho = \frac{1}{2}$ es el que más difiere de la solución analítica.

En conclusión, al disminuir el tamaño de paso en el espacio (Δx) y el valor de ρ , se decrementa el valor del tamaño de paso en el tiempo (Δt) y el del error absoluto porcentual.

Al construir el esquema de diferencias finitas una de las hipótesis es que el muestreo en el espacio y en el tiempo sean infinitesimalmente pequeños, por lo que los resultados obtenidos son coherentes con lo esperado.

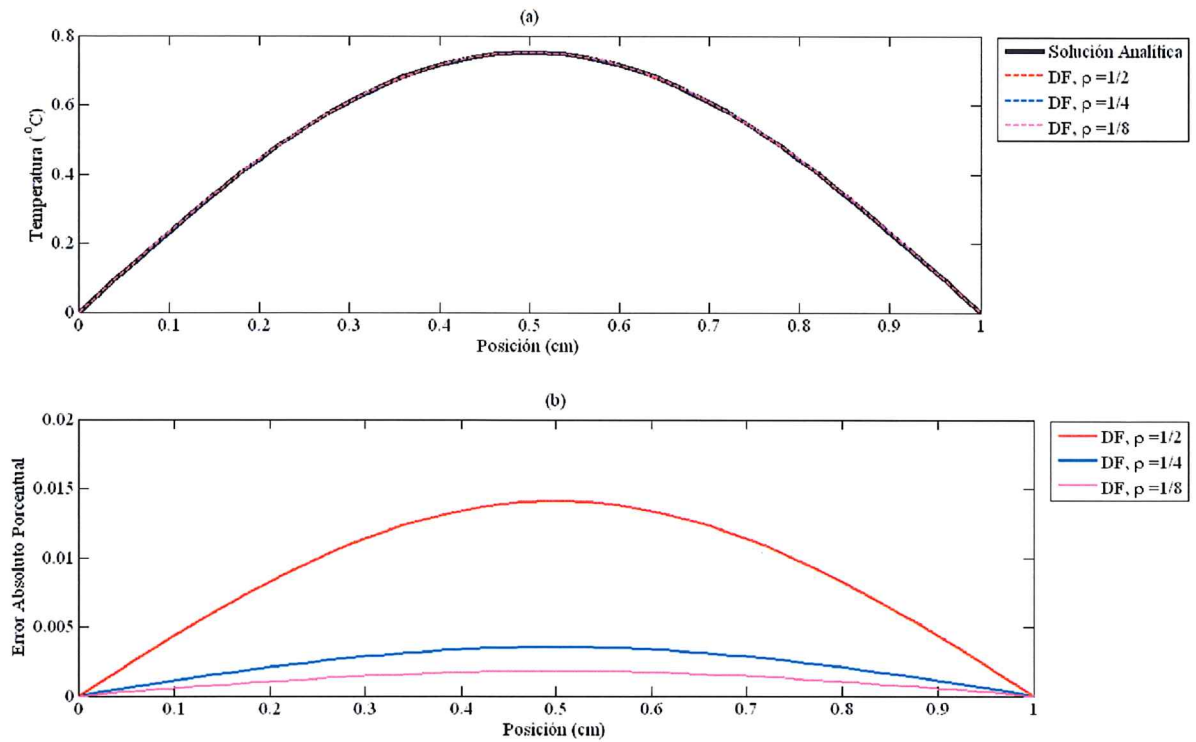


Fig. 6.4: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2}cm$.

7. ECUACIÓN DE ONDA

La ecuación de onda en una dimensión espacial está dada por

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (7.1)$$

donde $u(x, t)$ representa la posición del objeto unidimensional en el tiempo t y la posición x , y c es la velocidad con que se mueve dicho objeto.

Siguiendo la metodología descrita en el capítulo 6, se sustituyen en la ecuación de onda cada una de las derivadas parciales por sus respectivas ecuaciones de diferencias. Por lo que el esquema de diferencias finitas para la ecuación (7.1) es

$$u_k^{n+1} = \sigma^2 (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) + 2u_k^n - u_k^{n-1}, \quad (7.2)$$

con

$$\sigma = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (7.3)$$

conocida como la condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy [2].

7.1. Ejemplo Numérico

Se quiere analizar el comportamiento del movimiento de una cuerda elástica de 1cm de longitud que vibra a una velocidad de $1\text{cm}/\text{s}$. Si la cuerda se tensa con firmeza entre dos soportes al mismo nivel horizontal, entonces la ecuación (7.1) modela este fenómeno y debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$u(0, t) = 0,$$

$$u(1, t) = 0,$$

para todo $t > 0$. Además, la cuerda empieza a vibrar al soltarla de su posición inicial

$$u(x, 0) = \text{sen}(n\pi x),$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0,$$

donde $0 < x < 1$ y n es un número entero.

Por lo tanto, la función (3.17) que describe cómo vibra la cuerda en todo tiempo es

$$u(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \text{sen}(m\pi x) \cos(m\pi t), \quad (7.4)$$

Para el análisis de los errores intrínsecos del esquema (7.2), primero se fijará el muestreo en el espacio y se variará el valor de σ de manera que se satisfaga la condición CFL (7.3). Para $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}\text{cm}$ y $\sigma = \frac{1}{2}$ se tiene que $\Delta t = 1,25 \times 10^{-2}\text{s}$, con $\sigma = \frac{1}{4}$ se implica que $\Delta t = 6,3 \times 10^{-3}\text{s}$ y para $\sigma = \frac{1}{8}$ se obtiene $\Delta t = 3,1 \times 10^{-3}\text{s}$.

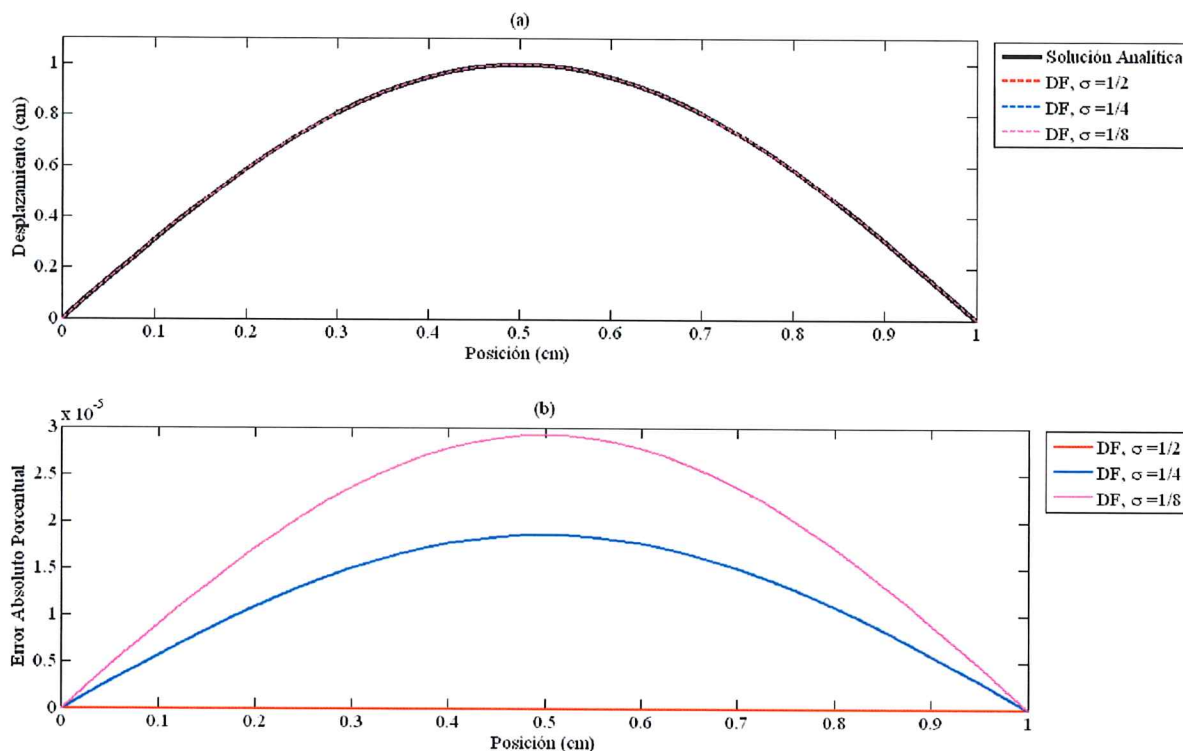


Fig. 7.1: Posición de la cuerda para $t = 1,25 \times 10^{-2}s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$.

