

Aplicación multiplataforma para la visualización y resolución
numérica de potenciales cuánticos

Resumen

Proyecto de Fin de Carrera

Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas



**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**

Febrero de 2011

Autor

Javier Montejo Berlingen

Tutor

José Rafael García-Bermejo Giner

Resumen del proyecto de fin de carrera

Javier Montejo Berlingen

Febrero de 2011

Resumen

1. Introducción

La aplicación *jSchroedinger* se plantea como una herramienta docente y didáctica que pueda ser empleada tanto por los distintos departamentos de Física de la Universidad de Salamanca, como por los alumnos de dicha disciplina que deseen utilizarla. Permite resolver de forma numérica la ecuación de Schrödinger para cualquier potencial, tarea que resulta necesaria en multitud de ámbitos de la Física. Si la forma funcional del potencial es sencilla, la ecuación se puede resolver de forma analítica. Sin embargo para potenciales más complejos es necesario recurrir a una solución numérica de la ecuación. El usuario introducirá la expresión del potencial deseado y la aplicación hallará las soluciones de onda y el espectro de energías.

El movimiento de una partícula en un potencial independiente del tiempo viene gobernado por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Dado un determinado potencial, deseamos conocer las soluciones de onda $\psi(x)$ y las energías para las cuales existe una solución.

Para resolver numéricamente esta ecuación recurriremos al algoritmo de Numerov, el cual está especialmente indicado para resolver ecuaciones diferenciales de segundo grado sin términos de primer grado.

Las herramientas y aplicaciones existentes en este campo concentran sus esfuerzos en obtener la máxima precisión y velocidad en los cálculos, prescindiendo de toda presentación gráfica ya que están dirigidas al ámbito de la investigación. El desarrollo de este proyecto pretende ofrecer una herramienta didáctica que permita no solo la resolución de la ecuación de Schrödinger, sino que ofrezca una visualización gráfica de todos los componentes físicos involucrados, desde el planteamiento del potencial hasta las funciones de onda obtenidas y el espectro de energías.

2. Objetivos

La funcionalidad básica del proyecto es resolver la ecuación de Schrödinger, que es la ecuación que rige el movimiento de una partícula en un potencial a nivel cuántico. El usuario podrá introducir cualquier potencial en la aplicación y el programa deberá ser capaz de resolver la ecuación de Schrödinger con este potencial y mostrar los resultados.

Además del potencial, el usuario debe tener libre acceso a los parámetros del cálculo. De esta forma puede ajustar la precisión y la duración de los cálculos a sus necesidades.

El proyecto está destinado principalmente a su uso académico y didáctico. Por lo tanto se considera otro requisito imprescindible la visualización gráfica de todos los conceptos físicos involucrados. Éste es probablemente el aspecto más importante del proyecto y el que lo distingue de otras aplicaciones similares existentes en el mundo de la física. La resolución de potenciales es un elemento cotidiano e imprescindible en muchos ámbitos de la física y por tanto ya existen programas destinados a este fin. La diferencia es que estos programas buscan únicamente la eficiencia y precisión en los cálculos, siendo generalmente programas de línea de comandos sin posibilidades de visualización, utilizados en el ámbito de la investigación. Por tanto el enfoque didáctico de este proyecto, centrado en que el usuario sea capaz en todo momento de visualizar los elementos físicos involucrados, distingue a este proyecto del resto de programas existentes.

La solución numérica de la ecuación de Schrödinger conlleva una gran carga de cálculo y procesamiento que puede llevar a tiempos de respuesta y de espera elevados para obtener las soluciones. De igual manera, una mayor precisión en el cálculo implica un tiempo de ejecución mayor. Dada la orientación didáctica del proyecto se considera prioritaria la visualización de los resultados frente al tiempo de ejecución y la precisión. A pesar de ello es necesario establecer una cota mínima para ambos que se ha de respetar. Por una parte el tiempo de ejecución, para unos valores razonables de los parámetros, no debe superar los pocos segundos. Por otra parte, establecemos unos valores iniciales de precisión tales que el valor de los resultados para los potenciales más frecuentes sea exacto con al menos seis decimales.

