

# ESTUDIO E IMPLEMENTACION DE METODOS COMPUTACIONALES PARA LA RESOLUCION NUMERICA DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES

Danny M. Martínez y Eduardo Menéndez Proupin, Facultad de Física-IMRE, Universidad de La Habana

## RESUMEN

Se presenta un estudio de la factibilidad y eficiencia de los métodos de diferencias finitas para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales. Se resuelven varios problemas típicos del electromagnetismo y de la mecánica cuántica, proponiéndose su introducción en la práctica docente.

## ABSTRACT

A study of the factibility and efficiency of finite difference methods to solve partial differential equations is presented. These methods are illustrated in the solution of typical problems of electromagnetism and quantum mechanics. The introduction of these methods in teaching is proposed.

## I. INTRODUCCION

La mayoría de las ecuaciones en derivadas parciales que describen fenómenos físicos no tienen soluciones analíticas debido a la complejidad de las fronteras o a las características de la propia ecuación en los casos de fronteras separables. Ante esta realidad el enfoque de la era preinformática consistía en idealizar el problema: considerar fronteras de alta simetría (círculos, cuadrados, etc), linealizar las ecuaciones o desprestigiar algunos términos molestos, siempre intentando no perder la esencia del fenómeno estudiado. Aún en la era de los ordenadores portátiles y la Internet, este enfoque se utiliza con excelentes resultados en la ciencia y la tecnología. Sin embargo, hay situaciones en que no es posible simplificar el problema. En otras ocasiones, se pretende refinar los resultados obtenidos mediante los modelos simples extendiendo así las fronteras del conocimiento. Otras veces se estudia un conjunto de ecuaciones que se diferencian poco entre sí y se busca encontrar la ecuación que describe óptimamente el sistema investigado. En estas circunstancias, encontrar la solución analítica de cada ecuación, aun cuando es posible, demanda mucho trabajo y resulta ventajoso disponer de un método numérico que permita evaluar las soluciones rápidamente y escoger la ecuación que más convenga. La solución de esta ecuación óptima, puede entonces refinarse o expresarse en forma analítica.

En los *currícula* de las especialidades universitarias de Física en Cuba se aprecia una ausencia casi

total de entrenamiento en métodos numéricos, los cuales son incorporados al bagaje cultural del estudiante generalmente en los trabajos de curso y diploma, mas de manera fragmentada e incompleta. Una razón para esta deficiencia es la tradicional escasez de medios de cómputo potentes; otra, la falta de tradición "numérica" en nuestra comunidad física. Sin embargo, el acelerado desarrollo de los ordenadores personales y de las redes de cómputo posibilitan el replanteo del problema. Así, nos hemos propuesto evaluar la factibilidad de introducir algunos problemas en la práctica docente, que involucren la solución de ecuaciones en derivadas parciales. Hemos escogido las ecuaciones de Laplace, Poisson y Schrödinger, con varios tipos de fronteras, y las hemos resuelto mediante el método de diferencias finitas.

En el método de diferencias finitas, para resolver numéricamente una ecuación diferencial es necesario *discretizar* el problema, es decir, buscar la solución en un conjunto finito de puntos y aproximar nuestra ecuación diferencial por relaciones algebraicas que cumplen los valores de la función solución en estos puntos. A estas relaciones se les da el nombre de *ecuaciones en diferencias finitas*. Por ejemplo, si se considera una malla cuadrada  $x_i = ih$ ,  $y = jh$  ( $i, j = 0, 1, \dots, N$ ), siendo  $h$  la distancia entre puntos sucesivos, puede demostrarse que el laplaciano de una función  $u(x, y)$  se aproxima con exactitud hasta términos  $o(h^4)$  por la expresión en diferencias [1-4]

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \Big|_{(x_i, y_j)} = \frac{u(x_{i-1}, y_j) + u(x_{i+1}, y_j) + u(x_i, y_{j-1}) + u(x_i, y_{j+1}) - 4u(x_i, y_j)}{h^2} \quad (1)$$

Consideremos el caso simple de la ecuación de Laplace en un dominio cuadrado  $(x,y)$ :  $0 < x < a$ ,  $0 < y < a$ , con la función  $u(x,y)$  tomando ciertos valores en la frontera. Para resolverla en diferencias finitas se define una malla cuadrada con  $h = a/N$ . Igualando a cero el miembro derecho de la expresión (1) para todos los puntos interiores ( $0 < i, j < N$ ) se obtiene un sistema de  $(N-1)^2$  ecuaciones algebraicas siendo las incógnitas  $u(x_i, y_j)$  con  $1 < i, j < N - 1$ . Los valores de  $u(x_i, y_j)$  cuando  $i = 0$  ó  $N$  ó  $j = 0$  ó  $N$  están fijados por las condiciones de frontera.

