

# Métodos Computacionales 2: Taller 4

## Ecuaciones diferenciales parciales

Por Santiago Henao Castellanos

Este taller se centra en aplicaciones de ecuaciones diferenciales parciales.

El taller debe ser presentado varios archivos `.py`, uno por punto (`Punto_1.py`, `Punto_2.py`, etc) que debe correr sin errores invocando simplemente `python Punto_1.py`.

El código no debe tener ningún `plt.show()`, y tampoco debe interrumpir su ejecución o esperar ningún input. Todos los resultados que se pidan guardar (gráficas, videos, etc) deben estar en la misma carpeta del código, y deben ser los mismos que produce el código al ser ejecutado. Si se especifica que debe definir una función, debe usar el nombre asignado. Se penalizará con nota si no se cumplen estas especificaciones.

Si el código alza una excepción, se calificará hasta ese punto.

Considere muy bien el tamaño de la grilla y el paso temporal para su simulación. Si su solución diverge por incumplir las condiciones de Courant-Friedrichs-Lewy, el punto se calificará como malo.

Se permite usar el paquete `py-pde`. Tengan en cuenta que ese paquete usa el método de líneas, no el método de diferencias finitas dado en clase.

*In the beginning, all you want are results.  
In the end, all you will want is control.*

Cada numeral vale 2.2 puntos, se califica sobre 5.5.

El primer punto tiene un paso a paso, pero haganse preguntas sobre el fenómeno físico y su dependencia sobre las condiciones iniciales y las constantes usadas. Y respóndase ustedes mismos esas preguntas variando la simulación.

Los puntos 2 y 3 no tienen un paso a paso, y van a evaluar la capacidad de su grupo de hacer preguntas de investigación sobre el fenómeno presentado. Se presentan ejemplos de preguntas, pero ustedes pueden estudiar lo que quieran del sistema. Se evaluará calidad, no cantidad.

Para exportar videos debería tener instalado `ffmpeg`. Por cada GIF exportado se baja 0.2pt.

# 1 Evolución temporal en sistemas cuánticos

En la tarea pasada estudiamos las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger. La ecuación dinámica es la siguiente:

$$\mathbb{i}\hbar\partial_t\psi(t,x) = \left(V(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\right)\psi(t,x)$$

o, en forma adimensional

$$\partial_t\psi(t,x) = \mathbb{i}[\alpha\partial_x^2 - V(x)]\psi(t,x)$$

Para este punto queremos estudiar cómo se comporta un paquete de onda cuando lo ponemos a evolucionar en diferentes potenciales.

Existe un [simulador en línea creado por el todopoderoso Paul Falstad](#), para que jueguen un poco con el fenómeno antes de ponerse a simular.<sup>1</sup>

Simularemos con  $\alpha = 0.1$  hasta  $t = 150$ , en  $x \in [-20, 20]$ . Se remociendan condiciones de frontera de Neumann  $\partial_x\psi = 0$  en los extremos, pero con Dirichlet se supone que también estaría bien.

## 1.a Oscilador armónico

$$V(x) = -\frac{x^2}{50}$$

El potencial más usado, el más bonito, y hasta soluble analíticamente.

Empezaremos con un paquete Gaussiano en  $t = 20$ , con algún ancho deseado, y con una parte compleja que básicamente se encargará de la velocidad de la onda

$$\psi(0,x) = \overbrace{e^{-2(x-10)^2}}^{\text{posición inicial}} \times \underbrace{e^{-\mathbb{i}2x}}_{\text{velocidad inicial}}$$

Puede cambiar el ancho, la velocidad, o la dirección de la velocidad si lo desea. Si grafica la parte real e imaginaria de estas condiciones iniciales, descubrirá que es una onda tipo De Broglie.