Otro objetivo importante es la capacidad de guardar y almacenar los potenciales y los resultados generados con la aplicación. De esta forma se da al usuario la posibilidad de almacenar el trabajo realizado y evita la repetición de cálculos de forma innecesaria.

Igualmente los elementos gráficos deben poder ser exportados en formato de imagen. De esta forma se permite el uso de los resultados obtenidos fuera de la aplicación.

Para completar la orientación académica consideramos que es necesario que la interfaz de la aplicación sea intuitiva y fácil de manejar. Los elementos de la interfaz deben ser autoexplicativos y evidentes y la ayuda integrada en la aplicación debe ser suficiente para realizar cualquier operación. Por todo ello la usabilidad de la aplicación debe ser igualmente un elemento a tener en cuenta durante el desarrollo del proyecto.

3. Descripción del sistema

El software puede dividirse en tres módulos sucesivos, cada uno de ellos con funcionalidades bien diferenciadas:

Entrada de datos: En primer lugar el usuario interactuará con una interfaz en la que definirá el experimento que desea resolver. En este paso definirá el potencial y los parámetros físicos involucrados, e igualmente los parámetros del cálculo, de forma que pueda controlar la precisión y el tiempo de ejecución según sus necesidades. El sistema recogerá y almacenará los datos de entrada, además de presentar una interfaz a través de la cual el usuario interactuará. Adicionalmente deberá realizar el preprocesado necesario de los datos para construir los objetos necesarios para los siguientes módulos.

Cálculo numérico: El segundo módulo realizará todo el proceso de cálculo numérico en ausencia de interfaz gráfica a fin de obtener la mayor eficiencia posible en el cálculo. Este subsistema contiene los algoritmos numéricos de la aplicación y es el encargado de obtener los resultados. El rendimiento, eficiencia y precisión de la aplicación dependen completamente de los cálculos realizados en este módulo.

Presentación de resultados: Por último el tercer módulo ofrecerá una interfaz gráfica en la que se mostrarán los resultados obtenidos. Éstos se mostrarán en las formas que se consideren más útiles desde el punto de vista académico. El usuario puede guardar los resultados o exportarlos en los formatos correspondientes para su uso fuera de la aplicación. Finalmente se ofrece la posibilidad de volver al segundo módulo y refinar los resultados para obtener una mayor precisión.

Dado que estos subsistemas no actúan simultáneamente sino secuencialmente, el mantenimiento y actualización del sistema se simplifica enormemente. Únicamente hay que respetar el formato de los datos u objetos transferidos de un subsistema a otro.

4. Aspectos relevantes

4.1. Programación orientada a objetos

Una de las elecciones más determinantes a la hora de abordar el proyecto fue la elección del lenguaje de programación a utilizar. Por una parte se desea resolver un problema mediante cálculo numérico, en el que deseamos la mayor precisión posible y un tiempo de ejecución bajo. Por otra parte deseamos hacer especial hincapié en la parte gráfica y visual de la aplicación y mantener un buen diseño modular para que el proyecto pueda ser fácilmente ampliable, lo cual requeriría un lenguaje orientado a objetos como puede ser Java.

A partir de los objetivos establecidos podríamos concluir que, dado que antepone el aspecto visual a la eficiencia de los cálculos, la elección natural sería la programación orientada a objetos. Sin embargo los lenguajes orientados a objetos tienen un rendimiento mucho menor en cálculos numéricos que los lenguajes estructurados. Por tanto antes de elegir Java como el lenguaje que se iba a usar se hicieron pruebas exhaustivas de su rendimiento numérico. Se llegó a la conclusión de que si bien su rendimiento era inferior al de C, la diferencia en tiempo de ejecución es prácticamente inapreciable para el usuario, para valores de precisión razonables, y por tanto su uso está perfectamente justificado.

