

Numerical implementation of Einstein-Brillouin-Keller quantization for arbitrary potentials^[1]

Alba Hernández Costoya
Markel Larrea Undabeitia

2022ko maiatzaren 8a

Abstract

Artikulu honetan Andrew J. Larkoski, David G. Ellis, and Lorenzo J. Curtis-ren “Numerical implementation of Einstein-Brillouin-Keller quantization for arbitrary potentials”^[1] artikuluaren berrikusketa egiten da. Helburua edozein potentzial zentral (partikula klasiko zein kuantikoekin) numerikoki ebaztea da, eta horretarako Fortran programazio lengoaia erabiliz eta artikulu originala erreferentziazat hartuz, kalkulu horiek berregin eta orokortuko dituen programa diseinatu dugu. Horrela, Einstein-Brillouin-Keller metodoa erabili dugu ebazpenerako.

1 Sarrera eta problema-ren deskribapena

Fisikako graduan irakasten diren fisikako problemak gutxi dira existitzen direnekin alderatuz. Izan ere, soluzio analitikoa baino ez dutenak irakasten dira.

Soluzio analitikoa duten problemak gutxi dira, baina oso garrantzitsuak: osziladore harmonikoa, potentzial osin infinitua, orbita newtondarrak... Problema hauek urriak izan arren, mundu fisikoan gertatzen diren fenomeno gehienak ulertzeko nahikoak dira, hurbilketa baliagarriak eginez behintzat, problema ugari gutxi horietara laburbildu baitaitezke.

Hala ere, problemak pixka bat konplikatzean, adibidez perturbazioak sartzean edota bi gorputz baino gehiagoren arteko elkarrekintza aztertu nahi dugunean, soluzio analitikorik ez dago, eta beraz, gradu mailako ikasgai gehienetatik kanpo gelditzen dira kontzeptu hauek.

Dena den, metodo numerikoak erabil daitezke honelako problema ugari ebazteko. Po-

sizio probabilitate-dentsitateak erabiliz hainbat problema klasiko zein kuantiko azter daitezke.

Modu honetan, bi gorputzen arteko elkarrekintza landu dugu proiektu honetan, edozein potentzial zentral arbitrario aukuratuta (nahiz eta soluzio analitikorik ez izan). Hau garatzeko ez gara Newton-en ekuazioetatik (partikula klasikoentzat) edota Schrödinger-en ekuaziotik (partikula kuantikoentzat) abiatu, bigarren ordenako ekuazio diferentzialetan oinarritzen direnak, baizik eta energia eta momentu angeluarraren kontserbazio-printzipioetan oinarritu gara.

Horrela, energia eta momentu angeluarrak ezagututa, era klasikoan kalkulatzeko dira momentu erradiala, periapsi eta apoapsia, eta posizio probabilitate banaketa; eta Einstein-Brillouin-Keller metodoa (EBK hementik aurrera) erabiliz, kuantizazioa sar daiteke.

EBK kuantizazio metodoa fase espazioko koordenatuen eta momentuen ibilbide integrala ebaztean datza^[2]. Gure kasuan simetria esferikoa baino ez duten sistemak azter-

tuko ditugu, eta kasu horretan honako erlazioa dugu:

$$\left(n_\theta + n_\varphi + \frac{1}{2}\right) \hbar = \left(\ell + \frac{1}{2}\right) \hbar = L$$

EBK metodoak $L^2 = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2$ emaitza ematen du, Schrödinger-en $L^2 = \ell(\ell + 1) \hbar^2$ -ren desberdina dena. Ezberdintasun hau Langer-en zuzenketa da, $r = 0$ singularitatearen inguruko arazoak konpontzeko erabiltzen dena, baina beste ordena batzuetarako arazoak dakartza. Beraz, gure kasuan, $r = 0$ -ko anplitudea txikia denez, ohiko $\ell(\ell + 1)$ adierazpena erabili dugu.

Metodo hau bi gorputzen problema ebazteko erabili dugu. Potentzial zentral baten eraginpean dauden m_1 eta m_2 masako eta r distantziaz banaturiko bi partikula kontsideratu ditugu. Higidura plano bakarrean ematen denez, koordenatu polarrak erabiliz, ondokoak dira sistemaren momentu angeluarra eta energia:

$$L = \mu r^2 \dot{\phi} = \text{kte}$$

$$E = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \mu r^2 \dot{\phi}^2 + U(r) = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + V_r$$

non $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ masa laburbildua den.

Momentu angeluarraren kontserbazioa dela eta, potentzial eraginkorra definitu dezakegu:

$$V_r = \frac{1}{2} \frac{L^2}{\mu r^2} + U(r)$$

Horrela, bi gorputzen problema dimentsio bakarrean V_r potentzialean higitzen den μ partikula bakarraren problemaren baliokidea da.

Hortaz, EBK metodoa erabili dugu bi gorputzen problema potentzial ezberdinekin ebazteko, hurrengo ataletan azaltzen den moduan.

2 Problemaren ebazpena metodo numerikoen bidez

Bi gorputzen problema ebaztea helburu izanik, adibide gisa molekula diatomikoen tzako egokia den potentziala erabili dugu,

erreferentziako artikulua^[1] jarraituz. Modu horretan, Lennard-Jones (6-12) potentziala erabili dugu, nukleo atomikoen elkarrekintza ereduatzeko oso erabilia dena:

$$U_{6-12}(r) = \frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6}$$

non a eta b parametro positiboak diren. Aztertutako kasua Mg_2 molekula da, eta a eta b balioak datu esperimentaletatik lortzen dira.