En general, trabajaremos con una ecuación de la forma

$$L(u) = f, \quad (2)$$

donde  $L$  es cierto operador diferencial lineal y homogéneo,  $u$  la función incógnita y  $f$  cierta inhomogeneidad. Denotaremos por  $L(u)_{i,j}$  el operador discretizado actuando sobre la función, obtenido reemplazando las derivadas por sus aproximaciones en diferencias finitas [2] en una malla cuadrada. Denotemos también  $u(x_i, y_j) = u_{i,j}$  y  $f(x_i, y_j) = f_{i,j}$ . Esta última la consideraremos cuadrada, es decir,  $x_i = ih$ ,  $y_j = jh$  ( $i, j = 1, \dots, N-1$ ). Las ecuaciones discretizadas quedan

$$L(u)_{i,j} = f_{i,j}. \quad (3)$$

Trabajaremos con condiciones de frontera de Dirichlet; es decir, que están dados los valores de la función en las fronteras. Como puede suponerse de las notaciones, los problemas considerados son bidimensionales, pero la extensión a tres o más dimensiones es simple. También es fácil modificar las condiciones de frontera para tratar problemas más específicos.

Las ecuaciones discretizadas forman un sistema de ecuaciones lineales que tiene como incógnitas las  $u_{i,j}$  y puede resolverse por diversos métodos del álgebra lineal. Debido a la gran cantidad de incógnitas, los métodos directos, como el de Gauss, no son viables [5]. Por esta causa usualmente se emplean métodos iterativos, que requieren menos memoria RAM.

En este trabajo empleamos dos métodos para resolver iterativamente las ecuaciones diferenciales: Sobre-Relajaciones Sucesivas (SRC) y Multi-Malla Total (MMT) (Successive Over-Relaxation y Full MultiGrid en la literatura anglófona predominante). La programación de estos métodos se realizó en lenguaje FORTRAN con el compilador GNU Fortran 77 de Linux, con base en las rutinas sor.f, mglin.f y ran0.f del paquete Numerical Recipes 2.0. Los cálculos se realizaron en un microprocesador Pentium II a 233 MHz.

## 2. DESCRIPCION DE LOS METODOS

### 2.1 Sobre-Relajaciones Sucesivas

En general, los métodos de relajación consisten en iterar a partir de una aproximación inicial, corrigiendo en cada iteración según la ecuación (1)

$$u_{i,j}^{nueva} = u_{i,j}^{vieja} - \omega \cdot \frac{L(u^{vieja})_{i,j} - f_{i,j}}{\partial L(u^{vieja})_{i,j} / \partial u_{i,j}} \quad (4)$$

En dependencia del valor del parámetro  $\omega$  se habla de relajación ( $\omega = 1$ ), sub-relajación ( $\omega < 1$ ) o sobre-relajación ( $\omega > 1$ ). La sub-relajación se emplea cuando la naturaleza de la ecuación produce problemas de convergencia. Cuando estos no existen, la sobre-relajación conduce a una mejora en la velocidad de convergencia. Existen otros detalles técnicos para acelerar la convergencia, que referimos a la literatura [1].

### 2.2 Multi-Malla Total

Este método se basa en la utilización de varias mallas de diferente espaciamiento  $h$  (y por tanto diferente número  $N$  de puntos).

Escribamos nuestra ecuación en diferencias finitas para una malla de espaciamiento  $h$

$$L_h u_h = f_h. \quad (5)$$

En la ecuación anterior hemos omitido explícitamente los índices  $i$  y  $j$  para no hacer engorrosa la lectura. Sea  $\hat{u}_h$  cierta aproximación a la ecuación anterior y denotemos por  $u_h$  su solución exacta. El error o la corrección en  $\hat{u}_h$  será:

$$v_h = u_h - \hat{u}_h \quad (6)$$

El residuo o defecto, dada la linealidad del operador, estará dado por

$$d_h = L_h \hat{u}_h - f_h = -L_h(u_h - \hat{u}_h) = -L_h v_h \quad (7)$$

En lugar de resolver para  $v_h$  directamente, restringimos nuestra ecuación a una malla más gruesa, de espaciamiento  $H$  (tomaremos  $H = 2h$ ), utilizando un operador lineal de restricción  $R$  [1]. Esto significa trabajar con la ecuación  $L_H v_H = -d_H$ , donde  $d_H = R d_h$ . Entonces se halla una solución  $v_H$  y se prolonga esta solución a la malla fina mediante un operador lineal de prolongación  $P$ :  $v_h = P v_H$ . Finalmente calculamos una nueva aproximación:

$$\hat{u}_h^{nueva} = \hat{u}_h + v_h \quad (8)$$

Se agrega en la malla fina, antes y después del proceso descrito, cierto número, por lo general uno o dos, de iteraciones de relajación.

