



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Condiciones Iniciales en Cosmología Cuántica

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Gerardo Francisco Meyer Forgues

Asesorado por

Ramírez Romero Cupatitzio

Puebla Pue.
4 de Diciembre de 2020



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Condiciones Iniciales en Cosmología Cuántica

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Gerardo Francisco Meyer Forgues

Asesorado por

Ramírez Romero Cupatitzio

Puebla Pue.
4 de Diciembre de 2020

Título: Condiciones Iniciales en Cosmología Cuántica
Estudiante: GERARDO FRANCISCO MEYER FORGUES

COMITÉ

Silva Ortigoza Gilberto
Presidente

Velázquez Quesada Mercedes
Secretario

Vázquez Báez Victor Manuel
Vocal

Vocal

Ramírez Romero Cupatitzio
Asesor

Índice general

1. Introducción	5
2. Fundamento Teórico	7
2.1. Sistemas Hamiltonianos con Constricciones	7
2.2. Formalismo ADM	9
2.3. Ecuación de Wheeler-DeWitt para una métrica FLRW	9
2.4. Valor Esperado del Factor de Escala	12
2.5. Elementos de Ecuaciones Diferenciales Parciales con Dos Variables	12
2.6. Método de Aproximación de Diferencias Finitas	15
2.7. Integración Numérica: Método del Trapezoide	18
3. Cálculos y Resultados	21
3.1. Desarrollo de la Ecuación de Wheeler-DeWitt para la métrica FLRW	21
3.2. Clasificación de la Ecuación de Wheeler-DeWitt y elección del Potencial	22
3.3. Problema Bien Puesto para la Ecuación de Wheeler-DeWitt	22
3.4. Método de Diferencias Finitas Aplicada a la Ecuación de Wheeler-DeWitt	23
3.5. Método del Trapezoide Aplicado al Valor Esperado del Factor de Escala	24
3.6. Solución Numérica de la Ecuación de Wheeler-DeWitt	25
3.7. Clasificación Básica de las Condiciones de Frontera y sus Soluciones	26
3.7.1. Función Inicial de la Solución Igual a Cero	26
3.7.2. Función Inicial de la Derivada de la Solución Igual a Cero	34
3.7.3. Funciones Iniciales Distintas de Cero	43
3.8. Soluciones con una Posible Interpretación Física	47
4. Conclusiones	49
A. Códigos de Soluciones Numéricas	51
A.1. Ecuación de Onda	51
A.2. Ecuación Wheeler-DeWitt con Métrica FLRW	52
A.3. Programas para la ecuación de Wheeler-DeWitt	54
A.3.1. Código con medias variables	54
A.3.2. Código con sigmas variables	59
A.3.3. Código con lambda variable	64
A.3.4. Código con masa variable	67
Bibliografía	71

Agradecimientos

A mi familia, a mi chica, a mis amigos, a mi tutor y a México.

Resumen

En esta tesis se desea mejorar la comprensión de las consecuencias de las condiciones de frontera en la función de onda del universo de la ecuación de Wheeler-DeWitt para modelos de cosmología cuántica con una geometría Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker y con un potencial escalar cuártico, para ello se elaboró una clasificación básica de las condiciones de frontera y sus soluciones numéricas. El presente trabajo empieza por clasificar la ecuación diferencial parcial y establecer los intervalos de las variables y las condiciones de frontera, luego se emplea el método numérico de diferencias finitas y se deriva un criterio de estabilidad que debe cumplirse para evitar soluciones divergentes, después se procede a codificar el algoritmo en Python y a calcular las soluciones numéricas, finalmente se elabora una clasificación de dichas soluciones en base a las condiciones de frontera.

Capítulo 1

Introducción

La Cosmología es una ciencia que estudia el universo como un todo empezando por su origen, situación actual y su futuro, como también su tamaño, expansión y su forma. Su inicio empieza por el siglo XVI cuando se establece el principio de Copérnico: "Los humanos no son observadores privilegiados"[1], el cual actualmente es conocido como el principio cosmológico: "El universo a larga escala es homogéneo e isotrópico". Esto, junto a las leyes de la mecánica clásica y la teoría gravitacional de Newton se denomina Cosmología Newtoniana.

El siguiente descubrimiento que ayudó al desarrollo de esta disciplina se dio a principios del siglo XX cuando Einstein publicó la teoría general de la relatividad (GR), la cual expande la teoría gravitacional de Newton. Al ser esta una teoría covariante Hermann Weyl se preguntó como se podría aplicar dicha teoría a un sistema único como el universo, esto le llevo a postular que los cuerpos celestes se mueven en el espacio-tiempo como partículas en un fluido perfecto [2]. De esta manera, el principio cosmológico, la relatividad general y el postulado de Weyl dieron origen a la Cosmología Relativista.

Luego, a principios de los años 1920 se obtuvo una de las soluciones exactas de las ecuaciones de campo de Einstein denominada métrica de Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker (FLRW), esta puede obtenerse meramente del principio cosmológico y describe tres tipos de geometría para el universo: plana, esférica e hiperbólica. El uso de esta métrica en las ecuaciones de campo de Einstein desemboca en las ecuaciones de Friedmann, donde la variable de estudio es un parámetro que mide la expansión del universo denominado factor de escala [2]. También, durante la época hubo descubrimientos observacionales que confirmaron los desarrollos teóricos; como la existencia de otras galaxias además de la Vía Láctea por Edwin Hubble [3] y la expansión del universo confirmada por el corrimiento al rojo por Vesto Slipher [4].

El modelo Cosmológico más aceptado es el del Big Bang. Propuesto inicialmente por Lemaître en 1931 describe la evolución del universo y establece que su origen fue una singularidad a temperatura y densidad muy elevadas [5]. El éxito de esta teoría se debe a que gran cantidad de información observacional se ajusta a este modelo, por mencionar las más conocidas se tiene la ley de Hubble, que muestra la expansión del universo; la radiación de fondo de microondas (CMB), que consiste en una radiación que permea todo el universo e indica que en algún momento el universo estuvo muy caliente y denso; la nucleosíntesis, que es el proceso que da origen a los núcleos atómicos a partir de nucleones y explica la abundancia de elementos ligeros en el universo [6]. Existen variantes del modelo del Big Bang y en la actualidad el modelo más aceptado es el Λ CDM (Lambda Cold Dark Matter) porque incorpora la materia oscura y la energía oscura [7], elementos asociados con la evidencia observacional de la cantidad de materia necesaria para mantener la estructura de las galaxias [8] y con la aceleración de la expansión del universo [9], respectivamente.

A pesar del éxito de la teoría del Big Bang, esta no podía responder todas las preguntas que surgieron en décadas posteriores. La primera fue poco después de su descubrimiento y se denominó el problema del horizonte, la cual está relacionada con la homogeneidad de la temperatura del CMB

[6]. La segunda apareció después del descubrimiento de la física de partículas en los años 1950 y se la llamó el problema de la planitud, la cual cuestiona el valor de la densidad de materia del universo ya que es igual al valor necesario para que el universo sea plano [6]. La tercera surgió después del desarrollo de las grandes teorías de unificación (GUT) en los años 1970 y se la llamó problema de los monopolos magnéticos, ya que según estas teorías el universo temprano corresponde a un sistema con condiciones necesarias para la creación de monopolos magnéticos [6]. Con la finalidad de intentar resolver estas tres preguntas Starobinsky, Guth y Linde desarrollaron la teoría de la inflación, la cual es una adición a la teoría del Big Bang y proponen que en un periodo muy temprano en la evolución del universo el factor de escala estaba incrementando su valor aceleradamente, esto produjo que el universo se expanda de manera exponencial y extremadamente rápido [6]. Actualmente a la inflación se la considera una teoría de condiciones iniciales porque modelos con parámetros muy similares predicen universos distintos [10].

La relatividad general predice que toda la energía y el espacio tiempo del universo se encontraban en una singularidad inicial antes del Big Bang pero esta no puede explicarla. Por otro lado, debido a su tamaño, la singularidad pertenece al campo de la mecánica cuántica lo cual conlleva a que se desarrollaran teorías que cuantizaran la gravedad. De esta manera se abrió el campo de la gravedad cuántica cuyos primeros trabajos datan de los años 1930 hechos por Leon Rosenfeld [11][12] y Matvei Broinsein [13], y que para el final de los años 1950 se obtuvieron ideas básicas para enfrentar el problema. Actualmente la gravedad cuántica esta siendo estudiada principalmente por dos enfoques distintos: a través de la teoría de cuerdas y la loop quantum gravity cuya diferencia yace en que la primera esta enfocada en unir todas las interacciones fundamentales y la segunda se concentra en cuantizar solamente la gravedad [14].

La cosmología cuántica es aquella disciplina que utiliza la gravedad cuántica para estudiar al universo y una de las descripciones del mismo es a través de la ecuación de Wheeler-DeWitt (WDWE). Esta corresponde a una ecuación en derivadas parciales sobre la función de onda del universo y se obtiene al cuantizar canonicamente la relatividad general escrita bajo el formalismo ADM [15].

En el presente trabajo se desea mejorar la comprensión de las consecuencias de las condiciones de frontera en la función de onda del universo de la ecuación de Wheeler-DeWitt para modelos de cosmología cuántica con una geometría Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker y con un potencial escalar cuártico, para ello se elaboró una clasificación básica de las condiciones de frontera y sus soluciones numéricas.

Capítulo 2

Fundamento Teórico

2.1. Sistemas Hamiltonianos con Constricciones

Del sistema Lagrangiano se puede extraer la matriz Hessiana, cuyos elementos están definidos por $W_{ij} := \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}$, para clasificar dos tipos de sistemas. El primero se denomina sistema regular y se caracteriza porque $\det[W_{ij}] \neq 0$, esto permite que todas las aceleraciones se escriban en función de las coordenadas y velocidades generalizadas. El segundo sistema se llama singular y se caracteriza porque $\det[W_{ij}] = 0$, esto se traduce en la existencia de constricciones que actúan como restricciones en los valores iniciales y por tanto requiere de una extensión del formalismo de Hamilton para su descripción. En el sistema Hamiltoniano es sencillo estudiar las constricciones y el método para encontrarlas se denomina Algoritmo de Dirac [16].

El algoritmo de Dirac empieza por la acción, la cual es una funcional dada por

$$S[q(t)] = \int L(q, \dot{q}) dt, \quad (2.1)$$

donde L es la Lagrangiana de un sistema físico. Usando el principio de mínima acción, el cual establece que la variación de la acción es igual a cero, se obtienen las ecuaciones de movimiento del sistema. Se procede a aplicar la transformación de Legendre

$$H(q, p) = \dot{q}^i p_i - L, \quad (2.2)$$

transformando el sistema Lagrangiano a uno Hamiltoniano, donde $H(q, p)$ es la función Hamiltoniana y $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$. En sistemas regulares los momentos son funciones independientes de las velocidades pero no así en sistemas singulares. De esta manera, una restricción primaria es una relación entre las coordenadas generalizadas y los momentos canónicos que se obtiene en el proceso de la formulación Hamiltoniana y se escribe de la siguiente manera

$$\psi_s \approx 0, \quad s = 1, \dots, S, \quad (2.3)$$

donde S es el número de constricciones primarias y el símbolo \approx significa “hasta los términos que se hacen cero en la superficie de restricción $\psi_s = 0$ ”. Incorporando las constricciones en el Hamiltoniano se obtiene el Hamiltoniano total

$$H_T = H + \lambda^s \psi_s, \quad (2.4)$$

donde λ^s son multiplicadores de Lagrange. Las ecuaciones de movimiento correspondientes escritas con el corchete de Poisson son

$$\dot{q}^i \approx \{q^i, H_T\}, \quad (2.5)$$

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.1. SISTEMAS HAMILTONIANOS CON CONSTRICCIONES

$$\dot{p}_i \approx \{p_i, H_T\}, \quad (2.6)$$

Estas ecuaciones indican que el Hamiltoniano total genera el flujo dinámico de las variables del espacio fase en el tiempo. De manera general, sea $F(q^i, p_j)$ una función arbitraria del espacio fase, entonces

$$\dot{F} \approx \{F, H_T\} \quad (2.7)$$

representa el cambio de F generado por H .