En la figura 7.1(a) se muestra la posición de la cuerda para el tiempo de $1,25 \times 10^{-2}s$. En línea continua negra se grafica la solución analítica (7.4), en línea discontinua roja, azul y magenta la solución del esquema de diferencias finitas (7.2) con σ igual a $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$, y $\frac{1}{8}$, respectivamente. A simple vista, las tres soluciones numéricas son iguales a la solución analítica. En la figura 7.1(b) se muestra en línea continua roja, azul y magenta, el error absoluto porcentual de las soluciones numéricas para σ igual a $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ y $\frac{1}{8}$, respectivamente. Aunque la diferencia entre la solución analítica y las numéricas es del mismo orden, claramente se ve que el esquema con $\sigma = \frac{1}{8}$ es el que más difiere de la solución analítica y que para $t = 1,25 \times 10^{-2}s$ conforme σ tiende a la unidad la solución numérica se asemeja a la analítica.

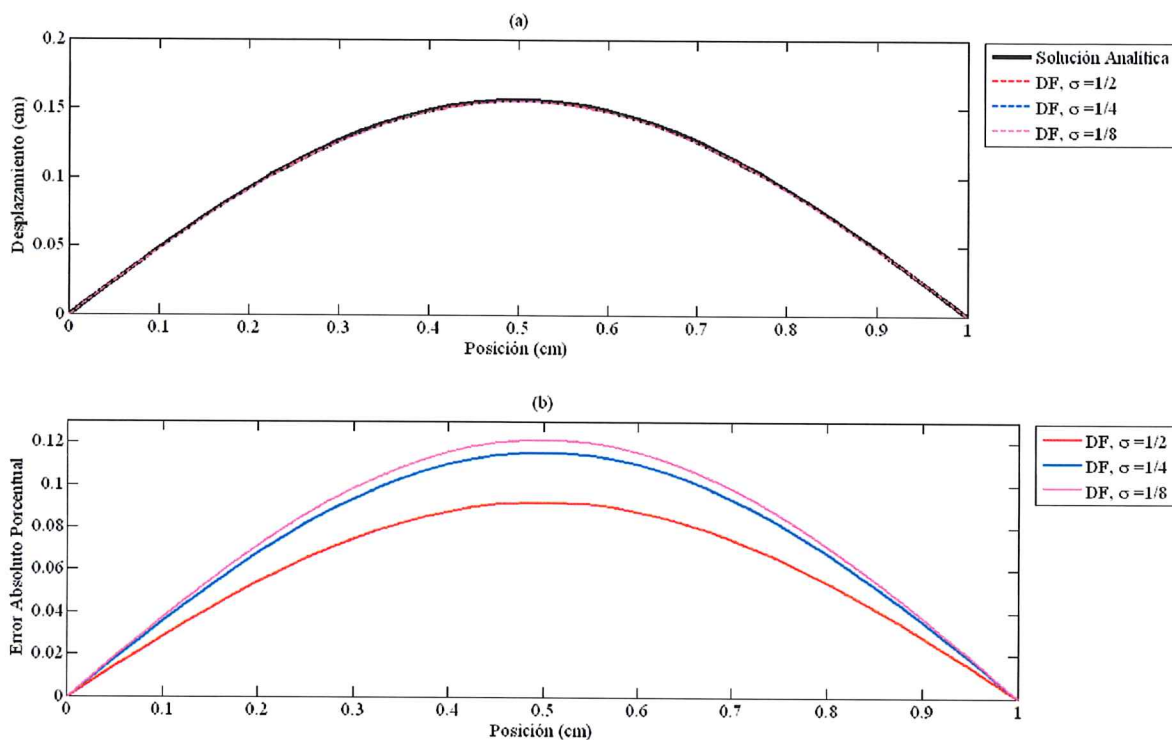


Fig. 7.2: Posición de la cuerda para $t = 1,55s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$.

En la figura 7.2(a) se presenta la posición de la cuerda para el tiempo de 1,55s. La figura 7.2(b) muestra que el error absoluto porcentual incrementó con el tiempo y que el esquema de diferencias finitas con $\sigma = \frac{1}{8}$ sigue siendo el que más difiere de la solución analítica.

En la figura 7.3(a) se presenta la posición de la cuerda para el tiempo de 3,80s. La figura 7.3(b) muestra que el error absoluto porcentual nuevamente incrementó con el tiempo y que el esquema de diferencias finitas con $\sigma = \frac{1}{8}$ sigue siendo el que más difiere de la solución analítica.

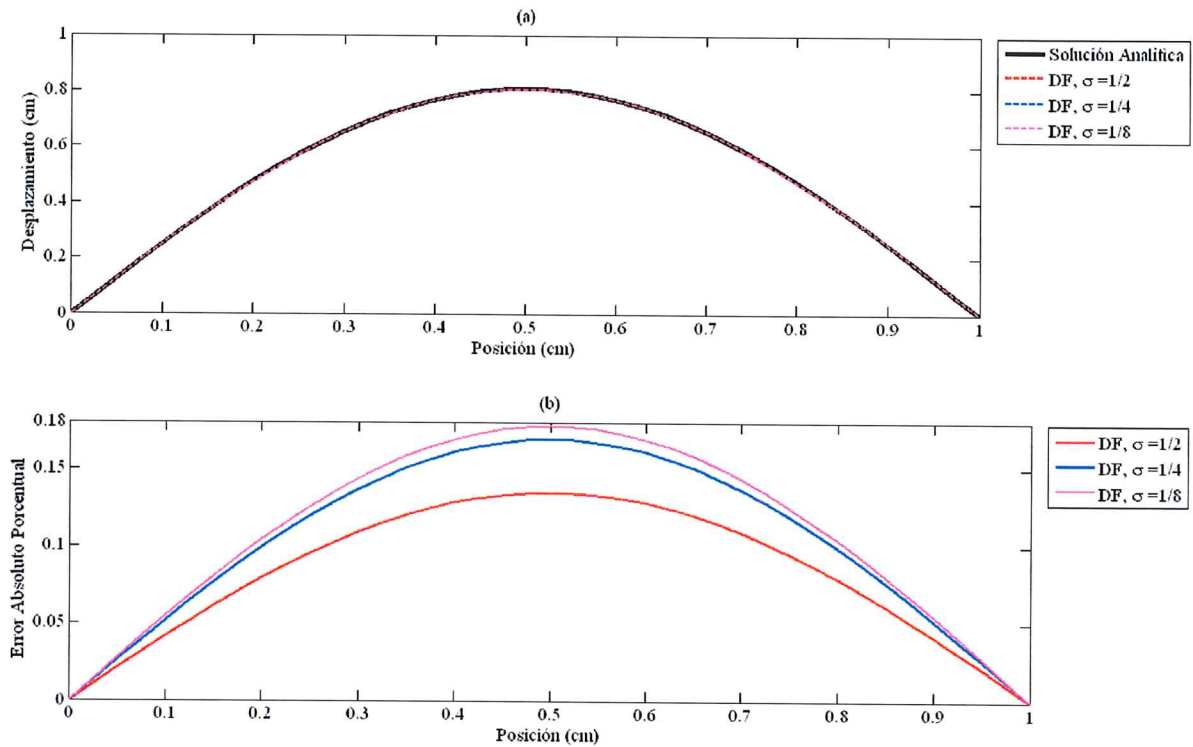


Fig. 7.3: Posición de la cuerda para $t = 3,80s$ y $\Delta x = 2,5 \times 10^{-2}cm$.

