Metodos matematicos III

Tarea: 4
Alumno: Angel Ricardo Sanchez Zeferino
matricula: 201404791
e-mail: wabngel@hotmail.com

1. Ejercicio 1

Identifica la ecuación diferencial(Bessel,Legendre,etc...) e indica cuales son sus soluciones (funciones especiales)

a)

$$xY'' + (1-x)Y' + nY = 0$$

Esta ecuacion tiene la forma de una ecuacion diferencial de Laguerre, que tiene solución:

$$Y_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})$$

b)

$$(1-x^2)Y'' - 2xY' + nY = 0$$

Esta ecuación, es la forma canonica de la ecuación de Legendre, se puede resolver de dos maneras:
1.b) Por sustitución de $Y = \sum_{i=0}^{\infty} a_n x^n$ en la ecuación diferencial

2.b) Por el cambio de variable $x = cos(\theta)$ Por este segundo camino, se hallan las derivadas :

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dx}\frac{dx}{d\theta}$$

Se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{d^2Y}{d\theta^2} + cotg(\theta)\frac{dY}{d\theta} + nY = 0$$

Que es una ecuacion diferencial ordinaria, con solución:

$$y(\theta) = Ay_1(cos(\theta)) + By_2(cos(\theta))$$

Las soluciones con polinomios de Legendre de orden n tendran la solución:

$$y(\theta) = A * p_n(cos(\theta)) + B * Q_n(cos(\theta))$$

c)

$$r^2\frac{d^2Y}{dr^2} + r\frac{dZ}{dr} + (k^2r^2 - (n+\frac{1}{2})^2)Y = 0$$

La ecuacion de esta ecuacion diferencial es de la forma de una ecuacion de Bessel de grado n+1/2,por el grado y los coeficientes, ya que la ecuación ordinaria de Bessel es:

$$x^2 Z_v'' + xZ_v' + (x^2 - v^2)Z_v = 0$$

cuya solucion, son de la forma:

$$J_n(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s!(n+s)!}(\frac{x}{2})^{n+2s}$$

f)

$$\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{dy}{dx} + \alpha y = 0$$

Al simplificar esta ecuación, se obtiene una ecuación diferencial de Legendre,asi que las soluciones de esta ecuación diferencial es una combinación de polinomios de Legendre

e)

$$Y'' + (\alpha - x^2)Y = 0$$

Esta ecuación es la ecuación de weber,si se efectua el cambio de variable:

$$Y(x) = e^{-x^2/2}A(x)$$

Se obtiene la ecuación de Hermite

$$A''(x) - 2xA'(x) + 2rA(x) = 0$$

con $2r = \alpha - 1$ Nuevamente se hace un desarrollo en seria de taylor para hallar las relaciones de recurrencia de los coeficientes, asi se llega a que la solucion de esta ecuacion diferencial es de la forma:

$$Y(x) = P_m(x)e^{-x^2/2}$$

Con P_m un polinomio de hermite

h)

$$(1-x^2)Y'' - 2xY' + (n - \frac{m}{1-x^2})Y = 0$$

Esta ecuación diferencial tiene la forma de la ecuación diferencial de Legendre, asi que las soluciones seran polinomios de legendre

i)

$$x^2Y + xY' + (x^2 - \alpha^2)Y$$

Esta ecuacion diferencial tiene la misma forma que una ecuacion de Bessel asi que la solución sera:

$$Y_\alpha(x) = \sum_{s}^{\infty} \frac{(-1)^s x^{\alpha+2s}}{s!(\alpha+s)!(2)}$$

j)

$$Y'' - 2xY' + 2nY$$

Esta ecuación diferencial, es una ecuacion diferencial de Hermite, asi que tiene soluciones:

$$Y_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

k)

$$xY'' + (n-x)Y' + kY = 0$$

Esta ecuacion, es una variante de la ecuación diferencial de Laguerre: xy” +(1-x)y’ +ny=0 la cual tiene por soluciones, los polinomios de Laguerre, asi que para est ecuación, que tiene un termino extra que varia, solo habria que modificar eso, por ejemplo, que las soluciones sean del tipo:

$$\psi_{n,k}(x) = L_n(x)A(k)$$

2. Ejercicio 2

Hacer una simulación de un oscilador armónico cuantico en dos dimensiones

Para realizar la solución numerica, definimos un conjunto discreto de puntos dados por: $x_j = j\triangle x$ con sus correspondientes valores en la frontera en x_0 por la izquierda y x_m por la derecha, lo mismo para y:$y_k = k\triangle y$ El tiempo tambien se discretiza : $t^n = n\triangle t$ Asi que $x_j \in [0, x_m]$ y $t^n \in [0, t^s]$, para nuestro estudio, $x_m = 1$
Para hacer el codigo mas sencillo, se usa una malla de [0,1]X[0,1], mientras que $\triangle t = 0{,}002$, el numero de divisiones de la malla es nxn, esto es hay nxn nodos, se fija n=500

Figura 1: Parametros

```
#  PARAMETROS
n = 500 # tamñaño de iteraciones de la malla
Dh = 1. / n # tamaño de paso espacial por cada iteracion punto
Dt = 0.002 # incremento temporal

k=0.02
```

La aproximación de diferencias finitas para dos dimensiones, asume que la funcion involucrada puede ser expandida en una serie de Taylor sobre todos los puntos de la maya [0,1] X [0,1] Al realizar la expansion de una funcion f, y al hacer unas rapidas operaciones, se llega a las siguientes relaciones:

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{\triangle x} \tag{1}$$

Ya que se ignoran terminos de exponentes mayores, al considerar un $\triangle x -> 0$
Tambien se tienen las siguientes relaciones:

$$f''(x_j) \approx \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1})}{(\triangle x)^2} \tag{2}$$

La ecuación de Schrödinger, para el oscilador armonico en dos dimensiones es:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}) + \frac{k}{2}(x^2 + y^2)\psi \tag{3}$$

Ya que estamos discretizando a la ecuación, entonces ψ dependera de la siguiente forma:

$$\psi^n_{j,k} = \psi(x_j, y_k, t^n)$$

Por conveniencia se toma $\hbar = 1 = m = 1 = k$ por lo tanto, la ecuacion de Schrödinger queda como:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2)\psi \tag{4}$$

Esta función de onda es compleja, es decir :

$$\psi = \alpha + i\beta$$

Conjugando la ecuación (4) :

$$-i\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{2}[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi^*}{\partial y^2}] + \frac{k}{2}(x^2 + y^2)\psi^* \tag{5}$$

Si se suma la ecuación 4 y la ecuación 5, se obtiene:

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\psi-\psi^*)=-\frac{1}{2}[\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\psi+\psi^*)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}(\psi+\psi^*)]+\frac{k}{2}(x^2+y^2)(\psi+\psi^*) \tag{6}$$

o escrito de otra forma:

$$-2\frac{\partial}{\partial t}(Im[\psi])=-[\frac{\partial^2}{\partial x^2}(Re[\psi])+\frac{\partial^2}{\partial y^2}(Re[\psi])]+k(x^2+y^2)(Re[\psi]) \tag{7}$$

Ahora si le restamos a (4), la ecuacion (5)

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\psi+\psi^*)=-\frac{1}{2}[\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\psi-\psi^*)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}(\psi-\psi^*)]+\frac{k}{2}(x^2+y^2)(\psi-\psi^*) \tag{8}$$

Usando las propiedades de los numeros complejos, se obtiene:

$$i\frac{\partial}{\partial t}2Re(\psi)=-i[\frac{\partial^2}{\partial x^2}Im(\psi)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}Im(\psi)]+ik(x^2+y^2)Im(\psi) \tag{9}$$

finalmente

Sistema de ecuaciones diferenciales parciales acoplado

$$-2\frac{\partial}{\partial t}(Im[\psi])=-[\frac{\partial^2}{\partial x^2}(Re[\psi])+\frac{\partial^2}{\partial y^2}(Re[\psi])]+k(x^2+y^2)(Re[\psi]) \tag{10}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}2Re(\psi)=-i[\frac{\partial^2}{\partial x^2}Im(\psi)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}Im(\psi)]+ik(x^2+y^2)Im(\psi) \tag{11}$$