Con esto en mente, el siguiente paso a realizar se denomina condición de consistencia y se caracteriza por determinar las ecuaciones de Hamilton para las constricciones primarias, i.e.

$$\dot{\psi}_s = \{\psi_s, H_T\} \approx 0. \quad (2.8)$$

De esta última ecuación surgen las constricciones secundarias, siendo aquellas que cumplen la siguiente expresión

$$\chi_k := \dot{\psi}_k \approx 0, \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.9)$$

donde K es el número de constricciones secundarias. Luego se aplica las condiciones de consistencia para las constricciones secundarias, de tal manera que

$$\dot{\chi}_k = \{\chi_k, H_T\} \approx 0, \quad (2.10)$$

y así sucesivamente hasta que no existan más constricciones. Es importante resaltar que no deben usarse estas constricciones antes de trabajar en los corchetes de Poisson, es por eso que las ecuaciones que tienen el símbolo \approx se denominan ecuaciones débiles [17].

Existe otro tipo de clasificación de las constricciones. Primeramente compactamos las constricciones primarias y secundarias de la siguiente manera

$$\phi_j \approx 0, \quad j = 1, \dots, J = S + K. \quad (2.11)$$

Por otro lado, sea $f = f(q, p)$ una cantidad dinámica, entonces se dice que f es de primera clase si $\{f, \phi_j\} \approx 0$ y f es de segunda clase si $\{f, \phi_j\} \neq 0$. Las constricciones de primera clase se caracterizan porque su flujo hamiltoniano es tangente a la superficie de restricción y por tanto se suman al Hamiltoniano, en cambio las constricciones de segunda clase generan un flujo transversal a dicha superficie y por tanto requieren de un tratamiento distinto. Eh aquí el paréntesis de Dirac el cual es una modificación del paréntesis de Poisson y tiene la finalidad de mantener el flujo hamiltoniano de las constricciones de segunda clase dentro de la superficie de restricción, su expresión esta dada por

$$\{f, g\}_D := \{f, g\} - \sum_{I, J} \{f, C^I\} (\{C^I, C^J\})^{-1} \{C^J, g\}, \quad (2.12)$$

donde C^I son constricciones de segunda clase y las sumas es para todas las constricciones secundarias [16].

Un resumen de la clasificación de las constricciones es la siguiente:

■ Primera Clasificación

- Constricciones Primarias: Relación entre las coordenadas y los momentos que se obtienen en el proceso de la formulación Hamiltoniana.
- Constricciones Secundarias: Relación entre las coordenadas y los momentos que se obtienen usando las ecuaciones de movimiento.

■ Segunda Clasificación

- Constricción de Primera Clase: Constricción cuyo paréntesis de Poisson con todas las demás constricciones es cero.
- Constricción de Segunda Clase: Constricción cuyo paréntesis de Poisson con al menos una constricción es distinto de cero.

2.2. Formalismo ADM

El formalismo ADM fue publicado por Arnowitt, Deser y Misner en 1959, sirve como base para la teoría hamiltoniana de la relatividad general y surge a partir de que solamente las derivadas temporales de una cantidad pueden ser transformadas a momentos. La idea que subyace es la foliación $3 + 1$ del espacio-tiempo donde la parte espacial está representada por una familia de hipersuperficies de tres dimensiones $\Sigma_t : t = \text{función constante de algún tiempo } t$ [18].

La geometría que describe la relatividad general es la Rimaniana, de esta manera existe un vector normal X^a a la superficie Σ_t y esta dado por

$$X^a = g^{ab}\partial_b t, \quad (2.13)$$

donde g^{ab} es la métrica del espacio-tiempo. Este vector es temporaloide y corresponde a un flujo hamiltoniano generado por la misma foliación, además puede ser normalizado para obtener el campo vectorial unitario n^a normal a la superficie Σ_t , cuya expresión es

$$n^a := X^a / \sqrt{-g_{bc}X^bX^c}. \quad (2.14)$$

Con esto en mente se procede a definir para cada superficie Σ_t una métrica inducida h_{ab} como

$$h_{ab} = g_{ab} + n_a n_b, \quad (2.15)$$

la cual actúa como un proyector por que proyecta los flujos (“Hamiltonianos”) sobre la superficie Σ_t . Algunas de sus propiedades son $h_{ab}n^b = 0$ y $h_{ab}s^a = g_{ab}s^a$, donde s^a es un vector tangente a Σ_t . Además es muy importante tomar en cuenta que h_{ab} no tiene inversa, pero h^{ab} actúa como tal solamente en Σ_t [16].

Con la finalidad de darle una dirección a las derivadas respecto del tiempo se procede a definir el campo vectorial de evolución temporal t^a , el cual se interpreta como el flujo del tiempo a lo largo del espacio tiempo. La descomposición de este campo en una parte tangencial y normal a Σ_t es la siguiente

$$t^a = Nn^a + N^a, \quad (2.16)$$

donde $N := -n_a t^a$ se denomina función de lapso y $N^a := h^{ab}t_b$ vector de desplazamiento [19]. Es importante mencionar que para un espacio isotrópico $N^a = 0$. Una representación visual de la descomposición se muestra en la figura 2.1. La función de lapso mide la velocidad de flujo del tiempo propio respecto a la coordenada tiempo cuando uno se mueve perpendicularmente a Σ_t a lo largo de n^a , y el vector de desplazamiento mide cuánto cambia el sistema de coordenadas espaciales locales tangencial a Σ_1 cuando se mueve de Σ_1 a Σ_2 a lo largo de n^a [20]. Geometricamente t^a se interpreta de la siguiente manera, tomemos dos hojas de la foliación Σ_t y consideremos un punto en cada hoja, entonces el campo vectorial de evolución temporal t^a conecta el punto de la hoja uno con el de la hoja dos, de esta manera se obtiene la dependencia temporal de un campo ya que se observa el cambio del punto cuando pasa de una hoja a la otra. De esta manera, t^a son curvas integrales cuyas intersecciones con todas las Σ_t corresponden a los mismos puntos en tiempos diferentes [16].

2.3. Ecuación de Wheeler-Dewitt para una métrica FLRW

La métrica FLRW describe un universo homogéneo e isotrópico y está dada por [16]

$$ds^2 = -N(t)^2 dt^2 + a(t)^2 \left[\frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \right], \quad (2.17)$$

donde $N(t)$ es la función lapso dependiente del tiempo, $a(t)$ es el factor de escala dependiente del tiempo, k el parámetro de curvatura constante y las variables espaciales están en coordenadas

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.3. ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT PARA UNA MÉTRICA FLRW

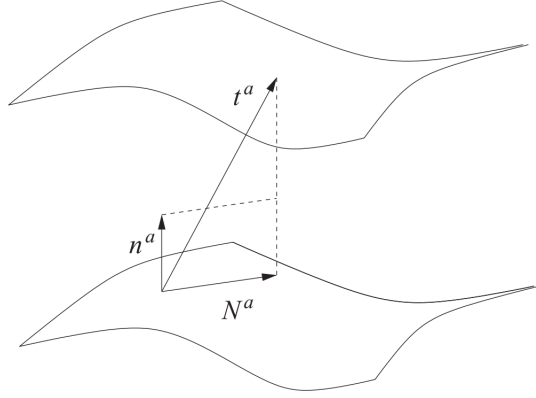


Figura 2.1: Descomposición del vector de evolución temporal t^a en una componente normal n^a y una tangencial N^a . Las hojas representan dos hipersuperficies Σ_t . Figura obtenida de [16].

esféricas. Como se mencionó anteriormente la función de lapso determina la frecuencia de reloj mediante la cual la coordenada t mide el tiempo, el factor de escala es un parámetro adimensional que mide la expansión del universo y el parámetro de curvatura constante es la curvatura intrínseca del espacio y adopta los valores de -1 , 0 o 1 correspondientes a una geometría hiperbólica, plana o esférica, respectivamente [21]. Sin pérdida de generalidad, la función de lapso y el factor de escala son positivos y no pueden ser cero [16].

Usando la métrica FLRW se calcula su determinante y se obtiene

$$g = -\frac{N^2 a^6 r^4 \sin^2 \theta}{1 - kr^2}, \quad (2.18)$$

luego se procede a obtener el escalar de Ricci que adopta la siguiente forma

$$R = \frac{6}{a^2} \left(\frac{a}{N^2} \ddot{a} + \frac{\dot{a}^2}{N^2} - \frac{a\dot{a}\dot{N}}{N^3} + k \right). \quad (2.19)$$

Por otro lado, la acción de Einstein-Hilbert que contiene una parte gravitacional y otra de materia está dado por [22]

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left[\frac{1}{2\kappa} R - \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \partial_\mu \varphi \partial_\nu \varphi - V(\varphi) \right], \quad (2.20)$$

donde $\kappa = 8\pi G/c^4$ es la constante de acoplamiento, φ un campo escalar dependiente del tiempo y $V(\varphi)$ un potencial dependiente del campo escalar. La introducción de este campo de materia en particular se debe a que en cosmología isotrópica el campo escalar es la única fuente de materia que es compatible con las simetrías [16].

Se procede a calcular la Lagrangiana del sistema, para ello se reemplaza las ecuaciones 2.18 y 2.19 en 2.20 y se procede a integrar por partes para eliminar \ddot{a} , luego por fines prácticos se considera que $\int_V dr d\theta d\phi \frac{r^2 \sin \theta}{\sqrt{1-kr^2}} = 1$ (esto es posible si se escoge apropiadamente los límites de integración) y por tanto se obtiene

$$L[N, a, \varphi] = -\frac{3a\dot{a}^2}{\kappa N} + \frac{3Nka}{\kappa} + \frac{a^3 \dot{\varphi}^2}{2N} - Na^3 V(\varphi), \quad (2.21)$$

donde los dos primeros términos surgen de la parte gravitacional de la acción y los dos últimos del campo de materia.

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.3. ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT PARA UNA MÉTRICA FLRW

Se procede a aplicar el algoritmo de Dirac para encontrar las constricciones del sistema. Se empieza calculando los momentos canónicos conjugados cuyas expresiones son

$$p_N = 0, \quad (2.22)$$

y

$$p_a = -\frac{6a\dot{a}}{\kappa N}, \quad p_\varphi = \frac{a^3\dot{\varphi}}{N}. \quad (2.23)$$

La expresión 2.22 es una restricción primaria y está asociado con la libertad de redefinir el tiempo [16]. De esta manera, el Hamiltoniano total adopta la siguiente forma

$$H_T = -\frac{\kappa N p_a^2}{12a} - \frac{3kNa}{\kappa} + \frac{N p_\varphi^2}{2a^3} + Na^3 V(\varphi) + \lambda p_N. \quad (2.24)$$

Aplicando la condición de consistencia sobre la restricción primaria se obtiene la restricción secundaria

$$\dot{p}_N = -\left[-\frac{\kappa p_a^2}{12a} - \frac{3ka}{\kappa} + \frac{p_\varphi^2}{2a^3} + a^3 V(\varphi) \right] \approx 0. \quad (2.25)$$

Luego, usando la condición de consistencia sobre la restricción secundaria se obtiene

$$\ddot{p}_N = \{\dot{p}_N, H_T\} = 0, \quad (2.26)$$

lo que significa que no existen más restricciones secundarias. Además, las dos restricciones obtenidas son de primera clase debido a que se cumple

$$\{p_N, \dot{p}_N\} = 0. \quad (2.27)$$

Finalmente, factorizando N de la Hamiltoniana total 2.24 y usando la restricción 2.22 se obtiene

$$H_T = N \left[-\frac{\kappa p_a^2}{12a} - \frac{3ka}{\kappa} + \frac{p_\varphi^2}{2a^3} + a^3 V(\varphi) \right], \quad (2.28)$$

es posible ver que el corchete corresponde a la restricción 2.25 y además este tiene la forma de un Hamiltoniano para una métrica FLRW con $N = 1$, por tanto si se llama H a la expresión en corchete se obtiene la restricción Hamiltoniana de la relatividad general $H_T = NH = 0$ y como $N(t)$ no puede ser cero, entonces

$$H = 0. \quad (2.29)$$

El siguiente paso a realizar es la cuantización canónica, la cual transforma la restricción Hamiltoniana en un operador, i.e. $H \rightarrow \hat{H}$. Este operador actúa sobre una cantidad denominada función de onda del universo ψ que se define como la amplitud de probabilidad de que el Universo tenga alguna geometría espacial y alguna distribución de materia [23, 24]. En este caso la función de onda del universo depende del factor de escala y del campo escalar, i.e. $\psi = \psi(a, \varphi)$. Por lo tanto, si el operador \hat{H} actúa sobre la función de onda del universo se obtiene

$$\hat{H}\psi(a, \varphi) = 0, \quad (2.30)$$

la cual se denomina ecuación de Wheeler-DeWitt (WDWE) con métrica FLRW. El enfoque de esta ecuación es distinto al de la ecuación de Shrödinger, para empezar la función de onda del universo es distinta y el Hamiltoniano no determina la evolución del sistema, este último se denomina problema del tiempo y representa un obstáculo en la búsqueda de proponer teorías de gravedad cuántica [24].