4.2. Parser

Durante el uso de la aplicación, el usuario introducirá la expresión del potencial a través de la interfaz correspondiente. Esta expresión deberá ser evaluada un número muy alto de veces, pero partimos de una cadena de caracteres con la expresión introducida por el usuario que no es directamente evaluable.

La solución a este problema es implementar un parser que analice la expresión y construya un objeto ecuación a partir de ella. Este objeto ecuación contendrá los métodos necesarios para evaluar la expresión.

La implementación manual de un parser es una opción arriesgada, ya que es imposible comprobar su correcto funcionamiento para todas las cadenas de caracteres posibles y muchas de las operaciones posteriores se basan en la asunción de que la cadena con la que se trabaja está correctamente formada. Para asegurar la fiabilidad del parser hemos basado todas sus operaciones sobre la estructura de una gramática formal. Esta gramática codifica las reglas para la construcción de expresiones matemáticas correctamente formadas.

Utilizando esta gramática la aplicación es capaz de analizar expresiones y verificar si están correctamente formadas. Una vez verificadas es posible

construir un objeto ecuación a partir de ella. Las reglas de la gramática recogen también las reglas de prioridad de operadores de forma que la ecuación obtenida se evalúe correctamente.

La figura 1 representa la estructura interna de la ecuación construida a partir de la expresión $\frac{e^x}{x+2} + c$.

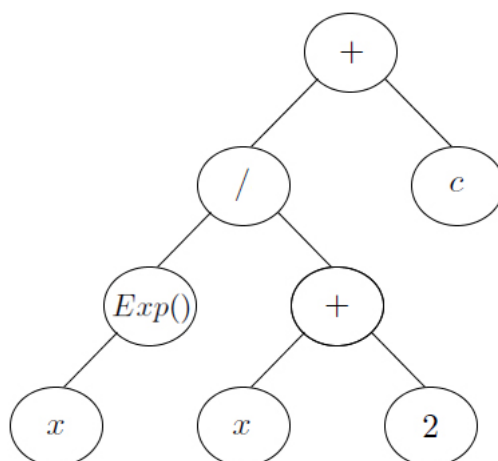


Figura 1: Estructura interna de la ecuación

4.3. Exportación de contenidos

Uno de los objetivos que el proyecto debía cumplir era que fuese capaz de guardar y cargar tanto los potenciales como los resultados generados. Adicionalmente deseamos poder exportar los resultados obtenidos en diversos formatos para su uso fuera de la aplicación.

Al exportar los resultados podemos optar entre:

Archivo de texto: podemos exportar la lista con las ondas y los valores de las energías obtenidos a un archivo de texto tabulado.

Archivos de imagen: las visualizaciones de las soluciones de onda y del potencial pueden ser exportados a archivos JPG. Es posible exportar soluciones de onda concretas o todo el conjunto de soluciones al directorio deseado.

De esta forma se permite el uso de los resultados obtenidos fuera de la aplicación.

4.4. Interfaz gráfica de usuario

Otro aspecto relevante del desarrollo del software ha sido el diseño de la interfaz. La estructura modular de la aplicación hace que se distingan dos

interfaces principales. Por una parte una interfaz de entrada de datos en la que el usuario definirá el potencial y los parámetros necesarios para el cálculo. Por otra parte una interfaz de presentación de resultados en la que se visualizarán de distintas formas las soluciones obtenidas.

En ambas interfaces se buscó que fueran intuitivas y fáciles de manejar. Los elementos de la interfaz fueron diseñados para ser autoexplicativos y evidentes. Adicionalmente se dotó a la aplicación de una ayuda integrada con toda la información necesaria para realizar cualquier operación.

Con esto se pretendió reducir al máximo la dificultad de uso de la aplicación, buscando que cualquier usuario fuera capaz de hacer uso de ella sin necesidad de conocimientos previos de uso.

5. Presentación de la aplicación

Se presenta a continuación un ejemplo de uso de la aplicación, en el cual se mostrarán las diversas opciones existentes en cada una de las interfaces. Tomaremos como potencial de ejemplo el oscilador armónico tridimensional con una unidad de momento angular.