Para hacerlo mas entendible, hacemos uso de que $\alpha = Re(\psi)$ mientras que $\beta = Im(\psi)$, se obtiene:

$$-2\frac{\partial}{\partial t}\beta=-[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\alpha_r+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\alpha_r]+k(x^2+y^2)\alpha_r \tag{12}$$

$$2\frac{\partial}{\partial t}\alpha=-[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\beta+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\beta]+k(x^2+y^2)\beta \tag{13}$$

Tambien se hace una pequeña modificacion en (1) y (2) ya que se trabaja con 2 variables independientes extras, asi que despues de la modificacion se obtiene: Para x

$$\frac{\partial\psi(x_j,y_k,t^n)}{\partial x}\approx\frac{\psi^n_{j+1,k}-\psi^n_{j,k}}{\triangle x} \tag{14}$$

Para y

$$\frac{\partial\psi(x_j,y_k,t^n)}{\partial y}\approx\frac{\psi^n_{j,k+1}-\psi^n_{j,k}}{\triangle y} \tag{15}$$

Para t

$$\frac{\partial\psi(x_j,y_k,t^n)}{\partial t}\approx\frac{\psi^{n+1}_{j,k}-\psi^n_{j,k}}{\triangle t} \tag{16}$$

Para la segunda derivada se hace un ajuste parecido, por ejemplo la segunda derivada con respecto a x:

$$\frac{\partial^2\psi(x_j,y_k,t^n)}{\partial x} \approx \frac{\psi^n_{j+1,k} - 2\psi^n_{j,k} + \psi^n_{j-1,k}}{\triangle x^2} \tag{17}$$

Al sustituir en la ecuación (12) este conjunto de aproximaciones numericas , se obtiene:

$$\frac{\beta^{n+1}_{j,k} - \beta^n_{j,k}}{\triangle t} = \frac{1}{2}(\frac{\alpha^n_{j+1,k} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j-1,k}}{\triangle x^2} + \frac{\alpha^n_{j,k+1} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j,k-1}}{\triangle y^2}) - \frac{1}{2}(x_j^2 + y_k^2)\alpha^n_{j,k} \tag{18}$$

Se despeja el valor de n+1 para el tiempo, pues es el que nos interesa generar apartir de un valor actual, se tiene :

$$\beta^{n+1}_{j,k} = \frac{\triangle t}{2}(\frac{\alpha^n_{j+1,k} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j-1,k}}{\triangle x^2} + \frac{\alpha^n_{j,k+1} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j,k-1}}{\triangle y^2} - (x_j^2 + y_k^2)\alpha^n_{j,k}) + \beta^n_{j,k} \tag{19}$$

Por otra parte para la parte real:

$$\alpha^{n+1}_{j,k} = \frac{-\triangle t}{2}(\frac{\beta^n_{j+1,k} - 2\beta^n_{j,k} + \beta^n_{j-1,k}}{\triangle x^2} + \frac{\beta^n_{j,k+1} - 2\beta^n_{j,k} + \beta^n_{j,k-1}}{\triangle y^2} - (x_j^2 + y_k^2)\beta^n_{j,k}) + \alpha^n_{j,k} \tag{20}$$

Se hace la resolucion espacial igual en los dos ejes:

$$\triangle y = \triangle x = 1/100 = \triangle h$$

Susstituyendo en (19) y (20), se tiene:

$$\beta^{n+1}_{j,k} = \frac{\triangle t}{2}(\frac{\alpha^n_{j+1,k} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j-1,k} + \alpha^n_{j,k+1} - 2\alpha^n_{j,k} + \alpha^n_{j,k-1}}{\triangle h^2} - (x_j^2 + y_k^2)\alpha^n_{j,k}) + \beta^n_{j,k} \tag{21}$$