Anime la probabilidad (norma cuadrada) del paquete de onda mientras que evoluciona en este pozo de potencial. `1.a.mp4`

También podemos medir la posición y la incertidumbre del paquete de ondas en cada momento del tiempo:

$$\mu(t) = \langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x \, \psi(t,x)^\dagger \psi(t,x) \, dx$$

$$\sigma(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \mu)^2 \, \psi(t,x)^\dagger \psi(t,x) \, dx$$

Donde  $\dagger$  es el complejo conjugado. Grafique esto como función del tiempo `1.a.pdf`: grafique  $\mu$  como una curva sólida, y grafique las “barras de error”  $\mu \pm \sigma$  como un `fill_between` transparente.

Encontrará un ejemplo de la animación en bloque neón. Puse la fase de cada punto como el color, porque es un fenómeno interesante, pero ustedes no tienen que hacerlo. Note que en los últimos frames del video empieza a degradarse la simulación. Tenga cuidado de que esto no les pase.

## 1.b Oscilador cuártico

Lo mismo del punto anterior! pero con el potencial cuártico (no armónico, anarmónico)

$$V(x) = \left(\frac{x}{5}\right)^4$$

simulando hasta  $t = 50$ .

Observe las diferencias con el punto anterior. Guarde `1.b.mp4`

## 1.c El potencial del sombrero

Una combinación interesante del potencial armónico y del cuártico es el llamado potencial sombrero:

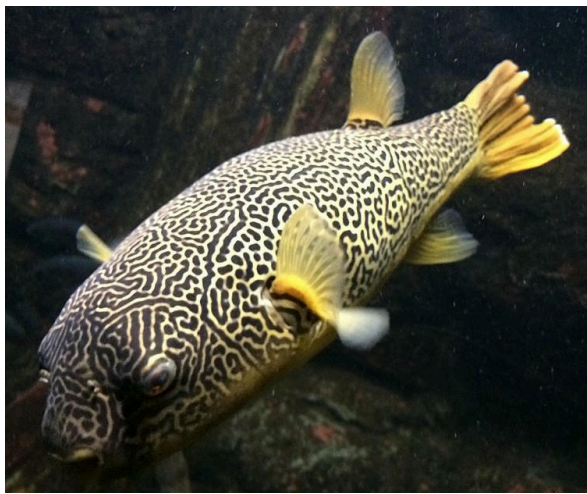
$$V(x) = \frac{1}{50} \left( \frac{x^4}{100} - x^2 \right)$$

Un potencial similar se usa en teoría cuántica de campos para el mecanismo de Higgs y el sector electrodébil, y es famoso porque parece un sombrero mexicano.

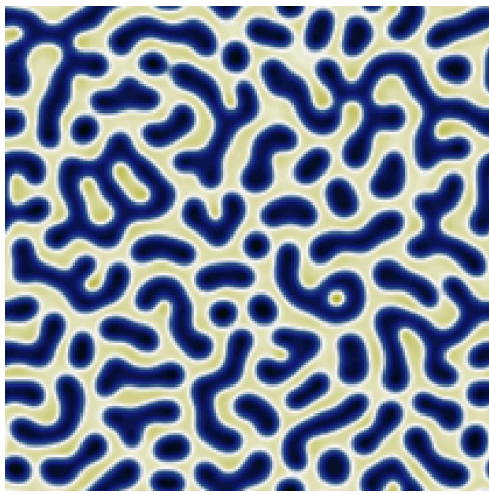
Repita, de nuevo, la simulación con este potencial, exporte video y gráfica, y note las diferencias.

<sup>1</sup>Denle una mirada a los otros simuladores de Falstad. Valen la pena.

## 2 Del caos al orden mediante coordinación multicelular



Pez globo Mbuna



Simulación

Hacia el final de su corta vida, Alan Turing se interesó en el problema de modelar cómo las pieles de los animales formaban patrones; por ejemplo, las rayas en el pelaje de los mamíferos (tigres, vacas, gatos, perros), o las escamas de algunos peces. Los llamados patrones de Turing son incluso aplicable a las columnas de convección en hidrodinámica.