5.1. Definiendo el experimento

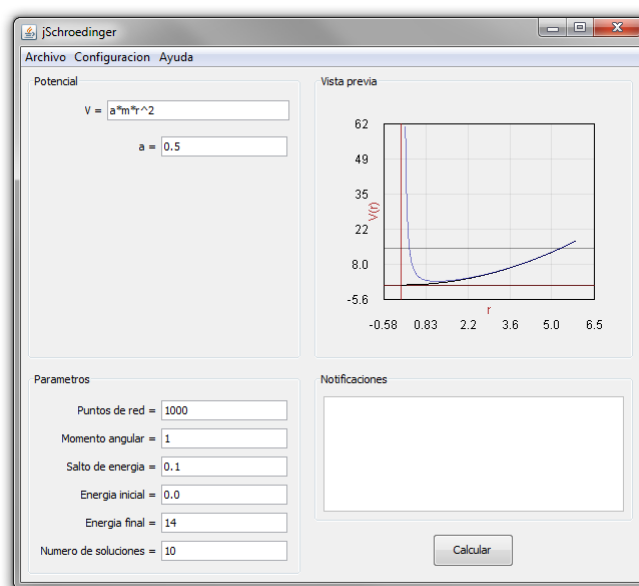


Figura 2: Interfaz de entrada de datos

En primer lugar escribimos nuestra expresión para el potencial: $V(r) = a * m * r^2$. El sistema reconocerá el parámetro a como definido por el usuario

y creará un nuevo parámetro para establecer su valor. El valor de la masa m se toma de la configuración del problema y por tanto no se creará un nuevo parámetro para él. El sistema reconoce que el potencial es tridimensional por el uso de la variable 'r' y activa la edición del momento angular, el cual establecemos en 1. A continuación procedemos a editar los parámetros del cálculo, establecemos el límite superior de la energía en 14 y mantenemos el resto de valores.

La figura 2 muestra el estado de la aplicación una vez editados los parámetros y el potencial.

La vista previa del potencial nos muestra en negro la gráfica de la expresión introducida y en azul el potencial efectivo creado por la presencia de momento angular.