Hasta aquí solo se han utilizado dos mallas, pero el proceso puede extenderse de manera casi trivial a un número mayor de mallas, resolviéndose exactamente la ecuación en la malla más gruesa que se utilice. En esto consiste el método MMT, cuyo esquema general a grosso modo se muestra en la Figura 1. Con la selección  $H = 2h$  los tamaños de malla posibles están determinados por la relación  $N = 2^M + 1$ , con  $M = 1, 2, \dots$

Se parte de la malla más gruesa  $E$  donde se resuelve la ecuación en diferencias finitas exactamente o mediante el método SRS. A partir de aquí, subir implica pasar mediante interpolación a una malla más fina ( $h = H/2$ ) y bajar resulta en la restricción a una malla más gruesa ( $H = 2h$ ). En cada  $S$  se realizan varios pasos de relajación. Nótese que no se relaja hasta obtener convergencia, hemos usado típicamente 5 pasos. Finalmente, se obtiene la solución en la malla de espaciamiento mínimo. El proceso descrito, el paso desde la malla más fina a la que se ha llegado hasta la más gruesa y de vuelta a la más fina, se conoce como ciclo en  $V$ . El interior del rectángulo en la Figura 1 indica uno de estos ciclos. El tamaño de las  $V$  se va aumentando hasta llegar al tamaño de malla que se desea. El cálculo se optimiza mediante un parámetro: el número de ciclos en  $V$  de cada tamaño, que es igual a 2 en la Figura 1. Obsérvese que la ventaja del método proviene de resolver la ecuación en una malla de menor número de puntos, lo que se revierte en mayor rapidez. Los operadores de prolongación  $P$  y restricción  $R$  que utilizamos corresponden a lo que se conoce como interpolación bilineal y de pesado medio, respectivamente.

Como aproximación inicial, si la ecuación o las condiciones de frontera no son homogéneas, se pueden tomar  $u_{ij} = 0$ . Por lo general la malla más gruesa  $E$  (Figura 1) se toma de  $N = 3$  porque la solución exacta a la ecuación en diferencias finitas es aquí inmediata.

### 2.3 Modificación para el problema de autovalores de la ecuación de Helmholtz

Veamos ahora el caso de la ecuación de Helmholtz

$$\begin{aligned} L &= \nabla^2 + e, \\ f &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

siendo  $e$  el autovalor, que toma valores discretos cuando se imponen condiciones de frontera en un dominio acotado.

El método de solución consiste, en rasgos generales, en darle un valor al parámetro  $e$  y obtener una aproximación para la función incógnita; luego, esta aproximación se usa para actualizar el valor del parámetro y se repite el procedimiento. Esta serie de aproximaciones sucesivas nos lleva a la obtención del autovalor y la autofunción correspondiente. Lo que hemos descrito funciona bien para el menor autovalor, pero no basta para obtener las soluciones de los demás autovalores. Recordemos, sin embargo, que las autofunciones correspondientes a autovalores diferentes son ortogonales, y que aquellas que corresponden al mismo autovalor en caso de degeneración pueden escogerse siempre de manera que sean ortogonales [3,4]. Resulta claro ahora que después de obtener la primera solución debemos intercalar en cada ciclo de actualización del parámetro y la función un paso de ortogonalización según el método de Gram-Schmidt respecto a las soluciones ya obtenidas.

Para la ecuación de Helmholtz el parámetro se actualizaría según la ley

$$e = \frac{-\sum_{i,j=1}^N \nabla^2(u)_{i,j} \cdot u_{i,j}}{\sum_{i,j=1}^N |u_{i,j}|^2} \quad (10)$$

La ecuación anterior se obtiene multiplicando la ecuación (3) (con  $L$  y  $f$  dados por (9)) por  $\sum_{i,j} u_{i,j}$  y despejando  $e$ . Si ya están calculadas  $K$  autofunciones  $v_{i,j}^k$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ , ortogonales entre sí, y hemos obtenido una aproximación  $u_{i,j}$  para la autofunción  $K+1$ , el método de Gram-Schmidt indica reemplazar esta aproximación por

$$\tilde{u}_{i,j} = u_{i,j} - \sum_{k=1}^K \frac{\langle u | v^k \rangle}{\langle v^k | v^k \rangle} \cdot v^k, \quad (11)$$

donde

$$\langle u | v \rangle \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N u_{i,j} \cdot \bar{v}_{i,j} \quad (12)$$

es el producto escalar. Es conveniente normalizar las autofunciones  $v^k$  a medida que se van obteniendo pues así no se pierde tiempo calculando ni se necesita almacenar los valores de la norma de estas funciones para utilizarlos en el proceso de ortogonalización.

Debemos decidir en qué momentos del proceso de solución actualizar el valor del parámetro y forzar la ortogonalidad de las funciones. En el método SRS se pueden hacer ambas operaciones después de cada iteración de relajación o cada cierto número pequeño de las mismas para ganar en velocidad. En

el caso del MMT la situación se complica un poco. Nosotros hemos escogido para realizar las actualizaciones del parámetro  $e$ , el momento en que se está trabajando en la malla más fina a la que se haya llegado en cada  $V$ , tal como se indica en la Figura 1. La ortogonalización se aplica después de cada relajación siempre que la misma cambie la función de manera apreciable, lo que se expresa en una comparación de las normas de la variación y de la propia función.