6-12 potentzialaren oreka-egoera (minimoa, hau da, $\frac{dU_{6-12}}{dr} = 0$ -ren soluzioa) r_0 izanik:

$$r_0^6 = \frac{2a}{b}$$

Beraz, potentzialaren balioa puntu horretan honakoa da:

$$-\epsilon = \frac{b^2}{4a} - \frac{b^2}{2a} = -\frac{b^2}{4a}$$

Hortaz, $a = \epsilon r_0^{12}$ eta $b = 2\epsilon r_0^6$ dira, eta datu esperimentaletatik $\epsilon = 0.0019636$ hartree eta $r_0 = 7.36$ bohr dira. Beraz, $a = 4.96 \cdot 10^7$ eta $b = 624$ lortzen dira.

Oso garrantzitsua da unitate atomikoetan lan egitea (hartree=bohr= $m_e=\hbar=1$); izan ere, metodo numerikoak erabiltzean, 64 bit-ekin ezin dira lortu SI-ko unitateetan konstante unibertsalak zehaztasunez. Adibidez, $\hbar \sim 10^{-34}$ denez SI-ko unitateetan, Fortranek 0-tzat jotzen du.

Hori guztia horrela izanik, Fortran bidez modulu bat eraiki dugu konstanteak dituen [konstanteak.f90], era publikoan definitu ditugunak eta modu horretan edozein momentuan erabili ahal izateko.

Ondoren, potentzial eraginkorra duen beste modulu bat sortu dugu [funtzioak.f90]. Potentzial eraginkorrak 6-12 potentzialaren ekarpena eta momentu angeluarraren ekarpena dituen funtzioa da. Momentu angeluarraren ekarpena zehazteko ℓ aldagai publiko gisa hartu dugu, bere balioa edozein momentuan programan aukeratu dezakeguna.

Potentzial eraginkorra ondokoa da:

$$V_{r6-12} = \frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6} + \frac{\ell(\ell + 1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (1)$$

Beharrezko hirugarren modulua [eragiketak.f90] atal guztiak burutzeko funtzioak dituen modulua da. Potentzial eraginkorra

aparteko modulu batean egin behar izan dugu funtzioek hau argumentu moduan jaso ahal izateko (interface bidez).

Potentzial baten eraginpeko bi partikula ez erlatibistentzako momentu erradiala ondokoa da.

$$p_r = \sqrt{2\mu(E - V_{r6-12})} \quad (2)$$

$(E - V_r) \geq 0$ betetzea ezinbestekoa da p_r definitua egoteko, hortaz, erdibiketa metodoaren bidez $(E - V_r) = 0$ betetzen duten r_1 eta r_2 puntuak lortzen dituen funtzio bat sortu dugu [erroak].

Erroak bilatzeko erabili dugun metodoa erdibiketa da. Metodo honek funtzioak erro bat duen tarte bat hartu eta bitan banatzen du. Bi tarteetako batean egon behar da erroa, eta hori konprobatzeko tartearen mugetako funtzioaren balioak biderkatu egiten dira, eta emaitza negatiboa bada, erroa tarte horretan dago, funtzioa positibotik negatibora pasatu delako edo alderantziz. Ondoren erroa duen tarte berririo bitan banatzen du, eta prozesu berbera errepikatzen du nahi dugun zehaztasuna lortu arte.

Erdibiketa metodoarekin aukeratutako tartean erro bakarra egon behar denez, eta emandako (a_0, b_0) tartean bi erro daudenez (suposatuko dugu beti horrela dela, balio egokiak aukeratzen baitira), eta programa edozein potentzialerako baliagarria izatea nahi dugunez, tarte bi zatitan banatu dugu (a_0, r_0) eta (r_0, b_0) , r_0 potentzialaren minimoa dugun distantzia izanik.

Hori dela eta, minimoaren posizioa kalkulatzeko duen funtzio bat eraiki dugu [minimoV], deribatuaren erroen bilaketa erdibiketa metodoaren bidez egiten duena. Deribatua kalkulatzeko [deribatuV] funtzio bat sortu dugu. Honek hiru puntuko erdiko formula erabiltzen du deribatuaren kalkulurako.

Formula honek funtzioan pauso bat aurreago eta pauso bat atzerago dauden funtzioaren balioak erabiltzen ditu bien arteko malda lortzeko.

Tarte modu horretan banatuz ziurtatu dezakegu azpitarte bakoitzean erro bakarra egongo dela beti.

Behin r_1 eta r_2 puntuak lortuta, p_r funtzio batean adierazi dugu [pr]. Zehaztasun nume-

rikoagatik hartutako punturen bat negatiboa izatekotan 0-ra berdindu dugu, (2) adierazpeneko erro karratuan arazorik ez izateko.

Behin hori eginda, n_r energia maila bakoitzari dagokion energia kalkulatu dugu. E energia ondoko baldintza betetzen duen energia da:

$$\left(n_r + \frac{1}{2}\right) \hbar = \frac{1}{\pi} \int_{r_1}^{r_2} p_r dr \quad (3)$$

$\int_{r_1}^{r_2} p_r dr$ integrala kalkulatzeko duen funtzio bat sortu dugu [integral_pr], trapezioaren erregela konposatua erabiliz.

Metodo honekin integratzeko interesatzen zaigun tarte zati askotan banatzen da, eta tarte txiki horietako bakoitzerako lehenengo mailako Newton-Cotes erregela aplikatzen da funtzioan, hau da, tartearen mugetako funtzioaren balioekin bat az bestekoa egin eta tartearen zabalerarekin biderkatu. Tarte guztietako emaitzak batuz nahi dugun integrala lortzen dugu.

Hori izanik, (3) adierazpenetik erdibiketa metodoaren bidez (erroen bilaketarako) kalkulatu dezakegu emandako n_r bakoitzari dagokion E energia, funtzio baten bidez [energia_bilaketa].

Bi atomoak elkarren artean r distantziara egoteko probabilitatea momentu erradialaren alderantziz proportzionala da, $P(r) \propto \frac{1}{p_r}$. Probabilitate dentsitate hori adierazteko funtzio bat sortu dugu [pr_berminus1].