Al usar $\Delta x = 2,0 \times 10^{-2}$ con $\sigma = \frac{1}{2}$ se tiene que $\Delta t = 1,0 \times 10^{-1}$, y para $\sigma = \frac{1}{4}$ se implica que $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$ y con $\sigma = \frac{1}{8}$ se obtiene que $\Delta t = 2,5 \times 10^{-3}$. En la figura 7.4(a) se presenta la posición de la cuerda para el tiempo de $2 \times 10^{-2}s$. La figura 7.4(b) muestra que el error absoluto porcentual disminuyó en comparación con el caso anterior (figura 7.3). Sin embargo, nuevamente el esquema con $\sigma = \frac{1}{8}$ es el que más difiere de la solución analítica.

Entonces, al disminuir el tamaño de paso en el espacio y al tender el valor de σ a la unidad, se decrementa el valor del error absoluto porcentual. Sin embargo, de la condición de estabilidad (7.3), se esperaría que el método funcionara conforme σ

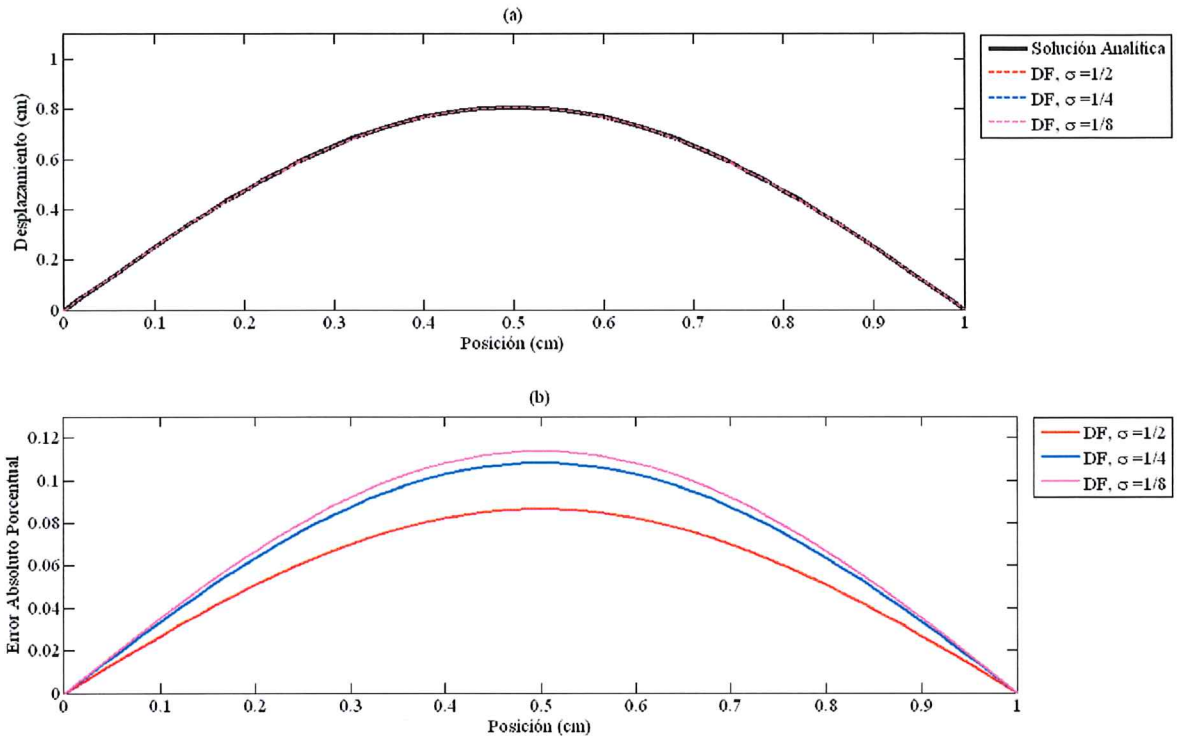


Fig. 7.4: Posición de la cuerda para $t = 3,80s$ y $\Delta x = 2,0 \times 10^{-2}cm$.

tiende a cero, ya que de esta forma se disminuiría el tamaño de paso en el tiempo, lo cual sería congruente con las hipótesis de construcción de los esquemas de diferencias finitas.

8. ECUACIÓN DE POISSON

La ecuación de Poisson en una dimensión es

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -f(x), \quad (8.1)$$

donde $f(x)$ es una función conocida.

Siguiendo el mismo procedimiento descrito en el capítulo 6, se sustituirá la diferencial por su respectiva ecuación de diferencias (6.11) (tomando $t = 0$). Entonces el esquema de diferencias finitas para la ecuación (8.1) es

$$u_{k+1} = 2u_k - u_{k-1} - \Delta x^2 f(k\Delta x). \quad (8.2)$$

En el caso particular en el que $f(x)$ sea una constante real, digamos q , se tiene que

$$u_{k+1} = 2u_k - u_{k-1} - \Delta x^2 q. \quad (8.3)$$

Cuando $f(x) = 0$ a la ecuación (8.1) se le conoce como ecuación de Laplace en una dimensión y su esquema de diferencias finitas es

$$u_{k+1} = 2u_k - u_{k-1}. \quad (8.4)$$

8.1. Ejemplos Numéricos

8.1.1. $f(x) = q$

Se analizará el comportamiento de la temperatura de una varilla delgada de $10m$ de longitud, que está expuesta a una fuente constante de calor de $10^\circ C$. Además, la varilla está completamente aislada y se considerará que la dimensión de la sección transversal es tan pequeña que en cualquier punto su temperatura es constante. Los extremos de la varilla están sometidos a una temperatura constante de $40^\circ C$ y $200^\circ C$, respectivamente. Entonces, la ecuación (8.1) modela este fenómeno y debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$u_{x_1} = u(0) = u_1 = 40,$$

$$u_{x_2} = u(10) = u_2 = 200.$$

Por lo que la solución analítica (4.4) a este problema es

$$u(x) = -5x^2 + 66x + 40. \quad (8.5)$$

En la figura 8.1(a) se grafica la distribución de la temperatura en la varilla. En línea continua negra se muestra la solución analítica (8.5), en línea discontinua roja, azul y magenta la solución del esquema de diferencias finitas (7.2) con Δx igual a $1cm$, $1 \times 10^{-1}cm$ y $1 \times 10^{-2}cm$, respectivamente. A simple vista, las tres soluciones numéricas son iguales a la solución analítica. En la figura 8.1(b) se muestra en línea continua roja, azul y magenta, el error absoluto porcentual de las soluciones numéricas para Δx igual a $1cm$, $1 \times 10^{-1}cm$ y $1 \times 10^{-2}cm$, respectivamente. Aunque