Como aproximación inicial a las funciones  $u_{ij}$  se dan valores aleatorios a las mismas excepto en las fronteras, donde deben anularse. Es necesario hacer en el MMT una variación respecto al caso de las ecuaciones de Poisson y de Laplace. En estos, la malla más gruesa  $E$  (Figura 1) se toma de  $N = 3$  porque la solución exacta a la ecuación en diferencias finitas es aquí inmediata. En el caso del problema de autovalores y autofunciones se buscan varias funciones con simetrías diferentes y ortogonales entre sí. Cuando se está calculando la  $n$ -ésima autofunción, la malla más gruesa debe ser capaz de conservar la ortogonalidad respecto a las  $n-1$  autofunciones calculadas previamente. Por esta razón es imposible partir de la malla de  $N = 3$ , donde solo hay un punto que no es frontera. La solución a esta situación es modificar el esquema de la Figura 1 comenzando no desde el nivel más bajo  $E$ , sino desde cierto  $S$  con un grado suficiente de resolución; nosotros comenzamos en nuestros cálculos en  $N = 9$ . Esta selección nos permitió obtener los 10 primeros autovalores y autofunciones. Para calcular un número mayor de autoestados es necesario aumentar  $N = 2^M + 1$  para preservar la ortogonalidad.

### 3. APLICACION DE LOS METODOS Y RESULTADOS

#### 3.1 Ecuaciones de Laplace y Poisson

Considérese el problema de hallar el potencial electrostático en una región cuadrada libre de cargas, conociendo que el potencial toma en cada arista valores constantes. Esto es un problema de Dirichlet para la ecuación de Laplace. En este caso sencillo se puede obtener la solución analítica como una serie de Fourier. La solución, obtenida mediante el método de MMT y una malla fina de  $N = 129$  se muestra en la Figura 2 a). Comparando el resultado de diferencias finitas con el resultado analítico encontramos que en términos de la norma de las funciones, la solución numérica es exacta hasta un 0.04 %.

Otro ejemplo clásico es el caso de una elipse conductora colocada en un campo exterior uniforme bidimensional, o lo que es igual, un cilindro de base elíptica en un campo uniforme en tres dimensiones. Para hallar el campo eléctrico en la vecindad de la elipse se necesita resolver la ecuación de Laplace

en el exterior de la elipse, la condición de contorno es que en puntos infinitamente alejados de la elipse el campo eléctrico se uniforme. En la práctica, hemos resuelto la ecuación de Laplace en una región cuadrada cuyo lado es el triplo del eje mayor de la elipse, imponiendo la condición de potencial constante en los lados perpendiculares al campo y potencial lineal en los lados paralelos al campo externo. Este es un caso en que la solución analítica es muy complicada, pero para el método numérico no representa dificultad. Las curvas equipotenciales se muestran en la Figura 2 b).

En la Figura 2 c) se muestran las líneas equipotenciales en un capacitor de sección cuadrada. En este caso la solución analítica es muy compleja, pero se resuelve fácilmente con el método numérico. Usando la expresión en diferencias para el gradiente del potencial se puede calcular la densidad de carga en las placas del capacitor  $\sigma = \pm \nabla u / \epsilon_0$ , que se muestra en la Figura 2 d). Integrando  $\sigma$  se puede calcular la carga total y con esto, la capacidad del condensador.

A continuación presentamos un estudio de la velocidad de cálculo para los distintos métodos. Hemos tomado como banco de prueba el primero de los problemas resueltos. En la figura 3 se muestra el tiempo de cálculo en función del tamaño de la malla. Se aprecia que en ambos el tiempo es una función potencial del tamaño de malla. En general, el SRS es más lento que su análogo MMT y que el tiempo de cálculo para el mismo aumenta mucho más con el tamaño de malla: en el SRS se tiene aproximadamente una proporcionalidad con  $N^3$ , frente a una proporcionalidad con  $N^2$  para el MMT. Se necesitan tiempos de cálculo del orden de un minuto para obtener una solución en el MMT con una malla de  $N = 1025$ , mientras que en el SRS esto ya ocurre con  $N = 301$ . Para  $N \sim 300$  el MMT consume 60 veces menos tiempo. No obstante, el SRS tiene la ventaja de requerir menos memoria y ser de más fácil programación y adaptación a un problema concreto.

#### 3.2 Ecuación de Schrödinger

Consideremos la determinación de los estados estacionarios y niveles energéticos de una partícula de masa  $m$  que se mueve libremente en cierta región  $S$  del plano, confinada por una barrera de potencial infinita. O sea, precisamos resolver la ecuación

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E \right) \Psi(x, y) = 0 \quad (13)$$

con la condición  $\Psi = 0$  en la frontera de  $S$ . Si se introduce la magnitud  $e = 2mE/\hbar^2$ , la ecuación (13) adopta la forma típica de la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 u + e \cdot u = 0. \quad (14)$$

Hemos considerado tres tipos de regiones: cuadrada, circular y elíptica.