2.4. Valor Esperado del Factor de Escala

En mecánica cuántica la función de onda $\Psi(x, t)$ describe el estado cuántico de un sistema físico. Esta función pertenece al espacio complejo de Hilbert y para darle una interpretación probabilística es necesario normalizarla. Para ello, primeramente se calcula la norma de la función de onda, dada por

$$\|\Psi(x, t)\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}, \quad (2.31)$$

donde $|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ y $\Psi^*(x, t)$ es el complejo conjugado de $\Psi(x, t)$. Finalmente, la función de onda normalizada $\psi(x, t)$ se obtiene al realizar la siguiente operación

$$\psi(x, t) = \frac{\Psi(x, t)}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}}. \quad (2.32)$$

De esta manera, la función de onda normalizada cumple con la condición

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (2.33)$$

y por tanto la cantidad $|\psi(x, t)|^2$ corresponde a una función de densidad de probabilidad [29]. Todo este procedimiento se denomina interpretación estadística de Born y su importancia radica en que permite conectar el carácter probabilístico de la función de onda con el mundo físico de las observables. Esta conexión se realiza cuando se calculan los valores esperados de una observable C , la cual se define de la siguiente manera: Si un sistema físico se encuentra en el estado $\psi(x, t)$, entonces el valor esperado de una observable C en el tiempo t esta dado por [28]

$$\langle C \rangle = \int \psi^*(x, t) \hat{C} \psi(x, t) dx, \quad (2.34)$$

donde \hat{C} es un operador asociado a la observable C , $\psi(x, t)$ es una función de onda normalizada, $\psi^*(x, t)$ es el complejo conjugado de $\psi(x, t)$ y los límites de integración corresponden al dominio de la variable x .

La observable de mayor importancia del sistema físico dado por la ecuación 2.30 es el factor de escala a cuyo dominio es $0 < a < a_f$, donde a_f es un valor finito mayor a cero. De esta manera, el valor esperado del factor de escala para el campo escalar φ esta dado por

$$\langle a \rangle = \int_0^{a_f} \psi^*(a, \varphi) \hat{a} \psi(a, \varphi) da. \quad (2.35)$$

Considerando que el operador factor de escala puede escribirse como $\hat{a} = a$ y que $|\psi(a, \varphi)|^2 = \psi^*(a, \varphi)\psi(a, \varphi)$, entonces la anterior expresión adopta la siguiente forma

$$\langle a \rangle = \int_0^{a_f} a |\psi(a, \varphi)|^2 da. \quad (2.36)$$

2.5. Elementos de Ecuaciones Diferenciales Parciales con Dos Variables

Las ecuaciones diferenciales parciales (PDEs) son ecuaciones diferenciales que contienen funciones de varias variables desconocidas y sus derivadas parciales. En física se usan como modelos para

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.5. ELEMENTOS DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES CON DOS
VARIABLES

describir el comportamiento de algún sistema físico, por ejemplo la PDE que gobierna la mecánica cuántica es la ecuación de Schrödinger y en una dimensión tiene la forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi, \quad (2.37)$$

donde $\Psi = \Psi(x, t)$ es la solución denominada función de onda y $V = V(x)$ es un potencial. Este motivo conlleva a aprender distintas técnicas para resolver PDEs y el primer paso, antes de aplicar cualquier método, es el de determinar si un problema de PDE es un problema bien puesto, para ello deben cumplirse las siguientes propiedades: [25]

1. Existencia de una solución.
2. Unicidad de la solución.
3. Estabilidad de la solución.

El primer punto establece que la PDE debe contener al menos una solución, el segundo menciona que dadas unas condiciones de frontera y/o iniciales la solución debe ser única y el tercero significa que la solución debe depender continuamente de las condiciones iniciales y/o condiciones de frontera. Los problemas que no son bien puestos se caracterizan por ser inestables porque pequeñas variaciones en las condiciones de frontera generan distintos resultados. Por otro lado, cuando uno resuelve problemas de PDEs es muy importante realizar una clasificación muy detallada de esta y de sus condiciones de frontera y/o iniciales, porque existe una gran cantidad de métodos de resolución, los cuales no funcionan para todos los tipos de PDEs.

Se llaman condiciones iniciales a aquellas que especifican a la solución en el tiempo, en cambio las condiciones de frontera son aquellas que imponen condiciones en la solución a lo largo de la frontera espacial [25], aunque también se puede considerar el tiempo inicial como una frontera. Debido a la variedad de tipos de condiciones de frontera estas tienen la siguiente clasificación [26]:

1. *Condiciones de Dirichlet*: Corresponden a valores de la solución a largo de la frontera. Por ejemplo si el dominio espacial de la función de onda es $0 \leq x \leq l$, entonces las condiciones de Dirichlet podrían ser $\Psi(0, t) = 0$, $\Psi(l, t) = 0$, $t > 0$.
2. *Condiciones de Neumann*: Corresponden a valores de la derivada de la solución a lo largo de la frontera. Por ejemplo si el dominio espacial de la función de onda es $0 \leq x \leq l$, entonces una condición de Neumann podría ser $\Psi_x(0, t) = f(t)$, $t > 0$, donde $f(t)$ es una función del tiempo.
3. *Condiciones de Robin*: Corresponden a valores de la combinación lineal de la solución y la derivada de la solución a lo largo de la frontera. Por ejemplo si el dominio espacial de la función de onda es $0 \leq x \leq l$, entonces una condición de Robin podría ser $\alpha\Psi(0, t) + \beta\Psi_x(0, t) = 0$, $t > 0$, donde α y β son constantes específicas del problema.
4. *Condiciones Mixtas*: Se caracterizan porque una región de la frontera está dada las condiciones de Dirichlet y la otra por las condiciones de Neumann. Por ejemplo si el dominio espacial de la función de onda es $0 \leq x \leq l$, entonces una condición Mixta podría ser $\Psi(x, t) = 0$ si $0 \leq x < l/2$ y $\Psi_x(x, t) = c$ si $l/2 \leq x < l$, para todo $t > 0$, donde c es una constante específica del problema.
5. *Condiciones de Cauchy*: Son las de Dirichlet y de Neumann para un solo problema.

Saber si una PDE es lineal o no es de gran importancia porque estas pueden ser muy sensibles a las condiciones iniciales, puede no existir una solución analítica o la solución numérica diverge. Por tanto se realiza la siguiente clasificación [27]:

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO

2.5. ELEMENTOS DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES CON DOS VARIABLES

1. PDE Lineal: Una PDE es de este tipo si es lineal con respecto a la solución y sus derivadas. Por ejemplo, la PDE

$$a(x, y)u_x + b(x, y)u_y + c(x, y)u + e(x, y) = 0,$$

es lineal porque la solución u y sus derivadas son de grado uno. Esto es válido a pesar de que los coeficientes son funciones de las variables x y y .

2. PDE Cuasi-lineal: Una PDE es cuasi-lineal si es lineal con respecto a todas las derivadas de orden máximo de la solución. Por ejemplo, la PDE

$$a(x, y, u)u_x + b(x, y, u)u_y + c(x, y, u) = 0,$$

es cuasi-lineal porque los coeficientes a y b no dependen de u_x y u_y , respectivamente y por tanto son de grado uno. Es importante notar que el carácter cuasi-lineal está dado porque las derivadas de la solución están multiplicadas por funciones de la solución u . Muchos autores no hacen esta clasificación y por tanto es considerada como no lineal.

3. PDE No lineal: Una PDE es no lineal si no es ni lineal ni cuasi-lineal. Por ejemplo, la PDE

$$a(x, y, u, u_x, u_y)u_x + b(x, y, u, u_x, u_y)u_y + c(x, y, u) = 0,$$

es no lineal porque al multiplicar las derivadas por sus coeficientes se obtienen derivadas de grado distinto de uno.

Gran cantidad de modelos físicos corresponden a PDEs de segundo orden y para esta clase de ecuaciones es importante determinar el tipo de estructura (geometría) que tienen. Empezamos escribiendo la forma general de una PDE de segundo orden en dos variables

$$au_{xx} + bu_{xt} + cu_{tt} + f(x, t, u, u_x, u_t) = 0, \quad (2.38)$$

donde a , b y c son coeficientes constantes y f es una función que depende de las variables, la solución y las derivadas de primer orden de la solución. Luego, la expresión

$$L := au_{xx} + bu_{xt} + cu_{tt}. \quad (2.39)$$

se denomina parte principal. Finalmente la cantidad

$$d := b^2 - 4ac \quad (2.40)$$

se denomina discriminante y el signo de esta permite clasificar el tipo de estructura que tendrá una PDE. Por lo tanto, una PDE es hiperbólica si $d > 0$, parabólica si $d = 0$ y elíptica si $d < 0$ [25]. Podemos ver que el discriminante tiene una forma similar al argumento de la raíz de la solución de la fórmula cuadrática. Esta clasificación también es válida cuando los coeficientes dependen de las variables x y t , pero en este caso la estructura de la PDE cambia dependiendo del dominio de los coeficientes.

Considerando esta clasificación es posible determinar el tipo de algunos modelos conocidos [25]:

1. *Ecuación de Difusión*: Es una ecuación parabólica que describe procesos de transporte como ser la conducción de calor o la difusión de una sustancia. Se caracteriza porque las señales tienden a difuminarse y tiene la siguiente forma:

$$u_t - ku_{xx} = 0, \quad (2.41)$$

donde k es una constante que puede ser la constante de difusión en modelos de transporte molecular o la difusividad en modelos de conducción de calor. Para resolverla es necesario una condición de frontera y una condición inicial.

2. *Ecuación de Onda*: Es una ecuación hiperbólica que describe a las ondas, las cuales se propagan a una velocidad c . En este caso las señales tienen coherencia y tiene la siguiente forma:

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0. \quad (2.42)$$

Para hallar una solución se necesita una condición de frontera, una condición inicial para la solución y una condición inicial para la derivada de la solución.

3. *Ecuación de Laplace*: Es una ecuación elíptica que describe procesos estáticos y se aplica en la electrostática, la gravitación y los fluidos. La forma de la ecuación de Laplace es

$$u_{xx} + u_{yy} = 0, \quad (2.43)$$

y sus soluciones se llaman funciones armónicas. Para resolverla se necesita una condición de frontera.

Una de las variables de la ecuación de Difusión y de la ecuación de Onda es el tiempo y por tanto describen procesos dinámicos, es por eso que estas ecuaciones reciben el nombre de ecuaciones de evolución, en cambio la ecuación de Laplace solamente tiene variables espaciales y por tanto describe procesos estáticos, es por eso que esta recibe el nombre de ecuación de equilibrio.