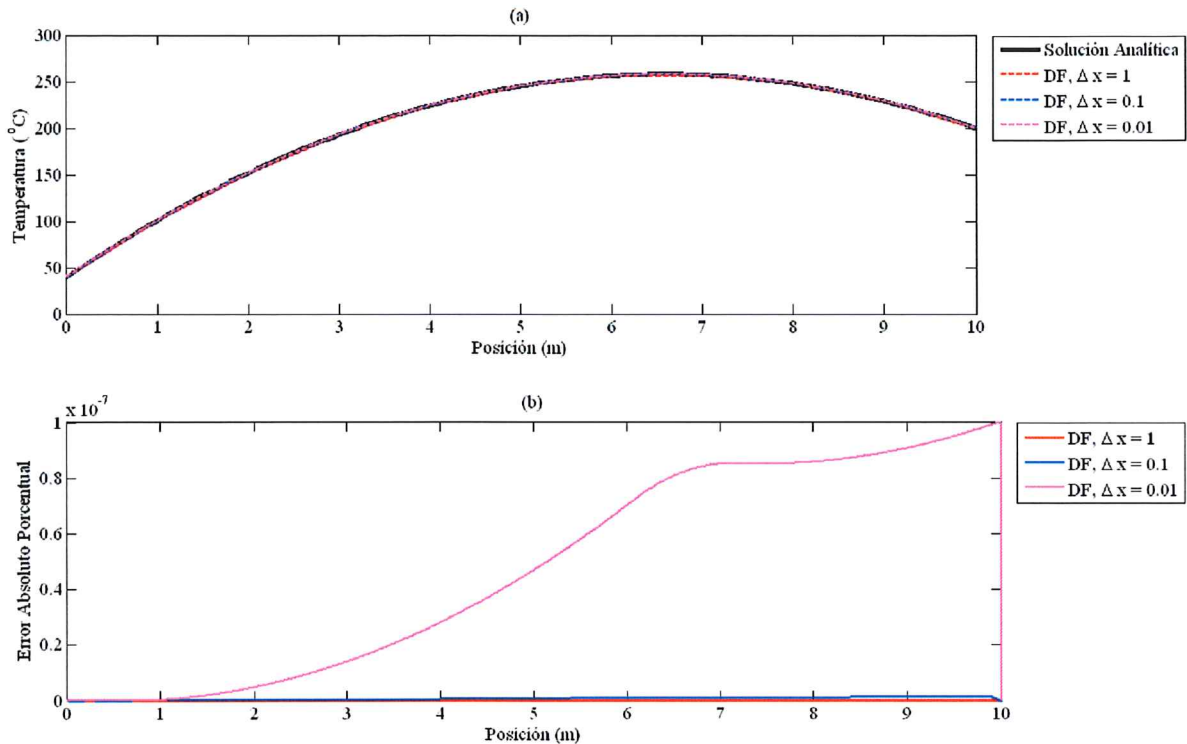


Fig. 8.1: Distribución de la temperatura en una varilla sometida a una fuente constante de calor.

la diferencia entre la solución analítica y las numéricas es muy pequeña, claramente se ve que el esquema con $\Delta x = 1 \times 10^{-2}$ es el que más difiere de la solución analítica y que conforme Δx tiende a la unidad la solución numérica se asemeja a la analítica.

8.1.2. Ecuación de Laplace ($f(x) = 0$)

Se quiere conocer el potencial electrostático en cualquier punto entre dos placas de un capacitor eléctrico. Dichas placas son conductoras, paralelas, están separadas un milímetro de distancia y sus respectivos potenciales electrostáticos son de 1 y 7 volts. En primera aproximación las placas se pueden considerar como dos planos infinitos conductores, esto con la finalidad de despreciar el efecto de los bordes. Entonces, la

ecuación (8.1) modela este fenómeno y debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$u(0) = 1,$$

$$u(1) = 7.$$

Por lo que su solución analítica (4.16) es

$$u(x) = 6x + 1. \tag{8.6}$$

En la figura 8.2(a) se presenta el potencial electrostático de un capacitor eléctrico. En línea continua negra se muestra la solución analítica (8.6), en línea discontinua roja, azul y magenta la solución del esquema de diferencias finitas (8.4) con Δx igual a 1cm , $1 \times 10^{-1}\text{cm}$ y $1 \times 10^{-2}\text{cm}$, respectivamente. A simple vista, las tres soluciones numéricas son iguales a la solución analítica. En la figura 8.1(b) se muestra en línea continua roja, azul y magenta, el error absoluto porcentual de las soluciones numéricas para Δx igual a 1cm , $1 \times 10^{-1}\text{cm}$ y $1 \times 10^{-2}\text{cm}$, respectivamente. Aunque el error absoluto porcentual es prácticamente cero, para cualquier tamaño de paso, claramente se ve que el esquema con $\Delta x = 1 \times 10^{-2}$ es el que más difiere de la solución analítica y que conforme Δx tiende a unidad la solución numérica se asemeja a la analítica.

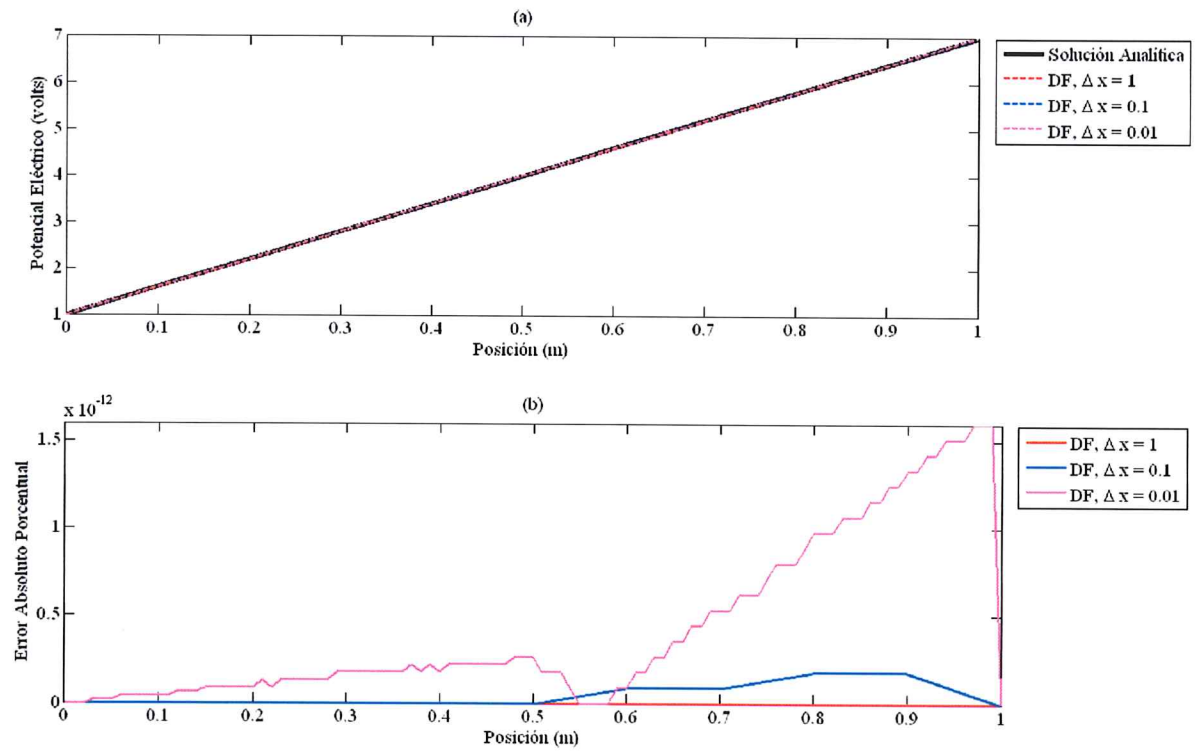


Fig. 8.2: Potencial electrostático de un capacitor eléctrico.

9. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión espacial se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (9.1)$$

donde $\psi(x)$ representa la posición de la partícula en el punto x , m es la masa de dicha partícula, E es su energía asociada, $V(x)$ es la energía potencial o diferencia de potencial al que pudiera estar sujeta la partícula y \hbar es la constante de Planck ($\hbar = 1,05 \times 10^{-34} J \cdot s$).

Siguiendo el mismo procedimiento descrito en el capítulo 6, se sustituirá la diferencial por su correspondiente esquema de diferencias (6.11) (tomando a $t = 0$ y haciendo el cambio de $u(x)$ por $\psi(x)$, dado que es una definición establecida por convención y resulta invariante). Entonces, el esquema de diferencias finitas para la ecuación (9.1) es

$$\psi_{k+1} = \left(2 - \Delta x^2 \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(k\Delta x)] \right) \psi_k - \psi_{k-1}. \quad (9.2)$$

9.1. Ejemplo Numérico

Se estudiará el comportamiento de un electrón de masa $9,11 \times 10^{-31} Kg$, que se mueve libremente ($V(x) = 0$) dentro de una caja unidimensional de longitud $2 \times 10^{-14}m$, que es aproximadamente igual a la separación observada entre átomos. Entonces, la ecuación (9.1) debe satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$\begin{aligned}\psi(0) &= 0, \\ \psi(L) &= \psi(2 \times 10^{-14}) = 0.\end{aligned}$$

Por lo tanto, su solución analítica (5.9) es

$$\begin{aligned}\psi(x) &= 1 \times 10^7 \text{sen} (1,5079 \times 10^{14}nx), \\ E &= 1,5079 \times 10^{-10}n^2.\end{aligned}\tag{9.3}$$

En la figura 9.1(a) se presenta la densidad de probabilidad de encontrar al electrón dentro de la caja unidimensional. En línea continua negra se muestra la solución analítica (9.3), en línea discontinua roja, azul y magenta la solución del esquema de diferencias finitas (9.2) con Δx igual a $1 \times 10^{-16}m$, $2 \times 10^{-16}m$ y $4 \times 10^{-16}m$, respectivamente. A simple vista, las tres soluciones numéricas son iguales a la solución analítica. En la figura 9.1(b) se muestra en línea continua roja, azul y magenta, el error absoluto porcentual de las soluciones numéricas para Δx igual a $1 \times 10^{-16}m$, $2 \times 10^{-16}m$ y $4 \times 10^{-16}m$, respectivamente.

