



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SOLUCIÓN NUMÉRICA A SISTEMAS
CUÁNTICOS CONFINADOS MEDIANTE
DIFERENCIACIÓN AUTOMÁTICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Allan Josué García Meza

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Carlos Ramírez Ramos



Ciudad Universitaria, CDMX, México, 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno:

Allan Josué

García

Meza

Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, Física

309218339

2. Datos del tutor:

Dr.

Carlos

Ramírez

Ramos

3. Datos del sinodal 1

Dr.

Luis Antonio

Pérez

López

4. Datos del sinodal 2

Dra.

Vicenta

Sánchez

Morales

5. Datos del sinodal 3

Dr.

Ricardo

Méndez

Fragoso

6. Datos del sinodal 4

Dr.

José Eduardo

Barrios

Vargas

7. Datos del trabajo escrito

Solución numérica al confinamiento cuántico mediante diferenciación automática

57 p, 2018

*A mi madre; que con sus invaluables consejos
me enseñó a aprender por cuenta propia y
me dotó de una incansable curiosidad.*

Reconocimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi madre que me dio la oportunidad y libertad de poder estudiar esta tan apasionante área del conocimiento como lo es la física. Agradezco también la fortuna de contar con las personas que más quiero, entre esas personas está mi abuela materna quien también fue vital en mis primeros años de vida. Entre las mismas personas se encuentran mis dos hermanos a quienes agradezco por la paciencia y tolerancia que han tenido hacia conmigo en mis momentos más oscuros y frustrantes.

También quiero mencionar a mis compañeros de la facultad con los he tenido la oportunidad de discernir y retroalimentarme; siempre es un gusto contar con tan variados puntos de vista. De entre ellos, en especial quiero agradecer a quienes han sido no sólo compañeros, sino también amigos y camaradas, mi segunda familia, a lo largo de estos años que duró la carrera. Nunca olvidaré con quiénes tomé las clases de los primeros semestres, clases que solían derivar en pláticas sobre temas de lo más variado en torno a la ciencia en general. Siempre fueron una inspiración para seguir adelante. Ha sido, es y será un gusto contar con ustedes. Por mi parte, ya lo saben: cuenten conmigo.

En particular quiero agradecer al Dr. Carlos Ramírez Ramos quien, además de ser mi director de tesis, fue también mi profesor en varios cursos a lo largo de la carrera. Estaré siempre agradecido pues con usted aprendí más allá del salón de clases. Muchas gracias por todo. También se agradece el apoyo otorgado por los proyectos UNAM-DGAPA-PAPIIT IA106617 y LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

Igualmente, agradezco a quienes aceptaron y conforman mi jurado: Dr. Luis Antonio Pérez Orozco, Dra. Vicenta Sánchez Morales, Dr. Ricardo Méndez Fragoso y Dr. José Eduardo Barrios Vargas. Espero que encuentren satisfactorio este trabajo.

Por último, agradezco a ti, lector, si no formas parte de alguno de los grupos mencionados anteriormente. De ser así, supongo que llegaste a este texto por responsabilidad o (espero) por curiosidad. En tal caso, deseo que encuentres en él lo que buscas y logre saciar esa sed que te hizo abrir este documento. Gracias por tu tiempo.

Resumen

Este trabajo muestra un método de solución numérica a sistemas cuánticos confinados. Para esto, se ataca el problema desde la naturaleza misma de las ecuaciones diferenciales pues en el régimen de la mecánica cuántica donde se satisfaga la ecuación de Shrödinger, se pueden derivar de esta ecuaciones diferenciales del tipo que son tratadas en este texto.

En el **Capítulo 1** se aborda de manera breve la teoría de Sturm-Liouville pues en ella se tratan las propiedades de mayor relevancia práctica para el análisis de ecuaciones diferenciales y su impacto en la física. En ese mismo capítulo se habla sobre la ecuación de Helmholtz pues es de este ejemplo con el cual se derivan diferentes sistemas de ecuaciones para diferentes simetrías. De ahí la importancia de contar con la capacidad de resolverlas. Posteriormente se abordan algunos métodos de solución analítica con el objetivo de exponer los alcances y límites que se encuentran al momento de intentar resolver de manera analítica una ecuación diferencial. De todos los métodos mencionados, es el método de Frobenius uno de los dos pilares sobre el cual se construye el método que aquí se presenta.

El **Capítulo 2** habla sobre el proceso de diferenciación automática. Sale del contexto de la física pues es un métodos numérico. Dentro de este se puede encontrar una explicación al funcionamiento del método y un par de ejemplos prácticos que evidencias la versatilidad del mismo. También hay definiciones útiles en el caso en que se desee trabajar con el método. Bien puede ser tratado o leído independientemente pues no tiene relación con el primer capítulo. No obstante, es esencial para comprender el siguiente. La diferenciación automática es el segundo pilar de la construcción del método de solución numérica.

Durante el **Capítulo 3** se construye y explica la forma en que el método de Frobenius y el de diferenciación automática pueden ser amalgamados para resolver ecuaciones diferenciales de manera (casi) numéricamente exacta. También se presenta la forma en la que, por ejemplo, se pueden encontrar la energías a un sistema cuántico usando el método de *regula-falsi*.

Por último, en los **Capítulos 4 y 5** se presentan un par de ejemplos prácticos ya conocidos con los cuales se puede comparar la capacidad y alcance del método.

En el **Apéndice** se encuentra la deducción del caso general del método de Frobenius aplicado para cualesquier par de funciones α y β que satisfagan las condiciones ahí indicadas. Esta parte es tan importante para el trabajo que se ha optado por dejarla en este apartado.

Introducción

Las ecuaciones diferenciales aparecen en una gran parte de las áreas de estudio de la física: mecánica analítica, la teoría electrodinámica clásica, termodinámica e incluso en la mecánica cuántica. Desde su descubrimiento y el inicio de su estudio existen ecuaciones diferenciales cuya solución analítica se conoce a profundidad, tanto su forma analítica como sus propiedades esenciales.

Sin embargo, las condiciones que se han de cumplir para que se satisfaga una ecuación, a consecuencia de la simplificación del problema, suelen ser de corto alcance comparado con el rango de situaciones en los que se puede encontrar un sistema. El modelo de un sistema puede llegar a ser válido para un conjunto de parámetros que no cubren por completo el sistema en estudio. Para casos simples, las soluciones no sólo son bien conocidas sino también sus propiedades más relevantes.

Por ejemplo, de la segunda ley de Newton, el movimiento del oscilador armónico simple se modela con la solución a la ecuación siguiente diferencial:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \left(\frac{k}{m}\right)x = 0 \quad (1)$$

En la que $x = x(t)$ representa la posición del oscilador como una función dependiente del tiempo medida desde el punto de equilibrio.

Es posible encontrar la solución a la ecuación (1) usando métodos relativamente sencillos. Uno de ellos consiste en proponer una función de prueba y comprobar si es solución de la ecuación. Para resolver la ecuación (1) suele proponerse como función de prueba a $x(t) = e^{i\omega t}$, que al sustituir se encuentra:

$$\begin{aligned} x''(t) + \left(\frac{k}{m}\right)x(t) &= -\omega^2 e^{i\omega t} + \left(\frac{k}{m}\right)e^{i\omega t} = 0 \quad \Rightarrow e^{i\omega t} \left[\left(\frac{k}{m}\right) - \omega^2 \right] = 0 \\ \Rightarrow \omega &= \pm \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \Rightarrow x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \end{aligned} \quad (2)$$

La función (2), es una combinación lineal de la parte real e imaginaria de la función de prueba que se propuso. Tales funciones forman un conjunto linealmente independiente de

soluciones a la ecuación (1). Además, la solución es una combinación lineal de funciones elementales por lo que analizar sus propiedades como el comportamiento para valores de t grandes o sus raíces se vuelve una tarea relativamente sencilla.

Ya que se encontró una relación entre la función propuesta como solución y los parámetros de la ecuación (1), esta misma se puede escribir de forma más compacta para una función arbitraria y :

$$y'' + \omega^2 y = 0 \quad (3)$$

La función y y su variable independiente pueden representar distintos fenómenos, dependiendo del contexto del problema.

En la ecuación (1), la solución (2) representa el movimiento del oscilador armónico simple. Sin embargo, en el contexto de la mecánica cuántica, la ecuación (3) es la ecuación de Schrödinger con un potencial constante independiente del tiempo en una dimensión por medio de una equivalencia:

$$\omega = k \quad \Rightarrow \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right] \psi = 0 \quad (4)$$

En la ecuación (4), el parámetro k es el número de onda de la función de onda ψ asociada al sistema. El producto $\psi^* \cdot \psi$ modela la distribución de densidad de probabilidad del sistema. Si, además, a la solución de la ecuación (4) se le imponen valores en los extremos del intervalo donde esté definida la ecuación, como es el caso de una partícula confinada en un pozo de potencial infinito unidimensional, de longitud L :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0 \quad (5)$$

Se dice que se tiene un problema de condiciones a la frontera definido por las ecuaciones (4) y (5). Ya que la ecuación (4) es equivalente a la ecuación (1) se puede usar la solución (2) como solución a la ecuación de Schrödinger. Para resolver las condiciones a la frontera (5) se resuelven las ecuaciones algebraicas definidas por la solución en los puntos 0 y L .

$$\psi(0) = A \cos k0 + B \sin k0 = A = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = B \sin kx$$

$$\psi(L) = B \sin kL = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\Rightarrow \quad k = k_n = \frac{n\pi}{L} = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Ya que E_n es la energía del sistema, se puede decir que se ha encontrado la solución al problema salvo por la constante de normalización B .

Los ejemplos (1) y (4) están regidos por la ecuación (3) y se ha encontrado la solución analítica al problema usando un método simple. Ambos problemas tienen dominio en una dimensión lo cual es muy difícil que exista en un experimento de laboratorio. Por ende, es necesario considerar dos (o tres) dimensiones espaciales para modelar completamente un sistema.

Cuando se tiene un problema de la forma (3) en varias dimensiones espaciales que presenten determinadas simetrías suele recurrirse al método de separación de variables que, esencialmente, consiste en proponer una función que dependa del producto de funciones independientes, una para cada dimensión espacial. Este proceso deriva en un sistema de ecuaciones independientes en las cuales hay que encontrar la solución a cada una. En más de una dimensión espacial, la ecuación (3) tiene la forma:

$$\nabla^2 y + k^2 y = 0 \quad (6)$$

Que es la ecuación de Helmholtz y es la parte espacial de la ecuación de onda. Mediante el proceso de separación se obtienen diferentes ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden cuya forma más general es:

$$p_2 y'' + p_1 y' + p_0 y = 0 \quad (7)$$

En donde p_2 , p_1 y p_0 son funciones de una variable la cual es la misma que la variable independiente de la incógnita y . Los ejemplos (1) y (4) son un caso especial de la ecuación (7) para una combinación particular de funciones p_2 , p_1 y p_0 ; en tal caso $p_2(x) = 1$, $p_1(x) = 0$ y $p_0(x) = k^2$ una constante. Si se modifica un poco la combinación de p_2 , p_1 y p_0 , la solución cambia notablemente.

Un caso conocido se da si sólo se cambia a p_1 por $p_1(x) = \frac{1}{x}$, al hacerlo se obtiene:

$$y'' + \left(\frac{1}{x}\right) y' + k^2 y = 0 \quad \Rightarrow \quad x^2 y'' + x y' + x^2 k^2 y = 0 \quad (8)$$

La ecuación (8) es la ecuación de Bessel de orden cero y modela la parte radial de la solución a la ecuación de Helmholtz cuando se usa un sistema de coordenadas cilíndricas por lo que de nuevo el problema radica en tener la capacidad de resolver la ecuación (8) junto con condiciones a la frontera propias del sistema.

El proceso utilizado anteriormente no es suficiente para encontrar la solución a la ecuación (8). El método al que se recurre para encontrar la solución al problema es el método de Frobenius y, si se cumplen determinadas hipótesis, brinda una forma de calcular la solución de la forma (7). Dicho método es generalmente extenso, en este capítulo introductorio no se presenta su desarrollo al aplicarlo en el problema, no obstante, sí se presenta la forma explícita de la solución:

$$y_0(x) = C J_0(x) + D Y_0(x)$$

$$J_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad Y_0(x) = \frac{2}{\pi} J_0(x) \left[\gamma + \ln\left(\frac{x}{2}\right) \right] - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!k!} H_k \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \quad (9)$$

A las funciones J_0 y Y_0 se les conoce como función de Bessel de primer y segundo tipo, respectivamente. Ambas, son soluciones a la ecuación (8), sin embargo, la función Y_0 presenta una singularidad en $x = 0$ heredado de la función p_2 .

Contrario al problema (3), obtener y analizar las soluciones (9) son tareas extensas. Que la segunda solución Y_0 esté en términos de la primera, J_0 , y aún así ambas formen un conjunto linealmente independiente da cuenta de lo poco trivial del proceso de solución. Por otro lado, las soluciones también presentan un comportamiento peculiar pues, aunque se conozca su forma analítica, no sucede lo mismo con sus raíces o el período de oscilación para valores de x cercanos al origen. La alternativa a la que más se recurre es calcular la solución mediante aproximaciones para después compararlas con lo que se sabe *a priori*.

Estos cálculos se vuelven complejos cuando son abordados numéricamente. Existen muchas y diversas formas de resolver una ecuación diferencial de forma numérica. Cada método, con sus respectivas ventajas y desventajas, ofrece una mayor o menor precisión con respecto a la solución analítica. Los cálculos que se efectúan para encontrar la solución son aproximaciones en mayor o menor grado dependiendo de la capacidad de los recursos de cómputo. Es aquí cuando entra en juego la eficiencia de un método y su implementación como algoritmo para ser interpretado por una computadora.

El método de Euler o el de Runge-Kutta son algunas de las formas en las que habitualmente se resuelven ecuaciones diferenciales de manera numérica. Sin embargo, dichos métodos usan como base la definición de derivada para aproximar el valor de la solución y eso representa un error numérico ya que la derivada es un límite puntual en un dominio donde la ecuación esté definida. Eso significa que, sin importar qué tan *refinado* se ejecute el cálculo, hay un error de cálculo desde el inicio.

En el texto se propone una alternativa para resolver ecuaciones diferenciales de forma numérica. El procedimiento utiliza dos métodos como base para su desarrollo e implementación. El primero es el método de Frobenius que brinda la manera encontrar la solución a una ecuación diferencial en su representación en serie de potencias. El segundo es el método de diferenciación automática que permite calcular los valores numéricos de los coeficientes del polinomio de Taylor asociado a una función en un punto dado.

La combinación de estos dos métodos por sí misma no es suficiente para obtener una solución numérica exacta pues ya que con el método de Frobenius se obtiene una serie de potencias, es necesario agregar más términos a una serie trunca para calcular valores de la función en un punto lejos del cual se desarrolla la serie.

Índice general

Introducción	vii
1. Origen y relevancia de las ecuaciones diferenciales en la física	1
1.1. Teoría de Sturm-Liouville	1
1.1.1. El problema de valores a la frontera	1
1.1.2. La medida en el espacio de funciones	2
1.1.3. Operadores diferenciales autoadjuntos	3
1.1.4. Funciones y valores propios	4
1.1.5. Representación en serie	6
1.2. Ecuación de Helmholtz	6
1.2.1. Ecuación de onda	6
1.2.2. Sistemas coordenados	7
1.3. Métodos de solución analítica	11
1.3.1. Método de ecuación característica	11
1.3.2. Método de reducción de orden	12
1.3.3. Método de Frobenius	13
1.4. Resumen	15
2. Diferenciación automática	19
2.1. Preámbulos	19
2.1.1. Contexto	19
2.2. Diferenciación automática	20
2.2.1. Esbozo	20
2.2.2. Definiciones	20
2.2.3. Operaciones entre funciones	21
2.2.4. Operaciones entre polinomios de Taylor	22
2.2.5. Series de Taylor y su relación intrínseca con la diferenciación automática	24

3. Solución numérica a ecuaciones diferenciales mediante diferenciación automática	27
3.1. Planteamiento y desarrollo	27
3.1.1. Solución de Frobenius	27
3.1.2. Cómputo de la relación de recurrencia	28
3.1.3. Soluciones concatenadas	29
3.2. Método de <i>regula-falsi</i>	30
3.3. Normalización	31
3.4. Resumen	32
4. Aplicación: Funciones de Bessel	33
4.1. Ecuación diferencial de Bessel: Solución unidimensional	33
4.2. Solución bidimensional	36
4.3. Representación en serie	38
5. Aplicación: Electrón confinado a una superficie cilíndrica finita en presencia de campos electromagnéticos	41
5.1. Carga eléctrica en campo electromagnético	41
5.1.1. Lagrangiano	41
5.1.2. Hamiltoniano	42
5.2. Confinamiento a un anillo	42
5.2.1. Consideraciones	42
5.2.2. Reducción de grados de libertad	43
5.3. Aplicación del método	44
5.4. Resultados	45
5.4.1. Geometría del sistema	45
5.4.2. Comportamiento en la frontera	46
5.4.3. Espectro de energía y funciones de onda	47
6. Conclusiones	51
A. Método de Frobenius: Solución general	53
Bibliografía	57

Origen y relevancia de las ecuaciones diferenciales en la física

1.1. Teoría de Sturm-Liouville

1.1.1. El problema de valores a la frontera

Considérese una ecuación diferencial ordinaria lineal homogénea de segundo orden donde la incógnita es la función $y(x)$ tiene la forma:

$$p_2(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + p_1(x) \frac{dy}{dx} + p_0(x) y = 0 \quad x \in (a, b) \quad (1.1)$$

En lo que se refiere a este trabajo, se considera el caso en que las funciones p_1 , p_2 y p_3 tienen derivadas de cualquier orden y tal derivada es continua en el dominio donde esté definida la ecuación. Un problema importante es el de encontrar la función (o funciones) que sean solución de la ecuación (1.1) y que además satisfaga las condiciones a la frontera del dominio:

$$y(a) = A \quad y(b) = B \quad (1.2)$$

Al conjunto de funciones que satisfagan las mismas condiciones que p_1 , p_2 y p_3 y (1.2) se denotará por Ω .

