

Tarea-Práctica 7.

Métodos de solución numérica para ecuaciones lineales y no lineales

Fecha de entrega: **14 de noviembre de 2024**

1. Descomposición LU (valor: 2 puntos).

- (a) A partir del programa para la *Eliminación Gaussiana* que hicimos en clase, escribe un programa que calcule la **descomposición LU** de una matriz. De hecho, el cálculo es el mismo que para la *eliminación gaussiana*, excepto que en cada paso del cálculo debes extraer los elementos apropiados de la matriz y ensamblarlos para formar la matriz diagonal inferior \mathbb{L} (i.e; $\mathbb{L} = \mathbb{L}_0^{-1}\mathbb{L}_1^{-1}\mathbb{L}_2^{-1}\mathbb{L}_3^{-1}\mathbb{L}_4^{-1}\dots$).
- (b) Prueba tu programa calculando la descomposición LU de la matriz del sistema que abordamos en clase:

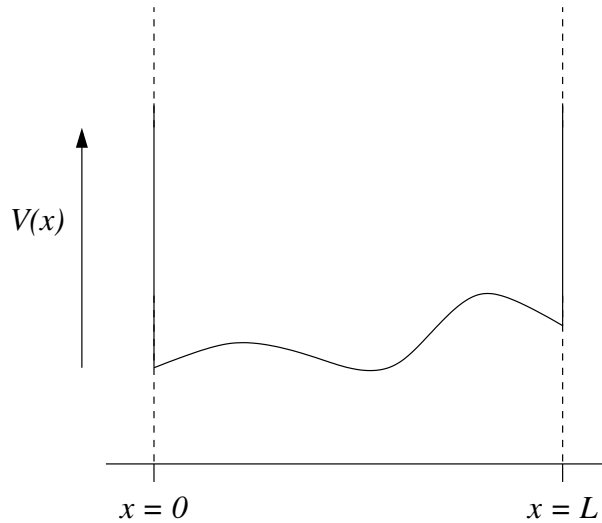
$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 4 & 1 \\ 3 & 4 & -1 & -1 \\ 1 & -4 & 1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \\ 9 \\ 7 \end{pmatrix} \quad (1)$$

- (c) Multiplica las matrices \mathbb{L} y \mathbb{U} que obtengas y verifica que se recupere la matriz original.
- (d) Convierte tu programa en una función y usala para crear un programa completo para resolver el sistema (ec. 1), realizando una doble sustitución inversa (*back-sustitution*).
- (e) Resuelve el mismo sistema usando la función `solve` del paquete `numpy` y verifica que obtengas la misma respuesta, para cualquier otro sistema que propongas.

2. Pozo cuántico asimétrico (valor: 3 puntos).

La mecánica cuántica se puede formular como un problema matricial y resolverse en una computadora usando métodos de álgebra lineal. Supongamos, por ejemplo, que tenemos una partícula de masa M en un pozo cuántico unidimensional de ancho L ,

pero no un pozo cuadrado como los ejemplos que probablemente hayas visto antes. Supongamos en cambio que el potencial $V(x)$ varía de alguna manera dentro del pozo:



No es posible resolver analíticamente este problema de forma general, pero podemos resolverlo en la computadora.

En un estado puro de energía E , la parte espacial de la función de onda obedece a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, donde el operador hamiltoniano \hat{H} está dado por:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Para simplificar, supongamos que las paredes del pozo son infinitamente altas, de modo que la función de onda es cero fuera del pozo, lo que significa que debe ir a cero en $x = 0$ y $x = L$. En ese caso, la función de onda se puede expresar como una serie sinusoidal de Fourier de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \sin \frac{\pi n x}{L},$$

donde ψ_1, ψ_2, \dots son los coeficientes de Fourier.

(a) Observando que, para m, n enteros positivos

$$\int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = \begin{cases} L/2 & \text{si } m = n, \\ 0 & \text{de lo contrario,} \end{cases}$$

demuestra que la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\psi = E\psi$ implica que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \int_0^L \sin \frac{\pi m x}{L} \hat{H} \sin \frac{\pi n x}{L} dx = \frac{1}{2} L E \psi_m.$$

Así, definiendo una matriz \mathbb{H} con elementos:

$$\begin{aligned} H_{mn} &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi mx}{L}\right) \hat{H} \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi mx}{L}\right) \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx, \end{aligned}$$

demuestra que la ecuación de Schrödinger se puede escribir en forma matricial como $\mathbb{H}\psi = E\psi$, donde ψ es el vector (ψ_1, ψ_2, \dots) . Por lo tanto, ψ es un vector propio de la *matriz hamiltoniana* \mathbb{H} con valor propio E . Si podemos calcular los valores propios de esta matriz, entonces conoceremos las energías permitidas de la partícula en el pozo.