Horretarako, p_r lortzeko funtziotik abiatu gara, baina arazo konputazionalik ez izateko $p_r = 0$ den puntuetan $P(r) = 0$ finkatu dugu (berez, integratzean puntu bat aldatzeak ez luke emaitzan eraginik izan beharko).

Aukera guztien batura 1 izan behar da probabilitate bat izateagatik, hortaz, normalizaziorako beste funtzio bat sortu dugu [integral_pr_berminus1]. Hau egiteko, 2. ordenako Newton-Cotes erregela ireki konposatua erabili dugu, lehen erabilitakoa ez baita aproposa integral inpropioetarako.

Integratzeko beste metodo honetan, aurrekoan bezala, emandako tarte azpitarte askotan banatzen da gero denak batzeko, baina bakoitzean trapezioaren erregela aplikatu beharrean 2. ordenako Newton-Cotes erregela irekia aplikatzen da, non tartearen erdiko

funtzioaren balioa tartearen zabalerarekin biderkatzen den, infinitura doan funtzioak dakartzan arazoak saihestuz.

Azkenik, probabilitate dentsitatetik abiatuz, r^n -ren itxarondako balioa kalkulatu daiteke, n -ren balio ezberdinetarako, ondoko adierazpenaren bidez:

$$\langle r^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} r^n P(r) dr \quad (4)$$

Integratzeko funtzio bat sortu dugu [nitxarondako_azkarra]. Funtzio honetan ere, 2. ordenako Newton-Cotes erregela ireki konposatua erabiltzen dugu, integral inpropioa delako.

Gehigarri bezala potentzialen funtzioa erabiliz bi partikulen orbitaren simulazioa egin ahal izan dugu ekuazio diferentzialekin. Deribatu analitikorik ez egiteko 4. ordenako Runge-Kutta algoritmoa erabili dugu.

Runge-Kutta algoritmoak ekuazio diferentzial batekin hurrengo pausoa kalkulatzeko balio du, baina aldagai baten hurrengo balioa lortzeko puntu honetako malda hartu beharrean, puntu hau eta hurrengoaren arteko malda bat hartzen du, Taylor-en metodoarekin kalkulatu. Era honetara aldagaiaren hurrengo balioa zehatzagoa da.

Prozesu bakoitzerako erabilitako modulu, funtzio eta programak gure [Github](#)-eko errepositorioan^[3] daude. Bakoitzaren historialean bertsio ezberdinak kontsulta daitezke, eta *README.md* fitxategian erabilera azalpena dago.

3 Lortutako emaitzak

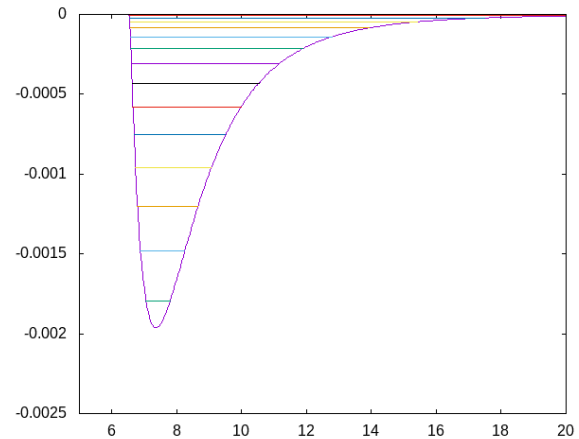
Atal honetan aurretik deskribatutako modulu etako funtzioak erabiltzen dituzten programekin lortutako emaitzak aurkeztuko ditugu.

Aurretik aipatutako prozesuekin n_r bakoitzari dagokion energia lortu dugu, 1. taulan adierazten den moduan. Ikus daitekeenez, lortu ditugun emaitzak erreferentziazko artikuluan^[1] lortzen direnekin bat datoz.

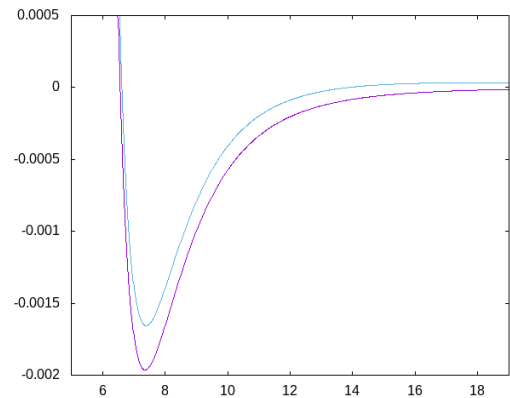
1. irudian bi magnesio atomoen elkarrekintzaren potentzial eraginkorra, eta n_r bakoitzari dagokion energia irudikatu dugu, oinarritzko egoerarako ($\ell = 0$ kasua).

n_r	E (hartree) (gurea)	E (hartree) (^[1])
0	-0.00179229374672	-0.001792
1	-0.00147878021202	-0.001479
2	-0.00120252248443	-0.001202
3	-0.00096160167493	-0.000961
4	-0.00075401670356	-0.000754
5	-0.00057767848305	-0.000578
6	-0.00043040398529	-0.000430
7	-0.00030991037558	-0.000310
8	-0.00021380949007	-0.000214
9	-0.00013960305600	-0.000140
10	-0.00008467921080	-0.000085
11	-0.00004631106458	-0.000046
12	-0.00002165826759	-0.000022
13	-0.00000708698724	

Taula 1: Oinarritzko egoeran ($\ell = 0$) lortzen diren energiaren balioak n_r maila bakoitzeko. [kk3.f90 programarekin].



Irudia 1: $\ell = 0$ kasurako potentzial eraginkorra eta n_r bakoitzari (0-tik 13-ra) dagokion energia. [kk7.f90 programarekin].



Irudia 2: $\ell = 0$ (morez) eta $\ell = 26$ (urdinez) kasuetarako potentzial eraginkorrak. [kk6.f90 programarekin].