De la ecuación (1.1) es posible construir un operador diferencial que actúa sobre y :

$$\left(\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] + q(x) \right) = p'(x) \frac{d}{dx} + p(x) \frac{d^2}{dx^2} + q(x)$$

Identificando los términos $p(x) = p_2(x)$, $p'(x) = p_1(x)$, $q(x) = p_0(x)$ se obtiene al operador diferencial de segundo orden:

$$\mathcal{L} = \left(\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{d}{dx} \right] + q(x) \right) = p_2(x) \frac{d^2}{dx^2} + p_1(x) \frac{d}{dx} + p_0(x) \quad (1.3)$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

Por lo que la ecuación diferencial homogénea puede escribirse en forma más compacta en términos de un operador y el problema representa encontrar aquellas funciones y que satisfagan

$$\mathcal{L}[y] = 0 \quad y(a) = A \quad y(b) = B \quad (1.4)$$

Al problema (1.4) se le conoce como problema de Sturm-Liouville con condiciones de Robin homogéneas al imponer condiciones a los valores de la solución y en la frontera del dominio de la ecuación.

El caso no homogéneo del problema de Sturm-Liouville y de mayor interés para la física es aquel en el que el operador reproduce a la función sobre la que actúa. Es decir, en su forma general, el problema tiene la forma:

$$\mathcal{L}[y] = \lambda w(x)y \quad y(a) = A \quad y(b) = B \quad (1.5)$$

La ecuación (1.5) es un problema de valores propios para la función y . Al escalar λ se le conoce como el valor propio asociado a y . A $w(x)$ se le suele llamar función de peso y cumple con:

$$0 < w(x) \quad \forall x \in (a, b) \quad (1.6)$$

A lo más, $w(x) = 0$ para un conjunto de puntos aislados de (a, b) (1).

El operador \mathcal{L} cumple con las propiedades de linealidad al actuar sobre una solución ya que las hereda de las propiedades mismas de la derivada. Es decir, si y_1 y y_2 son soluciones al problema (1.4) y λ, μ son escalares cualesquiera, se satisface que:

$$\mathcal{L}[\lambda y_1 + \mu y_2] = \lambda \mathcal{L}[y_1] + \mu \mathcal{L}[y_2] = 0 + 0 = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}[\lambda y_1 + \mu y_2] = 0$$

La combinación lineal de soluciones es solución y las condiciones a la frontera se satisfacen por la misma razón.

1.1.2. La medida en el espacio de funciones

El conjunto definido Ω es, a saber, un espacio vectorial de funciones con dimensión infinita. Para un espacio vectorial una de las propiedades que se estudian es el producto interior definido sobre el mismo espacio. Es una manera de medir dentro de él. El **producto interior** de dos funciones u, v en Ω está definido por:

$$\langle u|v \rangle = \int_a^b u^*(t)v(t)w(t)dt \quad (1.7)$$

El producto interior en Ω da una noción de medida análoga a la que se tiene para \mathbb{R}^2 , en ese sentido, se puede decir que $\langle u|v \rangle$ es la proyección de u sobre v . Por lo tanto, también

puede ocurrir que tal proyección sea cero. Si tal es el caso, se dice que las funciones son ortogonales. Dadas u y v , son **ortogonales** con el producto interior si:

$$\langle u|v \rangle = 0 \tag{1.8}$$

Con el producto interior definido es posible definir también una norma. De esta forma se completa la manera de medir o comparar funciones en Ω . La **norma** de una función u está dada en términos de su producto interior por:

$$\|u\|^2 = \langle u|u \rangle \tag{1.9}$$

Con la norma, se identifican aquellas funciones cuya norma es igual a 1. Las funciones que cumplan eso se les llama *funciones unitarias* en Ω . Es decir, u es **unitaria** si

$$\|u\| = 1 \tag{1.10}$$

Con la propiedad de ortogonalidad y funciones unitarias en el espacio Ω se pueden encontrar conjuntos γ de funciones que, dos a dos, cumplan ambas propiedades. Es decir, si u_i están en $\gamma \subset \Omega$ y además:

$$\|u_i\| = 1 \quad \forall u_i \in \gamma \quad \langle u_i|u_j \rangle = 0 \quad i \neq j \quad u_i, u_j \in \gamma$$

Se dice que el conjunto γ es **ortonormal**. Los conjuntos que cumplen esta propiedad son de interés especial pues son candidatos para formar una base de Ω lo que significa que cualquier función f puede ser representada como una combinación lineal infinita (serie) de las funciones existentes en γ .

1.1.3. Operadores diferenciales autoadjuntos

Usando la definición (1.3) se puede demostrar que el operador \mathcal{L} es un operador autoadjunto en el espacio Ω . Para ésto, cabe recordar que un operador es autoadjunto si satisface $\mathcal{L} = \hat{\mathcal{L}}$; donde $\hat{\mathcal{L}}$ es el operador adjunto a \mathcal{L} , aquel que cumple:

$$\langle \mathcal{L}u|v \rangle = \langle u|\hat{\mathcal{L}}v \rangle \tag{1.11}$$

Al usar el operador definido por (1.3) en (1.11) con condiciones (1.2) homogéneas se tiene:

$$\langle \mathcal{L}u|v \rangle = \int_a^b (\mathcal{L}[u])(t)v(t)dt = \int_a^b \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{du^*}{dt} \right] + q(t)u^*(t) \right) v(t)dt$$

Resolviendo por partes el primer miembro de la integral se cumple:

$$\int_a^b \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{du^*}{dt} \right] \right) v(t)dt = p(x)(u^*)'(x)v(x) \Big|_a^b - p(x)u^*(x)v'(x) \Big|_a^b$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

$$\begin{aligned}
 & + \int_a^b u^*(t) (p'(t)v'(t) + p(t)v''(t)) dt \\
 \Rightarrow & \int_a^b \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{du^*}{dt} \right] \right) v(t) dt = \int_a^b u^*(t) \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{dv}{dt} \right] \right) dt
 \end{aligned}$$

En resumen:

$$\begin{aligned}
 \int_a^b \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{du^*}{dt} \right] + q(u)u^*(t) \right) v(t) dt &= \int_a^b u^*(t) \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{dv}{dt} \right] \right) dt + \int_a^b q(t)u^*(t)v(t) dt \\
 \Rightarrow \int_a^b \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{du^*}{dt} \right] + q(u)u^*(t) \right) v(t) dt &= \int_a^b u^*(t) \left(\frac{d}{dt} \left[p(t) \frac{dv}{dt} \right] + q(u)v(t) \right) dt \\
 &\Rightarrow \langle \mathcal{L}u|v \rangle = \langle u|\mathcal{L}v \rangle \quad \Rightarrow \hat{\mathcal{L}} = \mathcal{L}
 \end{aligned}$$

Por lo que el operador definido en (1.3) es un operador autoadjunto. Con esto, se tiene Ω un espacio vectorial de funciones reales y \mathcal{L} un operador autoadjunto definido en Ω . Y, dentro de todas las propiedades que satisfacen los operadores autoadjuntos, las más importantes para su aplicación en la física son:

- Las funciones propias del operador \mathcal{L} forman una base ortonormal del espacio de funciones donde \mathcal{L} es autoadjunto (7) (6) (8).
- Los valores propios del operador \mathcal{L} son reales.

De la primera, el problema de encontrar una base del espacio Ω se reduce a encontrar las funciones propias del operador \mathcal{L} con lo cual, la representación de cualquier función $f \in \Omega$ queda determinada. De la segunda, es importante encontrar la relación entre el valor propio de una función propia del operador \mathcal{L} y el problema del sistema en estudio.

1.1.4. Funciones y valores propios

Considérense las funciones propias y_i del operador \mathcal{L} . A cada función propia y_i se le asocia un valor propio λ_i . Dado que las funciones propias y_i satisfacen la ecuación (1.5) es posible derivar una propiedad importante a partir de ello.

Partiendo de la ecuación (1.5) para dos funciones propias no necesariamente iguales:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}[y_i] - \lambda_i w(x)y_i &= 0 & \mathcal{L}[y_j] - \lambda_j w(x)y_j &= 0 \\
 \Rightarrow y_j \mathcal{L}[y_i] - y_i \mathcal{L}[y_j] &= (\lambda_i - \lambda_j) w(x)y_i y_j \\
 \Rightarrow \int_a^b y_j^* \mathcal{L}[y_i] dx - \int_a^b y_i^* \mathcal{L}[y_j] dx &= (\lambda_i - \lambda_j) \int_a^b w(x)y_i^* y_j dx \quad (1.12)
 \end{aligned}$$

Ya que el operador \mathcal{L} es autoadjunto, las dos integrales del lado izquierdo de la ecuación (1.12) se anulan entre sí; por lo que se tiene la condición:

$$(\lambda_i - \lambda_j) \int_a^b w(x) y_i^* y_j = 0$$

Lo cual es verdad si $i = j$. Por el contrario, si $i \neq j$, se tiene que satisfacer:

$$\int_a^b y_i^* y_j w(x) dx = 0 \quad (1.13)$$

Que es la condición de ortogonalidad para las funciones propias y_i del operador \mathcal{L} . Por lo tanto, de manera análoga, una función propia y_i del operador \mathcal{L} es **unitaria** si:

$$\int_a^b y_i^2(x) w(x) dx = 1 \quad (1.14)$$

La función w se le suele llamar también función de densidad pues *aporta* la parte necesaria para que al medir la función dentro del espacio, la *información* esté completa.

Desde el inicio del problema del Sturm-Liouville, identificar a la función de peso se vuelve esencial para comprobar las propiedades de ortogonalidad y norma. Por ejemplo, recordando el problema introductorio:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E_n\psi \quad (1.15)$$

En donde se encuentra el operador autoadjunto y se puede escribir la ecuación (1.15) en la forma de (1.5):

$$\mathcal{L}_S = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}_S[\psi] = E_n\psi$$

Además, es posible identificar al valor propio λ y a la función de peso w :

$$\lambda_n = E_n \quad w(x) = 1$$

Por supuesto, $\lambda_n \in \mathbb{R}$, el cual es un parámetro observable del sistema y $w(x)$ cumple con (1.6).

1.1.5. Representación en serie

Una de las propiedades más importantes con las que cuentan los operadores autoadjuntos está relacionada con sus funciones propias. Dicho conjunto, además de ser ortonormal, forma una base completa del espacio de funciones Ω . Es decir, cualquier función $f \in \Omega$ puede ser representada mediante una combinación lineal infinita (serie) de las funciones propias y_n asociadas a un operador \mathcal{L} .

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n y_n(x) \quad (1.16)$$

En la serie de funciones (1.16), la función f determina de manera única los coeficientes A_n y para calcularlos se recurre a la propiedad de ortonormalidad de las funciones y_n :

$$\begin{aligned} \langle y_{n'} | f \rangle &= \langle y_{n'} | \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n y_n \right) \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \langle y_{n'} | y_n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \delta_{n'n} = A_{n'} \\ \Rightarrow A_n &= \langle y_n | f \rangle = \int_a^b y_n^*(t) f(t) w(t) dt \end{aligned} \quad (1.17)$$

Por lo que los coeficientes A_n (conocidos como *coeficientes de Fourier*) se calculan usando la definición de producto interior en Ω y, ya que la integral es un límite, y este, de existir, es único, también lo es cada A_n . Es necesario recalcar que si bien las funciones propias satisfacen las condiciones a la frontera, la función f puede no hacerlo. Esto se explica con más precisión en (5) (10) (3).

1.2. Ecuación de Helmholtz

1.2.1. Ecuación de onda

Un fenómeno físico tiene representación en un espacio de cuatro dimensiones o con cuatro coordenadas: tres espaciales y una temporal. Así, un problema que tenga como variables independientes aquellas de clase espacial y temporal generalmente satisface la ecuación de onda o alguna de sus formas modificadas.

En su forma más elemental, la ecuación de onda en tres dimensiones espaciales es:

$$\nabla^2 u - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (1.18)$$

Donde $u = u(\bar{x}, t)$ y v es la velocidad de propagación de la onda. Al ser una ecuación para una función dependiente de varias variables, se dice que la ecuación es una ecuación

diferencial parcial. El método más común y utilizado en primer instancia para tratar de resolver un problema de este tipo es el de separación de variables. Su procedimiento consiste en suponer que la función solución que se busca, u , puede ser expresada como un producto de funciones de una sola variable:

$$u(\bar{x}, t) = A(\bar{x})T(t)$$

Usando esta representación de u en la ecuación (1.18):

$$\begin{aligned} \nabla^2 u(\bar{x}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(\bar{x}, t) &= \nabla^2 (A(\bar{x})T(t)) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (A(\bar{x})T(t)) = 0 \\ \Rightarrow T \nabla^2 A - \frac{1}{v^2} A \frac{d^2 T}{dt^2} &= 0 \\ \Rightarrow \frac{\nabla^2 A}{A} &= \frac{1}{v^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} \end{aligned}$$

Dos funciones de dos variables distintas son iguales en ambos dominios si ambas funciones son constantes. A esta constante k se le llama constante de separación.

$$\Rightarrow \frac{\nabla^2 A}{A} = \frac{1}{v^2 T} \frac{d^2 T}{dt^2} = -k^2$$

Por lo que se tiene un par de ecuaciones diferenciales, una para la parte temporal y la otra para la parte espacial de la solución:

$$T'' + (kv)^2 T = 0 \tag{1.19a}$$

$$\nabla^2 A + k^2 A = 0 \tag{1.19b}$$

La ecuación (1.19a) es la misma que se indica en el capítulo introductorio (1) para k y v constantes por lo que su solución es conocida y es de naturaleza oscilatoria. Por otro lado, a la ecuación (1.19b) se le conoce como ecuación de Helmholtz para A . Es una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden y, al depender de las coordenadas espaciales, las diferentes simetrías que pueda contener un sistema definen el tipo de solución asociada. A la vez, en la ecuación (1.19b) aparece el operador diferencial ∇ indicando la dependencia de las coordenadas en las tres dimensiones espaciales. Dicho operador, dependiendo del sistema coordenado que se use, puede presentarse en distintas formas.

1.2.2. Sistemas coordenados

Un sistema físico puede presentar diferentes simetrías. Estas han de aprovecharse para resolver de una manera más práctica el problema. Al mismo tiempo, cambiar de un sistema coordenado a otro implica que una función cambie su dependencia y en consecuencia una ecuación diferencial diferente entre un sistema y otro. Es por esto que se citan los sistemas coordenados usados para las simetrías más comunes.

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

Coordenadas cartesianas

El sistema elemental, las funciones coordenadas son la función identidad, no presenta curvatura y los operadores diferenciales escritos en este sistema no cambian:

$$\bar{x} = (x, y, z) \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.20)$$

Es útil para problemas de confinamiento en cajas, rectángulos y en general para geometrías *cuadradas*. Este sistema no cambia de forma al variar entre dimensiones. Recurriendo al método de separación de variables para la función A y usando el operador ∇^2 de la ecuación (1.20) en (1.19b):

$$\begin{aligned} A(\bar{x}) &= X(x)Y(y)Z(z) \\ \Rightarrow \quad \nabla^2 A + k^2 A &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) X(x)Y(y)Z(z) + k^2 X(x)Y(y)Z(z) = 0 \\ &\Rightarrow \quad YZX'' + XZY'' + XYZ'' + k^2 XYZ = 0 \end{aligned}$$

Dividiendo la ecuación entre XYZ y usando la constante de separación l :

$$\Rightarrow \quad \frac{X''}{X} = - \left(\frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} + k^2 \right) = -l^2$$

De la segunda igualdad resulta, usando la constante de separación m :

$$\frac{Y''}{Y} = - \left(\frac{Z''}{Z} + k^2 - l^2 \right) = -m^2$$

Al definir $-n^2 = (l^2 + m^2 - k^2)$ se tienen las siguientes ecuaciones

$$X'' + l^2 X = 0 \quad (1.21a)$$

$$Y'' + m^2 Y = 0 \quad (1.21b)$$

$$Z'' + n^2 Z = 0 \quad (1.21c)$$

El sistema de ecuaciones (1.21) consiste de ecuaciones ordinarias, una para cada coordenada espacial. La forma es del tipo (1).

