Unidad 1

Problemas de valor inicial para ecuaciones diferenciales ordinarias (c)

Integradores simplécticos.

Formulación newtoniana La ecuación de movimiento de una partícula de masa m restringida a moverse en una dimensión es expresada, en la formulación Newtoniana de la mecánica clásica, como una ecuación diferencial de segundo orden para la posición x respecto a cierto origen de coordenadas:

$$\ddot{x} = F(t)/m,$$

donde $F(t) = F(x, \dot{x}, t)$ es la fuerza que actúa sobre la misma. Esta ecuación puede ser escrita como un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden en la forma

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v(t),$$
$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = a(t),$$

donde $v(t)$ es la velocidad y $a(t) = F(t)/m$ es la aceleración que experimenta la partícula. La evolución temporal $(x_0, v_0) \to (x, v)$ sobre un intervalo temporal Δt es aproximada por el *método de Euler* según las ecuaciones:

$$v = v_0 + a_0 \Delta t,$$
$$x = x_0 + v_0 \Delta t,$$

mientras que el *método de Euler-Cromer* procede según

$$v = v_0 + a_0 \Delta t,$$
$$x = x_0 + v \Delta t.$$

Ejercicio 1. Considere el oscilador armónico simple para el cual $F = -kx$ donde k es una constante positiva. Por simplicidad, las unidades son escogidas de modo que $k = 1$ y $m = 1$ y las condiciones iniciales son $x(0) = 1, \dot{x}(0) = 0$.

(a) Implemente el método de Euler para este problema. Determine la solución numérica sobre un intervalo temporal que comprenda varios ciclos. Calcule la energía total del sistema $E = v^2/2 + x^2/2$ a partir de la solución numérica. Grafique dicho valor en función del tiempo. ¿Qué observa?

(b) Implemente el método de Euler-Cromer y repita las simulaciones del punto anterior. ¿Qué observa? Justifique.

Formulación hamiltoniana. Supongamos un sistema descrito por las coordenadas canónicas (q, p) con un hamiltoniano separable en la forma

$$H(q, p) = T(p) + V(q).$$

La evolución temporal $(q_0, p_0) \to (q, p)$ sobre un intervalo temporal τ es aproximada por el *método de leap-frog* según las ecuaciones

$$\tilde{p} = p_0 - \frac{\tau}{2}\frac{\partial V}{\partial q}(q_0),$$
$$q = q_0 + \tau \frac{\partial T}{\partial p}(\tilde{p}),$$
$$p = \tilde{p} - \frac{\tau}{2}\frac{\partial V}{\partial q}(q).$$

Ejercicio 2. El hamiltoniano del *péndulo plano* (ver parte (b) de esta unidad) está dado por

$$H(\theta, w) = \frac{1}{2}w^2 - k\cos\theta.$$

(a) Implementar el método de *leap-frog* para el péndulo plano.

(b) Determinar las soluciones numéricas para las mismas condiciones iniciales que en el parte (b) de esta unidad, pero integrando el sistema sobre un intervalo de tiempo mayor (digamos $t \geq 100$). Estudiar en particular el comportamiento de la energía calculada con la solución numérica.

(c) Modificar la implementación del método para utilizar un paso de integración al azar $\leq \tau$ (*Ayuda:* utilice la función `rand` proporcionada por la implementación del Fortran 77 del compilador `gfortran` junto con la subrutina `srand` que inicializa el generador de números al azar). Repita los experimentos anteriores, ¿qué sucede con la energía? Justifique sus resultados.