

Práctica 2:

1) Oscilador armónico en mecánica cuántica

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo viene dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi = E\phi, \quad (1)$$

donde $V(x)$ es el potencial del problema. Para el oscilador armónico se tiene

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2. \quad (2)$$

Las correspondientes autofunciones se escriben :

$$\phi_n = N_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

donde H_n son los polinomios de Hermite, y $\alpha = \sqrt{M\omega/\hbar}$, $\omega = \sqrt{k/M}$. Los autovalores correspondientes están dados por $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Para resolver el problema de autovalores numéricamente es conveniente usar unidades $\hbar = 2M = k/2 = 1$. También resulta útil trabajar en una caja de tamaño $2L$, de forma que imponemos condiciones de contorno $\phi(-L) = \phi(L) = 0$

Ejercicios:

1. Crear un programa que resuelva numéricamente el problema de autovalores anterior. Como formas de resolver el problema se proponen:

- Diferencias finitas: consiste en discretizar el problema, de forma que se calcula la solución en los puntos x_i , con $i = 0, 1, 2, \dots, N$. Por ejemplo, la ecuación $y'' + f(x)y = \kappa y$ se discretizaría como

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + f(x)y(x) = \kappa y(x) \rightarrow y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} + h^2 f_i y_i = h^2 \kappa y_i \quad (4)$$

Esta ecuación puede escribirse en forma matricial $H_{i,j}y_j = Ey_i$, de forma que resolver el problema consiste en obtener los autovalores y autovectores de la matriz $H_{i,j}$. Nota: el problema se resuelve para los puntos interiores, es decir, para $i = 1, 2, 3, \dots, N-1$, ya que los valores $y(-L) = y_0$, e $y(L) = y_N$ vienen dados por las condiciones de contorno del problema.

- Método del disparo: En este caso se consideran distintos valores para el autovalor, y se resuelve el problema de condiciones iniciales desde uno de los extremos (y_0) para cada valor propuesto. Solo para los valores correctos del autovalor, el valor final obtenido (y_N) coincidirá, bajo una cierta tolerancia, con el valor impuesto por el problema $y(L) = cte$.
2. Tomando $L = 6$ calculad el espectro y las autofunciones de los primeros 10 niveles y comparad con los resultados exactos. Estudiar la dependencia con el tamaño de la caja L

3. Resolved el problema de autovalores para el siguiente potencial perturbado:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \lambda x^4, \quad (5)$$

donde $\lambda < 1$. Comparad el resultado para el estado fundamental con el que se obtiene del cálculo perturbativo:

$$E_0(\lambda) = 1 + \frac{3}{4}\lambda - \frac{21}{16}\lambda^2 + \dots \quad (6)$$

Ayuda: Los polinomios de Hermite pueden calcularse mediante la siguiente fórmula de recurrencia:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (7)$$

con $H_0(x) = 1$ y $H_1(x) = 2x$.

2) Transformada de Fourier y análisis de señales

La Transformada de Fourier (TF) se emplea de formas muy diversas, desde la resolución de ecuaciones diferenciales, en mecánica cuántica, espectroscopía, etc. Sin embargo, posiblemente su aplicación más fructífera sea en el ámbito del análisis de señales, aplicándose en industrias como la musical, medios audiovisuales o para el tratamiento de imágenes. Los siguientes ejercicios tratan de mostrar algunas de estas aplicaciones

Ejercicios:

1. Limpiar señales: Normalmente, cuando se realizan mediciones de datos, dependiendo del dispositivo de medida, suele haber cierto ruido que puede enmascarar la verdadera naturaleza de los datos. Por ello, es habitual realizar un postprocesado de los datos con el objetivo de eliminar el ruido existente. En este proceso se suelen tomar medidas del ruido, es decir, se deja el dispositivo de medida registrando datos sin que el experimento se lleve a cabo. A partir de estas medidas del ruido, uno puede aplicar la TF al mismo y obtener la estadística del ruido en el espectro de frecuencias, lo que permite establecer un *threshold* que nos permite distinguir en la TF de la señal original la información de la señal y el ruido, permitiendo recuperar la señal original. El fichero “datos.txt” contiene un conjunto de datos con ruido, y el fichero “ruido.txt” datos del ruido. Usando este proceso de filtrado, obtener la señal subyacente del fichero “datos.txt”.
2. Reconocimiento de voz: Al igual que un instrumento musical de cuerda, la voz humana es producida por la vibración de las cuerdas vocales. Pese a que las características de cada individuo modifican esas vibraciones, cuando una persona dice “a”, todos somos capaces de reconocer este sonido debido a que tiene ciertas frecuencias características asociadas. Gracias a esto, algunos algoritmos tratan de aprovechar estas propiedades para el reconocimiento de la voz, para lo cual emplean la TF que permite identificar esas frecuencias características. Grabad a varias personas diciendo “a” y guardad los datos en un fichero WAV. Cargando del paquete *librosa* la función *load* podéis leer esos ficheros y convertirlos a un array de python con el que trabajar.

```
from librosa import load
datos, freq_muestreo = load("fichero.wav")
```

De forma cualitativa encontrad las características que hacen identificable el sonido “a”. Comparad con los otros sonidos vocálicos (y haced una pequeña programa que lea un fichero *WAV* e identifique la vocal que se dice en el fichero).