Coordenadas cilíndricas circulares

Este sistema coordenado se usa para sistemas en tres dimensiones espaciales con simetría azimutal. Es útil para sistemas que no tengan dependencia en alguna dirección. Tal dirección se define como la normal al plano del sistema.

$$\bar{x} = (x(r, \varphi), y(r, \varphi), z) = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.22)$$

Usando separación de variables para A como $A(\bar{x}) = R(r)\Phi(\varphi)Z(z)$ y el operador ∇^2 de la ecuación (1.22) en (1.19b):

$$\begin{aligned} \nabla^2 A + k^2 A &= \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] R(r)\Phi(\varphi)Z(z) + k^2 R(r)\Phi(\varphi)Z(z) = 0 \\ \Rightarrow \Phi Z \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + RZ \left[\frac{1}{r^2} \left(\frac{d\Phi}{d\varphi} \right)^2 \right] + R\Phi \left[\frac{d^2 Z}{dz^2} \right] + k^2 R\Phi Z &= 0 \end{aligned}$$

Al dividir la ecuación entre A , separar la función $Z(z)$ y usar la constante de separación l :

$$\frac{1}{rR} \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + \frac{1}{r^2\Phi} \left(\frac{d\Phi}{d\varphi} \right)^2 + k^2 = -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dz} = -l^2$$

Del primer y último miembro de la igualdad, si se define $n^2 = k^2 + l^2$ y una constante de separación m

$$\begin{aligned} \frac{1}{rR} \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + \frac{1}{r^2\Phi} \left(\frac{d\Phi}{d\varphi} \right)^2 = -n^2 &\Rightarrow \frac{r}{R} \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + \frac{1}{\Phi} \left(\frac{d\Phi}{d\varphi} \right)^2 = -r^2 n^2 \\ \Rightarrow \frac{r}{R} \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + r^2 n^2 = -\frac{1}{\Phi} \left(\frac{d\Phi}{d\varphi} \right)^2 = m^2 \end{aligned}$$

Se tienen las ecuaciones para R , Φ y Z :

$$Z'' - l^2 Z = 0 \quad (1.23a)$$

$$\Phi'' + m^2 \Phi = 0 \quad (1.23b)$$

$$r \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + (r^2 n^2 - m^2) R = 0 \quad (1.23c)$$

Las ecuaciones (1.23a) y (1.23b) ya se conoce el método de solución. Sin embargo, la ecuación (1.23c) se le conoce como la ecuación de Bessel de orden m y representa una mayor dificultad al momento de encontrar su solución.

Coordenadas esféricas

Útil para sistemas con simetría esférica. Si la variable relevante es la distancia respecto a algún punto de interés, éste es el sistema de coordenadas más adecuado.

$$\bar{x} = (x(r, \theta, \varphi), y(r, \theta, \varphi), z(r, \theta, \varphi)) = (r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta)$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

$$\begin{aligned}\nabla &= \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right), \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \\ \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)\end{aligned}\quad (1.24)$$

Usando separación de variables para la función A como $A(\bar{x}) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ para el operador de la ecuación (1.24) en (1.19b):

$$\begin{aligned}\nabla^2 A + k^2 A &= \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \\ &\quad + k^2 R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = 0 \\ \Rightarrow \Theta\Phi \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right] &+ R\Phi \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + R\Theta \left[\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right) \right] \\ &\quad + k^2 R\Theta\Phi = 0\end{aligned}$$

Al dividir la ecuación entre A , se tiene:

$$\frac{1}{R} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right] + \frac{1}{\Theta} \left[\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + \frac{1}{\Phi} \left[\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} \right) \right] = -k^2$$

Al multiplicar toda la ecuación por $r^2 \sin^2 \theta$, separar la parte dependiente de φ y usar a m como constante de separación:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = r^2 \sin^2 \theta \left[-k^2 - \frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{1}{r^2 \sin \theta \Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] = -m^2$$

Con las últimas dos igualdades se puede separar la parte de que depende de r y usando la constante de separación s :

$$\begin{aligned}-k^2 - \frac{1}{r^2 R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{1}{r^2 \sin \theta \Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) &= \frac{-m^2}{r^2 \sin^2 \theta} \\ \Rightarrow \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + r^2 k^2 &= \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{\sin \theta \Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = s^2\end{aligned}$$

La ecuación para Θ tiene la forma:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(s^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0$$

Si se hace el cambio de variable $x = \cos \theta$, se llega al siguiente conjunto de ecuaciones para $R(r)$, $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\varphi)$:

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \quad (1.25a)$$

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right) + \left(s^2 - \frac{m^2}{(1-x)^2} \right) \Theta = 0 \quad (1.25b)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (r^2 k^2 - s^2) R = 0 \quad (1.25c)$$

Como se ha mostrado, el operador ∇^2 en diferentes geometrías reduce el problema de una ecuación diferencial parcial a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, diferente en cada caso. La complejidad varía también con respecto al sistema coordinado que se use.

El problema ahora se dirige a encontrar la solución a las ecuaciones encontradas. Si bien existen métodos para encontrar la solución de manera analítica, no se pueden aplicar en todos los casos como se muestra en la siguiente sección.

1.3. Métodos de solución analítica

1.3.1. Método de ecuación característica

Partiendo del problema (1.1) para el caso especial en que las funciones p_2 , p_1 y p_0 son funciones constantes a , b , c , respectivamente, el problema se convierte a la forma:

$$ay''(x) + by'(x) + cy(x) = 0 \quad (1.26)$$

En este caso es relativamente simple encontrar una solución. Para esto, se propone como solución a la función:

$$y(x) = e^{rx} \quad (1.27)$$

La motivación a esto es que la función exponencial sigue *apareciendo* después de derivar por lo que la ecuación (1.26) induce la condición para que (1.27) sea solución. Al derivar y usar en la misma ecuación se tiene:

$$\begin{aligned} a(r^2 e^{rx}) + b(re^{rx}) + ce^{rx} &= e^{rx} (ar^2 + br + c) = 0 \\ \Rightarrow ar^2 + br + c &= 0 \end{aligned} \quad (1.28)$$

La cual es una ecuación cuadrática o de segundo orden donde r es la incógnita. Esta es inducida por la misma ecuación con lo que se dice es la ecuación asociada o característica del problema (1.26). Las soluciones a la ecuación (1.28) son:

$$r_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad r_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (1.29)$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

Las dos raíces inducen las dos soluciones al problema (1.26):

$$y(x) = Ae^{r_1x} + Be^{r_2x} \quad (1.30)$$

Ya que la solución (1.30) es una combinación lineal de exponenciales que dependen directamente de r_1 y r_2 analizar el comportamiento de tal solución se reduce a analizar las raíces dadas por (1.29).

Por ejemplo, si $a = 1$, $b = 0$ y $c = \omega^2$, una constante, se recupera el caso del que se habla en la introducción pues se tiene

$$r_1 = \frac{\sqrt{-4\omega^2}}{2} = \pm i\omega \quad r_2 = -r_1$$
$$\Rightarrow y(x) = Ae^{i\omega x} + Be^{-i\omega x} = (A + B) \cos \omega x + i(A - B) \sin \omega x$$

La cual es equivalente a la solución mencionada.

1.3.2. Método de reducción de orden

De nuevo, tomando el problema (1.1) ahora con p_0 y p_1 variables pero con p_2 constante, por simplicidad $p_2 = 1$, se tiene:

$$y''(x) + p_1(x)y'(x) + p_0(x)y(x) = 0 \quad (1.31)$$

El objetivo es encontrar las soluciones al problema (1.31). Para esto, se parte bajo una fuerte suposición: se conoce una de las soluciones $y_1(x)$. Con esto, se procede a introducir una nueva variable dependiente v y encontrar las condiciones bajo las cuales la segunda solución depende de la variable v :

$$y(x) = y_1(x)v(x) \quad \Rightarrow \quad y'(x) = y_1'(x)v(x) + y_1(x)v'(x)$$
$$\Rightarrow y''(x) = (y_1''(x)v(x) + y_1'(x)v'(x)) + (y_1'(x)v'(x) + y_1(x)v''(x))$$
$$\Rightarrow y''(x) = y_1''(x)v(x) + 2y_1'(x)v'(x) + y_1(x)v''(x)$$

De esta forma, si se tienen a y' y y'' se puede calcular $\mathcal{L}[y]$ con (1.31):

$$(y_1''(x)v(x) + 2y_1'(x)v'(x) + y_1(x)v''(x)) + p_1(x)(y_1'(x)v(x) + y_1(x)v'(x)) + p_0(x)y(x)$$
$$y_1(x)v''(x) + 2(y_1'(x) + p_1(x)y_1(x))v'(x) + (y_1''(x) + p_1(x)y_1'(x) + p_0(x)y_1(x))$$
$$\Rightarrow \mathcal{L}[y] = y_1(x)v''(x) + 2(y_1'(x) + p_1(x)y_1(x))v'(x)$$

Por lo que y es solución si se satisface

$$y_1(x)v''(x) + 2(y_1'(x) + p_1(x)y_1(x))v'(x) = 0$$

En este punto es importante recordar la relevancia de la suposición de conocer una de las soluciones y_1 con lo que la única incógnita es v' :

$$v'(x) = u(t) = \frac{\exp\left(-\int p_1(t)dt\right)}{y_1^2(x)} \quad (1.32)$$

La ecuación (1.32) es una ecuación diferencial lineal de primer orden por lo que se puede resolver integrando. De ahí el origen del nombre del método pues se ha reducido el problema (1.31) de encontrar la solución de una ecuación de segundo orden a encontrar la solución a una de primer orden; partiendo de la suposición de que se conoce y_1 . Al hacer la constante de integración igual a 1, por simplicidad, se obtiene

$$v(x) = \int u(t)dt \quad y_2(x) = y_1(x)v(x) \quad (1.33)$$

El conjunto de funciones en (1.33) y (1.32) determina por completo la segunda solución al problema (1.31). Se suele recurrir a éste método cuando se han encontrado raíces iguales usando el método de ecuación característica.

Como se ha mostrado en las secciones anteriores, se conocen métodos prácticos para encontrar la solución analítica a problemas de la forma (1.1) para casos particulares. Sin embargo, dichos métodos no pueden aplicarse para el caso general, aquel en que p_2 , p_1 y p_0 son funciones. Para esto, se recurre al método de Frobenius que si bien ejecutarlo *a mano* puede llegar a ser una tarea larga, garantiza encontrar la solución general al problema bajo ciertas hipótesis.

1.3.3. Método de Frobenius

Partiendo de la ecuación (1.1), a los puntos $x_0 \in (a, b)$ tales que $p_2(x_0) \neq 0$ se les conoce como *puntos ordinarios*. Si x_0 es un punto ordinario, p_2 no se anula en dicho punto; y ya que p_1 , p_2 y p_3 son diferenciables, en una vecindad de x_0 se puede definir (4):

$$\alpha(x) = \frac{p_1(x)}{p_2(x)} \quad \beta(x) = \frac{p_0(x)}{p_2(x)}$$

$$\Rightarrow y''(x) + \alpha(x)y'(x) + \beta(x)y(x) = 0 \quad (1.34)$$

Para resolver la ecuación (1.34) el método de Frobenius el consiste en proponer la solución como una serie de potencias en el intervalo (a, b) :

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n (x - x_0)^n \quad (1.35)$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

Y al sustituir (1.35) en (1.34) se derivan las condiciones bajo las cuales (1.35) es solución. No obstante, existe una manera más general de calcular la serie de potencias (1.35) en términos de las funciones $\alpha(x)$, $\beta(x)$. Esto se explica con detalle en el **Apéndice**.

Como ejemplo práctico al método de Frobenius se considera la ecuación (1) en forma adimensional:

$$y'' + y = 0 \quad (1.36)$$

Con lo que, en términos de la serie de potencias (1.35) la segunda derivada es:

$$y''(x) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)y_n x^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)y_{n+2} x^n \quad (1.37)$$

Al sustituir ambas series en la ecuación (1.36) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)y_{n+2} x^n + \sum_{n=0}^{\infty} y_n x^n &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} ((n+2)(n+1)y_{n+2} + y_n) x^n &= 0 \end{aligned} \quad (1.38)$$

Y ya que se busca que la solución sea válida para toda x en el intervalo donde esté definida la ecuación, se obtiene la condición para los coeficientes de la solución y :

$$\begin{aligned} (n+2)(n+1)y_{n+2} + y_n &= 0 \\ \Rightarrow y_{n+2} &= -\frac{y_n}{(n+2)(n+1)} \end{aligned} \quad (1.39)$$

La relación (1.39) es entre los términos sucesivos por lo que se pueden diferenciar entre aquellos pares y los impares. Para los coeficientes y_n pares, la relación (1.39) genera los siguientes términos:

$$\begin{aligned} y_2 &= -\frac{y_0}{2 \cdot 1} & y_4 &= +\frac{y_2}{4 \cdot 3} & \dots \\ \Rightarrow y_n &= y_{2m} = \frac{(-1)^m}{(2m)!} y_0 \end{aligned} \quad (1.40)$$

De manera análoga para los coeficientes impares:

$$\begin{aligned} y_3 &= -\frac{y_1}{2 \cdot 3} = -\frac{y_1}{3!} & y_5 &= -\frac{y_3}{5 \cdot 4} = +\frac{y_1}{5!} & \dots \\ \Rightarrow y_n &= y_{2m+1} = \frac{(-1)^m}{(2m+1)!} y_1 \end{aligned} \quad (1.41)$$

Y ya que la solución general contiene a todos los términos, tanto pares como impares, esta se puede escribir como:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n x^n = \sum_{m=0}^{\infty} y_{2m} x^{2m} + \sum_{m=0}^{\infty} y_{2m+1} x^{2m+1}$$

Usando las relaciones de recurrencia (1.40) y (1.41) se obtiene la solución general al problema:

$$y(x) = y_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} + y_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1} \quad (1.42)$$

La función en (1.42) contiene dos series independientes; aquella que contiene términos pares y la que contiene términos impares. Estas series corresponden, a saber, a las series de Taylor de la función $\cos(x)$ y $\sin(x)$, respectivamente. Es decir:

$$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} \quad \sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$$

Así, la función (1.42) queda descrita por:

$$y(x) = y_0 \cos(x) + y_1 \sin(x)$$

Con lo que se ha recuperado la solución obtenida anteriormente.

1.4. Resumen

El método de Frobenius es una forma de encontrar una solución para una ecuación diferencial cuyas funciones asociadas α y β sean analíticas en la vecindad del punto de interés pues la solución depende también de los coeficiente de las series de potencias asociadas a cada función. Conocer dicha serie es poco común, en cambio, conocer la serie de Taylor es en principio una opción más viable para encontrar los coeficientes de tal serie.

Ya que las funciones α y β son analíticas, son derivables, por lo que existe la serie de Taylor asociada a cada función y converge en la misma vecindad en que converge su serie de potencias:

$$\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha^{(n)}(0)}{n!} \right) x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n x^n$$

Con eso, basta calcular la forma de cada coeficiente α_n y β_n para completar la solución (1.35). Sin embargo, existen funciones con las cuales calcular su derivada de cualquier orden si bien no es una tarea difícil sí que es poco práctica. Por ejemplo

$$\alpha(x) = \frac{\arctan(x^x)}{\sinh(\cos(x))} e^{x^2}$$

1. ORIGEN Y RELEVANCIA DE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES EN LA FÍSICA

Derivar no es difícil, lo complicado es escribirlo de una manera corta, concisa. Si bien el ejemplo anterior puede parecer una exageración, es la evidencia de casos en los que calcular *a mano* cualquier término de la derivada de una función se vuelve un ejercicio impracticable.

Para aprovechar el método de Frobenius en el cálculo de la solución a una ecuación se hace uso del método de diferenciación automática. En resumen, permite conocer el valor numérico de los coeficientes que se buscan sin la necesidad de conocer su expresión algebraica. Utilizar ambos procedimientos es una forma de solución que permite abordar ecuaciones como las que se derivaron en la **Sección 1.2.2.** Para hacer un breve recordatorio, se hace una lista a continuación:

De la ecuación de onda (1.18), al proponer una función de variables separables se han obtenido las ecuaciones:

$$T'' + (kv)^2 T = 0 \quad (1.43a)$$

$$\nabla^2 A + k^2 A = 0 \quad (1.43b)$$

Después, dependiendo de la simetría del sistema, se han obtenido los sistemas de ecuaciones independientes en cada sistema coordenado:

Coordenadas cartesianas

$$X'' + l^2 X = 0 \quad (1.44a)$$

$$Y'' + m^2 Y = 0 \quad (1.44b)$$

$$Z'' + n^2 Z = 0 \quad (1.44c)$$

Coordenadas cilíndricas circulares

$$Z'' - l^2 Z = 0 \quad (1.45a)$$

$$\Phi'' + m^2 \Phi = 0 \quad (1.45b)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) + \left(rn^2 - \frac{m^2}{r} \right) R = 0 \quad (1.45c)$$

Coordenadas esféricas

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \quad (1.46a)$$

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right) + \left(s^2 - \frac{m^2}{(1-x)^2} \right) \Theta = 0 \quad (1.46b)$$

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + (r^2 k^2 - s^2) R = 0 \quad (1.46c)$$

Ya que el operador definido en (1.3) es un operador autoadjunto, se dirá que si una ecuación como las anteriores está escrita en forma equivalente está en su **forma autoadjunta**.

