Física Computacional Tarea 5 26110123
Fernando Maximiliano López Villegas

1. Descomposición LU
Yo estaba segurísima de que habían notas para los algoritmos. Pero bueno, veamos

$$\begin{pmatrix} l_{00} & & & \\ l_{10} & l_{11} & & \\ l_{20} & l_{21} & l_{22} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \\ \vdots \\ v_i \end{pmatrix} \quad i = j \text{ ent.}$$

Solo es despejar $l_{00} y_0 = v_0 \Rightarrow y_0 = \frac{v_0}{l_{00}}$ ent.

$$y_i = \frac{v_i - l_{i0} y_0 - l_{i1} y_1 - \dots - l_{i\,i-2} y_{i-2} - l_{i\,i-1} y_{i-1}}{l_{ii}}$$

ent.

$$y_i = \frac{v_i}{l_{ii}} - \frac{l_{iw} y_w}{l_{ii}} \text{ ent. } y[i] = y[i] - \frac{l[i,w] * y[w]}{l[i,i]}$$

ent. $y[i] += -\frac{l[i,w] * y[w]}{l[i,i]}$ i va de 0 a N
w va de 0 a i

Aquí pensa el porque no pongo un caso extra como si $i = 0$, bueno resulta que no es necesario, como pongo i en el segundo loop, no corre y lanza y_0 como debe.

Para el looop de $Ux = y$ no hay magia, es lo mismo solo que al reves.

2. Pozo cuántico asimétrico

(a) Demuestra que $\hat{H}\Psi = E\Psi$ implica

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

Dem

Por def $\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \sin \frac{\pi n x}{L}$ ent.

Como $\hat{H}\Psi = E\Psi$ ent.

$$\hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \sin \frac{\pi n x}{L} = E \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \sin \frac{\pi n x}{L} \text{ ent.}$$

multiplicando ambos lados por $\sin \frac{\pi m x}{L}$ ent.

$$\hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right) = E \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \sin \frac{\pi n x}{L} \sin \frac{\pi m x}{L}$$

ent si integramos respecto a x de 0 a L

$$\int_0^L \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n S_n S_m \, dx = \int_0^L E \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n S_n S_m \, dx \text{ ent}$$

esta integral es nula si $n \neq m$ y $\frac{L}{2}$ si $m = n$

ent. podemos cambiar n y m ent.

$$\int_0^L \hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n S_m S_n \, dx = \int_0^L E \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_m S_n S_m \, dx$$

Pero notemos que $\hat{H}$ depende, pero ... la suma pues es solo un termino ent. (Ψ_n son coeficientes)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx = \int_0^L S_n S_m \, dx \left(E \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_m \right)$$

Pero dijimos $n=m$ ent.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx = \frac{L}{2} E \left(\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_m = \Psi_m \right)$$

$$= \frac{L}{2} E \Psi_m$$

Ahora, demuestra que la ec. de Schrödinger se puede escribir en forma matricial como $H\Psi = E\Psi$ donde Ψ es el vector $(\Psi_1, \Psi_2, \ldots)$ y H_{mn} está dado por $\left\{ H_{mn} = \frac{2}{L} \int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx \right\}$ ent.

$$\frac{2}{L} \begin{pmatrix} H_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi \end{pmatrix} = \frac{2}{L} \begin{pmatrix} H_{on} \Psi_n \\ \vdots \\ H_{mn} \Psi_n \end{pmatrix} \text{ ent.}$$

$$\frac{2}{L} \begin{pmatrix} \int_0^L S_0 \hat{H} S_n \, dx \, \Psi_n \\ \vdots \\ \int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx \, \Psi_n \end{pmatrix}$$

por lo anterior

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n \int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx = \frac{L}{2} E \Psi_m$$

ent. pues

$$\frac{2}{L} \begin{pmatrix} \frac{L}{2} E \Psi_0 \\ \vdots \\ \frac{L}{2} E \Psi_m \end{pmatrix} = \frac{2}{L} \frac{L}{2} E \begin{pmatrix} \Psi_0 \\ \vdots \\ \Psi_m \end{pmatrix} \text{ ent.}$$

$$\boxed{H \Psi = E \Psi}$$

($m=n$ se refiere a dimensiones $\{\Psi_m = \Psi_n\}$)

b) Evalua analíticamente H_{mn}

Okay, aquí viene algo que no pude resolver (o sea sí) pero no sé lo que da pues.