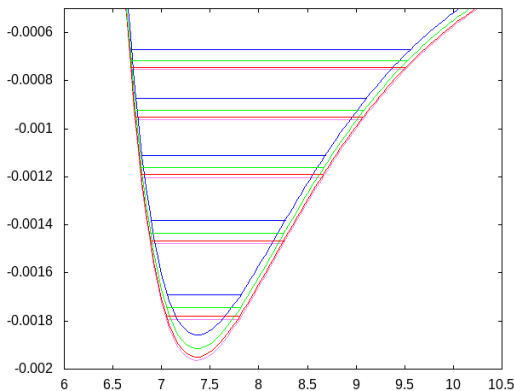
ℓ -k potentzial eraginkorrean duen eragina aztertu dugu, eta ezberdintasuna ikusarazten duen 2. irudian $\ell = 0$ eta $\ell = 26$ kasuak adierazi ditugu.

$\ell = 26$ kasurako n_r -ren araberrako energiak ere lortu ditugu, $\ell = 0$ kasuarekiko nola aldatzen diren ikusteko. 2. taulan lortutako balioak adierazi ditugu, baita erreferentziazko artikulukoak^[1]. Ikus daitekeenez, emaitzak bat datoz.

n_r	E (hartree) (gurea)	E (hartree) (^[1])
0	-0.00149221680795	-0.001492
1	-0.00119334364245	-0.001193
2	-0.00093233751795	-0.000932
3	-0.00070733649931	-0.000707
4	-0.00051640648005	-0.000516
5	-0.00035753958093	-0.000357
6	-0.00022865602252	-0.000229
7	-0.00012761436943	-0.000128
8	-0.00005224443305	-0.000052
9	-0.00000045754942	

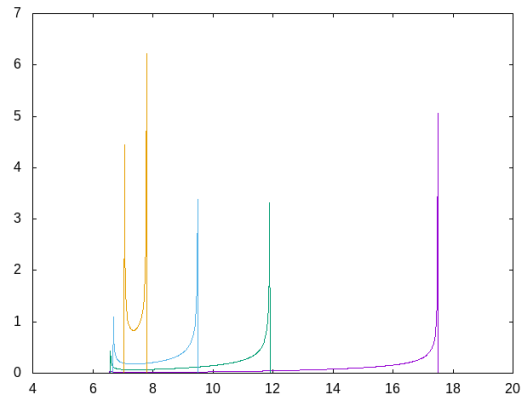
Taula 2: $\ell = 26$ egoerarako lortzen diren energiaren balioak n_r maila bakoitzeko. [kk3.f90 programarekin].

ℓ -k potentzial eraginkorrean eta energia mailetan duen eragina ikusteko 3. irudia prestatu dugu.



Irudia 3: $\ell = 0$ (larrosaz), $\ell = 5$ (gorriz), $\ell = 10$ (berdez) eta $\ell = 15$ (urdinez) kasuetako potentzial eraginkorrak eta energiak $n_r = 0, 1, 2, 3, 4$ mailatan. [kk8.f90 programarekin].

Bi atomoak elkarren artean r distantziara egoteko normalizatutako probabilitate dentsitatea 4. irudian adierazi dugu n_r -ren hainbat baliotarako.

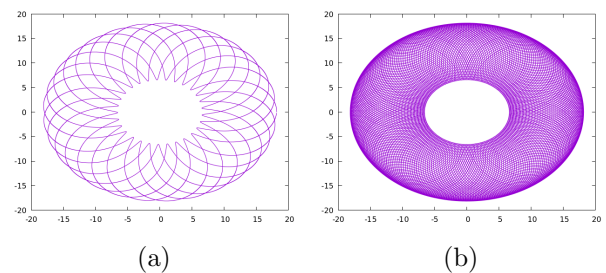


Irudia 4: $n_r = 0$ (horiz), $n_r = 4$ (urdinez), $n_r = 8$ (berdez) eta $n_r = 12$ (morez) kasuetarako atomoen arteko distantziaren probabilitate dentsitate normalizatuak. [kk4.f90 programarekin].

Probabilitate dentsitateetik abiatuta, r^n -ren itxarondako balioa kalkulatu dugu (4) adierazpena erabiliz, n -ren balio ezberdinetarako. Horrela, 3. taulan lortutako balioak bildu ditugu, baita erreferentziazko artikuluan lortzen diren balioak, eta datu esperimental tabulatuak. Ikus daitekeenez, erreferentziako artikuluko^[1] emaitzekin bateragarriak diren balioak lortu ditugu.

n_r	n	$\langle r^n \rangle$ (gurea)	$\langle r^n \rangle$ (^[1])	$\langle r^n \rangle$ (tab)
10	-1	0.08564574591958436	0.0857166	0.0981639
10	1	12.073297522333311	12.082	10.6666
10	2	149.76341170233084	149.861	117.755
11	-1	0.07793145141957988	0.0778734	0.0932373
11	1	13.361568937244284	13.3504	11.2706
11	2	183.4489169382909	183.286	131.637
12	-1	0.0688576709451566	0.0688818	0.0887466
12	1	15.143891469699039	15.1487	11.9394
12	2	236.22069268092537	236.293	148.301

Taula 3: Distantziaren berretura ezberdinen itxarondako balioak n_r -ren balio altuetarako, guk lortutakoak, artikulukoak eta tabulatuak. [kk5.f90 programarekin]



Irudia 5: Bi magnesio atomoen orbitaren simulazioa $n_r = 12$ eta $\ell = 15$ kasuan, denbora tarte txikian eta handian. [kk10.f90 eta kk10mod.f90 programekin].