2.6. Método de Aproximación de Diferencias Finitas

La dificultad que presentan las PDEs en su resolución y en especial la carencia de soluciones analíticas de muchas PDEs conllevó a que se desarrollaran métodos numéricos para estudiar sus soluciones. Uno de los métodos más simples se denomina aproximación de diferencias finitas cuya idea subyace en reemplazar las derivadas de la PDE continua por una aproximación de diferencia de cocientes transformándola en una ecuación algebraica discreta. Una de las ventajas del método es que puede resolverse usando una computadora en un número finito de pasos, pero al precio de obtener una solución aproximada y solamente para una región específica del dominio de las variables, aun así dan mucha información de la naturaleza y el comportamiento de la PDE [25].

La diferencia de cocientes puede obtenerse del teorema de Taylor. Sea $u = u(x, t)$ una función suficientemente suave con $n + 1$ derivadas continuas cerca de una vecindad de los puntos x y t , h un incremento suficientemente pequeño de x y k un incremento suficientemente pequeño de t , entonces el teorema de Taylor para la variable x y para la variable t son, respectivamente

$$u(x + h, t) = u(x, t) + u_x(x, t)h + \frac{1}{2}u_{xx}(x, t)h^2 + \frac{1}{3!}u_{xxx}(x, t)h^3 + \dots + \mathcal{O}(h^{n+1}), \quad (2.44)$$

$$u(x, t + k) = u(x, t) + u_t(x, t)k + \frac{1}{2}u_{tt}(x, t)k^2 + \frac{1}{3!}u_{ttt}(x, t)k^3 + \dots + \mathcal{O}(k^{n+1}), \quad (2.45)$$

donde $\mathcal{O}(h^{n+1})$ y $\mathcal{O}(k^{n+1})$ se llaman términos de error y son de orden $n + 1$. Tomando solamente los términos de primer grado en h y en k y despejando la primera derivada se obtiene la aproximación de diferencia hacia adelante cuyas formas son, respectivamente [25]

$$u_x = \frac{u(x + h, t) - u(x, t)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (2.46)$$

$$u_t = \frac{u(x, t + k) - u(x, t)}{k} + \mathcal{O}(k). \quad (2.47)$$

Las aproximaciones para u_{xx} y u_{yy} se denominan aproximaciones de diferencia centrada y se obtienen de la siguiente manera: Primero se reemplaza h por $-h$ en 2.44 y k por $-k$ en 2.45, obteniendo respectivamente

$$u(x - h, t) = u(x, t) - u_x(x, t)h + \frac{1}{2}u_{xx}(x, t)h^2 - \frac{1}{3!}u_{xxx}(x, t)h^3 + \mathcal{O}(h^4), \quad (2.48)$$

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.6. MÉTODO DE APROXIMACIÓN DE DIFERENCIAS FINITAS

$$u(x, t - k) = u(x, t) - u_t(x, t)k + \frac{1}{2}u_{tt}(x, t)k^2 - \frac{1}{3!}u_{ttt}(x, t)k^3 + \mathcal{O}(k^4), \quad (2.49)$$

luego se suman 2.44 con 2.48, 2.45 con 2.49 y se despejan las segundas derivadas, por tanto el resultado final es, respectivamente [25]

$$u_{xx} = \frac{u(x - h, t) - 2u(x, t) + u(x + h, t)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2), \quad (2.50)$$

$$u_{tt} = \frac{u(x, t - k) - 2u(x, t) + u(x, t + k)}{k^2} + \mathcal{O}(k^2). \quad (2.51)$$

Se procede a aplicar este método a la ecuación de onda con condiciones de frontera particulares. Se considera el problema

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c^2 u_{xx}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ u(0, t) &= u(1, t) = 0, \quad t > 0, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad u_t(x, 0) = g(x), \quad 0 < x < 1. \end{aligned} \quad (2.52)$$

El primer paso consiste en discretizar el espacio-tiempo, transformándolo en una rejilla donde los nodos son puntos que adoptan los posibles valores de las variables, esto se hace de la siguiente manera.

$$x_j = jh, \quad j = 0, 1, \dots, J; \quad t_n = nk, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (2.53)$$

donde h y k son números fijos denominados paso para el espacio y el tiempo, respectivamente, y están dados por $h = 1/J$ y $k = 1/N$. El entero J es el número de subintervalos en el dominio espacial $0 < x < 1$ y el entero N es el número de subintervalos en el dominio temporal $0 < t < T$. Es importante introducir una cota superior T al dominio del tiempo porque si no al programa le tomaría un tiempo infinito resolverlo. De esta manera, lo que se busca es una aproximación U_j^n de la solución $u(x_j, t_n)$ para cada nodo (x_j, t_n) . La solución aproximada es una matriz bidimensional U de j filas, asociadas con el espacio, y n columnas, asociadas con el tiempo.

El segundo paso es determinar las ecuaciones que calculan los elementos de la matriz U , esto se logra si se reemplaza 2.50 y 2.51 (despreciando los errores) en la ecuación de onda, luego se sustituyen los términos $u(x_j, t_n)$ por las soluciones aproximadas U_j^n , obteniendo

$$\frac{U_j^{n-1} - 2U_j^n + U_j^{n+1}}{k^2} = c^2 \frac{U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n}{h^2}, \quad (2.54)$$

si se resuelve para U_j^{n+1} se obtiene lo que se denomina esquema explícito o algoritmo de la ecuación de onda, cuya forma es

$$U_j^{n+1} = 2(1 - s^2)U_j^n + s^2(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) - U_j^{n-1}, \quad (2.55)$$

donde

$$s = \frac{ck}{h}. \quad (2.56)$$

Podemos ver que la solución aproximada para el punto (x_j, t_{n+1}) va a depender de los nodos (x_j, t_{n-1}) , (x_{j-1}, t_n) , (x_j, t_n) y (x_{j+1}, t_n) , esta relación se denomina átomo computacional y ayuda a visualizar como se construye la solución aproximada, véase Figura 2.2, adicionalmente indica que los índices de la expresión 2.55 pueden tomar los valores $j = 1, 2, \dots, J - 1$ y $n = 1, 2, \dots, N - 1$. En este caso se observa que para empezar el cálculo de la solución en $t_2 = 2k$ son necesarios los valores de los dos primeros pasos temporales $t_0 = 0$ y $t_1 = k$, los cuales se obtienen de las condiciones iniciales y de frontera.

Con esto en mente el tercer paso consiste en usar las diferencias finitas en las condiciones iniciales y de frontera. Empezando por las condiciones iniciales se tiene que la columna $t = t_0 = 0$ está dada por $u(x, 0) = f(x)$, de esta manera la primera condición inicial aproximada será

$$U_j^0 = f(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, J, \quad (2.57)$$

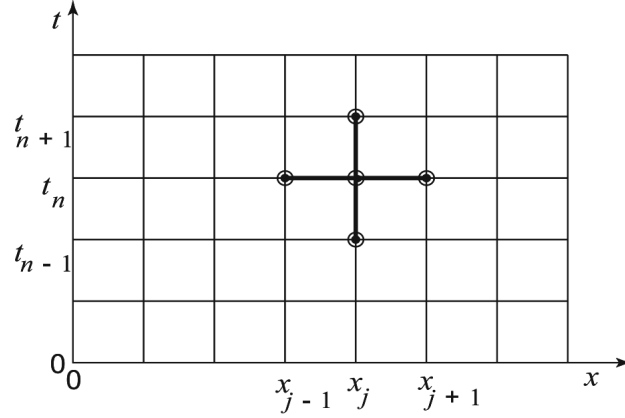


Figura 2.2: Átomo computacional para la ecuación de onda. Los valores al tiempo $n + 1$ dependen de los tiempos previos n y $n - 1$. Figura obtenida de [25].

luego la columna $t = t_1 = k$ está dada por $u_t(x, 0) = g(x)$, por tanto si se reemplaza 2.47, se sustituye los términos $u(x_j, t_n)$ por los U_j^n y se despeja U_j^1 se obtiene la segunda condición inicial aproximada

$$U_j^1 = U_j^0 + kg(x_j), \quad j = 1, \dots, J - 1. \quad (2.58)$$

Procediendo de la misma manera con las condiciones de frontera se tiene que la primera fila $x = x_0 = 0$ está dada por $u(0, t) = 0$, por tanto la primera condición de frontera aproximada será

$$U_0^n = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (2.59)$$

luego la fila $x = x_N = Nk$ está dada por $u(1, t) = 0$, de esta manera la segunda condición de frontera aproximada está dada por

$$U_J^n = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (2.60)$$

Finalmente el cuarto paso es usar recursivamente la ecuación 2.55 hasta llenar toda la matriz U . Las condiciones iniciales y de frontera serán usados para calcular los siguientes valores y así sucesivamente hasta terminar de llenar toda la matriz. El programa que resuelve la ecuación de onda se encuentra en los anexos y la figura 2.3 muestra una gráfica de la solución para el dominio $0 < x < 1$ y $0 < t < 16$, los parámetros $h = 0,125$, $k = 0,1$ y $c = 0,25$, y las condiciones iniciales $f(x) = 0$ y $g(x) = x - x^2$. Esta solución fue corroborada con su solución analítica.

Existe la posibilidad de que el método de diferencias finitas diverja, es por eso que existe un parámetro (criterio de convergencia o estabilidad), llamado condición de Courant-Friedrichs-Lax (CFL), que determina si el programa es o no convergente. La expresión está dada por $s \leq 1$, i.e.

$$c \leq \frac{h}{k}. \quad (2.61)$$

La idea subyacente de esta condición es que el tiempo de cómputo de la amplitud de la onda debe ser menor que el tiempo que tarda la onda de pasar de un punto de la rejilla a otro adyacente, en otras palabras significa que la rapidez de cálculo de los nodos h/k debe ser mayor a la rapidez de propagación de la onda c [25].

Para finalizar, existen tres tipos errores al aplicar el método de diferencias finitas [25]

1. *Errores de Truncación*: Mide el error que se produce en reemplazar la ecuación diferencial por la ecuación de diferencia finita, los cuales surgen por despreciar $\mathcal{O}(h^2)$.

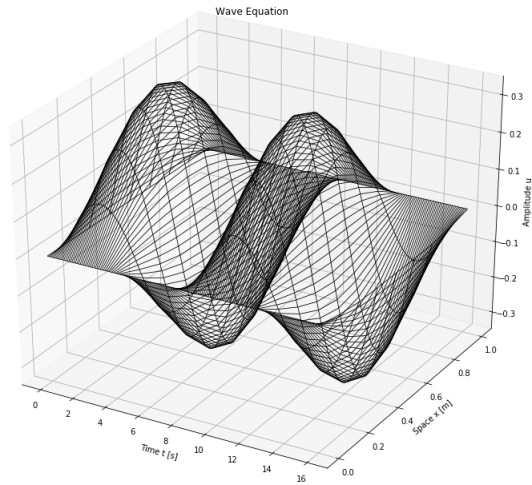


Figura 2.3: Solución numérica de la ecuación de onda por diferencias finitas. Las condiciones iniciales están dadas por las funciones $f(x) = 0$ y $g(x) = x - x^2$, y los parámetros son $h = 0,125$, $k = 0,1$, $c = 0,25$.

2. *Errores de Propagación:* Mide el error que se propaga en el cálculo utilizando el esquema de diferencia en sí, i.e. como una ecuación de diferencia propaga incorrectamente la información.
3. *Errores de Redondeo:* Mide el error acumulado del cálculo debido a la aritmética de dígitos finitos, esto se debe a la limitación de las computadoras.

2.7. Integración Numérica: Método del Trapezoide

El área debajo la curva $f(x)$ es la interpretación geométrica de la integral y este método de integración se caracteriza porque se aproxima dicha área a la de un trapezoide. La idea subyacente de este método radica en aproximar la función que se desea integrar por una función lineal y luego se procede a integrarla. Finalmente, para tener más precisión, el intervalo de integración se divide en varios subintervalos cuyas áreas corresponden a pequeños trapezoides que al sumarlos dan como resultado el área total. Este método es eficiente cuando las funciones son bien comportadas, además es útil cuando se desea integrar una función que no tiene una expresión analítica pero si presenta valores numéricos.