Según yo así se hace la integral

$$H_{mn} = \frac{2}{L}\int_0^L S_m \hat{H} S_n \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L S_m \left[\frac{-\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] S_n \, dx$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L S_m \left[\frac{-\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} S_n\right] + S_m V(x) S_n \, dx \quad \text{ent.}$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L S_m \left[\frac{-\hbar^2}{2M} - \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 S_n\right] + \frac{a}{L} x S_m S_n \, dx \quad \text{ent.}$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L + \frac{(\hbar\pi n)^2}{2ML^2} S_m S_n + \frac{a}{L} x S_m S_n \, dx \quad \text{ent.}$$

$$= \left(\frac{2}{L}\right)\left(\frac{(\hbar\pi n)^2}{2ML^2}\right)\int_0^L S_m S_n \, dx + \left(\frac{2}{L}\right)\left(\frac{a}{L}\right)\int_0^L x S_m S_n \, dx$$

si $m = n$ ent.

$$\frac{2}{L}\left(\frac{(\hbar\pi n)^2}{2ML^2}\right)\left(\frac{L}{2}\right) + \frac{2}{L}\left(\frac{a}{L}\right)\left(\frac{L^2}{4}\right)$$

si $m \neq n$ (podemos condensar esto al caso $m+n =$ impar)

ent.

$$\frac{2}{L}\left(\frac{(\hbar\pi n)^2}{2ML^2}\right)(0) + \frac{2}{L}\left(\frac{a}{L}\right)\left(-\left(\frac{2L}{\pi}\right)^2 \frac{mn}{(m^2-n^2)^2}\right)$$

$$= \left(\frac{2}{L}\right)\left(\frac{a}{L}\right)\left(-\left(\frac{2L}{\pi}\right)^2 \frac{mn}{(m^2-n^2)^2}\right) \quad \text{ent.}$$

Porque no digo listo lo logramos, pues cuando lo programé el ground state en la matriz del inciso (b) me daba 9. y algo en este lado

Vamos a hacer un analisis de dimensiones

$m = n$

$$\frac{(\hbar \pi n)^2}{2ML^2} + \frac{a}{4} = \frac{[\hbar^2]^2}{[M][L^2]} + [a]$$

$$\frac{(M L^2 T^{-1})^2}{L^2 [M]} + (M L^2 T^{-2}) \text{ ent.}$$

$$\frac{M^2 L^4 T^{-2}}{[M] L^2} + M L^2 T^{-2} = M L^2 T^{-2} + M L^2 T^{-2}$$

Y da energía la cosa esta... por eso no se porque no da lo que debe.

Ahora, supongamos que integramos todo igual pero ahora al final es mult por un $\frac{L}{2}$ en lugar del $\frac{2}{L}$ ent. $m=n$

$$\left(\frac{L}{2}\right)\left(\frac{(\hbar \pi n)^2}{2ML^2}\right)\left(\frac{L}{2}\right) + \left(\frac{L}{2}\right)\left(\frac{a}{L}\right)\left(\frac{L^2}{4}\right)$$

$$\frac{(\hbar \pi n)^2}{8M} + \frac{aL^2}{8} \text{ ent.}$$

$$\frac{(M L^2 T^{-1})^2}{M} + M L^2 T^{-2} [L^2].$$

$$\frac{M^2 L^4 T^{-2}}{M} + M L^4 T^{-2} \text{ ent.}$$

$$M L^2 T^{-2} (L^2) + M L^2 T^{-2} (L^2)$$

esto es energia · distancia al cuadrado

el $m+n$ = impar se checa analogamente.
Que si es consistente pues es equivalente a

$$\frac{L}{2} H' \psi = \left(\frac{L}{2}\right)^2 E \psi \quad \left(H_{mn}' = \frac{L}{2} H_{mn} \right)$$

pero, hasta aquí ha llegado mi análisis.
Por el momento no se porque pasa esto.
Una de las razones por los que seguí con este
cálculo que ante mis ojos "está mal" es que al
crecer la matriz con 100 elementos no mejoraba
la precisión, da datos distintos a la de $N=10$.
En cambio esta longitud al cuadrado energía
si seguía bien (mejoraba).

b) La parte del código está en la NB.

c) igual en el NB

d) NB

e) NB

3. Método de Relajación

Ningún inciso amerita desarrollo.