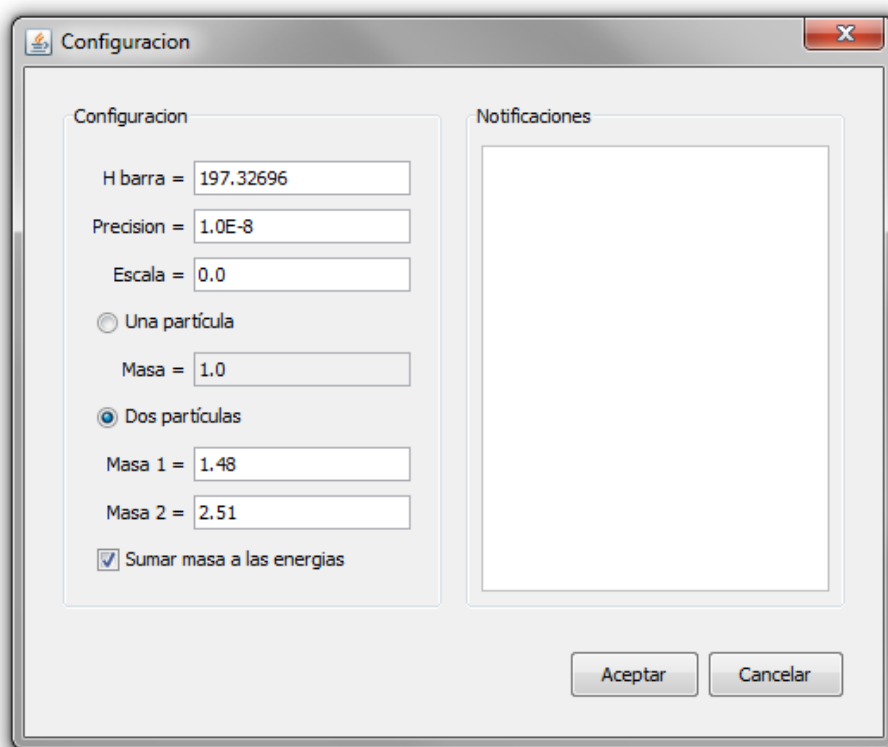


Figura 3: Cuadro de diálogo de configuración

Podemos editar los parámetros físicos del problema en la ventana de diálogo de configuración. En nuestro caso no variaremos el valor de los parámetros. La figura 3 muestra el cuadro de diálogo mediante el cual podríamos editar los valores físicos deseados.

Una vez definido el experimento estamos en situación de iniciar el cálculo. Dado que no hay errores en los parámetros el botón ‘Calcular’ está activado y podemos proceder al cálculo de soluciones para el potencial introducido.

5.2. Resultados

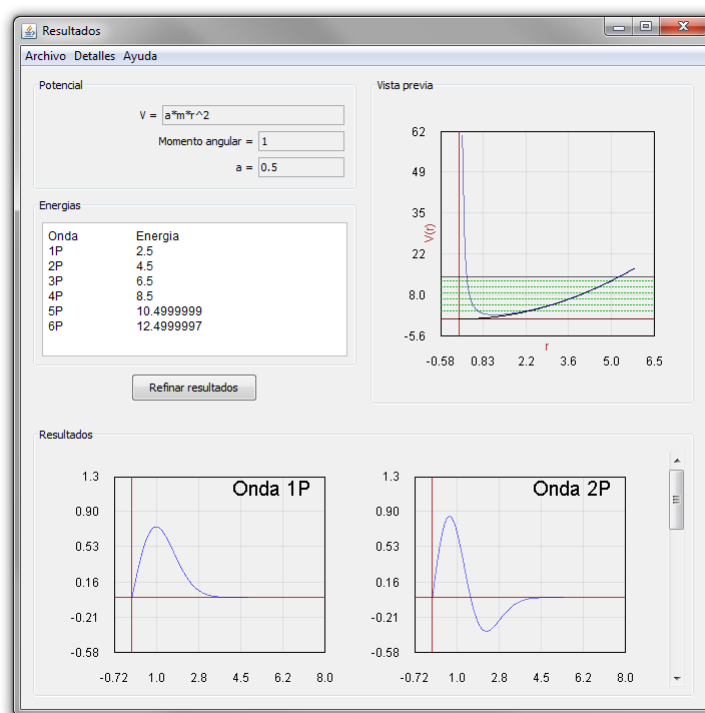


Figura 4: Interfaz de resultados

Una vez que la aplicación ha hallado las soluciones existentes, éstas se muestran en la interfaz de resultados. Podemos ver en la figura 4 los resultados que se han encontrado para el potencial que hemos definido.

Vemos como para las ondas 5P y 6P tenemos errores de precisión. Podemos refinar los resultados mediante el botón correspondiente, repitiendo el cálculo con mayor precisión. De esta forma obtendremos los resultados exactos, 10.5 y 12.5 respectivamente.

Si deseamos ver la función de onda a mayor tamaño superpuesta al potencial podemos hacer click sobre la solución que deseamos ampliar. La figura 5 muestra la onda 5P en su posición relativa del potencial. En la figura se puede observar como la función de onda entra en la región clásicamente prohibida del potencial.

A partir de esta ventana podemos exportar la gráfica a un archivo JPG.