Sea $f(x)$ una función bien comportada, entonces el área bajo la curva limitada por intervalo $a < x < b$ esta dada por

$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad (2.62)$$

realizando la aproximación lineal

$$f(x) \approx f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \quad (2.63)$$

y reemplazándola en la anterior ecuación se obtiene

$$I = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right] dx, \quad (2.64)$$

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTO TEÓRICO
2.7. INTEGRACIÓN NUMÉRICA: MÉTODO DEL TRAPEZOIDE

integrando, simplificando y ordenando términos se obtiene la regla del trapecoide cuya forma es [30]

$$I = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}. \quad (2.65)$$

Si se muestra una gráfica de la función puede verse que el área del trapecoide dado por 2.65 esta girado en 90° ya que $(b - a)$ corresponde a la altura y $\frac{f(a)+f(b)}{2}$ al promedio de las dos bases.

Se procede a dividir el dominio de integración en J subintervalos que tienen el mismo ancho (paso)

$$h = \frac{b - a}{J}. \quad (2.66)$$

Como consecuencia el dominio de integración se discretiza y adopta la forma

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, 1, \dots, J, \quad (2.67)$$

donde $x_0 = a$ y $x_J = b$. Por propiedad la integral 2.62 puede escribirse como

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{J-1}}^{x_J} f(x) dx, \quad (2.68)$$

sustituyendo en cada integral la regla del trapecoide 2.65 se obtiene

$$I = h \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \dots + h \frac{f(x_{J-1}) + f(x_J)}{2}, \quad (2.69)$$

agrupando y ordenando términos se llega a la regla del trapecoide para múltiples subintervalos [30]

$$I = \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{J-1} f(x_j) + f(x_J) \right]. \quad (2.70)$$

La ecuación 2.70 adopta la forma de la fórmula del área de un trapecoide si se la reescribe de la siguiente manera

$$I = (b - a) \frac{f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{J-1} f(x_j) + f(x_J)}{2J}, \quad (2.71)$$

donde $(b - a)$ es la altura y $\frac{f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{J-1} f(x_j) + f(x_J)}{2J}$ es el promedio ponderado de las bases, recordemos que en la gráfica de la función los trapecoides están girados noventa grados. Otra manera de reescribir la formula 2.70 es

$$I = \frac{h}{2} \sum_{j=1}^J [f(x_j) + f(x_{j-1})], \quad (2.72)$$

la cual es práctica a la hora de programar.

Capítulo 3

Cálculos y Resultados

3.1. Desarrollo de la Ecuación de Wheeler-DeWitt para la métrica FLRW

Sabemos que la constricción Hamiltoniana de la relatividad general es $H = 0$, siendo la forma explícita de la Hamiltoniana

$$H = -\frac{\kappa p_a^2}{12a} - \frac{3ka}{\kappa} + \frac{p_\varphi^2}{2a^3} + a^3 V(\varphi). \quad (3.1)$$

Para cuantizar canónicamente se debe garantizar la hermeticidad de la Hamiltoniana, es por eso que se aplica la regla de ordenamiento de Weyl sobre el primer término, obteniendo

$$H = -\frac{\kappa}{36} \left(\frac{1}{a} p_a^2 + p_a \frac{1}{a} p_a + p_a^2 \frac{1}{a} \right) - \frac{3k}{\kappa} a + \frac{1}{2a^3} p_\varphi^2 + a^3 V(\varphi). \quad (3.2)$$

Promoviendo las variables a operadores de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \varphi &\longrightarrow \hat{\varphi} = \varphi; & p_\varphi &\longrightarrow \hat{p}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ a &\longrightarrow \hat{a} = a; & p_a &\longrightarrow \hat{p}_a = -i\hbar \frac{\partial}{\partial a}, \end{aligned}$$

permite promover H a operador, por tanto se obtiene el operador de la constricción Hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\kappa}{36} \left(\frac{1}{a} \frac{\partial^2}{\partial a^2} + \frac{\partial}{\partial a} \frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial a} + \frac{\partial^2}{\partial a^2} \frac{1}{a} \right) - \frac{3k}{\kappa} a - \frac{1}{2a^3} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + a^3 V(\varphi). \quad (3.3)$$

Si este operador actúa sobre la función de onda del universo $\psi(a, \varphi)$ se obtiene

$$\hat{H}\psi = \frac{\kappa}{36} \left[\frac{1}{a} \frac{\partial^2 \psi}{\partial a^2} + \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{1}{a} \frac{\partial \psi}{\partial a} \right) + \frac{\partial^2}{\partial a^2} \left(\frac{\psi}{a} \right) \right] - \frac{3k}{\kappa} a \psi - \frac{1}{2a^3} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + a^3 V \psi. \quad (3.4)$$

Cambiando la notación por la usada en PDEs, desarrollando las derivadas y simplificando términos se llega a

$$\hat{H}\psi = \frac{\kappa}{36} \left[\frac{3}{a} \psi_{aa} - \frac{3}{a^2} \psi_a + \frac{2}{a^3} \psi \right] - \frac{3k}{\kappa} a \psi - \frac{1}{2a^3} \psi_{\varphi\varphi} + a^3 V \psi. \quad (3.5)$$

Si consideramos la constricción Hamiltoniana, entonces toda la anterior expresión es igual a cero, así

$$\frac{\kappa}{12a}\psi_{aa} - \frac{\kappa}{12a^2}\psi_a + \frac{\kappa}{18a^3}\psi - \frac{3k}{\kappa}a\psi - \frac{1}{2a^3}\psi_{\varphi\varphi} + a^3V\psi = 0, \quad (3.6)$$

multiplicando por $12a/\kappa$ y ordenando términos se obtiene la forma explícita de la WDWE para una métrica FLRW

$$\psi_{aa} - \frac{6}{\kappa a^2}\psi_{\varphi\varphi} - \frac{1}{a}\psi_a + \frac{2}{3a^2}\psi - \frac{36k}{\kappa^2}a^2\psi + \frac{12}{\kappa}a^4V(\varphi)\psi = 0. \quad (3.7)$$

3.2. Clasificación de la Ecuación de Wheeler-DeWitt y elección del Potencial

La PDE 3.7 tiene las siguientes clasificaciones:

- Es lineal porque su solución ψ y sus derivadas ψ_a , ψ_{aa} y $\psi_{\varphi\varphi}$ son de grado uno.
- Es hiperbólica porque su parte principal $D = \frac{24}{\kappa a^2}$ es mayor a cero.
- Es parecida a la ecuación de onda pero con mayor complejidad debido a la presencia de términos que contienen ψ y ψ_a .

Por otro lado, si se considera un potencial que sea estable y de mayor complejidad que del oscilador armónico se obtiene el potencial cuártico, cuya forma general es

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - \frac{1}{4!}\lambda\varphi^4, \quad (3.8)$$

donde las constantes m y λ corresponden a la masa y al coeficiente de interacción, respectivamente [31]. De esta manera la WDWE se transforma en

$$\psi_{aa} - \frac{6}{\kappa a^2}\psi_{\varphi\varphi} - \frac{1}{a}\psi_a + \frac{2}{3a^2}\psi - \frac{36k}{\kappa^2}a^2\psi + \frac{12}{\kappa}a^4\left(\frac{1}{2}m^2\varphi^2 - \frac{1}{4!}\lambda\varphi^4\right)\psi = 0. \quad (3.9)$$

3.3. Problema Bien Puesto para la Ecuación de Wheeler-DeWitt

Para que el problema sea bien puesto son necesarios la PDE, el dominio de las variables y las condiciones iniciales y/o de frontera, estas últimas deben asegurar la unicidad y estabilidad de la solución. La PDE a resolver está dada por la expresión 3.9.

Se procede a analizar el dominio de las variables. El factor de escala es un número positivo finito que no puede ser cero, por tanto su dominio está dado por $0 < a < a_f$. Por otro lado, con la finalidad de resolver el problema del tiempo se adopto la convención dada por [33], el cual interpreta el campo escalar como “tiempo”, así esta variable no puede ser negativa y por tanto tiene el dominio $\varphi > 0$.

Finalmente, son necesarias dos condiciones de frontera, una condición inicial para la solución y una condición inicial para la derivada “temporal” de la solución. Como el operador de la constricción Hamiltoniana es hermitico, entonces las condiciones de frontera están dadas por [32]

$$\psi(0, \varphi) = 0, \quad \psi(a_f, \varphi) = 0, \quad (3.10)$$

cuya clasificación es del tipo condiciones de Dirichlet. En cuanto a las condiciones iniciales se tiene de manera general

$$\psi(a, 0) = f(a), \quad \psi_{\varphi}(a, 0) = g(a), \quad (3.11)$$

donde $f(a)$ y $g(a)$ son funciones continuas.

3.4. Método de Diferencias Finitas Aplicada a la Ecuación de Wheeler-DeWitt

Se intentó resolver el problema analíticamente transformando la PDE 3.9 a su forma canónica pero no se obtuvo éxito alguno, esto llevó a atacar el problema de manera numérica. El método a usar es el de diferencias finitas debido a que la WDWE es una ecuación lineal hiperbólica. Como bien se sabe, los métodos numéricos requieren que los dominios de las variables estén acotados, es por eso que se introdujo una cota superior φ_f al dominio del campo escalar. De esta manera, el problema bien puesto de la WDWE se escribe de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \psi_{aa} - \frac{6}{\kappa a^2} \psi_{\varphi\varphi} - \frac{1}{a} \psi_a + \frac{2}{3a^2} \psi - \frac{36k}{\kappa^2} a^2 \psi \\ + \frac{12}{\kappa} a^4 \left(\frac{1}{2} m^2 \varphi^2 - \frac{1}{4!} \lambda \varphi^4 \right) \psi = 0, \quad 0 < a < a_f, \quad 0 < \varphi < \varphi_f, \\ \psi(0, \varphi) = \psi(a_f, \varphi) = 0, \quad 0 < \varphi < \varphi_f, \\ \psi(a, 0) = f(a), \quad \psi_{\varphi}(a, 0) = g(a), \quad 0 < a < a_f. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Para resolver el problema primeramente se genera la rejilla con los nodos

$$\begin{aligned} a_j &= hj, \quad j = 0, 1, \dots, J, \\ \varphi_n &= ln, \quad n = 0, 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde J es el número de subintervalos en $0 < a < a_f$, N es el número de subintervalos en $0 < \varphi < \varphi_f$, $h = \frac{a_f}{J}$ es el paso del factor de escala y $l = \frac{\varphi_f}{N}$ es el paso del campo escalar.

Luego, considerando la aproximación Ψ_j^n de la solución $\psi(a_j, \varphi_n)$ y reemplazando las formulas 2.46, 2.47, 2.50 y 2.51 en la PDE 3.12 se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_{j-1}^n - 2\Psi_j^n + \Psi_{j+1}^n}{h^2} - \frac{6}{\kappa a_j^2} \frac{\Psi_j^{n-1} - 2\Psi_j^n + \Psi_j^{n+1}}{l^2} - \frac{1}{a_j} \frac{\Psi_{j+1}^n - \Psi_j^n}{h} \\ + \frac{2}{3a_j^2} \Psi_j^n - \frac{36k}{\kappa^2} a_j^2 \Psi_j^n + \frac{12}{\kappa} a_j^4 \left(\frac{1}{2} m^2 \varphi_n^2 - \frac{1}{4!} \lambda \varphi_n^4 \right) \Psi_j^n = 0, \end{aligned} \quad (3.14)$$

despejando Ψ_j^{n+1} , simplificando y ordenando términos se llega al esquema explícito de la WDWE

$$\begin{aligned} \Psi_j^{n+1} = \left[2 + \frac{\kappa l^2}{9} + \frac{\kappa l^2}{6h} a_j - \frac{\kappa l^2}{3h^2} a_j^2 - \frac{6\kappa l^2}{\kappa} a_j^4 + 2l^2 a_j^6 \left(\frac{1}{2} m^2 \varphi_n^2 - \frac{1}{4!} \lambda \varphi_n^4 \right) \right] \Psi_j^n \\ + \frac{\kappa l^2}{6h^2} a_j^2 \Psi_{j-1}^n + \frac{\kappa l^2}{6h} \left(\frac{a_j}{h} - 1 \right) a_j \Psi_{j+1}^n - \Psi_j^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

se puede ver que el átomo computacional es el mismo que el de la ecuación de onda, por tanto los índices pueden tomar los valores $j = 1, 2, \dots, J - 1$ y $n = 1, 2, \dots, N - 1$.