Los métodos de solución analítica expuestos sólo son capaces de abordar algunas de las ecuaciones obtenidas. El método de Frobenius, en principio, puede ofrecer la solución acaso más generales. Sin embargo es necesario recordar que una de las hipótesis del método era que en el intervalo de interés de la ecuación todos los puntos fueran puntos regulares. Como se puede observar, todas ellas presentan singularidades. En esta tesis se trata el caso en que las ecuaciones no presentan singularidades en el intervalo donde estén definidas y después analizar el comportamiento conforme la solución toma valores cada vez más cercanos a la singularidad.

Diferenciación automática

2.1. Preámbulos

En el **Capítulo 1** se muestra el trasfondo teórico sobre el cual se construye la teoría de las ecuaciones diferenciales y la forma en que son tratadas. También se obtuvieron las ecuaciones diferenciales que derivan de la ecuación de Helmholtz y las cuales modelan el comportamiento de un sistema físico que satisfaga dicha ecuación. Así mismo, se revisaron los métodos de solución analítica para los casos en que sea posible utilizarlos.

En este capítulo se presenta una idea global sobre el funcionamiento del método de diferenciación automática y, con esto, su posterior relación con el método de Frobenius para el cálculo de soluciones a ecuaciones diferenciales.

2.1.1. Contexto

Considérese el problema del tipo (1.1) en que la función p_2 no tiene puntos singulares. Los puntos son ordinarios y es posible escribir la ecuación de la forma (1.34). En tal caso, mediante el método de Frobenius es posible obtener la solución en representación de serie de potencias mediante la relación de recurrencia (A.7). Los coeficientes de la relación de recurrencia dependen de las series de potencias de α y β .

Aproximar la función solución con la recta tangente arroja un buen resultado para vecindades pequeñas del punto. Sin embargo, conocer el valor exacto de la derivada de la función en el punto es una ventaja mayor que la aproximación.

En resumen, sólo es necesario conocer los coeficientes de la serie de potencias de α y β para calcular la solución numérica. Esto es posible sin conocer la forma analítica de cada coeficiente mediante un método de calcula el valor numérico de la derivada de una función evaluada en el punto de interés. Este es el método de diferenciación automática y funciona sin la necesidad de un cálculo simbólico.

2.2. Diferenciación automática

2.2.1. Esbozo

El método de diferenciación automática evita el cálculo simbólico de las derivadas de una función y permite conocer el valor de la derivada de orden n , evaluada en un punto. Es decir, arroja el valor numérico de la pendiente de la recta tangente a la función en el punto de forma exacta.

La diferenciación automática se basa en una estrategia similar a la derivación simbólica. Las expresiones intermedias entre la introducción de los parámetros de inicio y el resultado final son evaluadas lo antes posible lo que permite ahorrar memoria y cálculos.

Mediante la representación vectorial de una función, es posible cargar con la expresión numérica de una función y sus derivadas. Lo único que se necesita es definir cómo se comporta la variable independiente y las constantes. Por otro lado, como ocurre con las operaciones entre vectores, las operaciones entre funciones se hacen de manera equivalente con una modificación en los términos que impliquen una derivada.

2.2.2. Definiciones

Primero, hay que considerar una variable tipo vector que almacena los valores de la función f y sus derivadas evaluadas en un punto. El caso en que se busca el valor de la derivada, un vector de dimensión dos es suficiente, una para el valor de la función y otro para el de la derivada:

$$\bar{u} = (u, u') \tag{2.1}$$

Esta es la definición abstracta o vectorial de u , una función cualquiera. El método de diferenciación automática requiere definir cómo se comportan la variable independiente y las constantes:

$$\bar{x} = (x, 1) \quad \bar{c} = (c, 0) \tag{2.2}$$

Es importante notar que las definiciones en (2.2) satisfacen la definición de función dada por (2.1). Con estas nociones es suficiente para calcular el valor de una función lineal y su derivada en cualquier punto x .

Por ejemplo: Se desea calcular el valor de la función $f(x) = 2x$ y su derivada en el punto $x = 2$. Tales valores numéricos son $f(2) = 2(2) = 4$, $f'(2) = 2$. Esta información es necesaria para comprobar si los resultados obtenidos son los correctos. Para calcular los valores de f y f' usando diferenciación automática, se ejecutan dos pasos:

Primero, se declara la forma de la función f usando la definición (2.1):

$$\bar{f}(\bar{x}) = 2\bar{x} = 2(x, 1) = (2x, 2)$$

Después, ya que se busca el valor de la función en el punto $x = 2$, se evalúa en $\bar{x} = (2, 1)$:

$$\bar{f}(2) = (2(2), 2) = (4, 2)$$

Ya que \bar{f} es un vector, satisface la definición (2.1) por lo que el lado derecho de la igualdad es el valor de la función y su derivada en $x = 2$, respectivamente, que es el resultado que se esperaba.

Con las definiciones (2.1) y (2.2), como se ha dicho, es posible encontrar el valor de funciones lineales lo cual es un conjunto pequeño de funciones comparado con las que aparecen en la práctica. Para poder abordar un conjunto más amplio de funciones es necesario definir el álgebra que rige el proceso de diferenciación automática.

2.2.3. Operaciones entre funciones

Como en el álgebra de vectores, la definición para las operaciones entre definiciones de funciones en la diferenciación automática son similares, sin embargo, también tienen que satisfacer las operaciones entre las derivadas de las funciones en su respectivo lugar y orden:

$$\bar{u} + \bar{v} = (u + v, u' + v') \quad (2.3a)$$

$$\bar{u} - \bar{v} = (u - v, u' - v') \quad (2.3b)$$

$$\bar{u} \times \bar{v} = (uv, u'v + uv') \quad (2.3c)$$

$$\bar{u} \div \bar{v} = (u/v, (u' - (u/v)v')/v) \quad (2.3d)$$

Lo anterior ha sido calculado usando las propiedades de la derivada, en cada caso. En consecuencia, es necesario definir la regla de la cadena:

$$\bar{g}(\bar{u}) = \bar{g}(u, u') = (g(u), g'(u)u') \quad (2.4)$$

Con definiciones (2.3) y (2.4) es posible calcular el valor numérico de un conjunto más amplio de funciones que las que se podía anteriormente.

Retomando el primer ejemplo pero con una función no lineal: $f(x) = x^2 + 1$ se procede de manera análoga. Para su posterior comprobación, se calculan los valores numéricos *a mano*. El valor de f' en $x = 2$ es, a saber, 4. Para calcularlo mediante diferenciación automática primero se declara la forma de la función f usando la definición (2.1):

$$\bar{f}(\bar{x}) = (\bar{x} \times \bar{x}) + \bar{1} = (x, 1) \times (x, 1) + (1, 0) = (x * x, 1 * x + 1 * x) + (1, 0)$$

$$\bar{f}(\bar{x}) = (x^2 + 1, 2x)$$

2. DIFERENCIACIÓN AUTOMÁTICA

De nuevo se observa que la forma vectorial de la función f satisface de manera simbólica la definición (2.1). Segundo, se evalúa en el punto $x = 2$ cuya forma vectorial es $\bar{x} = (2, 1)$

$$\bar{f}(2) = ((2)^2 + 1, 2(2)) = (5, 4)$$

Lo cual coincide con el resultado que se espera con lo que se puede decir, al menos para este ejemplo, que se han calculado los valores $f(2)$ y $f'(2)$ de forma **numéricamente exacta**.

Lo mismo se ha de hacer si se desea calcular la segunda derivada de una función y el comportamiento de la variable independiente x y las constantes.

$$\bar{u} = (u, u', u'') \quad \bar{x} = (x, 1, 0) \quad \bar{c} = (c, 0, 0)$$

Sin embargo, se vuelve a caer en el problema de calcular de manera simbólica la expresión para derivadas de orden superior como, por ejemplo, en la derivada de segundo orden de la división de funciones:

$$\bar{u} \div \bar{v} = (u/v, (u' - (u/v)v')/v, (u'' - 2(u/v)'v' - (u/v)v'')/v)$$

Una manera de abordar el problema es considerar el polinomio de Taylor asociado a cada función y usarlos para aproximar el valor de la derivada de orden n resultado de la operación entre funciones.

2.2.4. Operaciones entre polinomios de Taylor

Considérese el polinomio de Taylor de orden k de una función f alrededor de x_0 :

$$f(x) = f_0 + f_1(x - x_0) + \dots + f_k(x - x_0)^k \quad f_k = \frac{f^k(x_0)}{k!}$$

Con la serie de Taylor de dos funciones es posible encontrar la serie del resultado de efectuar operaciones entre esas funciones definiendo el resultado como una nueva función h que también tiene representación en serie de potencias:

$$\sum_{k=0}^{\infty} h_k(x - x_0)^k = f(x) + g(x) \quad \Rightarrow \quad h_k = (f + g)_k = f_k + g_k \quad (2.5a)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} h_k(x - x_0)^k = f(x) - g(x) \quad \Rightarrow \quad h_k = (f - g)_k = f_k - g_k \quad (2.5b)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} h_k(x - x_0)^k = f(x) \times g(x) \quad \Rightarrow \quad h_k = (f \times g)_k = \sum_{i=0}^k f_i g_{k-i} \quad (2.5c)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} h_k(x - x_0)^k = f(x) \div g(x) \quad \Rightarrow \quad h_k = (f \div g)_k = \frac{1}{g_0} \left(f_k - \sum_{i=0}^{k-1} (f \div g)_i g_{k-i} \right) \quad (2.5d)$$

En cada caso, el término h_k indica el k -ésimo coeficiente de la serie de Taylor de la función h alrededor del punto x_0 . La forma en que esto puede ayudar a la diferenciación automática es a calcular los términos de una derivada de orden superior pues, en lugar de calcularlos de manera simbólica, se usa su expresión en serie de Taylor. La justificación a esto se da más adelante; esencialmente, el vector que representa a una función es el vector que contiene los coeficientes de su serie de Taylor.

Ya que la suma y el producto son operaciones simples, sólo se dan las deducciones para el producto y la división de funciones:

Producto: Multiplicando las series de Taylor de f y g se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} (f \times g)_k (x - x_0)^k &= \left(\sum_{m=0}^{\infty} f_m (x - x_0)^m \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} g_i (x - x_0)^i \right) \\ \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} (f \times g)_k (x - x_0)^k &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} f_m g_i (x - x_0)^{m+i} \end{aligned}$$

Definiendo $k = m + i$; $k - i = m \geq 0 \Rightarrow k \geq i$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} (f \times g)_k (x - x_0)^k &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{i=0}^k f_k g_{k-i} \right) (x - x_0)^k \\ \Rightarrow (f \times g)_k &= \sum_{i=0}^k f_k g_{k-i} \end{aligned}$$

División: Se considera el cociente entre las series de Taylor y se despeja la incógnita que en este caso es $(f \div g)_k$

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} (f \div g)_k (x - x_0)^k &= \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_k (x - x_0)^k \right) \div \left(\sum_{k=0}^{\infty} g_k (x - x_0)^k \right) \\ \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} f_k (x - x_0)^k &= \left(\sum_{k=0}^{\infty} (f \div g)_k (x - x_0)^k \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} g_k (x - x_0)^k \right) \end{aligned}$$

Usando el mismo razonamiento que con la multiplicación se puede encontrar el término k del producto de ambas series:

$$\begin{aligned} f_k &= \sum_{i=0}^k (f \div g)_i g_{k-i} = \sum_{i=0}^{k-1} (f \div g)_i g_{k-i} + (f \div g)_k g_0 \\ \Rightarrow (f \div g)_k &= \frac{1}{g_0} \left(f_k - \sum_{i=0}^{k-1} (f \div g)_i g_{k-i} \right) \end{aligned}$$

2.2.5. Series de Taylor y su relación intrínseca con la diferenciación automática

Con lo anterior ya se cuentan con las operaciones necesarias para calcular series de Taylor de funciones y de operaciones entre funciones. Así, por ejemplo, calcular la serie de Taylor de la función x^2 se reduce a calcular la serie de Taylor de x y luego multiplicarlo por la serie misma. Tal serie, como se ha mostrado, es muy simple de calcular por lo que los cálculos simbólicos se evitan y, en consecuencia, se evita uso de memoria.

Un punto importante a recordar es que, por ejemplo, la mayor parte del tiempo (o casi todo) se recurre a funciones de las cuales se conoce su desarrollo en serie de Taylor. En términos de polinomios es necesario revisar de nuevo cómo se comportan la variable independiente y las constantes:

$$\begin{aligned}x &= x_0 + 1(x - x_0) + 0(x - x_0)^2 + \dots + 0(x - x_0)^k \\c &= c + 0(x - x_0) + 0(x - x_0)^2 + \dots + 0(x - x_0)^k\end{aligned}$$

Lo que significa que en forma vectorial, la variable independiente y las constantes se representan por medio de los coeficientes de su polinomio de Taylor:

$$\bar{x} = (x_0, 1, 0, \dots, 0) \tag{2.6a}$$

$$\bar{c} = (c, 0, 0, \dots, 0) \tag{2.6b}$$

Y, en general, cualquier función es representada por el vector que contiene los coeficientes de su polinomio de Taylor asociado:

$$\bar{f}(\bar{x}_0) = (f_0, f_1, f_2, \dots, f_k) \tag{2.7}$$

En resumen, las definiciones (2.6) y (2.7) son equivalentes a (2.2) y (2.1) respectivamente con la ventaja que las primeras sirven para calcular el valor de la derivada de la función f de orden k evaluada en el punto x_0 . Para calcular los coeficientes es más que suficiente usar las definiciones (2.5).

Funciones elementales

Ya que una función f se maneja de forma vectorial (cuyas entradas son los coeficientes de su derivada de orden k evaluada en el punto x_0) es posible definir una función elemental en términos de funciones polinomiales por medio de su serie de Taylor.

Un primer ejemplo es la composición entre la función exponencial y una función arbitraria g de la cual se conoce la serie de Taylor:

$$g(x) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k(x - x_0)^k$$

Con lo cual se puede definir en un primer intento el polinomio de Taylor de la composición $(g \circ e)(x) = e^{g(x)}$ como:

$$e^{g(x)} = \sum_{k=0}^{\infty} (e^g)_k (x - x_0)^k$$

Ya que esta última es una serie de Taylor se puede usar el hecho que:

$$\frac{d}{dx} e^{g(x)} = g'(x) e^{g(x)}$$

Por lo que se tiene:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} k (e^g)_k (x - x_0)^{k-1} &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} k g_k (x - x_0)^{k-1} \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} (e^g)_k (x - x_0)^k \right) \\ \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty} k (e^g)_k (x - x_0)^k &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} k g_k (x - x_0)^k \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} (e^g)_k (x - x_0)^k \right) \end{aligned}$$

Por último, al usar la definición de la multiplicación:

$$k (e^g)_k = \sum_{i=1}^k i g_i (e^g)_{k-i} \quad k > 0$$

Ya que se sabe que el término constante está dado por $(e^g)_0 = e^{g_0}$, cada término de la composición de funciones queda determinado por:

$$f(x) = \begin{cases} e^{g_0} & \text{si } k = 0 \\ \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{\infty} i g_i (e^g)_{k-i} & \text{si } k > 0 \end{cases}$$

De la misma se pueden definir funciones elementales como $\ln(x)$, $\sin(x)$, $\cos(x)$, etc.

Solución numérica a ecuaciones diferenciales mediante diferenciación automática

En esta sección se busca desarrollar la forma en que los métodos de diferenciación automática y el método de Frobenius pueden implementarse en un algoritmo para resolver ecuaciones diferenciales del tipo (1.34) que no contienen punto singulares en el intervalo (a, b) que está particionado de manera regular.