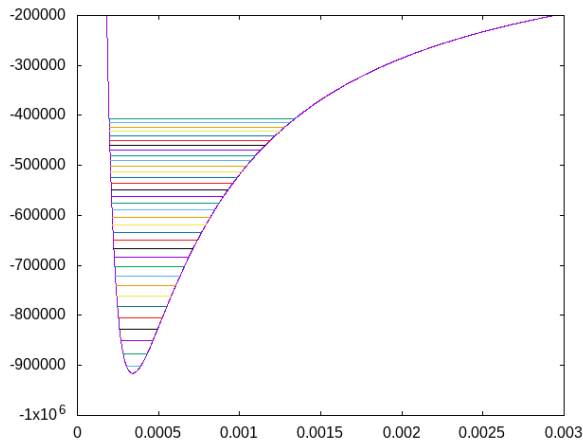
Gehigarri bezala 6-12 potentzial honekin eta Runge-Kutta algoritmoarekin bi magnesio atomoen orbita simulatu dugu (5. irudia).

Ikusi dezakegu simulatutako orbita honek periapsi eta apoapsia bateragarriak direla guk lehen kalkulaturako balioekin, eta 5. irudiko puntu dentsitatea 4. irudiko dentsitate probabilitateekin bat datorrela antze-man dezakegu.

4 Hedapena beste kasu batzuetara

Aurreko kasua aztertzeke erabilitako modulu eta programak edozein potentzialekin erabili ahal izateko moduan prestatu ditugu. Hori dela eta, ezagutzen ditugun beste potentzial batzuetara aplikatzea erabaki dugu, sortutako programaren hedapenak eta baliagarritasuna aztertzeke.

4.1 Elkarrekintza nuklearraren kasu gehiago



Irudia 6: $\ell = 0$ kasurako potentzial eraginkorra eta n_r bakoitzari (0-tik 33-ra) dagokion energia. [kk7v12.f90 programarekin]

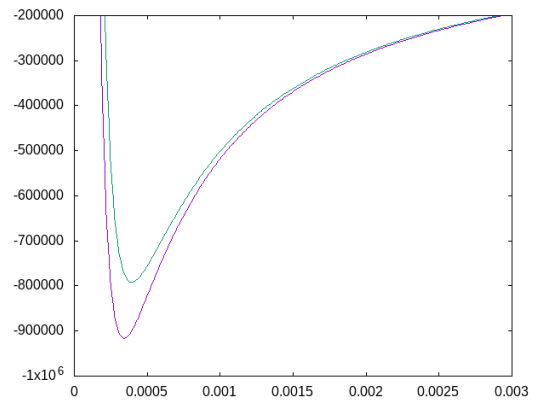
Aurrekoan nukleoaren arteko elkarrekintza ereduatzeko 6-12 potentziala erabili dugu. Elkarrekintza honetarako beste antzeko potentzial bat ere erabili dezakegu, 1-2 potentziala^[4]:

$$U_{1-2}(r) = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r}$$

$$V_{r1-2} = \frac{a}{r^2} - \frac{b}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (5)$$

Aurreko kasuan moduan Mg_2 molekula erabilita a eta b parametroen balioak ezagunak dira. Potentzial hau erabiliz, aurretik landutako kalkuluetako batzuk errepikatu ditugu. Horien artean, potentziala eta lehenengo energia mailak 6. irudian adierazi ditugu.

Horrez gain, ℓ -ren balio ezberdinetarako potentzialak konparatu ditugu 7. irudian ikus daitekeen moduan.



Irudia 7: $\ell = 0$ (morez) eta $\ell = 26$ (berdez) kasuetarako potentzial eraginkorrak. [kk6v12.f90 programarekin]

Ikus daitekeenez, elkarrekintza nuklearreko bi potentzialekin (6-12 eta 1-2) emaitza kualitatibo berberak lortzen ditugu, energia mailen eta potentzialaren distantziarekiko jo-kaerari dagokionez.

4.2 Kepler-Coulomb potentziala

Objektu astronomikoen higidura potentzial grabitatorioaren menpekoea da guztiz. Potentzial hau fisikan gehien erabiltzen denetarikoa da. Hori dela eta, gure programak emaitza egokiak ematen dituen egiaztatu dugu.

M gorputz baten (astunaren) masa, m beste gorputzaren (arinaren) masa, G grabitazio unibertsalaren konstantea eta r bi gorputzen arteko distantzia izanik, potentzial grabitatorioa ondokoa da:

$$U_g = -\frac{GMm}{r}$$

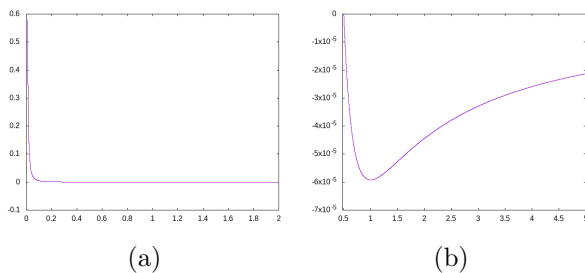
Dena den, aurreko kasuan bezala, potentzial eraginkorra erabiliko dugu, momentu angeluarraren ekarpena potentzialaren barnean sartuz, momentu angeluarra kontserbatzen baita. Horrela izanik, bi gorputzen problemari dagozkion aldaketak eginez, potentzial grabitatorio eraginkorra ondokoa da:

$$V_{rg} = -\frac{GMm}{r} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

L orbitako momentu angeluarra izanik.

Era honetako problemak ebazteko unitate sistema astronomikoa erabiltzea egokiena da, metodo numerikoek ekar dezaketen zenbaki handiegi eta txikiegi zehaztasun edo hein ezagatik. Horrela, masak eguzki masatan (M_\odot), distantziak unitate astronomikotan (UA) eta periodoak urtetan, neurtu ditugu. Era horretan $G = 4\pi^2$ izango dugu.

Kasu hau lurra eguzkiaren inguruan duen orbitarako aplikatu dugu. Horrela M eguzkiaren masa ($M = 1 M_\odot$), m lurraren masa ($m \simeq 3 \cdot 10^{-6} M_\odot$), lurraren eta eguzkiaren arteko distantzia $d = 1$ UA eta lurraren eguzkiaren inguruko orbita periodoa $T = 1$ urte izango dira. Hori kontuan izanik, lurraren momentu angeluarra $L = dm v$ da, eta orbita zirkularra dela kontsideratuz (hurbilketa egokia da eszentritzitatea oso txikia delako), $v = \frac{2\pi d}{T}$ denez, $L = d^2 m \frac{2\pi}{T}$ izango dugu.