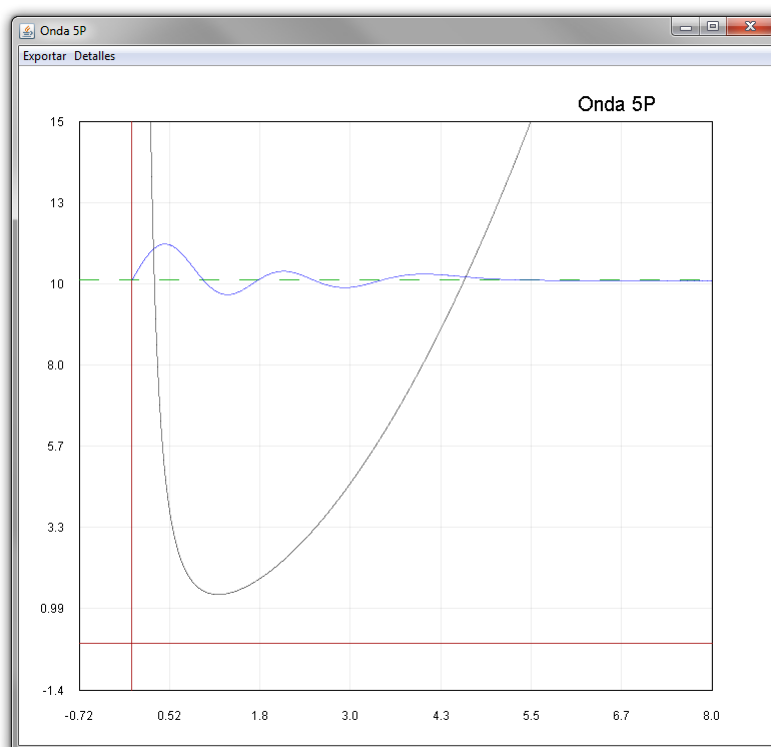


Figura 5: Solución de onda a mayor tamaño

Para ello simplemente hay que seleccionar la opción de menú correspondiente y determinar el directorio en el que se desea guardar. También podemos exportar de forma conjunta todas las soluciones de onda desde la interfaz de resultados.

En cualquier momento podemos consultar los detalles del cálculo mediante el que se ha hallado la solución. Para ello podemos usar la opción de menú 'Ver detalles' desde la interfaz de resultados o desde la ventana individual de visualización de la onda.

Este sencillo ejemplo muestra el funcionamiento básico de la aplicación a lo largo de todo el proceso de cálculo. En él se han mostrado los pasos necesarios para definir un potencial arbitrario y hallar sus soluciones.

6. Conclusiones

Analizando el trabajo realizado y teniendo en cuenta los objetivos propuestos inicialmente podemos llegar a las siguientes conclusiones:

- Se ha construido una herramienta capaz de resolver la ecuación de Schrödinger con eficiencia, cumpliendo los requisitos y objetivos de precisión establecidos.
- La aplicación se ha dotado de una interfaz gráfica visualmente atractiva e intuitiva de usar. A través de ella el usuario puede tener una representación mental en todo momento de los conceptos físicos involucrados.
- Se ha construido un analizador léxico-sintáctico que permite al usuario introducir expresiones personalizadas en la aplicación.
- Se ha dotado a la aplicación de los medios necesarios para importar y exportar los contenidos generados, permitiendo su uso más allá de la aplicación y guardando los resultados deseados para su uso posterior.
- Se ha construido una aplicación didáctica sencilla de usar, que puede ser utilizada por cualquier alumno o profesor sin necesidad de conocimientos específicos en informática.

Las aplicaciones existentes para resolver la ecuación de Schrödinger son aplicaciones escritas en lenguajes orientados al cálculo numérico, tales como Fortran o C. Carecen completamente de interfaz gráfica, donde el potencial va escrito directamente en el código fuente de la aplicación.

A pesar de las numerosas implementaciones propias por parte de los departamentos, sigue existiendo un vacío en el ámbito académico. El proyecto *jSchroedinger* aspira a cubrir esta vacante. Es perfectamente capaz de resolver los mismos potenciales que sus homólogos sin interfaz a costa de una ligera pérdida de eficiencia. A cambio incorpora una interfaz que facilita el uso del programa y que ofrece una visualización gráfica de los elementos físicos. Esta visualización gráfica convierte el proyecto en una herramienta docente de gran utilidad en el ámbito académico.