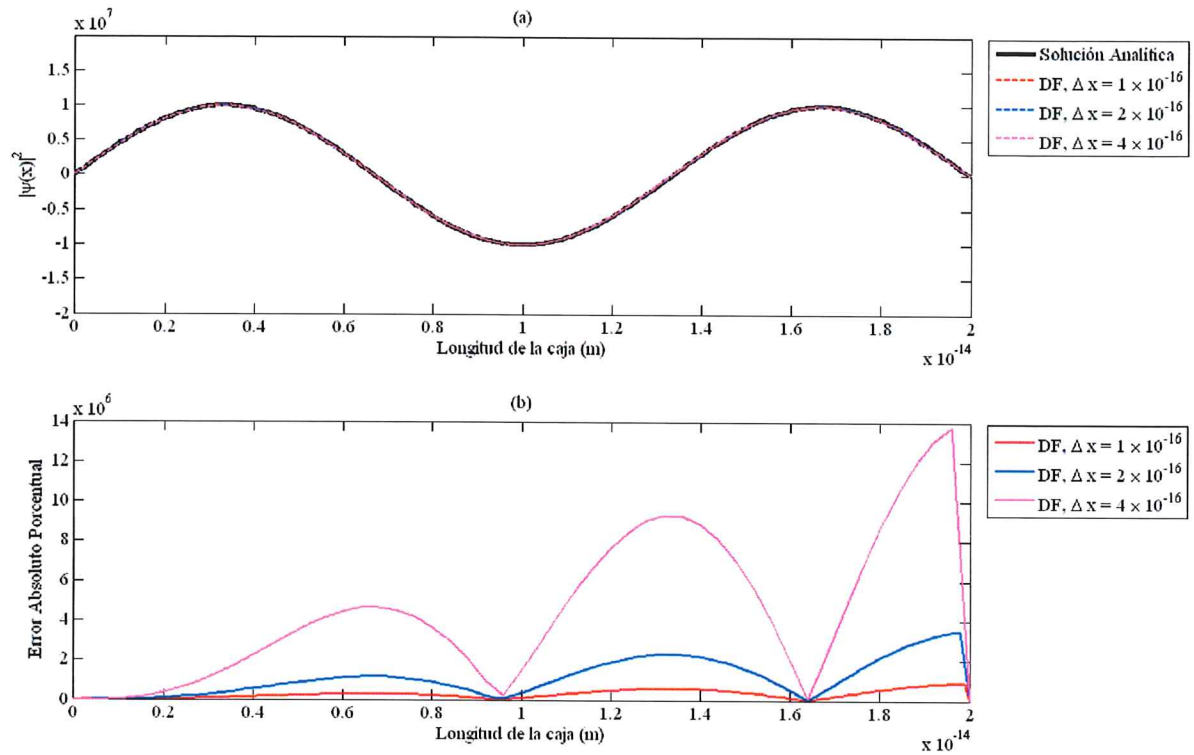


Fig. 9.1: Densidad de probabilidad para un electrón que se mueve libremente dentro de una caja unidimensional.

En la figura 9.1(b) se muestra claramente que las soluciones numéricas difieren considerablemente de la solución analítica llegando a ser dicha diferencia del orden de siete unidades de magnitud para $\Delta x = 4 \times 10^{-16} m$. Además se observa que el error absoluto porcentual disminuye conforme el valor de Δx decrece.

Parte III

DIFERENCIAS FINITAS EXACTAS (DFE)

El método de diferencias finitas consiste en sustituir la ecuación diferencial (dominio continuo) mediante una ecuación de diferencias finitas (dominio discreto). Como resultado de esta sustitución, en la mayoría de los casos, la solución numérica (dominio discreto) es una “buena” aproximación de la solución analítica (dominio continuo). Sin embargo, la solución numérica rara vez representará exactamente a la solución analítica. Esto es debido, a que intrínsecamente los esquemas de diferencias finitas dependen del muestreo seleccionado para el dominio. Para asegurar la “buena” aproximación de la solución numérica, el esquema de diferencias finitas tendrá que satisfacer criterios de convergencia y de estabilidad. Por lo que surge la siguiente pregunta:

¿Existe una metodología que permita construir esquemas de diferencias finitas que reproduzcan exactamente la solución de la ecuación diferencial en el dominio discreto?

A dichos esquemas se les denomina diferencias finitas exactas, de forma implícita son estables y convergen a la solución buscada, por lo que automáticamente son independientes del tamaño de muestreo [5].

En esta sección se describirá el procedimiento estandar para construir esquemas de diferencias finitas exactas para las ecuaciones de calor, onda, Poisson y Schrödinger. Además, se realizará el análisis de los errores generados por dichos esquemas, haciendo notar que si existe diferencia entre la solución numérica y la real es debido a la aritmética finita de las computadoras.

10. ECUACIÓN DE CALOR

La ecuación diferencial parcial que describe un proceso de difusión de calor en una dimensión espacial es

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (10.1)$$

donde $u(x, t)$ representa la distribución de calor en el tiempo t y en la posición x , y c es la constante de difusión de calor.

Para contruir el esquema de diferencias finitas exactas de la ecuación (10.1), primeramente se toma la suma de la expansión en serie de Taylor (6.9) de $u(x + \Delta x, t)$ y $u(x - \Delta x, t)$ alrededor del punto (x, t) , es decir,

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) &= 2 \left[u(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \frac{\Delta x^{2n}}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Puesto que $u(x, t)$ satisface la ecuación de calor (10.1), es continua y existen todas sus derivadas, se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} \\ &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} = \frac{1}{c^4} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (10.3)$$

análogamente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^6 u(x, t)}{\partial x^6} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(\frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} \right)}_{\text{ecuación (10.3)}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{\left(\frac{1}{c^4} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \right)}_{\text{ecuación (10.3)}} = \frac{1}{c^4} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \underbrace{\left(\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} \\ &= \frac{1}{c^4} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \underbrace{\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right)}_{\text{ecuación (10.1)}} = \frac{1}{c^6} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial t^3}, \end{aligned} \quad (10.4)$$

generalizando,

$$\frac{\partial^{(2n)} u(x, t)}{\partial x^{(2n)}} = \frac{1}{c^{(2n)}} \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial t^n}, \quad (10.5)$$

donde n es un número natural.

Sustituyendo las ecuaciones (10.5) en (10.2), esta se reescribe como

$$u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) = 2 \left[u(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{1}{c^4} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial t^4} + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{\Delta x^6}{6!} \frac{1}{c^6} \frac{\partial^6 u(x, t)}{\partial t^6} + \dots + \frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} \frac{1}{c^{(2n)}} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial t^{2n}} + \dots \right]. \quad (10.6)$$

El término entre corchetes ($[\dots]$) en la ecuación (10.6) es la expansión en serie de Taylor de $u(x, t + \Delta t)$ alrededor del punto (x, y) (ecuación 6.4), si

$$\frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} \frac{1}{c^{(2n)}} = \frac{\Delta t^n}{n!}. \quad (10.7)$$

Usando la relación (10.7) en la ecuación (10.6), llegamos a que

$$u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) = 2u(x, t + \Delta t). \quad (10.8)$$

Utilizando la definición (6.13) en la ecuación (10.8), el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación de calor se escribe como

$$u_k^{n+1} = \frac{1}{2} [u_{k+1}^n + u_{k-1}^n], \\ \Delta t^n = \frac{n!}{(2n)! c^{(2n)}} \Delta x^{(2n)}, \quad (10.9)$$

donde n es un número natural.