3.1. Planteamiento y desarrollo

3.1.1. Solución de Frobenius

Se tiene una ecuación de la forma (1.34) definida en un intervalo (a, b) :

$$y''(x) + \alpha(x)y'(x) + \beta(x)y(x) = 0 \quad (3.1)$$

En la cual se ha usado la hipótesis de que tanto la solución y como las funciones α y β tienen representación en serie de potencias (trunca):

$$y(x) = \sum_{n=0}^N y_n (x - x_0)^n \quad \alpha(x) = \sum_{m=0}^N \alpha_m (x - x_0)^m \quad \beta(x) = \sum_{m=0}^N \beta_m (x - x_0)^m \quad (3.2)$$

Donde los coeficientes y_n , como se prueba en el **Apéndice**, están determinados por la relación de recurrencia:

$$y_{n+2} = \frac{-1}{(n+2)(n+1)} \left(\sum_{m=0}^n (n-m+1)\alpha_m y_{n-m+1} + \beta_m y_{n-m} \right) \quad 0 \leq n \quad (3.3)$$

Como caso particular, a la función y se le imponen condiciones a la frontera de tipo Dirichlet en los puntos extremos del intervalo (a, b)

$$y(a) = 0 \quad y(b) = 0 \quad (3.4)$$

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA A ECUACIONES DIFERENCIALES MEDIANTE DIFERENCIACIÓN AUTOMÁTICA

Como se menciona en el **Apéndice**, la relación de recurrencia (3.3) tiene dos términos libres y_0 y y_1 , tales términos son las condiciones iniciales de la función y su derivada evaluados en el punto inicial, en este caso el punto a . Es decir:

$$y_0 = y(a) \quad y_1 = y'(a) \quad (3.5)$$

La condición a la frontera en el punto a determina el primer parámetro $y_0 = 0$. Para el segundo, que es libre, se coloca un valor distinto de cero para evitar la solución trivial. Por simplicidad, $y_1 = 1$.

3.1.2. Cómputo de la relación de recurrencia

El siguiente paso es calcular la relación de recurrencia (3.3). Es aquí donde interviene la diferenciación automática pues, si se tiene la expresión de α y β se pueden calcular los términos en dicha expresión, es decir:

$$\bar{\alpha}(\bar{x}) = \left(\alpha(a), \frac{\alpha'(a)}{1!}, \frac{\alpha''(a)}{2!}, \dots, \frac{\alpha^{(N)}(a)}{N!} \right) = (\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N) \quad (3.6a)$$

$$\bar{\beta}(\bar{x}) = \left(\beta(a), \frac{\beta'(a)}{1!}, \frac{\beta''(a)}{2!}, \dots, \frac{\beta^{(N)}(a)}{N!} \right) = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N) \quad (3.6b)$$

Usando los valores calculados en (3.6) se puede resolver numéricamente la relación de recurrencia (3.3) por lo que para obtener la serie de Taylor de la función y en un punto del intervalo (a, b) es relativamente más rápido comparado con calcular la relación de recurrencia encontrando antes la forma analítica de los coeficientes α_m y β_m .

No obstante, aún hay que resolver el problema que toda serie de potencias contiene: Si se desea calcular valores de la función evaluada en puntos lejanos al punto donde se desarrolla originalmente la serie, es necesario considerar cada vez más términos en la suma.

Además, puede ocurrir que no se cuenten con los recursos suficientes para obtener los términos necesarios para poder calcular los valores al final del intervalo.

3.1.3. Soluciones concatenadas

Con una partición regular se obtienen puntos x_j a lo largo del intervalo (a, b) . Ya que la ecuación (3.1) está definida a lo largo del intervalo, está definida en cada punto x_j . De la sección anterior, se ha obtenido la solución en serie de potencias (3.2) que es válida a lo largo del intervalo (a, b) . Sin embargo, para calcular el valor $y(b)$ puede llegar a ser necesario considerar muchos términos en la serie, es decir, una N muy grande. Para evitarlo, y de paso reducir los cálculos, en lugar de calcular una solución, se calculan varias, tantas como puntos en la partición de (a, b) .

Para dos puntos consecutivos, hay una ecuación diferencial definida:

$$y''(x_j) + \alpha(x_j)y'(x_j) + \beta(x_j)y(x_j) = 0 \quad (3.7a)$$

$$y''(x_{j+1}) + \alpha(x_{j+1})y'(x_{j+1}) + \beta(x_{j+1})y(x_{j+1}) = 0 \quad (3.7b)$$

Ya que se sabe calcular la solución de un punto inicial, la misma puede usarse para resolver la solución en el siguiente punto. Para lograrlo, se impone a la solución, y su derivada, una condición de continuidad. Dicha condición no es arbitraria pues, al ser solución de una ecuación diferencial, por naturaleza es diferenciable, en consecuencia, continua. Además, es una manera de controlar la precisión del cálculo pues, menor sea la norma de la partición, más cercanos serán los valores entre ellos.

Para una partición de tamaño fijo h , el parámetro de precisión es la cantidad de términos N que se consideren en la serie. Con la solución calculada en el punto x_j y la condición de diferenciabilidad, se calcula la siguiente solución:

Ya que las funciones α y β son las mismas en el intervalo (a, b) y la relación de recurrencia está definida en términos de α y β , los únicos parámetros libres son y_0 y y_1 en el punto x_{j+1} . Por lo tanto, para garantizar la diferenciabilidad de la solución, se definen los primeros coeficientes de la relación de recurrencia en el punto x_{j+1} como:

$$y_0(x_{j+1}) = y(x_j + h) \quad y_1(x_{j+1}) = y'(x_j + h) \quad (3.8)$$

Con lo que es posible calcular la relación de recurrencia (3.3) en el punto x_{j+1} . Es importante notar que la definición (3.8) es la versión discretizada de las condiciones (3.5).

Aunque es verdad que $x_{j+1} = x_j + h$, se ha optado por escribir el lado derecho de la igualdad para dejar en forma explícita que los valores son los de la solución cuya serie se calcula en x_j pero se evalúa en el punto $x_j + h$, es decir, ya separado del punto en donde se desarrolla la serie. A este procedimiento se le llama concatenado o concatenación y suele usarse de manera recurrente. La ventaja es que reduce de manera considerable el

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA A ECUACIONES DIFERENCIALES MEDIANTE DIFERENCIACIÓN AUTOMÁTICA

error numérico al calcular la solución evaluada en valores alejados del punto inicial. La desventaja es que, por cada punto, hay que calcular nuevamente la relación de recurrencia. Sin embargo, esa parte del cálculo queda solventada por la diferenciación automática actuando en α y β

Queda un último problema que es el de satisfacer la condición en la segunda frontera $x = b$. De manera natural no hay razón alguna para que al calcular el valor en el punto frontera, es decir, $y(b)$, sea cero. Para resolverlo, se recurre a un otro método conocido y que requiere pocos recursos de cómputo.

3.2. Método de *regula-falsi*

Para satisfacer la condición a la frontera $y(b) = 0$ se recurre al método de *regula-falsi* (o de la regla falsa). El objetivo del método es esencialmente encontrar la raíz (o raíces) de una función f .

La raíz de una función es aquel punto x^* tal que $f(x^*) = 0$. Es decir, se busca punto en el dominio de la función; lo cual no es útil en este caso pues, por el teorema de existencia y unicidad, la solución es única (2). Lo que significa que, si $y(b) \neq 0$ la solución nunca va a satisfacer la segunda condición a la frontera. Al menos no en primeros principios.

En este punto es necesario recordar la **Sección 1.1.1.**, donde se habla de funciones y valores propios. En ella se encuentra que una función propia es aquella que satisface el problema (1.5). Usando la definición de función y valor propio, para poder calcular la función que satisface las condiciones en la frontera $x = b$, se parte de la siguiente premisa:

La función propia y_λ que satisface la ecuación (3.1) y las condiciones a la frontera (3.4), cuyo valor propio es λ , se *encuentra* entre las funciones que satisfacen la ecuación (3.1) y tienen parámetros asociados $\lambda + \varepsilon$, $\lambda - \varepsilon$. Es decir:

$$y_{\lambda-\varepsilon}(b) < y_\lambda(b) < y_{\lambda+\varepsilon}(b) \quad (3.9)$$

Es importante justificar la desigualdad (3.9): Primero, ya que los valores propios de un operador autoadjunto son reales, existen las vecindades de tales valores dentro de la recta real. Como segundo punto, es importante recordar que el método aquí desarrollado es un método computacional, lo que significa que la ecuación (3.1) tiene como valores de entrada números en una computadora, no símbolos como lo presenta el método de separación de variables. Una computadora no diferencia entre un valor propio y un parámetro cualquiera. Tercero; la desigualdad (3.9) puede estar en orden inverso para distintos valores λ (de hecho, sucede). Se presenta en este orden para dar una idea intuitiva de la variación de la función solución con respecto al espacio de parámetros con valores reales. Cuando coincide que tal parámetro es un valor propio, se cumple $y_\lambda(b) = 0$.

Dicho eso, ahora es posible recurrir al método de *regula-falsi* para calcular los parámetros λ que satisfacen $y_\lambda(b) = 0$; es decir, encontrar los valores propios asociados a cada función. Se aplica el método de *regula-falsi* no en el espacio $(x, y(x))$ sino en el espacio $(\mu, y_\mu(b))$.

El procedimiento consiste en lo siguiente:

- Se calcula el conjunto de valores $y_{\mu_j}(b)$ y se discriminan las parejas de valores $y_{\mu_j}(b)$, $y_{\mu_{j+1}}(b)$ que sean de signos opuestos. De acuerdo a la desigualdad (3.9), el valor propio λ satisface $\mu_j < \lambda < \mu_{j+1}$.
- Se calcula el punto en que la recta que une a los puntos $(\mu_j, y_{\mu_j}(b))$ y $(\mu_{j+1}, y_{\mu_{j+1}}(b))$ interseca al eje μ . Al punto de intersección se le llamará μ^* .
- Se calcula $y_{\mu^*}(b)$. Si satisface la condición a la frontera, $\mu^* = \lambda$. De lo contrario, se procede a hacer un nuevo cálculo reduciendo el intervalo de búsqueda.

El método de *regula-falsi* es un método convergente. Puede suceder que en uno de los intentos $\mu^* = \lambda$, sin embargo, esto no ocurre generalmente. Es más, pueden darse las condiciones tales que el valor propio λ , al ser real, tenga más cifras decimales que las que puede representar una computadora, en cuyo caso es imposible calcularlo con exactitud. Como esto ocurre la mayor parte de las veces, se establece una cota máxima de error para el valor $y_{\mu^*}(b)$ con el cual es posible acercarse al valor propio tanto como sea técnicamente posible.

3.3. Normalización

Una vez calculada la función propia y_λ con su valor propio asociado λ se procede a normalizar las funciones aprovechando la representación con polinomios de Taylor de cada una. Calcular la norma de una función se reduce a calcular las definiciones (1.7) y (1.9). Sin embargo, una de las ventajas que ofrece el método de diferenciación automática es la representación en serie de Taylor para una función arbitraria.

Es decir, para el caso en que $w(x) = !$ y se desee calcular la norma de la función y_λ en un intervalo (a, b) :

$$\|y_\lambda\|^2 = \int_a^b y_\lambda^*(t) \cdot y_\lambda(t) \, dt$$

A calcular una suma de integrales a lo largo de la partición del intervalo (a, b) usando la definición (2.1):

$$\|y_\lambda\|^2 = \int_a^b \bar{y}_\lambda^*(t) \cdot \bar{y}_\lambda(t) \, dt$$

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA A ECUACIONES DIFERENCIALES MEDIANTE DIFERENCIACIÓN AUTOMÁTICA

Donde, al usar la definición del producto de series de Taylor se obtiene

$$\|y_\lambda\|^2 = \int_a^b \sum_{k=0}^N (y_\lambda^* \times y_\lambda)_k t^k dt \quad (y_\lambda^* \times y_\lambda)_k = \sum_{i=0}^k y_{\lambda,k}^* y_{\lambda,k-1} \quad (3.10)$$

No obstante, el integrando en la ecuación (3.10) es un polinomio por lo que su integral es inmediata (además de analítica) por lo que el proceso de integración aumenta su precisión y versatilidad.

Así, es posible encontrar las funciones propias, los valores propios y la norma mediante la representación vectorial y el proceso de diferenciación automática. Con ello, encontrar la base ortonormal para posteriormente poder representar cualquier función ψ como una combinación lineal de la base. Los coeficientes de Fourier de dicha combinación lineal se calculan de la misma manera que la norma:

$$C_n = \int_a^b \sum_{k=0}^N (\psi^* \times y_\lambda)_k t^k dt \quad (\psi^* \times y_\lambda)_k = \sum_{i=0}^k \psi_k^* y_{\lambda,k-1} \quad (3.11)$$

3.4. Resumen

Con el método de Frobenius se encuentra de manera analítica la solución en forma de serie de potencias. Tal serie depende de las condiciones iniciales para la función, su derivada y de los coeficientes de las series de potencias de las funciones α y β .

Recurriendo a la diferenciación automática es posible encontrar los coeficientes de las series de α y β con lo que la relación de recurrencia queda completamente resuelta.

Para evitar considerar muchos términos en la serie de la solución, la ecuación se resuelve localmente en las vecindades de los puntos de la partición del intervalo de interés. Esto también aumenta la precisión del cálculo en todo el intervalo conforme aumenta el tamaño de la partición.

Puede ocurrir que la función encontrada no satisfaga la condición a la frontera en $x = b$. En tal caso se recurre al método de *regula-falsi* para encontrar el valor propio y con ello calcular la función propia.

En términos estrictos, cuando la función y satisfaga la ecuación (3.1) y las condiciones (3.4) se dice que es un armónico. Cuando tal función está normalizada (1.14) se dice que es una función propia pues estas forman un conjunto ortonormal del espacio de funciones.

Aplicación: Funciones de Bessel

4.1. Ecuación diferencial de Bessel: Solución unidimensional

Como una primer aplicación al método se ha resuelto numéricamente la ecuación de Bessel que aparece en el capítulo introductorio.

$$x^2 y'' + xy' + x^2 \mu^2 + y = 0 \tag{4.1}$$

En la cual, una de sus soluciones es la función de Bessel de primer tipo:

$$J_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \tag{4.2}$$

Si bien la serie (4.2) es convergente para cualquier $x < \infty$ es necesario considerar cada vez más terminos conforme x se aleje del punto donde se desarrolla originalmente dicha serie. Es posible usar el método aquí implementado para encontrar la solución en el intervalo $(0, 20)$. Para lograrlo, es necesario utilizar dos soluciones: la definida en (4.2) y su forma general en serie de potencias (1.35).

Primero se utiliza la función J_0 en una vecindad del punto $x = 0$. Por ejemplo, cuando se usa una partición regular es útil considerar la función en el intervalo $(x_0, x_0 + h)$ donde $x_0 > 0$ y h es la norma de la partición. Para calcular la solución en el siguiente punto se procede de manera análoga a como se indica en la **Sección 3.3.3**. y de esa manera se define:

$$y_0(x_1) = J_0(x_0 + h) \quad y_1(x_1) = J_0'(x_0 + h)$$

Y de forma consecutiva para el resto del intervalo

$$y_0(x_{j+1}) = y_0(x_j + h) \quad y_1(x_{j+1}) = y_1'(x_j + h)$$

Cuando se use a una solución conocida, como J_0 se dice que es la *semilla* de la solución.

4. APLICACIÓN: FUNCIONES DE BESSEL

Para los valores de la solución en puntos lejos del origen se recurre al método descrito en el capítulo anterior pues, para este caso, las funciones α y β no tienen singularidades en el dominio $(h, 20)$.

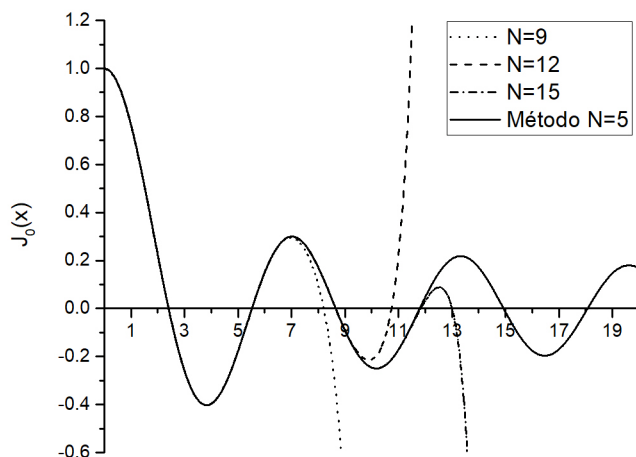


Figura 4.1: Función de Bessel de primer tipo. En línea punteada se muestran las series de potencias truncas (4.2) con 9, 12 y 15 términos respectivamente. En línea continua, la solución obtenida al concatenar soluciones con 5 términos en la serie. Ambas soluciones fueron calculadas con la misma norma h de la partición en el intervalo $(0, 20)$ cuyo valor es de 1×10^{-3} .

Para obtener valores de la función J_0 evaluada en puntos lejos del origen es necesario considerar cada vez más términos conforme el valor de x aumente. Sin embargo, concatenar soluciones es una forma de evitar el problema de tener que considerar cada vez más términos en la serie (4.2) y en lugar de eso resolver localmente la ecuación, como puede verse en la **Figura 4.1**. La solución puede extenderse hasta cualquier valor de x aunque eso significa un mayor tiempo de cálculo. La precisión queda determinada principalmente por el número de términos N considerados en la función (4.2) y por la norma de la partición h .