- (b) Para el caso $V(x) = ax/L$, evalúa la integral en H_{mn} analíticamente y encuentra una expresión general para el elemento de la matriz H_{mn} . Demuestra que la matriz es real y simétrica. Probablemente te resulte útil saber que

$$\int_0^L x \sin\left(\frac{\pi mx}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx = \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq n \text{ ambos pares o impares,} \\ -\left(\frac{2L}{\pi}\right)^2 \frac{mn}{(m^2 - n^2)^2} & \text{si } m \neq n \text{ uno par y otro impar,} \\ L^2/4 & \text{si } m = n. \end{cases}$$

Escribe un programa para evaluar tu expresión para H_{mn} con m y n arbitrarios; cuando la partícula en el pozo es un electrón, el pozo tiene un ancho 5 \AA y $a = 10 \text{ eV}$. (La masa y la carga de un electrón son $9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$ y $1.6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ respectivamente.)

- (c) En teoría, la matriz \mathbb{H} es infinitamente grande, por lo que no podemos calcular todos sus valores propios. Pero podemos obtener una solución bastante precisa de los primeros recortando la matriz. Modifica el programa que escribiste para el inciso anterior para crear una matriz de 10×10 de los elementos de \mathbb{H} (i.e. $m, n = 10$). Calcula los valores propios de esta matriz usando la función apropiada de la biblioteca `numpy.linalg` y entonces imprime (en unidades de electron-volts) los primeros diez niveles de energía del pozo cuántico, dentro de esta aproximación. Deberías encontrar, por ejemplo, que la energía del estado fundamental del sistema es de alrededor de $5,84 \text{ eV}$. (Hint: ten en cuenta que los índices matriciales en Python comienzan en cero, mientras que los índices en expresiones algebraicas estándar, como las anteriores, comienzan en uno. Ten en cuenta esto en tu programa).

- (d) Modifica tu programa para usar una matriz de 100×100 y calcula nuevamente los primeros diez valores propios de energía. Comparando con los valores que calculaste en el inciso (c), ¿qué concluyes sobre la precisión del cálculo?
- (e) Ahora modifica tu programa, una vez más, para calcular la función de onda $\psi(x)$ para el estado fundamental y los dos primeros estados excitados del pozo. Utiliza tus resultados para hacer una gráfica con tres curvas que muestren la densidad de probabilidad $|\psi(x)|^2$ en función de x para cada uno de estos tres estados. Presta mucha atención a la normalización de la función de onda: debe satisfacer la condición $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$. ¿Esto es cierto para tu función de onda?

3. Método de relajación (valor: 1 punto).

Considere la ecuación $x = 1 - e^{-cx}$, donde c es un parámetro conocido y x desconocido. Esta ecuación surge en una variedad de situaciones, incluida la física de procesos de contacto, modelos matemáticos de epidemias y teoría de grafos aleatorios.

- (a) Escribe un programa para resolver esta ecuación para x usando el método de relajación para $c = 2$. Calcula su solución con una precisión (exactitud) de al menos 10^{-6} .
- (b) Modifica tu programa para calcular la solución para valores de c de 0 a 3 en pasos de 0.01 y haz una gráfica de x en función de c . Deberías ver una transición clara de un régimen en el que $x = 0$ a un régimen en el que x es distinto de cero. Este es otro ejemplo de *transición de fase*. En física, esta transición se conoce como *transición de percolación*; y en epidemiología es lo que se conoce como *umbral epidémico*.

4. Glucólisis (valor: 1 punto).

El proceso bioquímico de la *glucólisis*, i.e. la descomposición de la glucosa en el cuerpo para liberar energía, puede modelarse mediante las siguientes ecuaciones

$$\frac{dx}{dt} = -x + ay + x^2y, \quad \frac{dy}{dt} = b - ay - x^2y.$$

Aquí x e y representan concentraciones de dos sustancias químicas, *ADP* y *F6P*, y a y b son constantes positivas. Una de las características importantes de las ecuaciones no lineales como estas son sus *puntos estacionarios* (o *puntos fijos*), es decir, valores de x e y en los cuales las derivadas de ambas variables se vuelven cero simultáneamente, de modo que dichas variables dejan de cambiar y se vuelven constantes en el tiempo. Al

establecer las derivadas en cero arriba, los puntos estacionarios de nuestras ecuaciones de glucólisis son soluciones de

$$-x + ay + x^2y = 0, \quad b - ay - x^2y = 0.$$

(a) Demuestra analíticamente que la solución de estas ecuaciones es

$$x = b, \quad y = \frac{b}{a + b^2}$$

(b) Demuestra que las ecuaciones se pueden reorganizar de la siguiente manera:

$$x = y(a + x^2), \quad y = \frac{b}{a + x^2}$$

y escribe un programa para resolver estas ecuaciones usando el método de relajación con $a = 1$ y $b = 2$. Deberías encontrar que el método no logra converger a una solución para este caso.