En el caso en que S es un cuadrado de arista a es fácil hallar las soluciones analíticas

$$\Psi_{m,n}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi m x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi n y}{a}\right), \quad (15)$$

$$e_{m,n} = \frac{\pi^2}{a^2} (m^2 + n^2),$$

donde m y n son números naturales o 0. Esta solución nos servirá para comprobar la efectividad del método numérico.

Para el caso en que la región S es circular de radio R también resulta fácil encontrar las soluciones analíticas reales

$$\Psi_{v,n}^{(1)}(r, \theta) = J_v\left(\frac{x_{v,n} r}{R}\right) A_v \sin(v\theta),$$

$$\Psi_{v,n}^{(2)}(r, \theta) = J_v\left(\frac{x_{v,n} r}{R}\right) B_v \cos(v\theta), \quad (16)$$

$$e_{v,n}^{1,2} = \frac{x_{v,n}^2}{R^2},$$

donde  $v = 0, 1, 2, \dots$ ,  $n = 1, \dots$ ,  $J_v(x)$  son las funciones cilíndricas de Bessel, A y B son constantes de normalización de los estados degenerados (1) y (2).  $x_{v,n}$  es el n-ésimo cero de la función  $J_v(x)$ .

Hemos realizado cálculos con el método MMT en una malla cuadrada de  $N = 257$ . Para la región circular se hizo  $u_{i,j} = 0$  siempre que  $x_i^2 + y_j^2 \geq R^2$ , el proceso iterativo se aplicó solamente a los valores  $u_{i,j}$  para los cuales  $x_i^2 + y_j^2 < R^2$ . La Tabla 1 muestra la comparación del resultado numérico y el analítico para los autovalores de la energía adimensionalizada  $ea^2$ . Estos valores difieren a lo sumo en un 0.01 %. La Tabla 2 muestra los resultados para el caso de la región circular. En este caso el error del cálculo numérico es inferior al 0.7 %. Aquí se obtiene una menor exactitud debido a que la frontera del círculo no coincide en general con los puntos de la malla y por lo tanto queda un tanto indefinida, situación esta que mejora en la medida en que la malla tenga más resolución. Si consideramos que la indeterminación en el radio del círculo está dada por

$$\frac{\delta_R}{R} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{2} \cdot h}{R} = \frac{\sqrt{2}}{N-1} \quad (17)$$

y sabiendo que  $e \propto R^{-2}$  tendremos el estimado  $\delta_e/e = 2\delta_R/R \sim 0.95\%$  para  $N = 257$ .

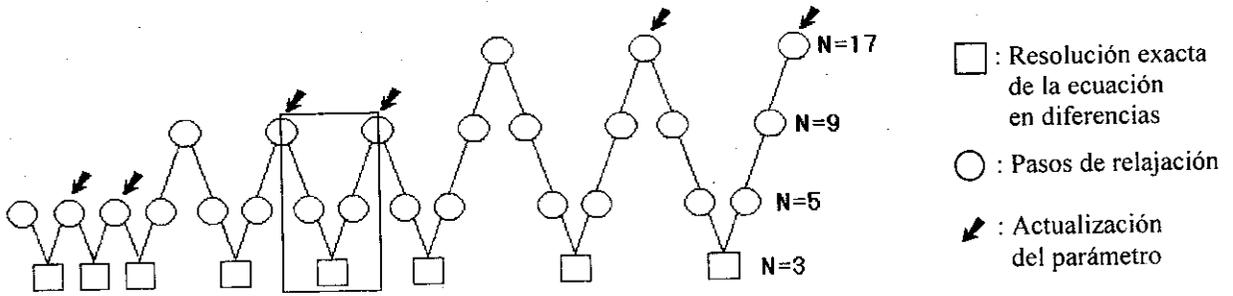
**Tabla 1.** Comparación de los valores de la energía adimensional obtenidos por vía numérica con los valores exactos para la región cuadrada.

m, n	$\frac{ea^2}{\pi^2}$	$\frac{ea^2}{\pi^2} \equiv m^2 + n^2$
1, 1	1.99998	2
1, 2	4.9999	5
2, 1	4.9998	5
2, 2	7.9996	8
1, 3	9.9993	10
3, 1	9.9993	10
2, 3;	12.9991	13
3, 2	12.9992	13
1, 4	16.998	17
4, 1	16.998	17
3, 3	17.999	18
2, 4	19.998	20
4, 2	19.998	20