De la misma manera se ha calculado la solución Y_0 cuya forma analítica es:

$$Y_0(x) = \frac{2}{\pi} J_0(x) \left[\gamma + \ln \left(\frac{x}{2} \right) \right] - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!k!} H_k \left(\frac{x}{2} \right)^{2k} \quad (4.3)$$

Para obtener la solución numérica se ha usado la función Y_0 evaluada en una vecindad δ cerca del origen. Contrario a lo que se puede pensar, una vecindad más cercana al punto $x = 0$ no ofrece ninguna mejora en los cálculos. De hecho, conforme se acerque a tal punto, la solución numérica tiene a arrastrar errores locales pues los datos de entrada no son los verdaderos. Esto, nuevamente, nos habla de una cota dada por los recursos de cómputo con los que se cuenten.

En la práctica, la solución Y_0 no suele utilizarse pues su singularidad en el origen no representa alguna situación física real, de algún sistema que se comporte de esa manera.

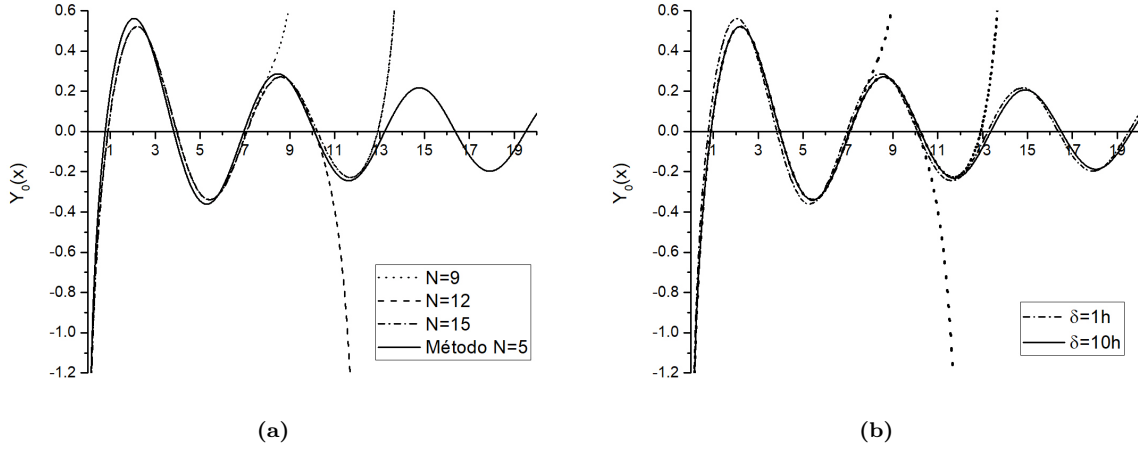


Figura 4.2: En la figura (a) se muestra la función de Bessel de segundo tipo. En línea punteada se muestran las series de potencias truncas (4.3) con N términos. En línea continua la solución obtenida al concatenar soluciones. En la figura (b) la comparación entre dos soluciones obtenidas usando la función (4.3) como semilla en diferentes vecindades δ del origen. Marcada como punto-línea se muestra la solución calculada en la figura (a). En línea continua la solución calculada en una vecindad más alejada del origen.

En la **Figura 4.2** se pueden apreciar dos casos: Cuando se evalúa la función Y_0 en una vecindad δ del punto $x = 0$ y cuando se evalúa en una vecindad un poco más grande. Es importante notar cómo la función que se ha calculado a partir de una vecindad más alejada del origen coincide con mayor precisión con las series de potencias truncas; mostradas en línea punteada. La presencia de singularidades interviene de manera significativa al calcular una solución. Tal singularidad es heredada por la misma ecuación, en específico, por el término:

$$\alpha(x) = \frac{1}{x}$$

Cuyos términos asociados a su serie de potencias tienen la forma:

$$\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n (x - x_0)^n \quad \alpha_n = (-1)^n x_0^{-(n+1)}$$

El término que depende de x_0 tiende a ser cada vez mayor conforme se acerca al punto $x = 0$ por lo que no importa se consideran más o menos términos en la serie (4.3). Para mejorar la precisión, es necesario hacer los cálculos en una vecindad más alejada del origen.

El anterior resultado exhibe una debilidad del método pues, cerca de una singularidad, es necesario considerar más términos en cada serie de potencias. Cada serie puede ser no calculable ya sea por la capacidad de memoria o por la naturaleza misma de los coeficientes.

4.2. Solución bidimensional

Un caso más complejo es aquel en el que se considera el sistema de ecuaciones derivadas en coordenadas cilíndricas circulares en el **Capítulo 1**:

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \quad (4.4a)$$

$$r \left[\frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) \right] + (r^2\lambda^2 - m^2) R = 0 \quad (4.4b)$$

La solución a la ecuación (4.4b) definida en un intervalo $r \in (a, b)$, evitando la singularidad en el origen ($r = 0$), y que además satisfaga las condiciones a la frontera:

$$R(a) = 0 \quad R(b) = 0 \quad (4.5)$$

Es una combinación lineal de las funciones funciones J y Y :

$$R_n(r) = A_{nm} J_m \left(\frac{\alpha_{nm}}{b} r \right) + B_{nm} Y_m \left(\frac{\beta_{nm}}{b} r \right)$$

A simple vista parece un problema, si bien no difícil, pero sí tedioso de resolver de manera analítica. Sin embargo, es conveniente recordar que la función $R(r)$ es la que ha de satisfacer las condiciones a la frontera y eso se resuelve como se indica en la **Sección 3.3.3**.

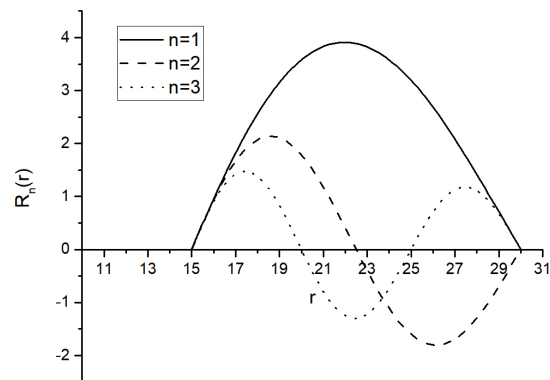


Figura 4.3: Parte radial de las primeras tres soluciones a la ecuación 4.4b que también satisfacen la condición a la frontera 4.5 en $a = 15$ y $b = 30$. El error ε aceptable en la segunda condición es menor que 1×10^{-3} . Si bien n se ha usado para indicar el número de raíces que tiene la función, no necesariamente es un parámetro entero en la ecuación 4.4b.

La condición a la frontera en el punto $r = b$ ciertamente no se satisface con rigor. Como se ha indicado, el método de *Regula-falsi* busca el conjunto de valores λ_n con las cuales, las funciones R_{λ_n} satisfacen la condición a la frontera en $r = b$ con un cierto error. Es decir, se tiene el control de la desigualdad $|R_n(b)| < \varepsilon$, donde ε es el error tolerado. En la **Figura 4.3** se han calculado las primeras tres funciones solución de la parte radial.

La función completa $y_{nm}(r, \varphi) = R_n(r)\Phi_m(\varphi)$ depende tanto de la parte radial como de la parte angular. Algunas de las soluciones al sistema de ecuaciones (4.4a) y (4.4b) se muestran en la **Figura (4.4)** y (4.5).

$$y_{nm}(r) = \left(A_{nm} J_m \left(\frac{\alpha_{nm}}{b} r \right) + B_{nm} Y_m \left(\frac{\beta_{nm}}{b} r \right) \right) e^{im\varphi} \quad (4.6)$$

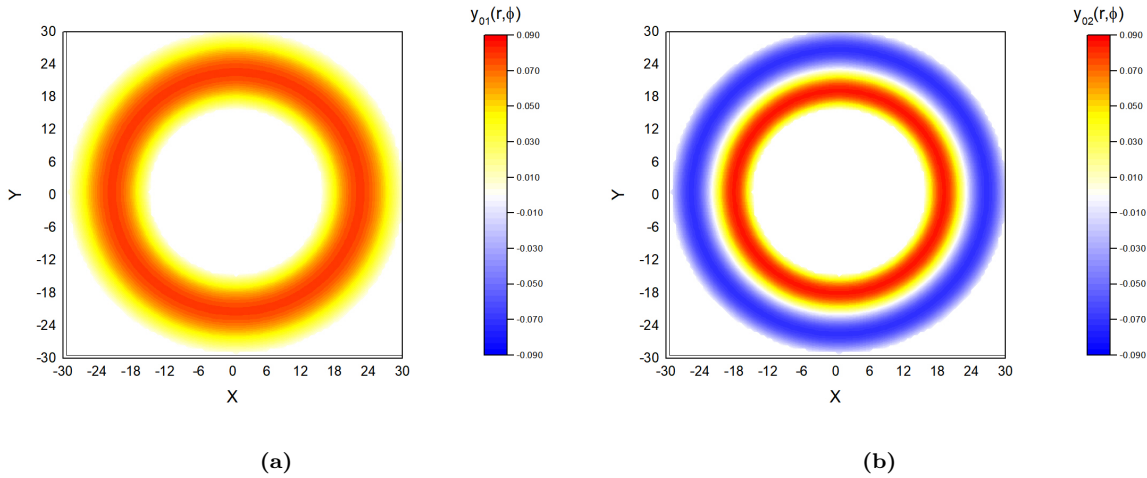


Figura 4.4: Función (4.6). En (a), la parte radial de la solución tiene $n = 1$ raíces (sin contar el valor inicial) mientras que la parte angular tiene $m = 0$ nodos. En (b), la parte radial de la solución tiene $n = 2$ raíces mientras que la parte angular tiene $m = 0$ nodos. En ambos casos los parámetros para los cálculos son los mismos que en la **Figura (4.3)**.

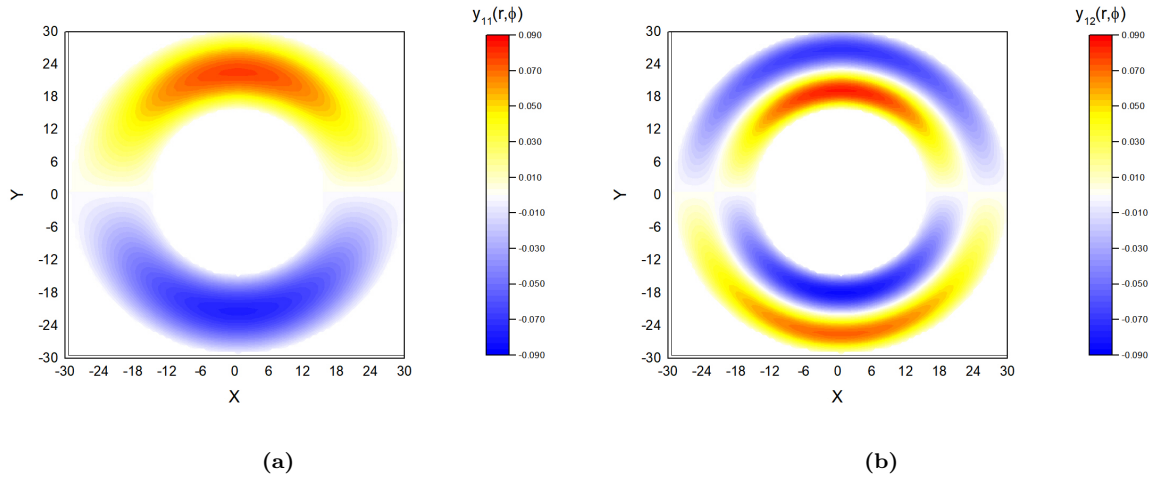


Figura 4.5: Función (4.6). En (a), la parte radial de la solución tiene $n = 1$ raíces (sin contar el valor inicial) mientras que la parte angular tiene $m = 1$ nodos. En (b), la parte radial de la solución tiene $n = 2$ raíces mientras que la parte angular tiene $m = 1$ nodos. En ambos casos los parámetros para los cálculos son los mismos que en la Figura (4.3).

4.3. Representación en serie

Las funciones solución a la ecuación (4.4b) forman una base ortonormal completa por lo que es posible representar una función en términos de una combinación lineal de funciones $R_n(r)$. Como se indica en el **Capítulo 1**, ya que el conjunto solución forma una base completa, una función diferenciable en el mismo intervalo donde esté definida la ecuación (4.4b) está representada de manera única por medio de la serie:

$$f(r) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n R_n(r) \quad (4.7)$$

Las funciones R_n son las soluciones normalizadas a la ecuación (4.4b). Una vez más, recordando que se cuentan con recursos de cómputo finitos, no es posible calcular todos los términos en una serie pues son infinitos por lo que se procede a calcular un máximo de N términos. En la **Figura (4.6)** se muestran un par de ejemplos del cálculo de series trunca para diferentes funciones.

La función en turno, $f(r)$ bien puede ser tomada como una *condición inicial* para el caso de una ecuación diferencial parcial dependiente del tiempo. En tal caso, la función corresponde a la parte radial de la solución.

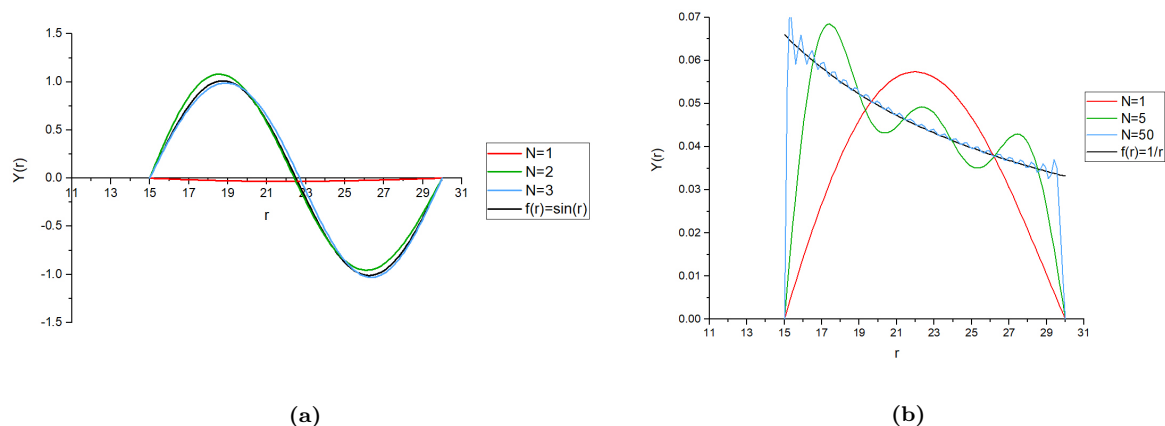


Figura 4.6: (a): Serie (4.7) con truncada en diferentes N y con f una función del tipo \sin que completa un período en el intervalo de definición de la ecuación (4.4b). (b): Serie (4.7) con diferentes N y $f(r) = \frac{1}{r}$. En el segundo caso, la función a representar no satisface las condiciones a la frontera, sin embargo, puede observarse la convergencia de la serie. Hay que notar como en el caso de la primer función, la convergencia es mucho más rápido comparada con la segunda.

Resumen

Como se ha mostrado, el método recupera las soluciones ya conocidas para la ecuación de Bessel (4.4b). Sólo con considerar la serie de Taylor de los polinomios α y β asociados y utilizando el método de diferenciación automática se puede calcular la solución con la precisión deseada. No obstante, las singularidades no dejan de representar un problema al momento de aproximar mediante series de Taylor el comportamiento de la solución cerca del punto singular.