4. Glucólisis.

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

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

con ecs. $-x + ay + x^2 y = 0$ (1) $\quad b - ay - x^2 y = 0$ (2)

en l.

de (2) vemos que $b = ay + x^2y$ ent. en (1)

$-x + b = 0 \quad \therefore \quad \underline{x = b}$ ent. en (2)

$b - ay - b^2y = 0$ ent. $b - y(a + b^2) = 0$

$\underline{b = y(a+b^2)} \Rightarrow \quad \underline{y = \frac{b}{(a+b^2)}}$

(b) reacomoda en la sig forma $x = y(a+x^2)$

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

en 1.

como $b = x$ ent. $\underline{x = y(a+x^2)}$ en'.

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

la 2^{da} parte (código) en NB.

(c) Si las acomodamos como

$x = \sqrt{\frac{b}{y} - a}$ y $y = \frac{x}{(a+x^2)}$

d) verifica

Después de correr el código $x = 2$ y $y = 0.4$

como $x = b$, $y = \frac{b}{a+b^2}$ y $a = 1$ y $b = 2$

ent. $\underline{x = 2}$, $y = \frac{2}{0.4+(2)^2} = \frac{2}{4.4}$

$= 0.454 \quad \underline{\approx 0.4}$

5. Constante de desplazamiento de wien

(a) $I(\lambda) = \dfrac{2\pi hc^2 \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}$ ent.

$Q = 2\pi hc^2$ y $\dfrac{hc}{k_B T} = w$ ent.

$= \dfrac{Q\lambda^{-5}}{(e^{w\lambda^{-1}} - 1)} \Rightarrow Q\lambda^{-5}(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-1}$ ent.

$Q\left[\lambda^{-5}[(-1)(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-2}(-w\lambda^{-2})(e^{w\lambda^{-1}})]\right.$

$\left.+ (-5)\lambda^{-6}\left[(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-1}\right]\right]$

$= Q\left[w\lambda^{-7}(e^{w\lambda^{-1}} - 1)\, e^{w\lambda^{-1}} - 5\lambda^{-6}(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-1}\right]$ ent.

igualando a cero ent.

$0 = w(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-2} e^{w\lambda^{-1}} - 5\lambda(e^{w\lambda^{-1}} - 1)^{-1} = 0$