10.1. Ejemplo Numérico

Analizando nuevamente el ejemplo del capítulo 6, pero ahora utilizando el esquema (10.9) con $\Delta x = 2 \times 10^{-2} \text{cm}$, en la figura 10.1(a) se muestra la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $2 \times 10^{-2} \text{s}$. En línea continua negra se grafica la solución analítica (6.17), en línea discontinua roja la solución del esquema de diferencias finitas. En la figura 10.1(b) se muestra en línea continua roja el error absoluto porcentual de la solución numérica, cuyo valor máximo es aproximadamente 10^{-2} .

Debido a los errores de redondeo intrínsecos en los cálculos por aritmética finita, se esperaría que al calcular la solución numérica mediante el esquema de diferencias finitas exactas, el error relativo porcentual fuera cercano al cero, sin embargo no es así. Esto se debe a que el tamaño de muestreo en el tiempo (10.7) depende de la constante n que es el índice del elemento en la serie de Taylor. Al seleccionar un valor para n sólo se está tomando en cuenta ese n -ésimo término en el esquema de diferencias en vez de considerar a la serie en su entidad completa.

Para $\Delta x = 1 \times 10^{-4} \text{cm}$ de la ecuación (10.7) se tiene que $\Delta t = 1,9792 \times 10^{-7} \text{s}$. En la figura 10.2(a) se muestra la distribución de temperatura en la barra para el tiempo de $1,9792 \times 10^{-7} \text{s}$. En línea continua negra se grafica la solución analítica (6.17), en línea discontinua roja la solución del esquema de diferencias finitas. En la figura 10.2(b) se muestra en línea continua roja el error absoluto porcentual de la solución numérica, cuyo valor máximo es cercano al cero.

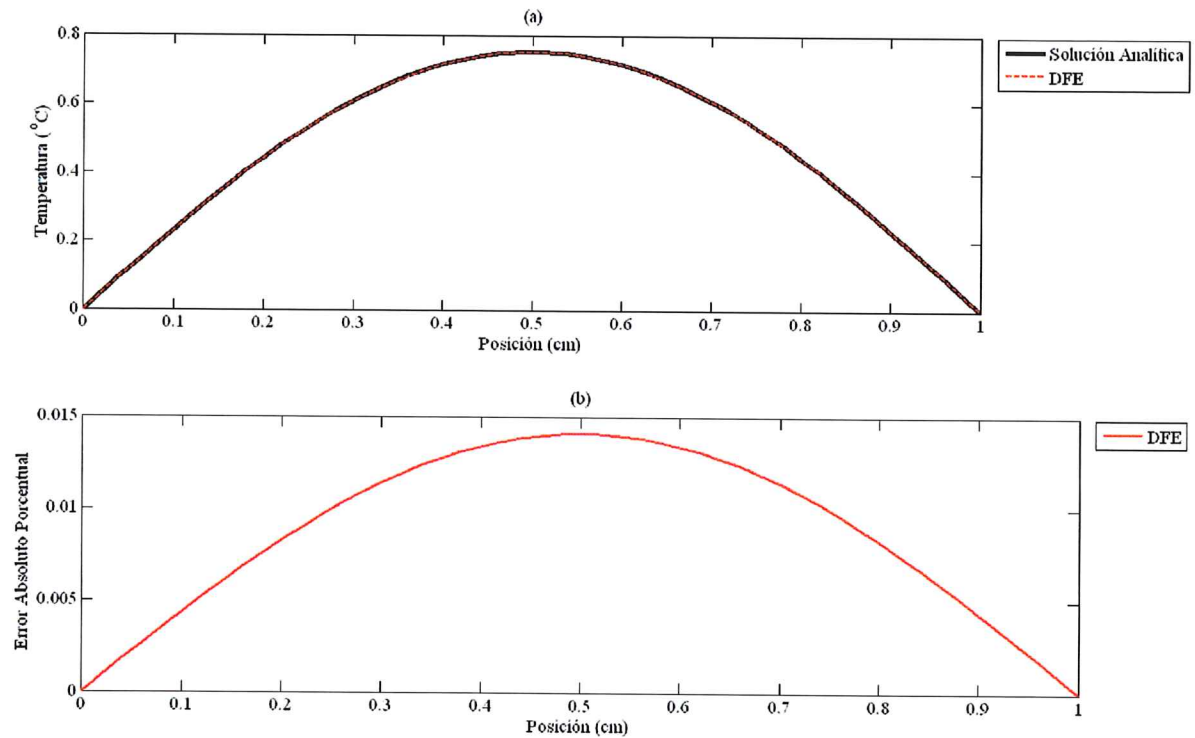


Fig. 10.1: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 2 \times 10^{-2} s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2} cm$.

El esquema de diferencias finitas (10.8) no es un esquema exacto, puesto que depende del tamaño del muestreo del dominio. Al igual que el esquema de diferencias (6.16), el esquema (10.8) se asemejará a la solución analítica conforme el tamaño del muestreo en el espacio y el tiempo sea más pequeño.

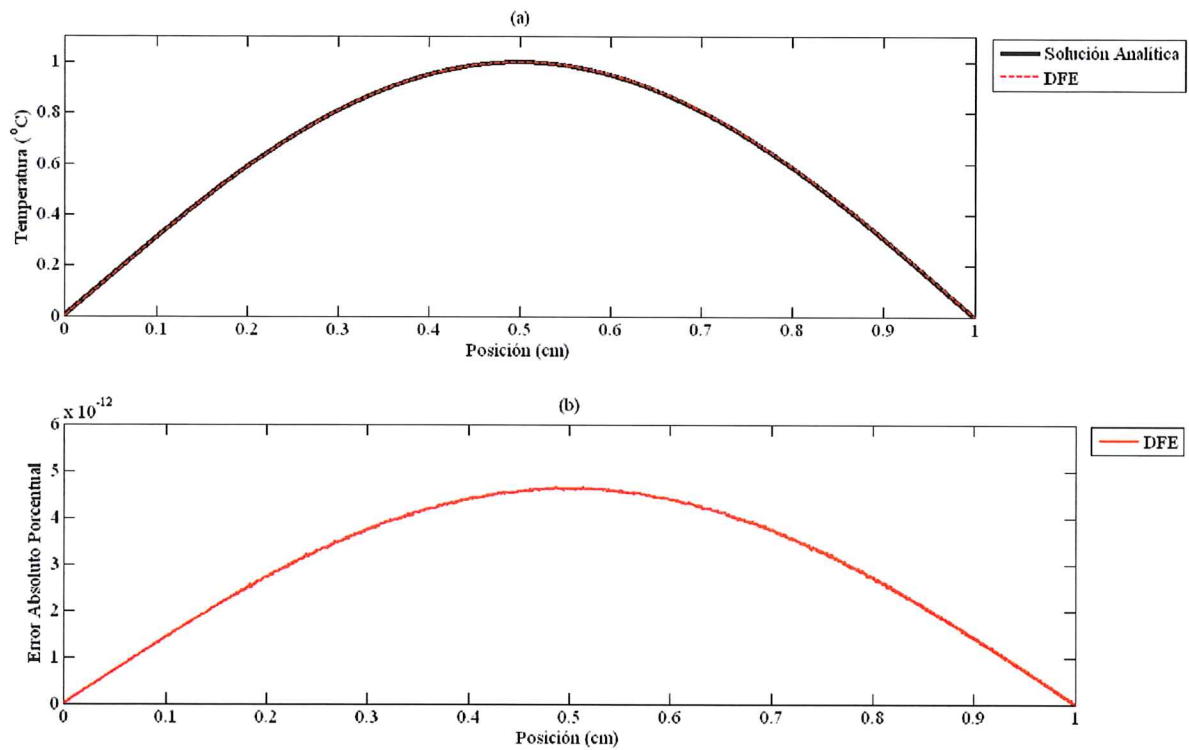


Fig. 10.2: Distribución de temperatura en una barra de cobre para $t = 1,9792 \times 10^{-7} s$ y $\Delta x = 1 \times 10^{-4} cm$.