Se procede a realizar el anterior procedimiento para las condiciones de frontera e iniciales, de esta manera las condiciones iniciales de 3.12 adoptan la forma

$$\begin{aligned} \Psi_j^0 &= f(a_j), \quad j = 0, 1, \dots, J, \\ \Psi_j^1 &= \Psi_j^0 + lg(a_j), \quad j = 1, \dots, J - 1, \end{aligned} \quad (3.16)$$

mientras que las condiciones de frontera de 3.12 adoptan la forma

$$\Psi_0^n = \Psi_J^n = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (3.17)$$

Finalmente se procede a obtener el criterio de convergencia. Multiplicando la ecuación 3.9 por $-\kappa a^2/6$ se llega a

$$\psi_{\varphi\varphi} - \frac{\kappa}{6}a^2\psi_{aa} + \frac{\kappa}{6}a\psi_a - \frac{\kappa}{9}\psi + \frac{6k}{\kappa}a^4\psi - 2a^6\left(\frac{1}{2}m^2\varphi^2 - \frac{1}{4!}\lambda\varphi^4\right)\psi = 0, \quad (3.18)$$

donde, de manera análoga a la ecuación de onda, el término $v^2 = \frac{\kappa}{6}a^2$ corresponde a la rapidez de onda al cuadrado. Aplicando el método de diferencias finitas nuevamente se llega al esquema explícito dado por 3.15 y la rapidez de onda al cuadrado se transforma en $v_j^2 = \frac{\kappa}{6}a_j^2$. Definiendo la cantidad $s_j = \frac{l}{h}v_j$ el esquema explícito 3.15 puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \Psi_j^{n+1} = & \left[2(1 - s_j^2) + h\frac{s_j^2}{a_j} + \frac{2h^2}{3}\frac{s_j^2}{a_j^2} - \frac{36kh^2}{\kappa^2}s_j^2a_j^2 \right. \\ & \left. + \frac{12h^2}{\kappa}s_j^2a_j^4\left(\frac{1}{2}m^2\varphi_n^2 - \frac{1}{4!}\lambda\varphi_n^4\right) \right] \Psi_j^n + s_j^2\left(\Psi_{j-1}^n + \Psi_{j+1}^n - \frac{h}{a_j}\Psi_{j+1}^n\right) \\ & - \Psi_j^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

cuya forma es una versión extendida del esquema explícito de la ecuación de onda 2.52. Debido a esta semejanza se procedió a usar el criterio CFL de la ecuación de onda para derivar el criterio de convergencia de la ecuación 3.19. Sabiendo que la condición CFL establece que $s \leq 1$, entonces se propone que $s_j \leq 1$ y por lo tanto el criterio de convergencia puede escribirse como

$$\frac{l}{h} \leq \sqrt{\frac{6}{\kappa} \frac{1}{a_j}}, \quad (3.20)$$

puede verse que el término de la derecha no tiene un valor constante porque depende inversamente del factor de escala. El valor mínimo que puede adoptar esta expresión es 0,4886 y surge cuando $j = J$, i.e. $a_j = 1$, además es el de mayor importancia porque el cociente l/h no debe excederlo para que la solución sea convergente.

3.5. Método del Trapezoide Aplicado al Valor Esperado del Factor de Escala

Para calcular el valor esperado del factor de escala primeramente se necesita la norma de la solución numérica $\langle \Psi \rangle^n$ a índice n fijo, la cual se obtiene reemplazando 2.72 en 2.31, por tanto

$$[\langle \Psi \rangle^n]^2 = \frac{h}{2} \sum_{j=1}^J \left[|\Psi_j^n|^2 + |\Psi_{j-1}^n|^2 \right], \quad (3.21)$$

es importante resaltar que n corresponde a un superíndice y no a una potencia. Luego se procede a encontrar la solución numérica normalizada Φ_j^n , cuya forma nace a partir de la expresión 2.32, obteniendo así

$$\Phi_j^n = \frac{\Psi_j^n}{\langle \Psi \rangle^n}. \quad (3.22)$$

Finalmente, teniendo en cuenta la anterior expresión, se reemplaza la regla del trapezoide 2.72 en la ecuación 2.36, entonces el valor esperado del factor de escala $\langle a \rangle^n$ a índice n fijo adopta la siguiente forma

$$\langle a \rangle^n = \frac{h}{2} \sum_{j=1}^J \left[a_j |\Phi_j^n|^2 + a_j |\Phi_{j-1}^n|^2 \right]. \quad (3.23)$$

3.6. Solución Numérica de la Ecuación de Wheeler-Dewitt

El lenguaje de programación usado fue Python versión 3.7 y para la codificación del programa se usaron las librerías “numpy” y “matplotlib.pyplot”; la primera permite el uso de herramientas científicas como vectores, matrices, rejillas, etc. y la segunda permite construir gráficas con los datos almacenados. En cuanto al programa primeramente se construyó la rejilla con nodos dada por 3.13, esto fue posible usando el comando “numpy.arange()”, el cual divide el dominio de las variables en subintervalos, e inmediatamente usando el comando “numpy.meshgrid()”, cuya función es construir la rejilla usando los subintervalos. Luego, con el comando “for”, se establecieron las condiciones de frontera 3.17 seguidas por las condiciones iniciales 3.16. Después se introdujo, respectivamente, el esquema explícito 3.15, la norma de la función de onda 3.21, la normalización de la función de onda 3.22 y el valor esperado del factor de escala 3.23, es importante mencionar que para el esquema explícito el primero comando “for” esta asignado al índice temporal (campo escalar) y el segundo al índice espacial (factor de escala) tal y como debe ser el llenado de la matriz según el átomo computacional. Para finalizar se usaron los datos obtenidos para construir una gráfica tridimensional de la solución de la ecuación de Wheeler-DeWitt $\Psi(a, \varphi)$ y una gráfica del valor esperado en función del campo escalar (tiempo). El código general se encuentra en los anexos. Por fines prácticos se realizaron las siguientes consideraciones:

1. Se usó el sistema de unidades geométrico, i.e. $c = 1$ y $G = 1$. Esto para evitar el uso de números muy grandes y muy pequeños y tener la mejor exactitud posible, adicionalmente ayuda a la hora de programar.
2. El problema está normalizado, i.e. $0 < a < 1$ y $0 < \varphi < 1$. El motivo se debe a que cambiar el dominio de las variables tienen gran impacto en el criterio de convergencia y en la implementación de las condiciones iniciales, esto se traduce en una mayor dificultad a la hora de programar. Para este caso la expresión 3.20 puede tomar la forma $\frac{J}{N} \leq \sqrt{\frac{6}{\kappa}} \frac{1}{a_j}$.
3. La resolución del programa, i.e. el número de subintervalos “espaciales” y “temporales”, fue de $J = 240$ y $N = 500$. El principal motivo se debe porque a resoluciones mayores el tiempo de cómputo es muy tardado, sin embargo en algunos casos se incremento la misma a $J = 2400$ y $N = 5000$ para estudiar algunos comportamientos en particular.
4. Se consideró un universo con geometría plana, i.e. $k=0$. Esto se justifica porque estudios de la misión Planck en 2015 mostraron que el universo tiene un parámetro de curvatura igual a cero con un error muy pequeño. [34].

Con la finalidad de estudiar adecuadamente la función de onda y el valor esperado del factor de escala se procedió a obtener la mayor cantidad de gráficas posibles, para ello se automatizó el código de la solución de la WDWE. En este caso, automatización se refiere al proceso de calcular gran cantidad de gráficas para funciones iniciales de una misma familia, i.e. con la misma estructura (forma) pero con distintos parámetros (valores de las constantes). La implementación de la automatización se encuentra sujeta al tipo de funciones iniciales; en algunos casos no es necesaria debido a que la variación de sus parámetros simplemente se traduce en un cambio en la escala y en otros casos si porque los parámetros afectan el comportamiento de la función en algunos de sus intervalos, e.g. una parábola paralela al eje de las ordenadas centrada en el origen y otra igual pero centrada a la derecha del eje de las ordenadas tienen distinto comportamiento en el intervalo $(0, 1)$.

Las primeras pruebas usando el programa dieron como resultado soluciones divergentes en los bordes, cosa que va en contra de las condiciones de frontera impuestas. Después de una minuciosa revisión del programa, el uso diverso de funciones iniciales para hallar la solución y el estudio de referencias bibliográficas se determinó que el problema correspondía al criterio de estabilidad. A un principio su valor se encontró empíricamente usando distintos valores de la relación entre el número de subintervalos del factor de escala y del campo escalar, llegando al valor aproximado $J/N \leq 1/2$. Luego, a partir del criterio CFL para la ecuación de onda se pudo derivar la relación 3.20. Es

importante mencionar que inicialmente no se intuyó usar la condición CFL para la obtención de 3.20 porque a pesar de las similitudes entre ambas ecuaciones, no son las mismas y no tendrían porque tener el mismo criterio de convergencia. A pesar de esto la relación obtenida resultó ser exitosa porque el programa no presentó los problemas mencionados anteriormente y además el valor mínimo que puede adoptar es 0,4886, siendo próximo al valor empírico.

3.7. Clasificación Básica de las Condiciones de Frontera y sus Soluciones

Como el problema es bien puesto entonces no se puede realizar una elección arbitraria de las funciones iniciales $f(a)$ y $g(a)$, sino se debe escoger funciones que garanticen la existencia, unicidad y estabilidad de la solución. Es por eso que se procede a realizar una clasificación básica de las condiciones de frontera y sus soluciones en base a la forma que presentan las funciones iniciales. Para determinar que el problema es bien puesto se procedió a calcular gran cantidad de soluciones y descartar aquellas que presentaban irregularidades, las cuales se manifiestan en forma de discontinuidades, zigzagueos, picos, etc. Por otro lado, con el fin de obtener soluciones que representan modelos físicos se estudiaron las gráficas obtenidas del valor esperado del factor de escala y se compararon con teorías físicas modernas como ser la inflacionaria y de modelos cíclicos del universo.

3.7.1. Función Inicial de la Solución Igual a Cero

Para esta clasificación se considera $f(a) = 0$, así la condición inicial de la solución y de la derivada de la solución adoptan la siguiente forma

$$\begin{aligned} \Psi_j^0 &= 0, & j &= 0, 1, \dots, J \\ \Psi_j^1 &= lg(a_j), & j &= 1, 2, \dots, J - 1, \end{aligned} \tag{3.24}$$

lo que significa que todos los elementos de la columna $n = 0$ de la matriz solución Ψ son cero. Debido a esto no es posible normalizar Ψ y por tanto, independiente de la forma de la función $g(a)$, este tipo de soluciones no tienen significado físico. Aun así fue relevante estudiar esta clasificación debido a que ayudó a analizar el impacto que aporta la función $g(a)$ en la estabilidad de la solución, como también el valor de los parámetros del potencial 3.8.

Polinomios

La forma general de un polinomio de grado m es $g_m(a) = \sum_{i=0}^m \alpha_i a^i$, donde α_i son constantes y en particular α_0 es la intersección con el eje de las ordenadas (desplazamiento vertical). Resolviendo la WDWE para este tipo de funciones se pudo concluir de manera general que el valor del polinomio en $a_0 = 0$ y $a_J = 1$ influyen en la continuidad de la solución. En el caso $g_m(0)$ las discontinuidades se manifiestan en forma de saltos abruptos que se encuentran entre los términos Ψ_0^n y Ψ_1^n y su origen se debe a la presencia de α_0 , es por eso que esta constante o debe ser un valor muy pequeño o debe ser nulo. Para el caso $g_m(1)$ las discontinuidades no tienen un patrón común pero se encuentran distribuidas alrededor de toda la superficie de la solución, estas dependen del valor de las constantes α_i ($i \neq 0$) y del grado del polinomio, sin embargo pudo observarse que a medida que el valor de $g(1)$ se aleja de cero la discontinuidad en la superficie aumenta.