$w e^{w\lambda^{-1}} - 5\lambda(e^{w\lambda^{-1}} - 1) = 0$

$\dfrac{w}{\lambda} e^{w\lambda^{-1}} - 5e^{w\lambda^{-1}} + 5 = 0$ $\{w = x\}$

$\dfrac{w}{\lambda} - 5 + 5e^{-w\lambda^{-1}} = 0$

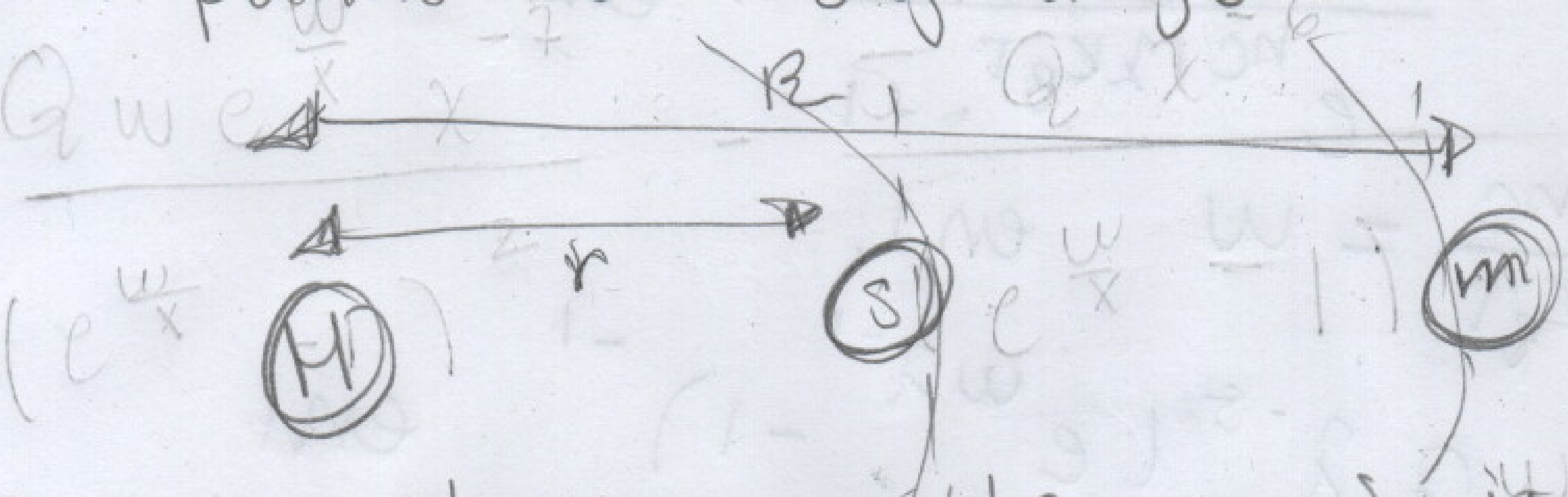
ent $\dfrac{hc}{\lambda k_B T} - 5 + 5e^{-\left(\frac{hc}{k_B T}\frac{1}{\lambda}\right)} = 0$

(b) NB

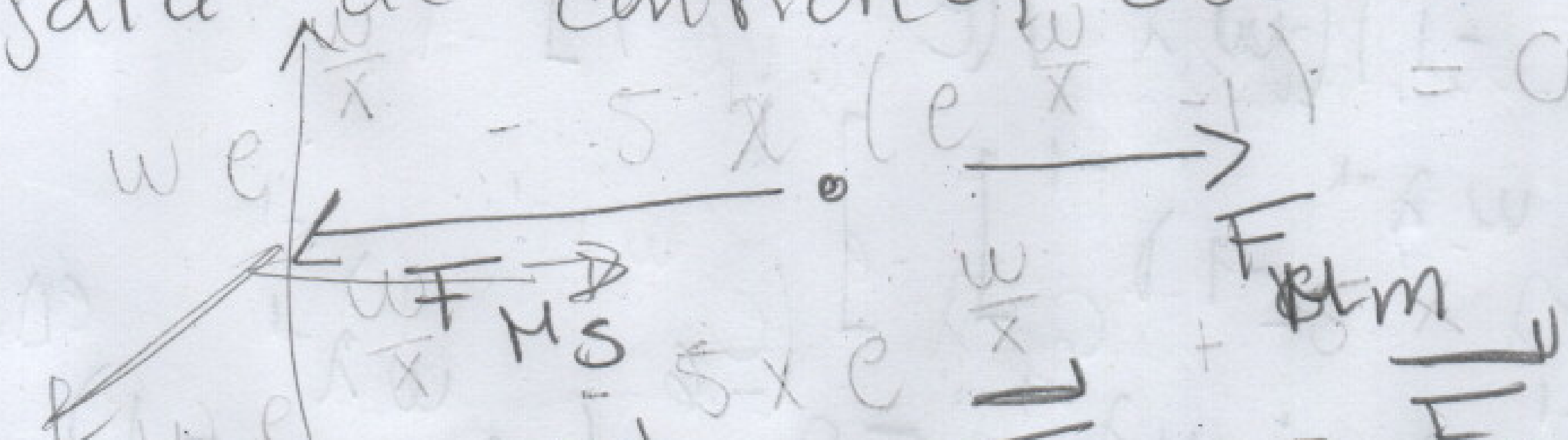
(c) NB

6. El punto de Lagrange

(a)



Okay la tierra jala a S y la luna lo jala (pero desde la tierra parece que la jala al contrario) osea.



ent. $\vec{F}_{MS} + \vec{F}_{mS} = \vec{F}_{R\,S} = \vec{F}_c$

ent.

$$\frac{GMs}{r^2} - \frac{Gms}{(R-r)^2} = r\omega^2 s$$

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

(b) NB