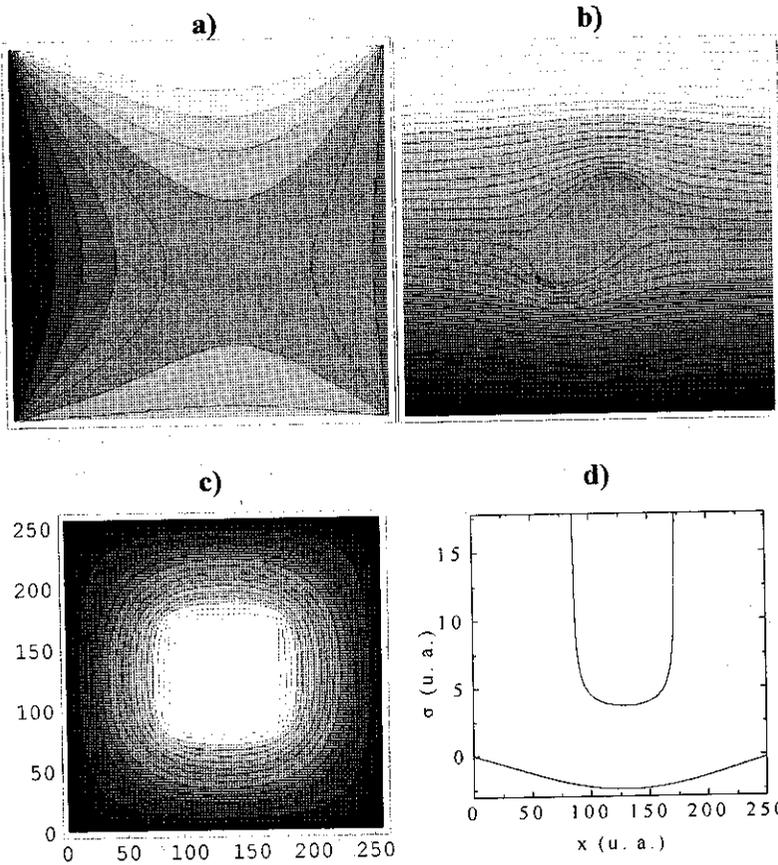
**Tabla 2.** Comparación de los valores de la energía adimensional obtenidos por vía numérica con los valores exactos para la región circular.

v, n	$ea^2$ (numérico)	$ea^2$ (analítico)
0,1	25.6	25.7
1,1	64.9	65.2
0,2	134.6	135.4
2,1	116.6	117.2
1,2	217.5	218.7
0,3	330.9	332.8
3,1	179.9	180.9
4,1	254.3	255.9
3,2	313.0	314.9
5,1	339.9	342.0

En las Figuras 4 y 5 se muestran las curvas de contorno de las funciones de onda para los 8 primeros niveles de energía en las regiones circular y elíptica, respectivamente. Para el caso de la región circular es interesante notar que las funciones de onda de estados degenerados que se obtienen son combinaciones lineales de las  $\Psi_{v,n}^{(1)}$  y  $\Psi_{v,n}^{(2)}$ . Las parejas de estados degenerados en la Figura 5 son b) y c), d) y e), o g) y h). Para obtener los estados  $\Psi_{v,n}^{(1)}$  o  $\Psi_{v,n}^{(2)}$  es necesario introducir la simetría en la aproximación inicial a la autofunción. Esto indica también que la simetría de la malla subyacente no influye en el cálculo.



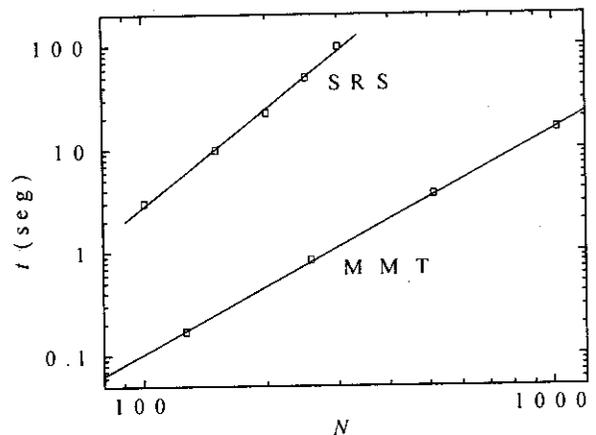
**Figura 1.** Esquema general del método MMT. La actualización del parámetro  $\epsilon$  se efectúa sólo en el problema de autovalores. El rectángulo indica un ciclo en V.

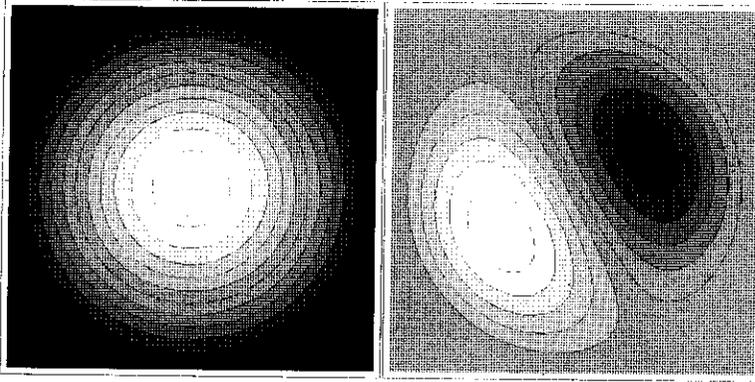


**Figura 2.** Potencial electrostático de:

- a) interior de un cuadrado cuyas aristas tienen potenciales constantes y diferentes entre sí,
- b) elipse conductora en un campo eléctrico externo homogéneo,
- c) capacitor de sección cuadrada.
- en d) se muestra la densidad superficial de carga en las placas del capacitor del inciso c) a lo largo de una de las aristas.