Por otra parte para la parte real:

$$\alpha^{n+1}_{j,k} = \frac{-\triangle t}{2}(\frac{\beta^n_{j+1,k} - 2\beta^n_{j,k} + \beta^n_{j-1,k} + \beta^n_{j,k+1} - 2\beta^n_{j,k} + \beta^n_{j,k-1}}{\triangle h^2} - (x_j^2 + y_k^2)\beta^n_{j,k}) + \alpha^n_{j,k} \tag{22}$$

Esto es lo que se resuelve por computadora, con el lenguaje Python
Para llevarlo a la computadora, se usa la siguiente notación:
Resolucion temporal

$$\triangle t = Dt$$

Resolción espacial

$$\triangle h = Dh$$

Parte real evaluada en x_j, y_k, t_n

$$\alpha^n_{j,k} = u[x,y] = uC$$

Parte real evaluada en x_j, y_k, t_{n+1}

$$\alpha^{n+1}_{j,k} = nextu[x,y]$$

Parte real evaluada en x_{j+1}, y_k, t_n

$$\alpha^n_{j+1,k} = uR$$

Parte real evaluada en x_{j-1}, y_k, t_n

$$\alpha^n_{j+1,k} = uL$$

Parte imaginaria evaluada en x_j, y_k, t_n

$$\beta^n_{j,k} = v[x,y] = vC$$

Parte imaginaria evaluada en x_j, y_k, t_{n+1}

$$\beta^{n+1}_{j,k} = nextv[x,y]$$

Parte imaginaria evaluada en x_{j+1}, y_k, t_n

$$\alpha^n_{j+1,k} = vR$$

Parte imaginaria evaluada en x_{j-1}, y_k, t_n

$$\alpha^n_{j+1,k} = vL$$

Como se menciono anteriormente, se evalua en cada punto, asi que $x_i = i\triangle x$, en el codigo la variable x, se usa para aquirir un valor entre 0 y 500, asi que el recorrido horizontal es: $x * Dh$

Figura 2: Discretizacion del sistema en el codigo

```
global u, v, nextu, nextv
for x in range(n):
    for y in range(n):
        # state-transition function
        uC, uR, uL, uU, uD = u[x,y], u[(x+1)%n,y], u[(x-1)%n,y], \
        u[x,(y+1)%n], u[x,(y-1)%n]
        vC, vR, vL, vU, vD = v[x,y], v[(x+1)%n,y], v[(x-1)%n,y], \
        v[x,(y+1)%n], v[x,(y-1)%n]
        d_re = (uR + uL + uU + uD - 4 * uC) / (Dh**2)
        d_im = (vR + vL + vU + vD - 4 * vC) / (Dh**2)
        nextu[x,y] = uC - (d_im-(((x*Dh)**2)+((y*Dh)**2))*vC) * Dt/2
        nextv[x,y] = vC+((d_re-((((x*Dh)**2)+((y*Dh)**2))*uC)) * Dt/2)
```

En t=0, se puede iniciar con la solucion analitica, la cual es:

$$\psi(x,y,t) = \sqrt{\frac{1}{\pi 2^{n_x+n_y} n_x! n_y!}} e^{-iE_{n_x,n_y} t-(x^2/2)-(y^2/2)} H \tag{23}$$

con

$$H = H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) = (-1)^{n_x+n_y} e^{x^2+y^2} \frac{d^{n_x}}{dx^{n_x}} e^{-x^2} \frac{d^{n_y}}{dy^{n_y}} e^{-y^2}$$

y

$$E_{n_x,n_y} = n_x + n_y + 1$$

con t=0, esta solucion adquiere la forma:

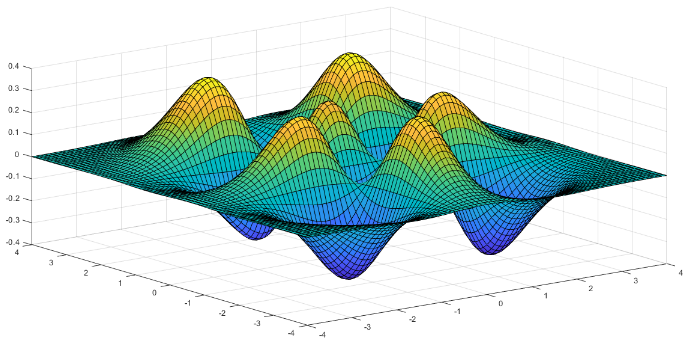
$$\psi(x,y,0) = \sqrt{\frac{1}{\pi 2^{n_x+n_y} n_x! n_y!}} e^{-(x^2/2)-(y^2/2)} H \tag{24}$$

Eligiendo $n_x = 2$ y $n_y = 3$ La función de onda sera la siguiente:

$$\psi(x,y,t) = \sqrt{\frac{1}{368\pi}} e^{-(x^2/2)-(y^2/2)} (4x^2-2)(8y^3-12y) \tag{25}$$

La forma de esta solucion se presenta a continuación:

Figura 3: Funcion de onda en t=0



2.1. Resultados

Resultados de animación: Se muestra en la siguientes imagenes los resultados de la parte real e imaginaria de la función de onda para el oscilador armonico cuantico en 2 dimensiones

Para mayores pasos, se vuelve muy difuso la imagen, producto del propio metodo numerico de aproximación. Sin embargo los resultados son muy satisfactorios

Figura 4: Estado inicial de la función de onda (step =0)