(c) Encuentra una forma diferente de reorganizar las ecuaciones de manera que cuando apliques el método de relajación nuevamente converja a un *punto fijo* y proporciona una solución. Verifica que la solución que obtengas concuerde con la del inciso (a).

5. Constante de desplazamiento de Wien (valor: 2 puntos).

La ley de radiación de Planck nos dice que la intensidad de la radiación por unidad de área y unidad de longitud de onda λ de un cuerpo negro a la temperatura T es

$$I(\lambda) = \frac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1},$$

donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y k_B es la constante de Boltzmann.

(a) Demuestra diferenciando (*derivando*) que la longitud de onda λ a la que la radiación emitida alcanza su mayor intensidad, es la solución de la ecuación

$$5e^{-hc/\lambda k_B T} + \frac{hc}{\lambda k_B T} - 5 = 0.$$

Sustituye $x = hc/\lambda k_B T$ y demuestra que la longitud de onda de la radiación máxima obedece al *desplazamiento de Wien*:

$$\lambda = \frac{b}{T},$$

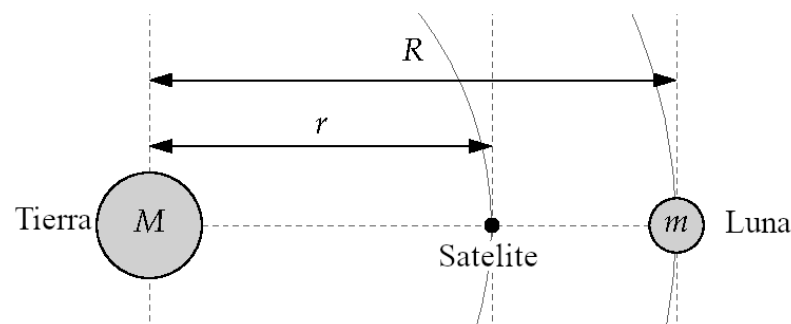
donde la llamada *constante de desplazamiento de Wien* es $b = hc/k_B x$, y x es la solución de la ecuación no lineal

$$5e^{-x} + x - 5 = 0.$$

- (b) Escribe un programa para resolver esta ecuación con una precisión (exactitud) de $\epsilon = 10^{-6}$ usando el método de búsqueda binaria y así, encuentra un valor para la constante de desplazamiento.
- (c) La ley de desplazamiento es la base del método de *pirometría óptica*, un método para medir las temperaturas de los objetos observando el color de la radiación térmica que emiten. El método se utiliza habitualmente para estimar las temperaturas superficiales de cuerpos astronómicos, como el Sol. El pico de longitud de onda en la radiación emitida por el Sol cae en $\lambda = 502 \text{ nm}$. A partir de las ecuaciones anteriores y el valor de la constante de desplazamiento, estima la temperatura de la superficie del Sol.

6. El punto de Lagrange (valor: 1 punto)

Hay un punto mágico entre la Tierra y la Luna, llamado punto de Lagrange L_1 , en el cual un satélite orbitará la Tierra en perfecta sincronía con la Luna, permaneciendo siempre entre las dos. Esto funciona porque la atracción de la Tierra hacia adentro y la atracción de la Luna hacia afuera se combinan para crear exactamente la fuerza centrípeta necesaria para mantener al satélite en esa órbita. Está es la configuración:



- (a) Suponiendo que las órbitas son circulares y que la Tierra es mucho más masiva que la Luna o el satélite, demuestra que la distancia r desde el centro de la Tierra hasta el punto L_1 satisface:

$$\frac{GM}{r^2} - \frac{Gm}{(R-r)^2} = \omega^2 r,$$

donde M y m son las masas de la Tierra y la Luna, G es la constante gravitacional de Newton y ω es la velocidad angular tanto de la Luna como del satélite.

- (b) La ecuación anterior es una ecuación polinómica de quinto orden en r . Estas ecuaciones no se pueden resolver exactamente de forma cerrada, pero es sencillo resolverlas numéricamente. Escribe un programa que utilice el *método de Newton* para resolver la distancia r desde la Tierra hasta el punto L_1 . Calcula una solución con una precisión (exactitud) de al menos cuatro cifras significativas.

Los valores de los distintos parámetros son:

$$G = 6.674 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2},$$

$$M = 5.974 \times 10^{24} \text{ kg},$$

$$m = 7.348 \times 10^{22} \text{ kg},$$

$$R = 3.844 \times 10^8 \text{ m},$$

$$\omega = 2.662 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}.$$

Considera que deberás elegir un valor inicial adecuado para r .