Con todo lo anterior en mente la función inicial de la derivada se pudo escribir como $g(a) = a(1 - a)h_m(a)$, donde $h_m(a)$ es un polinomio de grado m . Puede verse que la función tiene una raíz en 0 y otra en 1. La elección de esta forma se debe a cuestiones de simplicidad ya que también las funciones que en $g(0)$ y $g(1)$ son cercanas a cero corresponden a buenas aproximaciones. Una gran variedad de pruebas adicionales permitieron generalizar este resultado porque que mostraron

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS
3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

que $h_m(a)$ no necesariamente debía ser un polinomio. De esta manera la condición inicial de la derivada adopta la forma

$$\Psi_j^1 = la_j(1 - a_j)h(a_j), \quad j = 1, \dots, J - 1, \quad (3.25)$$

donde $h(a_j)$ es una función continua en $0 < a < 1$.

Con la finalidad de mostrar lo mencionado anteriormente se analizará un ejemplo específico. La figura 3.1 es una gráfica de la solución de la WDWE para $m = 1$, $\lambda = -1$, $f(a) = 0$ y $g(a) = 1 + 4a - 2a^2$. La discontinuidad debido a la constante independiente en $g(a)$ se encuentra en las líneas que conectan los puntos $\psi(0, \varphi)$ y $\psi(h, \varphi)$, ya que puede verse que existe el salto abrupto mencionado anteriormente. Por otro lado, se observó que existen puntos que al conectarse con otros puntos adyacentes forman picos, este comportamiento se repite en varias regiones de la superficie y se debe a que $g(1) \neq 0$. La figura 3.2 es una solución con los mismos parámetros del potencial que la anterior figura a excepción de que $g(a) = a(1 - a)$, i.e. tiene raíces en $a = 0$ y $a = 1$, y puede observarse que no se presentan ninguno de los problemas que surgen en la anterior figura. Esto se debe a que las raíces de $g(a)$ hacen que esta sea continua respecto a las condiciones iniciales y de frontera.

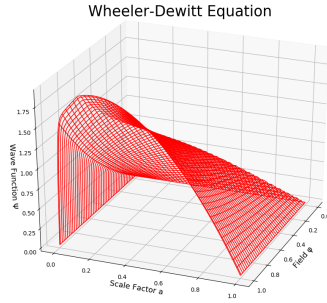


Figura 3.1: Solución para $f(a) = 0$, $g(a) = 1 + 4a - 2a^2$ y parámetros del potencial $m = 1$ y $\lambda = -1$. Las constantes del polinomio son las causantes de la discontinuidad de la solución.

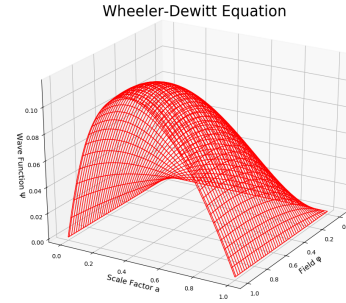


Figura 3.2: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a) = a(1 - a)$. Las raíces del polinomio se encuentran en 0 y en 1 y por tanto la función de onda es continua.

Las figuras 3.3 y 3.4 son soluciones para $g(a)$ igual a polinomios de Legendre de quinto y decimoquinto grado, respectivamente. Una característica de los polinomios de Legendre de grado impar es que todos tienen una raíz igual a cero, esto se ve reflejado porque en las gráficas no existen saltos abruptos cuando los puntos pasan de $\psi(0, \varphi)$ a $\psi(h, \varphi)$. Por otro lado, los valores de las raíces más próximas a la unidad (límite superior del factor de escala) son $a = 0,90618$ para el polinomio de quinto grado y $a = 0,987993$ para el polinomio de decimoquinto grado. Estos valores se ven reflejados en que la discontinuidad es menos evidente en la gráfica para el polinomio con la raíz más próxima a uno, i.e. la figura 3.4. Esta observación también es válida para el caso opuesto donde las raíces de la función $g(0)$ son muy próximas a cero, i.e. al límite inferior del factor de escala. Es por eso que los valores de $g(0)$ y $g(1)$ deben ser cero o muy próximos a cero para que la solución sea estable.

Debido a que la función inicial $g(a) = a(1 - a)$ genera una solución estable se procedió a utilizarla para analizar el impacto que genera el potencial 3.8 en la función de onda. Se realizaron varias pruebas, que no necesariamente se limitaron al uso exclusivo de $g(a) = a(1 - a)$, las cuales mostraron que existen límites que pueden adoptar los parámetros del potencial, estos valores corresponden a aquellos que tienen un impacto moderado en la obtención de la solución, i.e. la función de

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

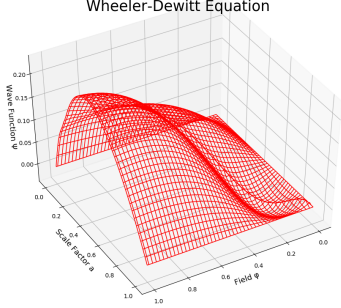


Figura 3.3: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual al polinomio de Legendre de quinto grado. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$. Puede verse que las discontinuidades forman picos.

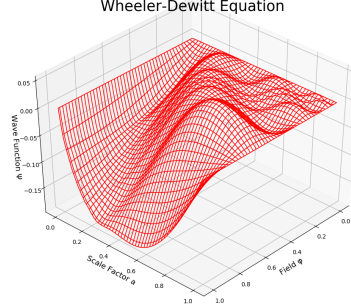


Figura 3.4: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual al polinomio de Legendre de decimoquinto grado. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$. No se aprecian discontinuidades a esta escala.

onda no adopta valores muy alejados de la solución con parámetros de potencial pequeños. Se empezó por analizar los límites de λ y para ello se anuló la contribución de la masa, i.e. $m = 0$, obteniéndose $\lambda \approx 10^6$ y $\lambda \approx -10^4$, las figuras generadas por estos límites corresponden a la figura 3.5 y 3.6, respectivamente. En la primera figura se observó que inicialmente la solución es creciente y luego experimenta un decrecimiento que culmina en dos pulsos. La región descendiente es aproximadamente decreciente en $0,2 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,2 \leq \varphi \leq 1$ y comparándola con la figura 3.2 se concluyó que este dominio corresponde a aquel donde el parámetro de potencial positivo tiene mayor efecto. La segunda figura mostró un comportamiento puramente creciente y se vio que el parámetro de interacción negativo tiene un mayor efecto en la región creciente en $0,4 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,7 \leq \varphi \leq 1$, aproximadamente.

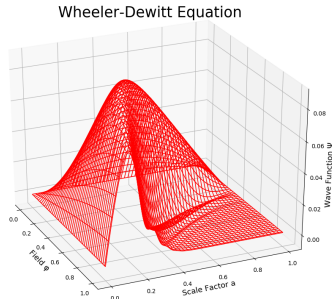


Figura 3.5: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a) = a(1 - a)$ y parámetros del potencial $m = 0$ y $\lambda = 10^6$.

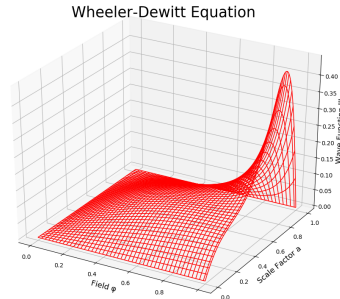


Figura 3.6: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a) = a(1 - a)$ parámetros del potencial $m = 0$ y $\lambda = -10^4$.

El segundo análisis correspondió a la masa y a una combinación de los dos parámetros del potencial. Cuando $\lambda = 0$ el valor límite de la masa es $m \approx 25$ y su solución se muestra en la figura 3.7, pudo verse que el comportamiento y la región de efecto del parámetro es aproximadamente

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

igual al de la figura 3.6, lo que nos llevó a concluir de que el efecto y la región son similares cuando los parámetros tienen signos contrarios. En cambio, cuando los parámetros son del mismo signo se genera un balance entre un incremento debido a la masa y un decremento que se genera por el parámetro de interacción, este balance tiene como valores límite $m = 100$ y $\lambda = 10^6$ y la solución que producen se muestra en la figura 3.8. Pudo verse que existe similar forma y región de efecto que el la figura 3.5, con las excepciones de que el número de pulsos incrementó a tres, existe un incremento antes del primer pulso y los valores numéricos de la función de onda son mayores.

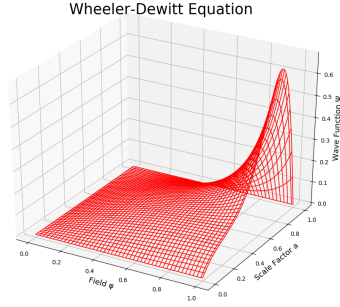


Figura 3.7: Solución para $f(a) = 0$, $g(a) = a(1 - a)$ y parámetros del potencial $m = 25$ y $\lambda = 0$.

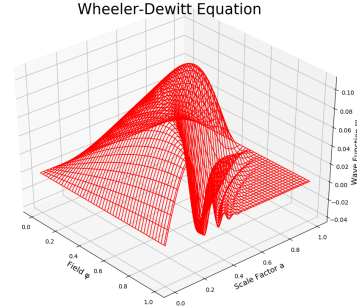


Figura 3.8: Solución para $f(a) = 0$, $g(a) = a(1 - a)$ y parámetros del potencial $m = 100$ y $\lambda = 10^6$.

Para números fuera de los límites mostrados la función de onda adopta valores muy elevados y no se ve visible el aporte de otros términos que no correspondan a los del potencial. Visto de otra forma, los valores del potencial son demasiado grandes y relegan a los demás términos como perturbaciones muy pequeñas. Por lo general la región promedio donde el potencial tiene un mayor efecto es en la esquina dada por $0,5 \leq a \leq 1$ y $0,5 \leq \varphi \leq 1$.

Función Seno

La forma general de la función seno esta dada por $g(a) = A \sin(Ba - C) + D$, donde A es la amplitud, B es la frecuencia de factor de escala, C es el desfase horizontal y D el desfase vertical. Debido a que la solución debe ser estable, entonces los valores de algunos parámetros están restringidos de tal manera que aseguren la continuidad de la solución respecto a las condiciones iniciales. Esto es posible si $C = \sin^{-1} \left(\frac{D}{A} \right)$ para valores de A y D tal que $-1 \leq \frac{D}{A} \leq 1$, esta relación fue obtenida a partir de considerar que para $f(0) = 0$, i.e. la función siempre empieza en el origen. La frecuencia puede tomar un valor arbitrario y por fines prácticos adoptó la forma $B = 2\pi f$, donde f es el número de ondas que entran en un ciclo. Considerando todo esto, la forma de la condición inicial de la derivada adopta la forma

$$\Psi_j^1 = l \left[A \sin \left(2\pi f a_j - \sin^{-1} \frac{D}{A} \right) + D \right], \quad j = 1, \dots, J - 1. \quad (3.26)$$

Los parámetros $A = 3$, $f = 5$ y $D = 0$ representan a una función inicial sin ningún desfase y generan la solución mostrada en la Figura 3.9. Es posible ver que la solución es estable debido a que su comportamiento es continuo, por otro lado puede observarse que el número de familias de crestas es igual al parámetro f .

La solución cuando la condición inicial de la derivada 3.26 tiene como elementos números positivos, i.e. una función coseno cuyo mínimo valor coincide con el origen, se muestra en la figura

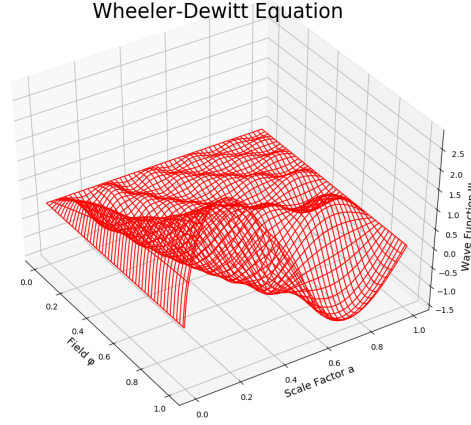


Figura 3.9: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 3$, $f = 5$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

3.10. Puede observarse que no presenta valores negativos, lo cual concuerda con la condición inicial. Por su contraparte, la figura 3.11 es solución para una condición inicial que tiene solamente valores negativos, i.e. una función coseno cuyo máximo valor coincide con el origen, y se asemeja a la anterior figura pero creciente en eje $-z$.