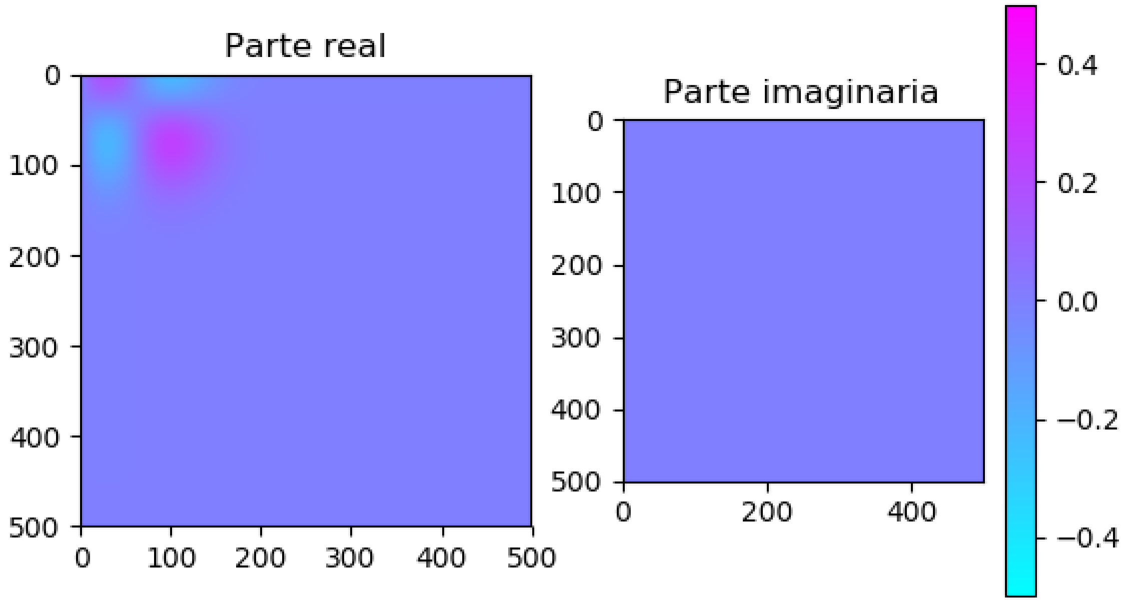


Figura 5: funcion de onda; step 1

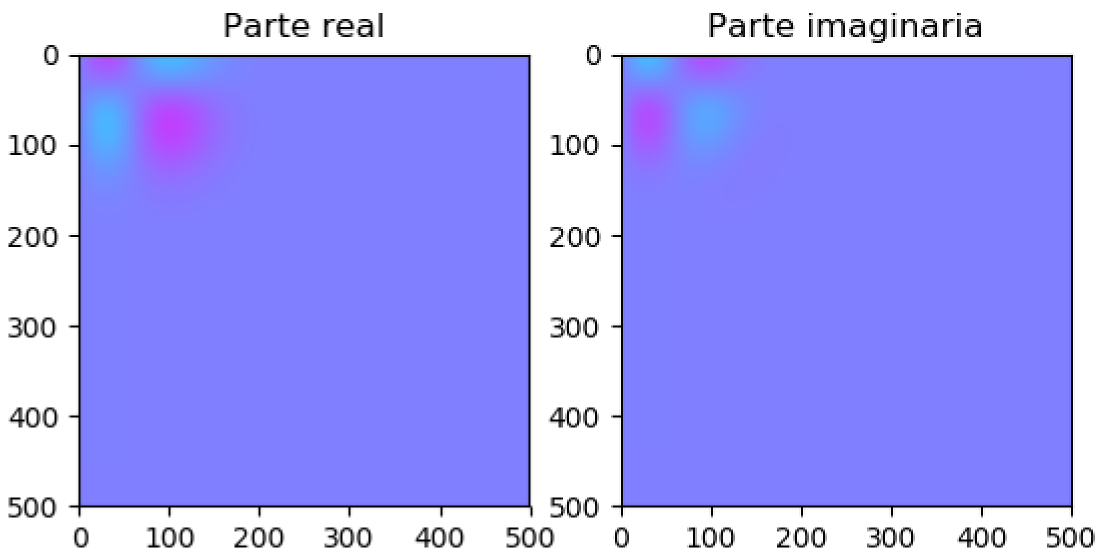


Figura 6: funcion de onda; step 3

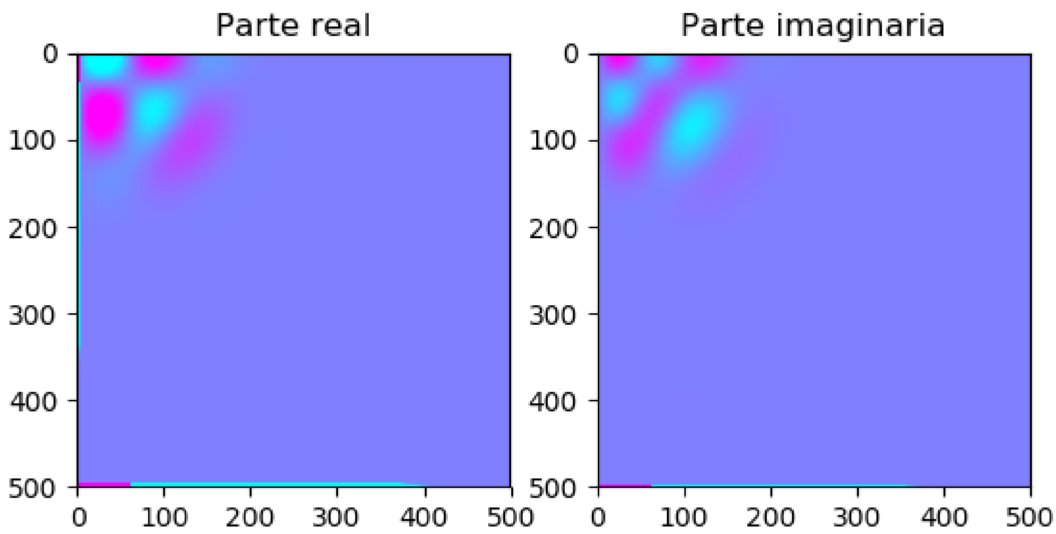


Figura 7: Función de onda; step 5