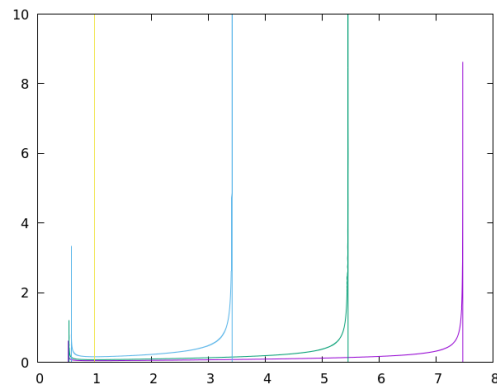


Irudia 8: Potentzial grabitatorio eraginkorra eguzkiaren eta lurraren arteko distantziaren (r) funtzioan. [kk6g.f90 programarekin].

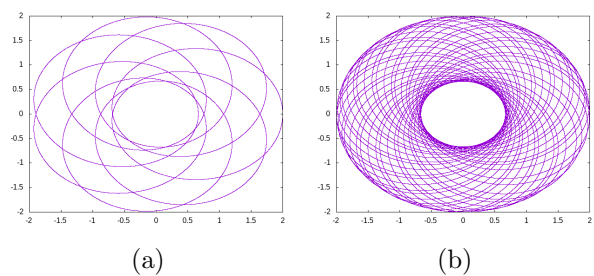
8. irudian ikus dezakegu potentzial grabitatorio eraginkorraren adierazpena lurraren eguzkiaren inguruko orbitarako. 8a. irudian argi dagoenez, $r \rightarrow 0 \Rightarrow V_{rg} \rightarrow \infty$ eta $r \rightarrow \infty \Rightarrow V_{rg} \rightarrow 0^-$, izan behar den moduan. Bestalde, 8b. irudian potentzialaren minimoa dagoen zatia baino ez dugu irudikatu. Potentzialaren minimoa lortzeko lehendik sortutako minimoa kalkulatzeko

funtzioa erabili dugu, eta lortutako balio numerikoa $r_0 = 1.000163269042969$ UA izan da. Ikus daitekeenez, 8b. irudian ikusten denarekin bat dator, baita espero beharko genukeen balioarekin ere. Izan ere, potentziala minimizatzen den puntua orbitaren oreka-puntu egonkorra da, eta horregatik planetak puntu horretan egoten dira. Lurraren eta eguzkiaren arteko distantzia 1 UA dela dakigu, gure emaitzarekin bat datorrena.

Horrez gain, bi gorputzen arteko distantziaren probabilitate dentsitate normalizatua irudikatu dugu, 9. irudian ikus daitekeen moduan, orbita zirkularren energiarentzat ($E_{\text{zirk}} = -\frac{GMm}{2d}$) eta hori baino handiagoak diren energiarentzat. Espero beharko genituzkeen emaitzak lortu ditugu. Ikus daitekeenez, orbita zirkularrerako dirac-en delta bat lortzen dugu 1 UA distantzian zentratuta. Gainontzeko balioentzat, orbita eliptikoak ditugunez, perihelio eta afelio inguruetan probabilitate dentsitatea handitzen da.



Irudia 9: $E = E_{\text{zirk}}$ (horiz), $E = \frac{E_{\text{zirk}}}{2}$ (urdinez), $E = \frac{E_{\text{zirk}}}{3}$ (berdez) eta $E = \frac{E_{\text{zirk}}}{4}$ (morez) kasuetarako lurraren eta eguzkiaren arteko distantziaren probabilitate dentsitate normalizatuak. [kk4g.f90 programarekin].



Irudia 10: Eguzkiaren inguruko Lurraren masako planeta baten orbitaren simulazioa, denbora tarte txiki eta handian [kk10.f90 eta kk10mod.f90 programekin].

6-12 potentzialaren kasuan egin dugun bezala, potentzial honekin eta Runge-Kutta algoritmoarekin orbita simulatu dugu, 10. irudian ikus daitekeen moduan.

4.3 Potentzial harmonikoa

Fisikan oso erabilgarria da potentzial harmonikoa; izan ere, kasu askotan hurbilpen gisa erabiltzen da partikulak oreka posizioaren inguruan dabiltzanean. Potentziala ondokoa da:

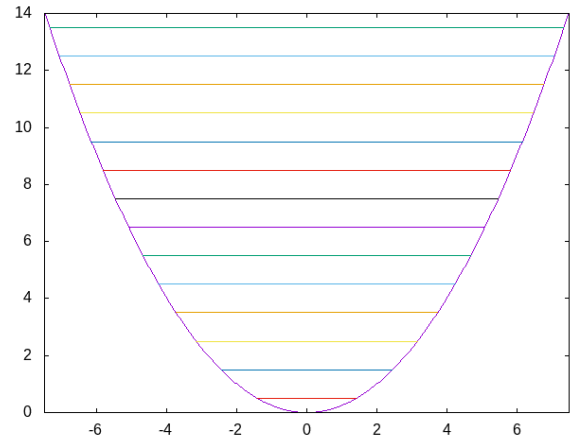
$$U_{\text{harm}} = \frac{1}{2}kr^2$$

non $k = \mu\omega^2$ den.