Aplicación: Electrón confinado a una superficie cilíndrica finita en presencia de campos electromagnéticos

5.1. Carga eléctrica en campo electromagnético

5.1.1. Lagrangiano

Para una partícula con carga q , velocidad \bar{v} y masa m , la fuerza que experimenta debido a la presencia de campo eléctrico y uno magnético es la fuerza de Lorentz,

$$\bar{F}_L = q (\bar{E} + \bar{v} \wedge \bar{B}). \quad (5.1)$$

Si bien el campo magnético no realiza trabajo sobre la carga, esto no implica que no exista una energía asociada a él. Es posible encontrar la energía potencial asociada a los campos eléctrico y magnético recurriendo al potencial escalar ϕ y vectorial \bar{A} en (5.1):

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\nabla\phi & \bar{B} &= \nabla \wedge \bar{A} \\ \bar{v} \wedge (\nabla \wedge \bar{A}) &= \nabla (\bar{A} \cdot \bar{v}) - (\nabla \cdot \bar{v}) \bar{A} = \nabla (\bar{A} \cdot \bar{v}) \\ \Rightarrow \quad \bar{F}_L &= -\nabla U = q (-\nabla\phi + \nabla (\bar{A} \cdot \bar{v})) \\ U &= q (\phi - \bar{A} \cdot \bar{v}) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Por lo que es posible calcular el lagrangiano del sistema y, por lo tanto, los momentos generalizados:

$$\begin{aligned} L = T - U &= \frac{m}{2} \bar{v}^2 - q (\phi - \bar{A} \cdot \bar{v}) \\ \bar{p}' &= \frac{\partial L}{\partial \bar{v}} = m\bar{v} + q\bar{A} = \bar{p} + q\bar{A} \end{aligned} \quad (5.3)$$

5. APLICACIÓN: ELECTRÓN CONFINADO A UNA SUPERFICIE CILÍNDRICA FINITA EN PRESENCIA DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS

5.1.2. Hamiltoniano

Una vez calculado el lagrangiano, es posible obtener el hamiltoniano en términos de los momentos generalizados:

$$\begin{aligned}
 H = T + U &= \frac{\bar{p}^2}{2m} + U = \frac{(\bar{p} + q\bar{A}) \cdot (\bar{p} + q\bar{A})}{2m} + q \left(\phi - \frac{\bar{A}}{m} \cdot \bar{p} \right) \\
 H &= \frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{q}{2m} \bar{A} \cdot \bar{p} + \frac{q^2}{2m} \bar{A}^2 + q \left(\phi - \frac{\bar{A}}{m} \cdot \bar{p} \right) \\
 H &= \frac{\bar{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \bar{A} \cdot \bar{p} + \frac{q^2}{2m} \bar{A}^2 + q\phi
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Para obtener el hamiltoniano cuántico del sistema, asociamos el momento con el operador de momento $\bar{p} \rightarrow \hat{p}$ con lo que se obtiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la partícula cargada en presencia de campo eléctrico y magnético constantes:

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \hat{A} \cdot \hat{p} + \frac{q^2}{2m} \hat{A}^2 + q\phi \right] \psi = E\psi \tag{5.5}$$

5.2. Confinamiento a un anillo

5.2.1. Consideraciones

En este capítulo se considera el problema descrito en el artículo (9) pues en este se estudia el comportamiento de un electrón sujeto a un potencial tipo pozo en la superficie de un cilindro finito de altura variable. Al sistema se le aplica un campo eléctrico constante en dirección x y uno magnético en dirección z ; con lo que se espera también haya dependencia de las soluciones por parte de estos. A una geometría como la anterior se le denomina *Quantum ribbon* (**QR**).

Para abordar numéricamente el problema, considerese la ecuación (5.5) en forma adimensional en representación de coordenadas y agregando el término de potencial por confinamiento:

$$\left[-\nabla^2 + i\bar{A} \cdot \nabla + \hat{A}^2 + \phi + V_{conf} \right] \Psi = E\Psi \tag{5.6}$$

En donde se ha tomado la ecuación (5.5) en su forma adimensional. Ya que la partícula se mueve dentro de un campo electromagnético constantes, es posible encontrar los potenciales escalar ϕ y el vectorial \bar{A} para asociados a la energía potencial del sistema:

$$\phi = -\eta x \quad \bar{A} = \left(-y\frac{\gamma}{2}, x\frac{\gamma}{2}, 0 \right) \tag{5.7}$$

5.2.2. Reducción de grados de libertad

Ya que el sistema a describir es un electrón confinado a moverse dentro de un QR se puede reducir el problema a resolver la ecuación de Schrödinger adimensional para $\Psi = \Psi(\varphi, z)$.

Así, usando los potenciales de (5.7) y considerando el operador ∇ en coordenadas cilíndricas con la variable r fija en $r = R$, la ecuación (5.6) toma la forma:

$$\hat{H}\Psi = \left[-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + \eta R \cos \varphi + V_{con}(\varphi, z) \right] \Psi = E\Psi \quad (5.8)$$

Donde V_{con} es el potencial de confinamiento asociado a la geometría del sistema. Ya que la altura de la QR es variable, se puede asumir que dicha variación puede ser parametrizada por la variable angular φ y, por ende, el potencial queda descrito por:

$$V_{con}(\varphi, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq z \leq h(\varphi) \\ \infty & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (5.9)$$

Por último, para modelar la variación de la altura h usando como parámetro la variable angular φ se considera la función:

$$h(\varphi; n, \delta) = h_0 \sqrt{1 - \delta(1 - \cos(m\varphi))} \quad (5.10)$$

De esta forma, es posible controlar el número de valles con el entero m , la profundidad de cada uno con δ y h_0 , que es la altura máxima que puede alcanzar el perfil o altura. La profundidad δ queda modulada bajo la condición: $0 \leq \delta \leq 0.5$. De esta forma se evitan singularidades en la función (5.10).

Aproximación adiabática

Aprovechando la relación entre el radio y la altura del QR , es posible considerar, para un φ fijo, la aproximación adiabática para el movimiento a lo largo de la variable φ . Así, es posible separar a la función de onda del electrón como el producto de dos funciones independientes: Aquella que describe el movimiento que aporta la mayor parte de la energía en la variable z como $f(z)|_\varphi$ para un determinado φ y, ya que la relación radio-altura es pequeña, un radio R también fijo. Por otro lado, el restante del movimiento se asocia con la parte azimutal $\Phi(\varphi)$.

Entonces, la función de onda completa queda descrita por:

$$\Psi(\varphi, z) = f(z)|_\varphi \Phi(\varphi) \quad (5.11)$$

5. APLICACIÓN: ELECTRÓN CONFINADO A UNA SUPERFICIE CILÍNDRICA FINITA EN PRESENCIA DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS

Usando la función (5.11) en (5.8) y por el proceso de aproximación adiabática se tiene:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + (E_z(\varphi) - V_{con}(\varphi, z)) \right] f(z)|_\varphi = 0 \quad (5.12)$$

Sin embargo, la ecuación (5.12) es la ecuación (4) del capítulo introductorio de las cuales sus funciones solución y energías son bien conocidas

$$f(z)|_\varphi = \sqrt{\frac{2}{h(\varphi)}} \sin\left(\frac{\pi}{h(\varphi)} z\right) \quad E_{z,base}(\varphi) = \frac{\pi^2}{h^2(\varphi)} \quad (5.13)$$

5.3. Aplicación del método

Si bien la parte axial de la función de onda Ψ ya se ha resuelto usando un par de aproximaciones, aún falta por resolver la parte azimutal Φ .

Para esto, como se indica en (9), se considera la función Φ como una función de onda variacional de una dimensión que describe el movimiento de rotación alrededor del eje ortogonal al plano. Por lo tanto, la función variacional ha de satisfacer

$$F[\Phi(\varphi)] = f(z)|_z \Phi(\varphi) |H - E| f(z)|_z \Phi(\varphi) \quad (5.14)$$

Siguiendo el principio variacional con las soluciones dadas por (5.13) se obtiene la ecuación para la parte azimutal que ha de satisfacer la función $\Phi(\varphi)$:

$$\left[-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V_{eff}(\varphi) - E \right] \Phi(\varphi) = 0 \quad (5.15a)$$

$$V_{eff}(\varphi) = V_{geo} + \eta R \cos \varphi = \left(\frac{\pi^2}{h^2(\varphi)} + \frac{4\pi^2 + 3}{12R^2} \left(\frac{h'(\varphi)}{h(\varphi)} \right)^2 \right) + \eta R \cos \varphi \quad (5.15b)$$

$$h(\varphi; n, \delta) = h_0 \sqrt{1 - \delta (1 - \cos(m\varphi))} \quad (5.15c)$$

Por lo tanto, ya que se conocen las soluciones a la ecuación (5.12), para conocer las funciones y valores propios es suficiente con resolver la ecuación (5.15a) la cual se puede reescribir como:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i\gamma R^2 \frac{\partial}{\partial \varphi} + R^2 \left(E - \left(\frac{\gamma^2 R^2}{4} + V_{eff}(\varphi) \right) \right) \right] \Phi = 0 \quad (5.16)$$

La cual es la forma descrita en (3.1) con polinomios α, β de la forma:

$$\alpha(\varphi) = i\gamma R^2 \quad (5.17a)$$

$$\beta(\varphi) = R^2 \left(E - \left(\frac{\gamma^2 R^2}{4} + V_{eff}(\varphi) \right) \right) \quad (5.17b)$$

Es decir, usando las definiciones (2.5) es posible describir en serie de Taylor a los polinomios α y β para, con ello, encontrar las soluciones Φ y las energías del sistema.

En este caso, aunque las condiciones a la frontera son periódicas, se necesita satisfacer la misma condición. Los parámetros variables son m , el número de valles, δ , la profundidad de cada valle, γ la amplitud del campo eléctrico y η la amplitud del campo magnético.

5.4. Resultados

5.4.1. Geometría del sistema

Los primeros aspectos a considerar sobre el sistema es cómo la geometría induce un potencial. Si bien en la ecuación (5.15c) la altura es un parámetro que sólo depende de ϕ , esta induce un potencial geométrico que, junto con el potencial dado por la presencia de campo eléctrico en una dirección preferencial, derivan en su total un potencial efectivo (5.15b).

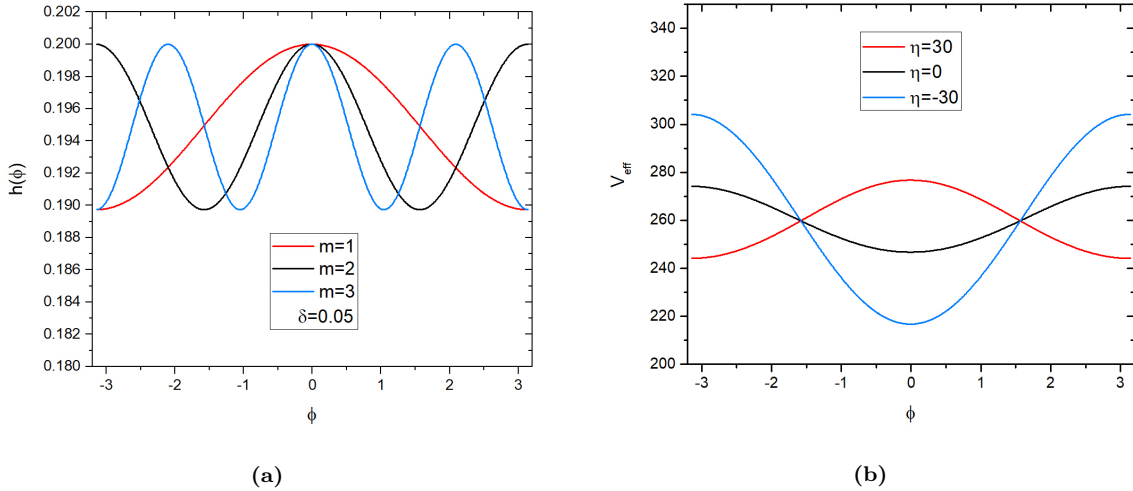


Figura 5.1: (a): Perfil de altura (5.15c) como función del ángulo ϕ con altura máxima $h_0 = 0.2$, calculado con m diferente número de valles y profundidad δ . En (b), el potencial efectivo (5.15b) calculado con diferentes amplitudes del campo eléctrico η y un único vale ($m = 1$).

En la Figura (5.1) se muestran algunos perfiles de altura con parámetros fijos y, en particular, el potencial efectivo inducido para un perfil con un número de valles fijo ($m = 1$) y diferentes amplitudes del campo eléctrico η . Si bien en la ecuación (5.15b) el potencial efectivo V_{eff} depende del perfil de altura, este actúa como una constante aditiva (V_{geo}) al potencial inducido por el campo eléctrico.

5.4.2. Comportamiento en la frontera

Para poder resolver la ecuación (5.15a) es necesario encontrar los valores de E tales que

$$\Phi_E(-\pi) = \Phi_E(\pi) \quad \Phi'_E(-\pi) = \Phi'_E(\pi) \quad (5.18)$$

No obstante, esta es una condición de frontera periódica distinta de la condición de tipo homogénea que se analizó en el **Capítulo 3**.

Para poder encontrar las soluciones a la ecuación (5.15a), se definen aquellas funciones que sean combinación lineal de las soluciones linealmente independientes del sistema. Es decir:

$$\Phi_E(\phi) = A\Phi_{01}(\phi) + B\Phi_{10}(\phi) \quad (5.19a)$$

$$\Phi_{01}(-\pi) = 0 \quad \Phi'_{01}(-\pi) = 1 \quad (5.19b)$$

$$\Phi_{10}(-\pi) = 1 \quad \Phi'_{10}(-\pi) = 0 \quad (5.19c)$$

Así, las condiciones (5.18) y (5.19) inducen una ecuación matricial para las soluciones linealmente independientes Φ_{01} , Φ_{10} :

$$\begin{pmatrix} \Phi_{01}(-\pi) - \Phi_{01}(\pi) & \Phi_{10}(-\pi) - \Phi_{10}(\pi) \\ \Phi'_{01}(-\pi) - \Phi'_{01}(\pi) & \Phi'_{10}(-\pi) - \Phi'_{10}(\pi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

Por lo que la condición para las funciones de la ecuación (5.19a) sean solución a (5.15a) es que se satisfaga (5.20). Entonces, para evitar soluciones triviales, el determinante de la matriz M que aparece en (5.20) es cero en la frontera del intervalo:

$$\det(M) = 0 \quad (5.21)$$

Por último, la solución encontrada, a saber, está en términos de Φ_{01} y Φ_{10} como:

$$\Phi_E = A \left(\Phi_{01} - \frac{M_{11}}{M_{12}} \Phi_{10} \right) \quad (5.22)$$

Con A la constante de normalización para la función Φ_E y M_{11} , M_{12} los elementos de la matriz en la ecuación (5.20).

En la **Figura (5.2)** se presenta el comportamiento del determinante de la matriz en (5.20) para un intervalo continuo de energías. Sólo aquellos valores de E donde el determinante se anula (como número complejo) son los valores permitidos del sistema; por ende, también las funciones solución. La parte imaginaria se debe al término imaginario en (5.15a) asociado directamente al campo magnético. Se presenta en diferentes escalas con el fin de mejorar su apreciación.

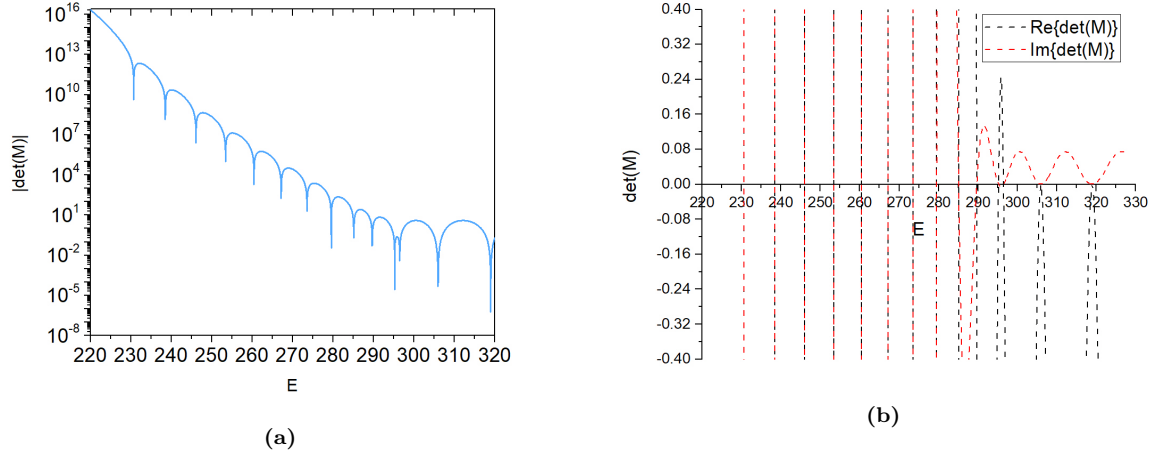


Figura 5.2: Comportamiento del determinante de la matriz M de la ecuación (5.20) para un intervalo de energías. Sólo aquellas en las que tanto la parte real como la imaginaria sean cero son las energías del sistema. En (a), el comportamiento para una escala del orden de 10^{12} . En (b), los mismos datos pero en una escala de 10^{-1} para un mayor rango de energías. El comportamiento después de las primeras energías $E \approx 290$ está dentro de una misma escala.

5.4.3. Espectro de energía y funciones de onda

En la **Figura (5.3)** se muestra el comportamiento de la energía al variar los parámetros externos.

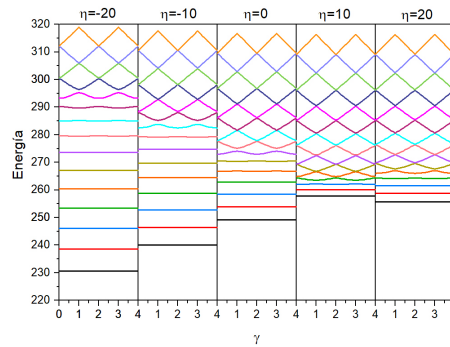


Figura 5.3: Espectro de energías para el sistema (5.8) con diferentes valores de campo eléctrico η y magnético γ . Para un campo eléctrico η fijo y altas energías, los estados excitados tienden a separarse o acercarse al variar el campo magnético γ . Esto es consecuencia de la susceptibilidad del electrón, al poseer alta energía, de ser influenciado por el campo magnético externo. Los parámetros restantes con los que se hicieron los cálculos son: altura máxima de la *Quantum Ribbon*: $h_0 = 0.2$, valles $m = 1$ y una profundidad $\delta = 0.05$.