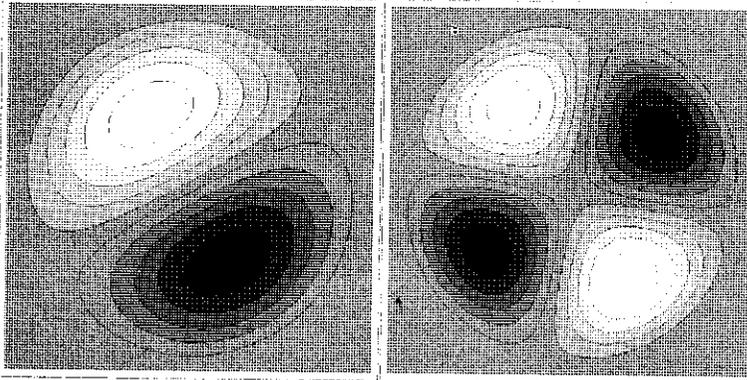
**Figura 3.** Tiempo de cálculo en función del tamaño de la malla para los métodos de Sobre-Relajaciones Sucesivas (SRC) y Multi-Malla Total (MMT) aplicados al cómputo del potencial electrostático en un capacitor de sección cuadrada.





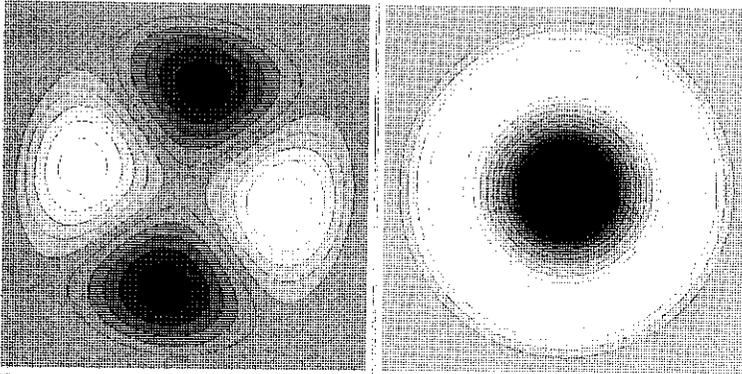
a)

b)



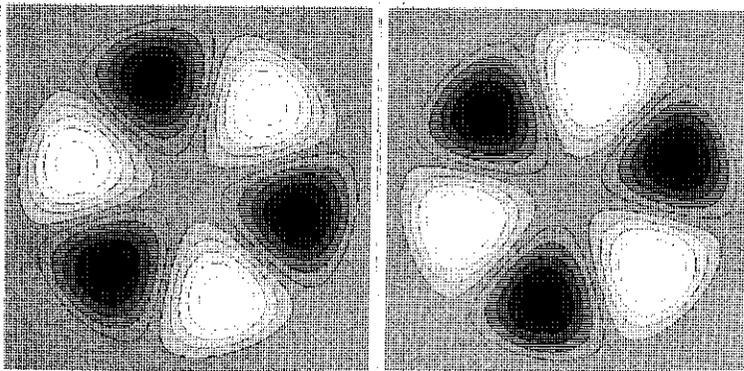
c)

d)



e)

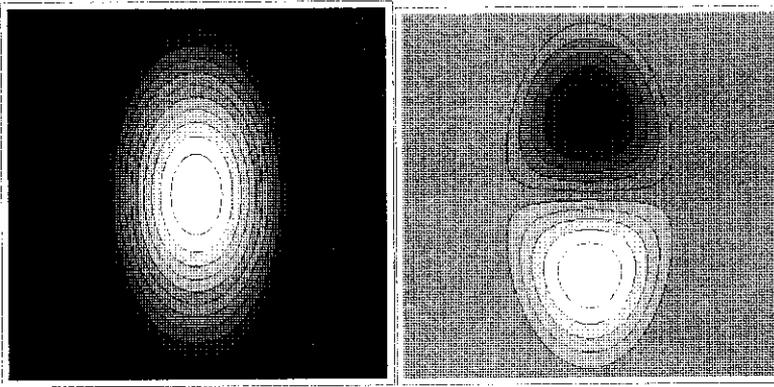
f)



g)

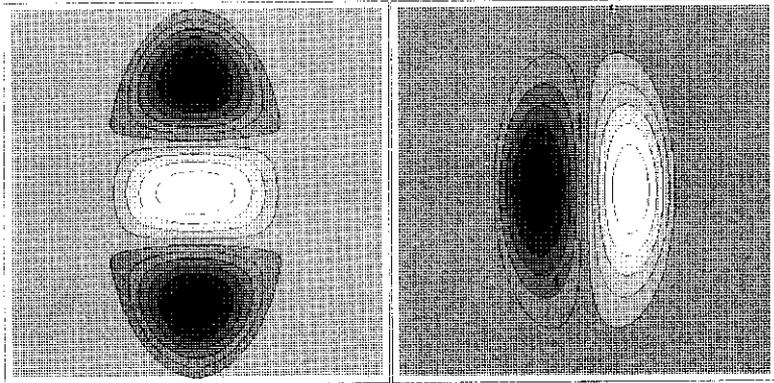
h)