Adibide gisa bi elektroi (edo positroi) potentzial harmonikoan dauden kasua aztertu dugu. Elektroiaren masa unitate atomikoetan $m_e = 1$ denez, $k = \frac{1}{2}$ aukeratu $\omega = 1$ balioko maiztasuna lortzen dugu. Schrödinger-en ebazpen analitikoa erabiliz, $E_n = (n_r + \frac{1}{2})\hbar\omega$ adierazpen teorikoa lortzen da energiarentzat. 4. taulan EBK metodoaren bidez programarekin lortutako energiaren balioak adierazi ditugu, eta balio teorikoekin (Schrödinger-en ebazpenekoekin) alderatu ditugu. Horrez gain, lehen 14 energia mailak eta potentziala 11. irudian adierazi ditugu. Ikus daitekeenez, espero genituen emaitzak lortu ditugu.

n_r	E_{gurea} (hartree)	E_{teoriko} (hartree)
0	0.5000005293634575	0.5
1	1.5000015881102136	1.5
2	2.5000026468552354	2.5
3	3.5000037056038344	3.5
4	4.5000047643542755	4.5
5	5.500005823112308	5.5
6	6.500006881821876	6.5
7	7.5000079405718845	7.5
8	8.500008999305955	8.5
9	9.50001005812145	9.5
10	10.500011116797843	10.5
11	11.50001217541453	11.5
12	12.500013234315748	12.5
13	13.500014293080284	13.5

Taula 4: Potentzial harmonikoarekin lortutako lehenengo 14 mailetakako energiak: konputazionalki lortutakoa eta balio teorikoa. [kk3h.f90 programarekin].



Irudia 11: n_r bakoitzari (0-tik 13ra) dagokion energia potentzial harmonikoan dauden m_e masako bi partikularentzat. [kk7h.f90 programarekin].

5 Proiektuan zehar izandako arazoak eta konponbideak

Proiektuaren garapenean zehar hainbat arazo izan ditugu programak egiterakoan, eta horiei konponbidea topatu behar izan diegu.

Lehenik, edozein modulu eta programatan beste modulu bateko konstante publikoak erabili ahal izateko g95 erabili behar izan dugu, F estandarra beharrean. Izan ere, F estandarrak funtzio eta subrutina puruak baino ez ditu onartzen.

Bestalde, p_r momentu erradiala periapsi eta apoapsiaren artean definituta dago, $(E - V_r) \geq 0$ betetzen duten r -ren puntuetan hain zuzen ere. r_1 eta r_2 balio horiek erroen bilaketa batekin lortu ditugu. Zehaztasun numerikoagatik gerta daiteke kasu batzuetan aurreko baldintza betetzen ez duten puntuak lortzea, eta nahiz eta 0-tik hurbil egon balio negatiboak lortzea. Hori dela eta, p_r -ren adierazpena (2) konplexua izan ez dadin, balio horiek 0-ra berdindu ditugu *if* kontrol egitura baten bidez. Hala ere, horrek probabilitate banaketa egiterakoan arazoak ekarri ditu; izan ere, $P(r) \propto \frac{1}{p_r}$ denez, puntu horietan balio infinituak lortzen genituen. Hori dela eta, beste funtzio bat egin genuen [pr.berminus1], puntu berezi horiek antzeko eran kudeatuz.

Horrez gain, potentzial grabitatorioaren funtzioa sortzean arazoa izan genuen. Funtzioak ez zuen errorerik ematen eta nahi genuena egiten zuen. Dena den, potentzial hori erabiltzen zuten beste funtzioek ez zuten funtzionatzen, hau da, ematen zituzten emaitzek ez zeukaten zentzurik. Hala ere, funtzio horietan ez zegoen arazoa beste potentzial batzuekin funtzionatzen zutelako. Akatsa non zegoen bilatu nahian, potentzialaren funtzioa kopiatzea helburu zuen beste funtzio bat sortu genuen, eta honek ere, beste potentzial batzuekin funtzionatzen zuen baina grabitatorioarekin ez. Hori ikusita arazoa potentzialaren funtzioan egon behar zela ondorioztatu genuen, baina horrek zentzurik ez zuela uste genuen, potentzialaren funtzioak arazo barik funtzionatzen zuelako. Azkenean, akatsa aurkitu genuen: puntu batean vrg idatzi beharrean vg idatzi genuen. Hori zuzendu ostean denak ondo funtzionatu zuen, baina oso bitxia iruditu zitzaigun akatsa egonik potentzialaren funtzioak ondo funtzionatzea. Gainera, horrek asko zaildu zuen errorea aurkitzea.

Bestetik, funtzio batean *do* ziklo batetik irten nahian, zikloa beharrean programa eten egiten genuen. Arazoa *exit* beharrean *stop* idatzi izana zen.

Horretaz aparte, erroen bilaketa bat egi-terakoan, emaitza lortzeko arazoak izan genituen hasieran, iterazio bakarra egiten zuelako, baina arazoa $\text{abs}(b-a)$ balio absolutua jartzea ahaztu zitzaigula zen.

Energiaren bilaketari dagokionez, potentzia- lez aldatzean arazoak izan genituen. Izan ere, energia bilatzeko tartea zehaztean potentzialaren minimoaren baliotik 0-ra bilatzea eskatu genion funtzioari, baina potentzial harmonikoarekin hori ez da baliagarria, energia guztiak positiboak baitira. Hori konpontzeko, potentzial harmonikoarekin erabiltzeko beste energiaren bilaketarako funtzio bat egin genuen [energia_bilaketa2], aurrekoaren berdina baina mugak aldatuz. Proposamen gisa bi funtzioak bakarrean bateratzen saiatu beharko ginateke hurrengo baterako.

Beste alde batetik, emaitza egokiak lortzea kostatu zitzaigun, kualitatiboki joera egokia zen, baina numerikoki emaitza okerrak. Ara-

zoa magnesioaren masa gaizki hartuta genduela zen, eta kalkuluak hartu behar genuen masaren erdiarekin egin genituen, emaitzek ez zetozen bat erreferentziazko artikulukoekin. Masaren balioa konpontzean emaitza egokiak lortu genituen.