11. ECUACIÓN DE ONDA

La ecuación de onda en una dimensión espacial está dada por

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (11.1)$$

donde $u(x, t)$ representa la posición del objeto unidimensional en el tiempo t y la posición x , y c es la velocidad con que se mueve dicho objeto.

Para construir el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación (11.1) se toma la suma de la expansión en serie de Taylor de $u(x, t + \Delta t)$ y $u(x, t - \Delta t)$ alrededor del punto (x, t) , es decir,

$$\begin{aligned} u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t) &= 2 \left[u(x, t) + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^4}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial t^4} + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \frac{\Delta t^{2n}}{(2n)!} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial t^{2n}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (11.2)$$

Como $u(x, t)$ es continua y existen todas sus derivadas, entonces de la ecuación

(11.1) se tienen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial t^4} &= c^4 \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4}, \\
 \frac{\partial^6 u(x, t)}{\partial t^6} &= c^6 \frac{\partial^6 u(x, t)}{\partial x^6}, \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial t^{2n}} &= c^{2n} \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}}, \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{11.3}$$

que al sustituirlas en (11.2) se tiene que

$$\begin{aligned}
 u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t) &= 2 \left[u(x, t) + \frac{\Delta t^2}{2!} c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\Delta t^4}{4!} c^4 \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} + \dots \right. \\
 &\quad \left. \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} c^n \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial x^n} + \dots \right],
 \end{aligned} \tag{11.4}$$

el término entre corchetes de la ecuación (11.4) es igual a la expansión en serie de Taylor de $u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t)$ alrededor del punto (x, t) si $\Delta x = c\Delta t$, entonces

$$u(x, t + \Delta t) + u(x, t - \Delta t) = u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t). \tag{11.5}$$

Usando la definición (6.13), el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación de calor (11.1) es

$$\begin{aligned}
 u_k^{n+1} + u_k^{n-1} &= u_{k+1}^n + u_{k-1}^n, \\
 \Delta x &= c\Delta t.
 \end{aligned} \tag{11.6}$$

11.1. Ejemplo Numérico

Se estudiará nuevamente el ejemplo del capítulo 7, pero ahora resolviéndolo numéricamente con el esquema de diferencias finitas exactas (11.6) con $\Delta x = 2 \times 10^{-2} \text{cm}$. En la figura 11.1(a) se muestra el desplazamiento de la cuerda para el tiempo de 3,8s. En línea continua negra se muestra la solución analítica (7.4) y en línea discontinua roja la solución numérica (11.6). En la figura 11.1(b) se muestra en línea continua roja, el error absoluto porcentual de la solución numérica, el cual es prácticamente cero.

El esquema de diferencias finitas (11.6) es exacto, puesto que independientemente del muestreo del dominio, el error absoluto porcentual es prácticamente cero. El error absoluto porcentual debe ser cero, en este caso no es así, debido a las limitaciones de aritmética de la computadora.

Al comparar los errores absolutos porcentuales mostrados en figuras 7.4 (DF) y 11.1 (DFE) se observa la enorme diferencia que existe entre los resultados de un esquema de diferencias finitas y uno exacto, para el problema de estudio es de trece ordenes de magnitud.

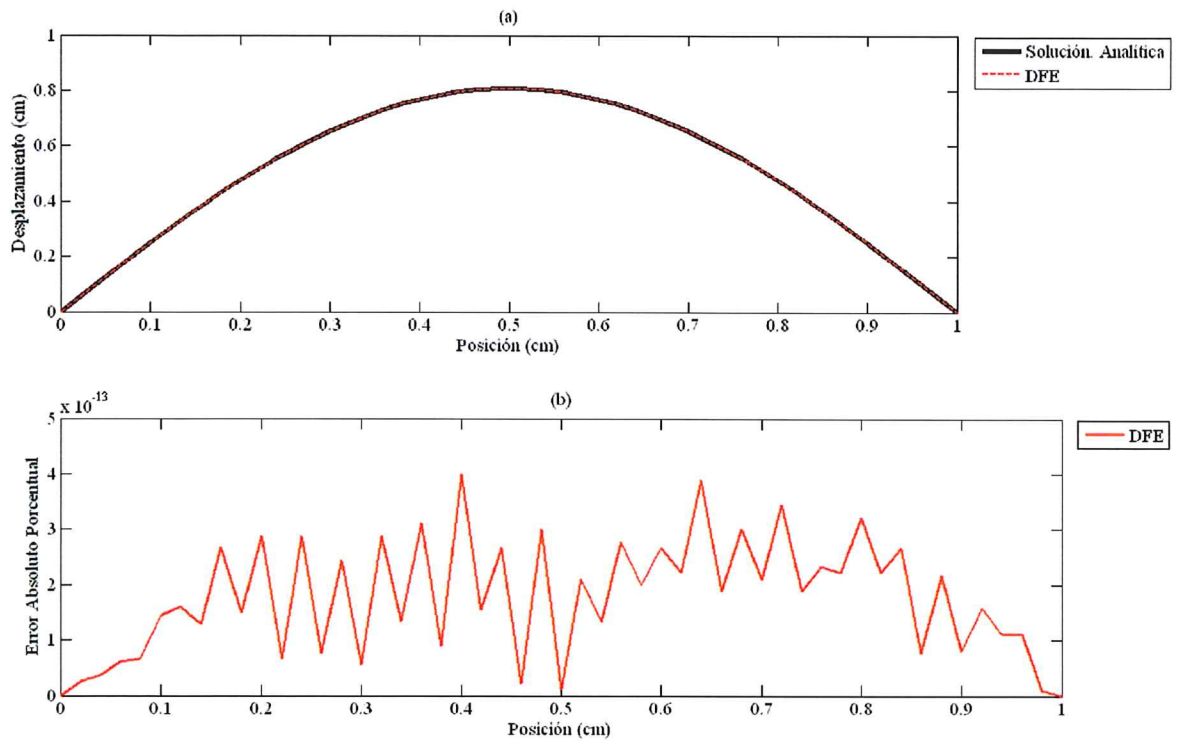


Fig. 11.1: Posición de la cuerda para $t = 3,8s$ y $\Delta x = 2 \times 10^{-2}cm$.

12. ECUACIÓN DE POISSON

La ecuación de Poisson en una dimensión es

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -f(x), \quad (12.1)$$

donde $f(x)$ es una función conocida.

Para construir el esquema de diferencias finitas exactas para (12.1), se realiza la suma de la expansión en serie de Taylor de $u(x + \Delta x)$ y $u(x - \Delta x)$ alrededor del punto x , es decir,

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) &= 2 \left[u(x) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{d^4u(x)}{dx^4} + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \frac{\Delta x^{2n}}{(2n)!} \frac{d^{2n}u(x)}{dx^{2n}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Para el caso en que $f(x)$ es una constante q , de la ecuación (12.1) se generan las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}
 \frac{d^4 u(x)}{dx^4} &= -\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = 0, \\
 \frac{d^6 u(x)}{dx^6} &= -\frac{d^4 f(x)}{dx^4} = 0, \\
 &\vdots \\
 \frac{d^{2n} u(x, t)}{dx^{2n}} &= -\frac{d^{2(n-1)} f(x)}{dx^{2(n-1)}} = 0, \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{12.3}$$

que al sustituirlas en la ecuación (12.2), se llega a que

$$u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) = 2u(x) - \Delta x^2 q. \tag{12.4}$$

Utilizando la definición (6.13), el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación de Poisson (12.1) con $f(x) = q$ es

$$u_{k+1} = 2u_k - u_{k-1} - \Delta x^2 q, \tag{12.5}$$

el cuál es el esquema de diferencias finitas (8.3) estudiado en el capítulo 8.