Pueden leer el artículo en bloque neón, pero de momento, el modelo es de dos campos en 2D:

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \alpha \partial_x^2 u + F(u, v) \\ \partial_t v &= \beta \partial_x^2 v + G(u, v)\end{aligned}$$

Para la simulación de la imagen de la derecha (sólo se muestra  $u$ ), usé

$$\begin{aligned}F(u, v) &= u - u^3 - v - 0.05 \\ G(u, v) &= 10(u - v)\end{aligned}$$

Con  $\alpha = 0.00028$  y  $\beta = 0.05$ . La simulación la realicé con  $u, v \in [0, 3]^2$ , hasta más o menos lograr un estado estacionario  $t \approx 15$ . Las condiciones iniciales son ruido gaussiano.

Simule con diferentes funciones, diferentes constantes, y explore las posibilidades de los patrones que puede conseguir.

Tiene total libertad creativa. Produzca varios ejemplos interesantes, y guarde las imágenes finales como `2_{título}.png`. Este título debe ser una descripción del patrón que encontró, y en la imagen deben estar las constantes y las funciones que usaron. Si lo consideran necesario, incluyan un documento de texto con una explicación muy, muy breve de cada resultado (un caption).

Note que algunos sistemas no tienen estado estable, sino que oscilan, como el Brusselator.



### 3 Solitones en un plasma libre

La ecuación de Korteweg-de-Vries es una versión suave del problema de Fermi-Pasta-Ulam, que estudia el comportamiento de las ondas cuando las ecuaciones del medio tienen términos no lineales. Por ejemplo, como se enuncia en el artículo de Zabusky y Kruskal (1965, PRL), sirve para modelar ondas de agua en superficies poco profundas, así como soluciones estacionarias en modelos de plasma idealizados.

$$\partial_t \phi + \phi \partial_x \phi + \delta^2 \partial_x^3 \phi = 0$$

La animación clásica de esta ecuación es empezar con un coseno como condiciones iniciales. Puede encontrar un video de esto en bloque neón; la onda inicial se descompone en muchos “solitones”, que actúan como partículas, pues son objetos estables que se mueven e interactúan. Se supone que tienen forma de secante hiperbólica cuadrada:

$$\phi(t, x) \approx A \operatorname{sech}(b(x - c - vt))^2$$

Estudie el comportamiento de estas “partículas”. Puede formular las preguntas que considere, pero algunas ideas para estudiar pueden ser:

- ¿Cómo dependen los solitones de las constantes de la ecuación diferencial?
- ¿Cómo interactúan los solitones? ¿Hay alguna especie de conservación de momento?
- Algunos solitones son más rápidos que otros. ¿Por qué?
- ¿Existe una condición de CFL para esta ecuación?
- ¿Hay formas que producen más solitones que otras? (o mejor, ¿hay condiciones no triviales que no produzcan solitones?)

Puede usar cualquier intervalo para  $x$ . Lo usual son condiciones de frontera periódicas.

Produzca las gráficas y animaciones que considere necesarias para responder a sus preguntas, guardadas como `3_{título}.pdf`, `3_{título}.png` o `3_{título}.mp4`. Si lo consideran necesario, incluyan un documento de texto con una explicación muy, muy breve de cada resultado (un caption).

Por si le sirve para su análisis, el campo  $\phi$  presenta infinitas cantidades conservadas. Las primeras tres son:

$$\begin{aligned} \text{masa} &= \int_0^L \psi \, dx = 0 \\ \text{momento} &= \int_0^L \psi^2 \, dx = 1 \\ \text{energía} &= \int_0^L \left( \frac{1}{3} \psi^3 - (\alpha \partial_x \psi)^2 \right) dx = 0 \end{aligned}$$

¿Puede encontrar más? ¿por qué algunas son cero?