5. APLICACIÓN: ELECTRÓN CONFINADO A UNA SUPERFICIE CILÍNDRICA FINITA EN PRESENCIA DE CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS

Para estados con baja energía se encuentra que el electrón tiende a localizarse en una región privilegiada. Esto se debe a que la superficie en la que se encuentra confinado tiene impurezas modeladas por la función (5.15c)

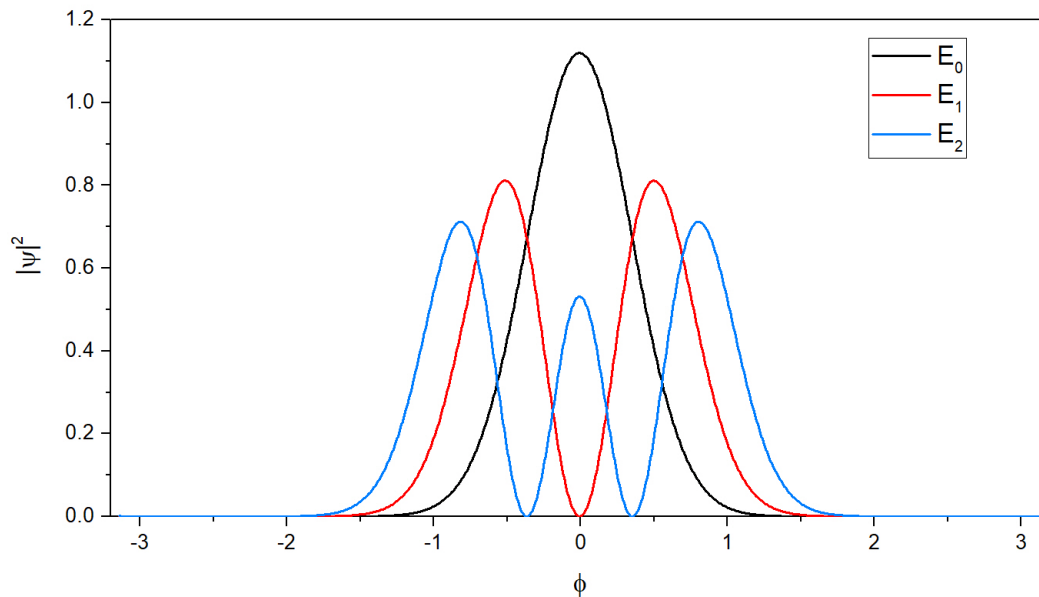


Figura 5.4: Densidad de probabilidad asociada a la solución de la ecuación (5.15a). Se muestran el estado base E_0 , y los dos primeros estados excitados E_1 y E_2 . Los parámetros de los campos electromagnéticos son $\eta = -20$ y $\gamma = 0$. Estos estados corresponden a los primeros estados energéticos que aparecen en la Figura (5.3).

Por último, se han calculado las densidades de probabilidad asociadas con las funciones (5.13) y las funciones que son solución a la ecuación (5.15a) a lo largo y ancho de la superficie de la *Quantum Ribbon*. En la Figura (5.5) se muestra la densidad de probabilidad del electrón distribuida a lo largo y ancho de la superficie de la *Quantum ribbon*. Conforme aumente el estado energético no sólo aparecen más nodos con respecto a la variable angular φ sino que se aprecia un desplazamiento de la función desde el ángulo $\varphi = 0$ hacia los bordes. Es en el caso más energético donde la función está completamente desplazada de su posición en el estado base. En este estado, para un electrón sería *más fácil desplazarse* a lo largo de la superficie *induciendo* una especie de *corriente* pues sería una carga en movimiento. Es decir, estaría realizando un movimiento de traslación con respecto al centro del origen de coordenadas.

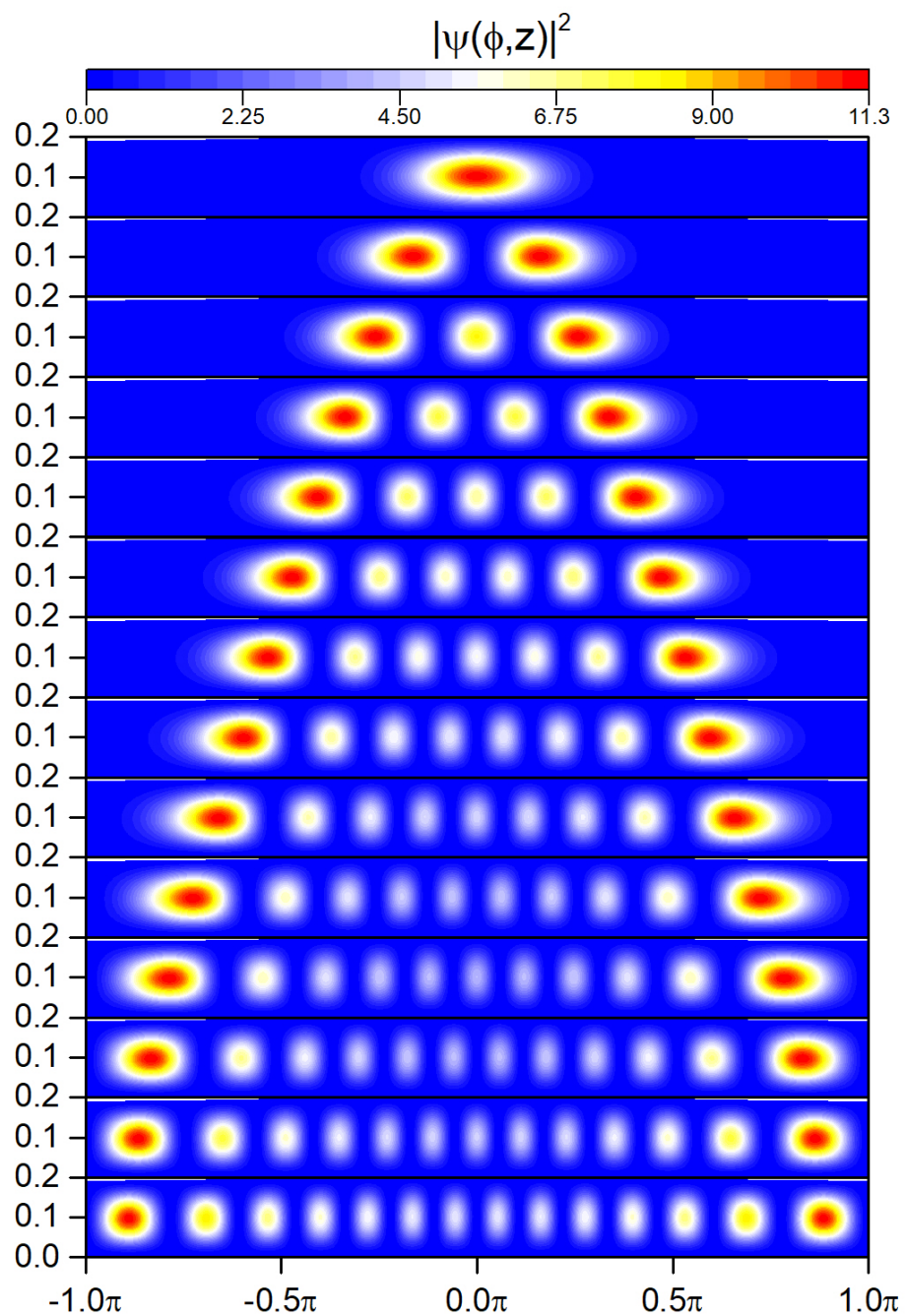


Figura 5.5: Densidad de probabilidad asociada al electrón sujeto al hamiltoniano (5.8). Los parámetros son los mismos que en la **Figura** (5.4). En orden descendente, el comportamiento entre niveles energéticos del electrón comenzando con el estado base.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se presenta un nuevo método para la solución numérica de las ecuaciones diferenciales derivadas del proceso de separación de variables en sistemas cuánticos confinados. Las ecuaciones que se tratan tienen la forma:

$$y''(x) + \alpha(x)y'(x) + \beta(x)y(x) = 0 \quad (6.1)$$

Con base en el método de Fröbenius, se establece un método recursivo para calcular numéricamente los coeficientes de la serie de Taylor de la solución y . Para lograrlo, se necesitan conocer los coeficientes de las series correspondientes a α y β . Calcular dichos coeficientes se hace a través del método de diferenciación automática.

Si bien una serie trunca no es formalmente la solución, con un total de términos lo suficientemente grande es posible decir que la solución es la buscada pues los coeficientes de dicha serie se obtienen de manera numéricamente exacta. En consecuencia, la exactitud de la solución queda limitada por la precisión de la máquina.

Por otro lado, ya que las funciones están representadas con series de Taylor truncas, estas (como polinomios) son simples de integrar obteniendo una vía fácil para el cálculo de normas y productos escalares. Se estudian ecuaciones del tipo (6.1) con condiciones de frontera de tipo Dirichlet y tipo periódicas. Los valores propios se encuentran numéricamente con alta precisión usando el método de *regula-falsi*.

El método fue probado con ecuación de Bessel para obtener la parte radial de la solución a un anillo bidimensional. También se obtuvieron las energías y las funciones de onda asociados a un electrón confinado a una nanosuperficie cilíndrica de altura variable sujeta a campos electromagnéticos constantes, recuperando el resultado que se encuentra en la literatura.

Si bien el procedimiento considera ecuaciones diferenciales sin puntos singulares, este puede extenderse para considerar tal caso, únicamente es necesario modificar la relación de recurrencia. Más aún, la norma de la partición y el orden de truncamiento de la serie guardan una estrecha relación entre precisión y eficiencia por lo que se convierten en parámetros de los cuales es posible aumentar la eficiencia del método.

Método de Frobenius: Solución general

Para resolver la ecuación (1.34) mediante el método de Frobenius el procedimiento consiste en proponer la solución como una serie de potencias en el intervalo (a, b) :

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n x^n \quad (\text{A.1})$$

También, ya que α y β son analíticas, tienen representación en serie de potencias en el mismo intervalo:

$$\alpha(x) = \sum_{m_1=0}^{\infty} \alpha_{m_1} x^{m_1} \quad \beta(x) = \sum_{m_2=0}^{\infty} \beta_{m_2} x^{m_2} \quad (\text{A.2})$$

El objetivo es usar las propiedades de linealidad de la derivada de la función propuesta en (A.1) para obtener las condiciones bajo las cuales dicha función satisface la ecuación (1.34). Para esto es necesario calcular los términos de y que aparecen en tal ecuación.

Al calcular las derivadas de (A.1):

$$y'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} n y_n x^n = \sum_{n=1}^{\infty} n y_n x^{n-1}$$

$$y''(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n(n-1) y_n x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) y_n x^{n-2}$$

Usando eso, las definiciones de (A.2) en (1.34) y al recomodar los índices de las sumas:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) y_{n+2} x^n + \left(\sum_{m_1=0}^{\infty} \alpha_{m_1} x^{m_1} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} (n+1) y_{n+1} x^n \right) + \left(\sum_{m_2=0}^{\infty} \beta_{m_2} x^{m_2} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} y_n x^n \right) = 0 \quad (\text{A.3})$$

A. MÉTODO DE FROBENIUS: SOLUCIÓN GENERAL

Del segundo y tercer miembro de la ecuación se tiene:

$$\left(\sum_{m_1=0}^{\infty} \alpha_{m_1} x^{m_1} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} (n+1) y_{n+1} x^n \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m_1=0}^{\infty} (n+1) \alpha_{m_1} y_{n+1} x^{n+m_1} \quad (\text{A.4})$$

$$\left(\sum_{m_2=0}^{\infty} \beta_{m_2} x^{m_2} \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} y_n x^n \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\infty} \beta_{m_2} y_n x^{n+m_2} \quad (\text{A.5})$$

En las igualdades (A.4) y (A.5) se hace el cambio de variable:

$$\mu_1 = n + m_1 \quad \Rightarrow \quad \mu_1 - m_1 = n \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \mu_1 \geq m_1$$

$$\mu_2 = n + m_2 \quad \Rightarrow \quad \mu_2 - m_2 = n \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \mu_2 \geq m_2$$

Con lo que se pueden reacomodar los términos de ambas sumas:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m_1=0}^{\infty} (n+1) \alpha_{m_1} y_{n+1} x^{n+m_1} = \sum_{\mu_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=0}^{\mu_1} (\mu_1 - m_1 + 1) \alpha_{m_1} y_{\mu_1 - m_1 + 1} x^{\mu_1}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\infty} \beta_{m_2} y_n x^{n+m_2} = \sum_{\mu_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\mu_2} \beta_{m_2} y_{\mu_2 - m_2} x^{\mu_2}$$

Sustituyendo en la ecuación (A.3):

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) y_{n+2} x^n + \sum_{\mu_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=0}^{\mu_1} (\mu_1 - m_1 + 1) \alpha_{m_1} y_{\mu_1 - m_1 + 1} x^{\mu_1} +$$

$$\sum_{\mu_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\mu_2} \beta_{m_2} y_{\mu_2 - m_2} x^{\mu_2} = 0$$

Como μ_1 y μ_2 son variables mudas y $0 \leq \mu_i < \infty$, haciendo $\mu_i \rightarrow n$ y agrupando términos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left((n+2)(n+1) y_{n+2} + \sum_{m_1=0}^n (n - m_1 + 1) \alpha_{m_1} y_{n - m_1 + 1} + \sum_{m_2=0}^n \beta_{m_2} y_{n - m_2} \right) x^n = 0$$

Nuevamente, como μ_1 y μ_2 son variables mudas se puede reescribir la ecuación:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left((n+2)(n+1) y_{n+2} + \sum_{m=0}^n ((n - m + 1) \alpha_m y_{n - m + 1} + \beta_m y_{n - m}) \right) x^n = 0$$

La ecuación se satisface si término a término los coeficientes de la serie son cero, es decir, si se cumple:

$$(n+2)(n+1)y_{n+2} + \sum_{m=0}^n ((n-m+1)\alpha_m y_{n-m+1} + \beta_m y_{n-m}) = 0 \quad (\text{A.6})$$

La igualdad (A.6) es una relación entre los términos y_n que son los coeficientes de la serie de potencias propuesta en (A.1) y determina una relación de recurrencia:

$$y_{n+2} = \frac{-1}{(n+2)(n+1)} \left(\sum_{m=0}^n (n-m+1)\alpha_m y_{n-m+1} + \beta_m y_{n-m} \right) \quad 0 \leq n \quad (\text{A.7})$$

En resumen, si se conoce el desarrollo en serie de potencias de las funciones α y β es suficiente conocer los términos y_0 y y_1 para determinar por completo la solución a la ecuación (1.34). En ese sentido, y_0 y y_1 son dos parámetros libres para cada solución lo que podría parecer genera una ambigüedad pero el teorema de existencia y unicidad garantiza que para un problema de la forma (1.34) con condiciones iniciales dadas tales como:

$$y(0) = A \quad y'(0) = B$$

La solución existe y es única. En el caso de una solución que tiene la forma (A.2) se traduce en:

$$A = y(0) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n(0)^n = y_0 \quad \Rightarrow A = y_0$$

$$B = y'(0) = \sum_{n=1}^{\infty} n y_n(0)^{n-1} = y_1 \quad \Rightarrow B = y_1$$

Lo que significa que la solución queda completamente al conocer las condiciones iniciales.

Bibliografía

- [1] Arfken, G. B. (2005). *Mathematical methods for physicists*. Elsevier academic press. 2
- [2] Arnold, V. I. (2004). *Lectures on partial differential equations*. Springer. 30
- [3] Asmar, N. H. (2005). *Partial differential equations*. Pearson Prentice Hall. 6
- [4] Boyce, W. E. and DiPrima, R. C. (2000). *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores a la frontera*. Editorial Limusa S. A. de C. V. 13
- [5] Carslaw, H. S. (1952). *Introduction to the Theory of Fourier's series and integrals*. Dover, 3 edition. 6
- [6] de la Peña, L. and Villavicencio, M. (2003). *Problemas y ejercicios de mecánica cuántica*. Fondo de cultura económica. 4
- [7] Griffiths, D. J. (2005). *Introduction to quantum mechanics*. Pearson Prentice Hall. 4
- [8] Sakurai, J. J. and Napolitano, J. (2011). *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley. 4
- [9] Salazar-Santa, J. D., Fonnegra-García, D., Fulla, M. R., Mora-Ramos, M. E., and Marin, J. H. (2018). Energy structure and optical response of multi-hilled gaas quantumm ribbon under crossed electric and magnetic fields. *Optical Materials*, 83:333–341. 42, 44
- [10] Weinberger, H. F. (1995). *A first course in partial differential equations with complex variables and transform methods*. Dover Publications, Inc. 6