En el caso en que $f(x) = 0$ la ecuación (12.1) es conocida como la ecuación de Laplace en una dimensión, entonces su esquema de diferencias finitas exactas es

$$u_{k+1} = 2u_k - u_{k-1}, \tag{12.6}$$

que es precisamente el esquema de DF (8.4) estudiado en el capítulo 8.

Entonces, se ha demostrado por qué para la ecuación de Poisson con $f(x)$ constante y la ecuación de Laplace, los esquemas de diferencias finitas tradicionales generan soluciones numéricas que reproducen la solución analítica.

13. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Se construirá el esquema de diferencias finitas exactas para estudiar el movimiento libre de un electrón dentro de una caja unidimensional cuya ecuación diferencial que gobierna este fenómeno es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (13.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck ($\hbar = 1,05 \times 10^{-34} J \cdot s$), m es la masa de la partícula, E es la energía asociada a la partícula.

Supóngase que $\psi(x)$ es continua e infinitamente diferenciable, entonces de la ecuación de Schrödinger se generan las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x), \\ \frac{d^4\psi}{dx^4} &= \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2 \psi(x), \\ &\vdots \\ \frac{d^{(2n)}\psi(x)}{dx^{(2n)}} &= (-1)^n \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^n \psi(x), \\ &\vdots \end{aligned} \quad (13.2)$$

Sustituyendo las ecuaciones (13.2) en la suma de la expansión en serie de Taylor de $\psi(x + \Delta x)$ y $\psi(x - \Delta x)$ alrededor del punto (x, y) , resulta que

$$\begin{aligned} \psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x) &= 2 \left[1 - \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\Delta x^2}{2!} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^2 \frac{\Delta x^4}{4!} - \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^3 \frac{\Delta x^6}{6!} \right. \\ &\quad \left. + \dots + (-1)^n \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^n \frac{\Delta x^{(2n)}}{(2n)!} + \dots \right] \psi(x) \\ &= 2 \cos \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Delta x \right) \psi(x). \end{aligned} \quad (13.3)$$

Usando las definiciones (6.12) y (6.13), obtenemos que el esquema de diferencias finitas exactas para la ecuación de Schrödinger (13.1) es

$$\psi_{k+1} = 2 \cos \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Delta x \right) \psi_k - \psi_{k-1}. \quad (13.4)$$

13.1. Ejemplo Numérico

Se estudiará nuevamente el ejemplo del capítulo 9, pero ahora resolviéndolo numéricamente con el esquema de diferencias finitas exactas (13.4) con $\Delta x = 4 \times 10^{-16} m$. En la figura 13.1(a) se muestra la amplitud de probabilidad de encontrar al electrón dentro de la caja. En línea continua negra se muestra la solución analítica (9.3) y en línea discontinua roja la solución numérica (13.4).

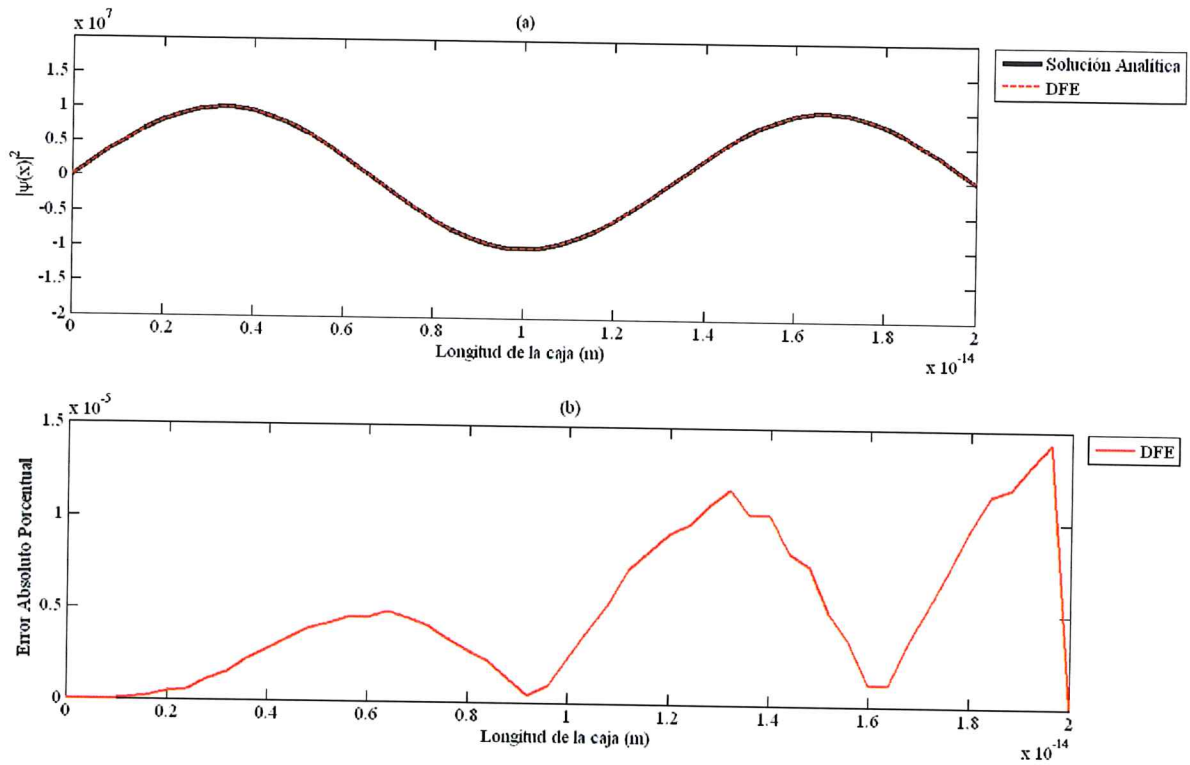


Fig. 13.1: Densidad de probabilidad para un electrón que se mueve libremente dentro de una caja unidimensional.

En la figura 13.1(b) se muestra en línea continua roja, el error absoluto porcentual de la solución numérica el cual es pequeño. Al comparar los errores absolutos porcentuales mostrados en figuras 9.1 y 13.1 se observa una diferencia de 11 ordenes de magnitud entre los resultados obtenidos mediante el esquema de diferencias finitas y el exacto.

14. CONCLUSIONES

Se construyeron esquemas de diferencias finitas exactas para la ecuación de onda, calor, Laplace, Poisson y Schrödinger, en una dimensión espacial. Dichos esquemas se aplicaron a problemas de importancia al área de la física, como por ejemplo: El determinar la distribución de temperatura en una varilla aislada, y en otra sometida a una fuente constante de calor; el modelar el movimiento oscilatorio de una cuerda fija en los extremos, o el potencial electrostático de un capacitor eléctrico; calcular la densidad de probabilidad para un electrón que se mueve libremente dentro de una caja.

Se realizó la comparación entre las soluciones numéricas obtenidas mediante los esquemas de diferencias finitas exactas y los esquemas tradicionales. Los análisis de errores mostraron que al trabajar con esquemas exactos los errores de las soluciones numéricas prácticamente son nulos, mientras que con los esquemas tradicionales podrían llegar a diferir de la solución analítica hasta 13 ordenes de magnitud.

Además se mostró que al utilizar los esquemas de diferencias finitas exactas se determina de manera única la forma de discretizar el dominio e implícitamente se satisface la condición de estabilidad y convergencia de la solución numérica.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Arfken, G.B., *Mathematical Methods for Physicists*.
Academic. EE.UU. 2001.
- [2] Hildebrand, F.B., *Finite-Difference Equations and Simulations*.
Prentice Hall. EE.UU. 1968.
- [3] Kreyszig, E., *Advanced Engineering Mathematics*.
John Wiley & Sons, 4ta edición EE.UU. 1979.
- [4] Mitchell, A.R., and Griffiths, D.F., *The Finite Difference Method
in Partial Differential Equations*.
John Wiley & Sons. EE.UU. 1980.
- [5] Solorza, S., *Diferencias Finitas Exactas: Un estudio Pedagógico*.
CICESE México. 1999.
- [6] Stephenson, G., *Partial Differential Equations for Scientists and
Engineers*.
Longman Inc., 2nd edition EE.UU. 1970.