Integratzeari dagokionez ere, arazo dezentte izan genituen. Hasteko ezin izan genituen eskura geneuzkan integratzeko moduluak erabili, gure funtzioek zeuzkaten argumentu kopuruagatik. Gainera, r^n -ren itxarondako balioaren kalkuluan emaitzak ez zetozen bat erreferentziazko artikulukoekin. Dena den, kualitatiboki 4. irudian ikusten diren banaketekin bateragarriak ziruditen, eta ezberdintasunen jatorria probabilitate dentsitatean zegoela pentsatu genuen. Hau da, r_1 eta r_2 puntuen inguruan egoteko probabilitatea infiniturantz jotzen du; beraz, probabilitate dentsitatea 1-erantz konbergentea izan arren, ia ezinezkoa da puntu horien inguruan emaitza berberak lortzea, nahiz eta pausua oso txikia izan balioak oso handiak direlako. Hala ere, geroago, arazoa hori ez zela ikusi genuen, nahi gabe integral inpropio bat irekia ez zen erregela konposatu batekin kalkulatzeko genbiltzala baizik. Hori konpontzean emaitza egokiak lortu genituen.

Azkenik, programa batzuk ondo funtzionatzen bazuten ere, asko tardatzen zuten konputatzen, eta optimizatu egin ditugu. Probabilitate dentsitate distribuzioak irudikatzean, adibidez, egin genuen programak puntu bakoitzerako kalkulatzeko emandako n_r -ren balioari dagokion energia, puntu guztietarako berdina bazen ere. Hau optimizatze-ko energia hasieran kalkulatu eta puntu denek balio hori har zezatela egin genuen. Antzerako zerbait gertatu zitzaigun itxarondako balioekin, probabilitate banaketaren normalizazio faktorea integratze-ko tarte bakoitzean kalkulatzeko baitzuen. Beste optimizazioaren antzera, hau normalizazioa amaierarako utzita konpondu genuen.

6 Ondorioak

Proiektu honetan zehar emaitza egokiak lortu ditugula esan dezakegu. Izan ere, alde batetik, 6-12 potentzialarekin lan egin dugu-

nean, erreferentziazko artikuluko^[1] emaitza numeriko eta grafiko berberak (edo gutxienez oso antzekoak eta bateragarriak) lortu baititugu.

Bestalde, elkarrekintza nuklearra ereduztatzeke erabiltzen den beste potentzial batekin (1-2 potentziala) emaitza kualitatibo berberak lortzen direla ikusi dugu.

Horrez gain, ezagunak diren potentziale-tara hedatu dugunean (Kepler-Coulomb eta harmonikoa), espero genituen emaitza analitikoetara heldu gara, izan behar den moduan.

Hori dela eta, EBK metodoak bi gorputzen problemaren ebazpenerako era egokian funtzionatzen duela ondoriozta dezakegu.

Oro har proiektu interesgarria izan dela esan dezakegu, beste ikasgai askotan (Mekanika eta Uhinak, Elektromagnetismoa, Fisika Kuantikoa...) landutako kontzeptuak bateratzen dituelako eta bertako problema ugari ebazteko metodo berri eta erabilgarriak eza-gutu ditugulako.

Horrela izanik, analitikoki ebazpenik ez daukaten potentzial zentralen problemak ebazteko tresna oso baliagarria erabiltzen ikasi dugu, hemendik aurrerako ikasketetan eta ikerkuntzetan lagungarria izan dakigukeena.

7 Hobekuntza posibleak

Bi taldekide baino ez garenez, hiru behar-rean, denbora aldetik justuago ibili gara, ezin izan dugu lana horrenbeste banatu, eta agian ezin izan dugu nahi beste sakondu gai batzuetan. Beraz, sakontze handiagoa egiteko proposamen batzuk ditugu.

Alde batetik, interesgarria izango litzateke ebazpen analitikoa duten kasuak hobeto aztertzea, EBK metodoarekin emaitza zuzenetara zein ordenatan heltzen garen ikusteko. Horrela izanik, potentzial harmonikoan gehiago sakontzea gustatuko litzaiguke, baita potentzial osin infinituan gertatzen dena planteatzea ere.

Bestalde, $U \propto \frac{1}{r}$ erako potentzialarekin gehiago sakontzea interesgarria litzateke, eguzkiaren eta lurraren arteko elkarrekintzaz gain, problema astronomikoa beste kasu

batzuetan aztertzea: lurra eta ilargia, edota masa antzekoagoa duten gorputzen arteko elkarrekintza, hau da, izarren sistema binarioak adibidez. Horrez gain, potentzial elektrostatikoa ere era honetakoa da, eta interesgarria izango litzateke kasu hori ere aztertzea.

Azkenik, interesgarria izango litzateke 6-12 potentzialarekin sakonki egindako kalkulu guztiak beste potentzial ugaritara hedatzea, batez ere ebazpen analitikoa ez duten potentziale-tara. Azken finean, horiek izango baitira metodo numerikoak beharrezkoak dituztenak, ez baitago ebazpena lortzeko beste modurik.

8 Erreferentziak

- [1] Andrew J. Larkoski, David G. Ellis, and Lorenzo J. Curtis. Numerical implementation of Einstein-Brillouin-Keller quantization for arbitrary potentials. *American Journal of Physics*, 74(7):572–577, 2006. <https://doi.org/10.1119/1.2192788>.
- [2] Lorenzo J. Curtis and David G. Ellis. Use of the Einstein-Brillouin-Keller action quantization. *American Journal of Physics*, 72(12):1521–1523, 2004. <https://doi.org/10.1119/1.1768554>.
- [3] <https://github.com/Markel103/Einstein-Brillouin-Keller>.
- [4] Roberto Pittau. Potenciales centrales. <http://www.ugr.es/~pittau/MECANICA/t2.pdf>.
- [5] A. Douglas Stone. Einstein's unknown insight and the problem of quantizing chaos. *Physics Today*, 58(8):37–43, 2005. <https://doi.org/10.1063/1.2062917>.