**Figura 4.**  
Primeras 8 autofunciones  
de la ecuación de Schrödinger  
en una región circular.



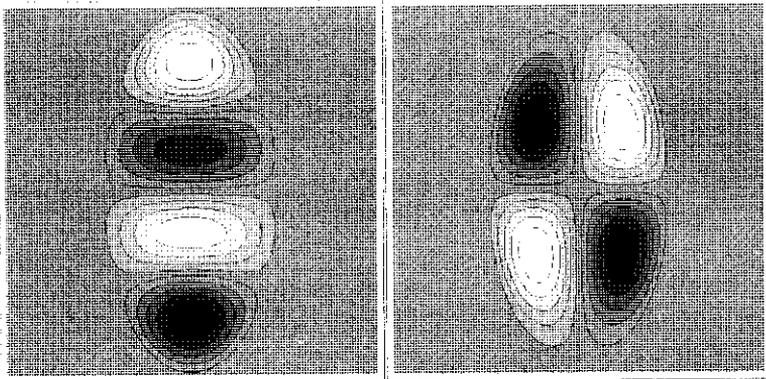
a)

b)



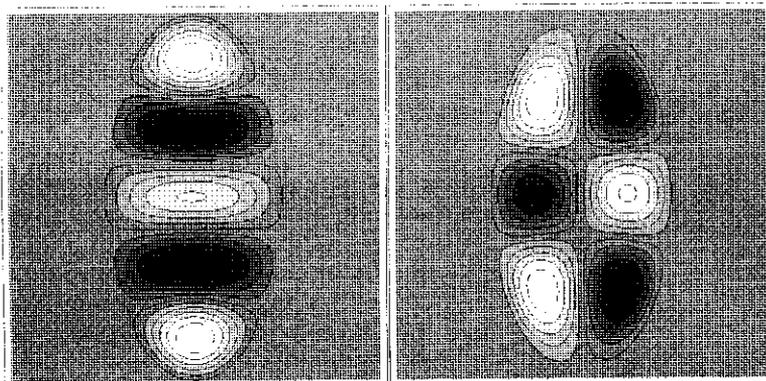
c)

d)



e)

f)



g)

h)

**Figura 5.**  
Primeras 8 autofunciones  
de la ecuación de Schrödinger  
en una región elíptica.

#### 4. CONCLUSIONES

Hemos comprobado la factibilidad de resolver ecuaciones en derivadas parciales utilizando ordenadores personales y rutinas comerciales en FORTRAN 77. Los métodos de SRS y MMT constituyen un buen punto de partida para emprender la búsqueda de soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales. Su implementación resulta considerablemente sencilla y eficiente utilizando las bibliotecas comerciales. La comparación entre ambos métodos muestra que el método de SRS es de más fácil programación, pues se basa en una idea mucho más sencilla y consume menos espacio en memoria. En contraste, el método de MMT, aunque más complejo de implementar, es mucho más rápido que el SRS. El tiempo de cálculo es proporcional en el SRS a  $N^3$  y

en el MMT a  $N^2$  ( $N$  de la malla más fina). Hemos presentado una extensión del método MMT para resolver problemas de autovalores y autofunciones. Hemos aplicado estos métodos a la solución de problemas del electromagnetismo y de la mecánica cuántica, los cuales son susceptibles de ser incorporados a la práctica docente en la especialidad de Física y afines. Todos estos métodos son extensibles fácilmente a tres dimensiones.

#### AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a nuestros colegas José Marín Antuña y Arezky Hernández Rodríguez por la lectura crítica de este documento y por sus útiles sugerencias a lo largo de esta investigación.

#### REFERENCIAS

1. PRESS, W. H.; S.A. TEUKOLSKY; W.T. VETTERLING and B.P. FLANNERY (1992), "Numerical Recipes in FORTRAN 77: The art of scientific computing", 2da. ed., Cambridge University Press.
2. GOMEZ MONTENEGRO, A. y L. ALVAREZ DIAZ (1991): "Métodos numéricos del análisis matemático", Editorial Academia, La Habana.
3. TIKHONOV, A. N. y A.A. SAMARSKII (1969): "Equations of mathematical physics", Instituto del Libro, La Habana.
4. MARIN ANTUÑA, J. (1992): "Métodos matemáticos de la física", Universidad de La Habana.
5. Los métodos directos son aquellos que permiten obtener la solución empleando un número finito de operaciones, generalmente involucran la inversión o diagonalización exacta de matrices de dimensión igual al número de incógnitas.