3. Evolución temporal de la TF: En muchas ocasiones (industria musical) no sólo nos interesa la TF de la señal completa, si no que debido a la existencia de variaciones en la señal, nos interesa ver cómo evoluciona en el tiempo esta TF (una canción tiene distintas notas a lo largo del tiempo). Para ello se suele usar la *Short Time Fourier Transform* (STFT), la cual se obtiene siguiendo los siguientes paso:

- a) Se toma un segmento de la señal completa (una “ventana” de tamaño *size*)
- b) Se suavizan los bordes multiplicando la señal por medio coseno
- c) Añadimos *size* ceros al final de la señal.
- d) Hacemos la TF de los datos que hemos generado (dividido por *size*)
- e) Calculamos el espectro de potencias y guardamos la primera mitad (hasta la frecuencia de Nyquist)
- f) Repetimos para la siguiente “ventana” de datos.

Haced un programa que sea capaz de calcular la STFT. Aplicar la TF y la STFT a los ficheros “cuadrado.wav”, “musica_1.txt” y “musica_2.txt”. En el primer caso, obtened las notas musicales y tratad de reconstruir la partitura con la información aportada por la STFT y la TF (caso real sencillo). Con la misma información aplicada a los casos “musica_1.txt” y “musica_2.txt” tratad de identificar las canciones y comparad con las partituras de las mismas.

3) Movimiento planetario y precesión del perihelio de Mercurio

Las ecuaciones de Newton para el movimiento planetario pueden reducirse al siguiente sistema de primer orden

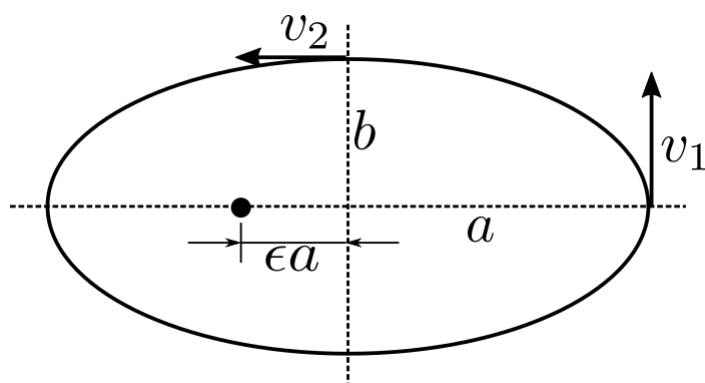
$$\frac{dx}{dt} = v_x \quad , \quad \frac{dv_x}{dt} = -\frac{GM_s x}{r^3} \quad , \quad (8)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y \quad , \quad \frac{dv_y}{dt} = -\frac{GM_s y}{r^3} \quad , \quad (9)$$

donde M_s es la masa del Sol. Para facilitar el cálculo numérico es conveniente trabajar en unidades astronómicas, de forma que el tiempo se mide en años y la distancia en unidades astronómicas ($1 \text{ UA} = 1,5 \times 10^{11} \text{ m}$). En este sistema de unidades se tiene que $GM_s = 4\pi^2 \frac{\text{UA}^3}{\text{años}^2}$.

La figura 1 muestra de forma esquemática la situación inicial, permitiendo obtener las condiciones iniciales del problema en el punto 1 (ó 2) a partir de la conservación de la energía y el momento angular:

$$v_1 = \sqrt{\frac{GM_s(1 - \epsilon)}{a(1 + \epsilon)}} \quad , \quad (10)$$



donde ϵ es la excentricidad de la órbita dada por $b = a\sqrt{1 - \epsilon^2}$.

Ejercicios:

1. Escribid un programa que calcule las órbitas de los planetas a partir de las condiciones iniciales y los datos de la siguiente tabla

Planeta	Masa (kg)	Semieje mayor (a UA)	Excentricidad (ϵ)
Mercurio	2.4×10^{23}	0.39	0.206
Venus	4.9×10^{24}	0.72	0.007
Tierra	6.0×10^{24}	1.00	0.017
Marte	6.6×10^{23}	1.52	0.093
Júpiter	1.9×10^{27}	5.20	0.048
Saturno	5.7×10^{26}	9.54	0.056
Urano	8.8×10^{25}	19.19	0.046
Neptuno	1.03×10^{26}	30.06	0.010
Plutón	1.3×10^{22}	39.53	0.248

2. Comprobad que las órbitas son cerradas, que se cumple la tercera ley de Kepler $T^2/a^3 = cte$, donde T es el periodo orbital, y la conservación de la energía. Comprobad que se cumple el Teorema del virial que relaciona la energía cinética y potencial: $\langle T \rangle = -\langle V \rangle/2$, siendo $\langle \cdot \rangle$ el promedio temporal en una órbita y T y V la energía cinética y potencial respectivamente.
3. Modificad la fuerza de Newton incluyendo la primera corrección de la Relatividad General (para Mercurio) esto es:

$$\vec{F} \simeq \frac{GM_s M}{r^3} \left(\left(1 - \frac{4GM_s}{c^2 r} + \frac{v^2}{c^2} \right) \vec{r} - \frac{4\vec{v} \cdot \vec{r}}{c^2} \vec{v} \right) \quad (11)$$

donde M es la masa de Mercurio y $c = 63241$ UA/año es la velocidad de la luz. Comprobad que estas correcciones producen que la órbita no se cierre, y por tanto, el perihelio avanza con cada vuelta. El ritmo de avance de este ángulo $\theta'(t)$ puede determinarse calculando lo que avanza por cada vuelta el perihelio. Sin embargo, dado que este efecto es proporcional a c^{-2} , para obtener una estimación es recomendable tomar valores de $c \simeq 100 - 1000$ y calculad para cada uno de ellos el avance del perihelio por vuelta. A partir de estos datos extrapolar el valor real ($\simeq 43''/\text{siglo}$)