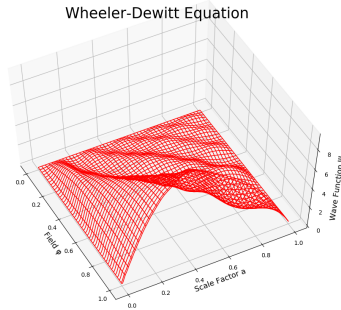


Figura 3.10: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 5$, $f = 5$ y $D = 5$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

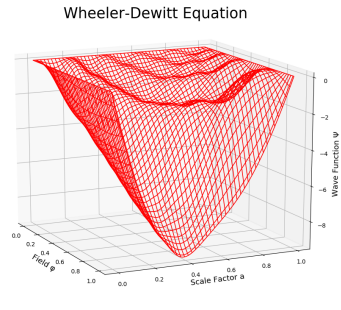


Figura 3.11: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 5$, $f = 5$ y $D = -5$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

Las figuras 3.12 y 3.13 surgen cuando el aporte de la condición inicial de la derivada es en su mayoría positivo y negativo, respectivamente, esto se ve reflejado en que las crestas tienen un mayor valor en el primer caso y los valles en el segundo caso. De todas las figuras mostradas hasta ahora puede concluirse que el comportamiento de la condición inicial se ve reflejada en la solución.

Para estudiar los parámetros del potencial se decidió usar la función $g(a) = 10 \sin(2\pi 5a)$ porque

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

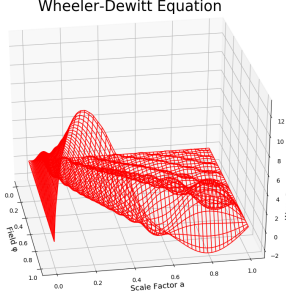


Figura 3.12: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 10$, $f = 7$ y $D = 3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

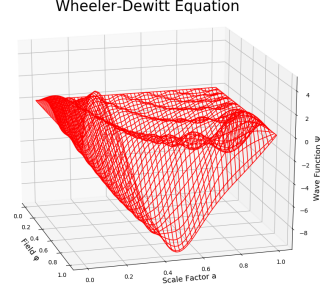


Figura 3.13: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 10$, $f = 7$ y $D = -4$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

esta genera una solución estable. Para este tipo de funciones el valor límite de la masa cuando $\lambda = 0$ es $m \approx 35$, la influencia de este parámetro se hace presente en la región creciente en $0,5 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,5 \leq \varphi \leq 1$, aproximadamente, y tiene un carácter divergente cuando la masa excede al valor límite. La figura 3.14 muestra este comportamiento y es posible ver el número de familias de crestas continuas es igual a f . De manera similar, cuando $\lambda \approx -10^4$ y $m = 0$ el comportamiento de la solución es divergente pero en la dirección negativa y afecta a la región aproximada creciente en $0,5 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,8 \leq \varphi \leq 1$. La figura 3.15 corresponde a una solución con parámetros $m = 100$ y $\lambda = 10^6$ y puede verse que en la región decreciente en $0,4 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,6 \leq \varphi \leq 1$, aproximadamente, el comportamiento ondulatorio de la función de onda es reemplazado por dos pulsos para luego permanecer constante.

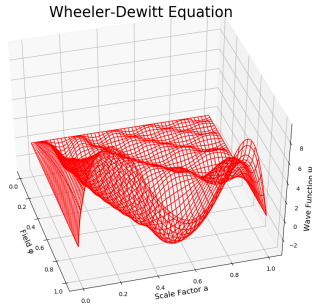


Figura 3.14: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 10$, $f = 5$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 35$ y $\lambda = 0$.

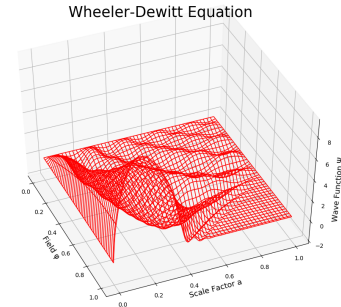


Figura 3.15: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ una función seno con parámetros $A = 10$, $f = 5$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

Como esta condición inicial garantiza la estabilidad de la función de onda, es posible utilizar como funciones iniciales a la familia de de funciones del tipo $g(a) = \sin(2\pi fa)h(a)$, donde $h(a)$ es una función continua en el intervalo $0 \leq a \leq 1$, para hallar una gran variedad de soluciones a la

WDWE.

Distribución Gaussiana

La forma de la distribución normal se asemeja a la de una “campana” y su expresión matemática esta dada por $g(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{a-\mu}{\sigma}\right)^2}$, donde μ es el valor medio de la distribución y σ es la variación. El primero esta asociado con el desplazamiento horizontal del valor máximo de la distribución y el segundo con el ancho que posee la “campana”. Debido a que la función tiende a cero cuando la variable tiende a $\pm\infty$ resulta ser una condición inicial optima para calcular soluciones estables. Para ello es necesario que la distribución sea próxima a cero en $g(0)$ y $g(1)$, esto es posible si el valor medio y la variancia adoptan valores que se encuentren aproximadamente entre $0,2 \leq \mu \leq 0,8$ y $0,04 \leq \sigma \leq 0,1$, respectivamente. Considerando esta función, la condición inicial de la derivada se transforma en

$$\Psi_j^1 = \frac{l}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{a_j - \mu}{\sigma}\right)^2\right], \quad j = 1, \dots, J - 1. \quad (3.27)$$

Si el valor máximo de 3.27 se encuentra más cercano a $a = 0$ la solución tendrá un crecimiento paulatino de mayor valor numérico, este comportamiento se muestra en la figura 3.16 donde los parámetros de la distribución normal son $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,05$. Puede verse que a medida que incrementa el factor de escala y el campo escalar el punto máximo se desplaza en la dirección de estos incrementos. En cambio si el valor máximo de 3.27 está más próximo a $a = 1$ la solución mostrará un crecimiento más brusco pero de menor valor numérico como se muestra en la figura 3.17, donde los parámetros son $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,05$. Una combinación de estos resultados se da

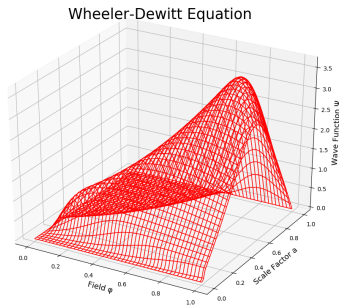


Figura 3.16: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,05$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

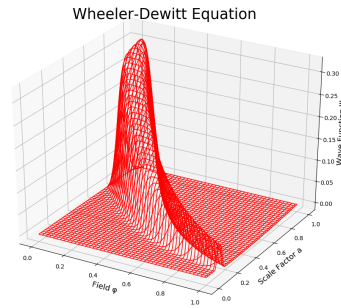


Figura 3.17: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,05$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

cuando $\mu = 0,5$ ya que la solución es paulatinamente creciente pero su valor máximo es más cercano a $a = 1$. Esto se muestra en la figura 3.18, donde $\sigma = 0,075$.

Todas las soluciones obtenidas anteriormente son estables, es por eso que se las usará para estudiar el potencial. La figura 3.19 se obtiene cuando los parámetros son $\mu = 0,5$, $\sigma = 0,075$, $m = 100$ y $\lambda = 10^6$, es posible ver que la solución tiene un comportamiento similar a la figura 3.18 pero presenta pulsos en la región creciente en $0,5 \leq \varphi \leq 1$ y decreciente en $0,2 \leq a \leq 1$. Usando estos mismos valores para los parámetros del potencial se obtienen las figuras 3.20 y 3.21 cuyo comportamiento es similar a las figuras 3.16 y 3.17, respectivamente, pero presentan un

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS
3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

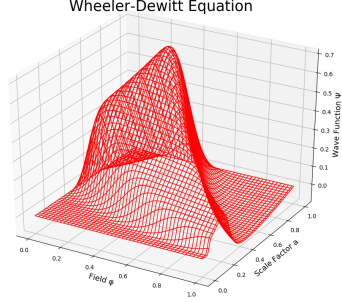


Figura 3.18: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

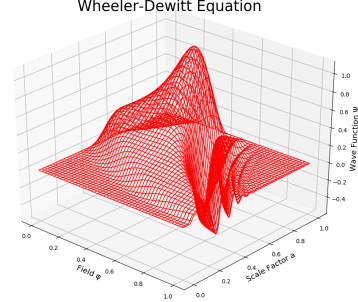


Figura 3.19: Solución para $f(a) = 0$ y $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

decrecimiento seguido por pulsos para luego tener un valor constante, todo esto sucede en la región aproximada creciente en $0,5 \leq \varphi \leq 1$ y decreciente en $0,2 \leq a \leq 1$.

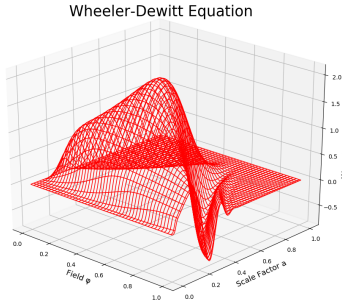


Figura 3.20: Solución para $f(a) = 0$, $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,05$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

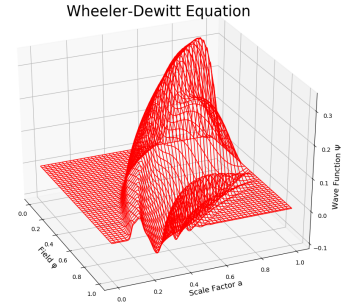


Figura 3.21: Solución para $f(a) = 0$, $g(a)$ igual a una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,05$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

Cabe mencionar que puede descartarse que la aparición de los pulsos tengan un origen en la resolución del programa. Esto se justifica porque, para todas las pruebas realizadas, los picos no desaparecieron al incrementar la misma.

En resumen, esta clasificación ayudó a determinar funciones que generan soluciones estables. Es muy importante mencionar que para garantizar la continuidad de la solución respecto a las condiciones iniciales $g(0)$ y $g(1)$ deben ser cero o muy cercanas a cero, visto de otra manera la función inicial debe tener dos raíces: una en cero o en un valor muy cercano a cero y otra en uno o en un valor muy cercano a uno. Por otro lado, cuando se involucra el potencial en el cálculo de la solución este se ve reflejado de dos maneras: La primera surge cuando el parámetro de interacción es negativo y es de carácter divergente, mientras que la segunda se da cuando el parámetro de interacción es positivo y su efecto se ve en forma de pulsos.

3.7.2. Función Inicial de la Derivada de la Solución Igual a Cero

Para esta clasificación se considera que $g(a) = 0$, entonces la condición inicial de la solución y de la derivada de la solución se transforman en

$$\begin{aligned}\Psi_j^0 &= f(a_j), \quad j = 0, 1, \dots, J \\ \Psi_j^1 &= f(a_j), \quad j = 1, 2, \dots, J - 1.\end{aligned}\tag{3.28}$$

En este caso fue posible normalizar la función de onda y por tanto obtener gráficas del valor esperado del factor de escala en función del campo escalar (“tiempo”), las cuales sirven como vínculo con algunas teorías físicas propuestas. Esta clasificación es relevante porque ayudó a estudiar el impacto que tiene la función $f(a)$ en la solución y en el comportamiento del valor esperado del factor de escala.

Polinomios

De la misma manera que la anterior clasificación, las raíces del polinomio tienen un gran impacto en la estabilidad de la solución. Analizando varios polinomios para $f(a)$ se corroboró que aquellos con al menos una raíz en $a_0 = 0$ y otra $a_J = 1$ dan como resultados soluciones estables. También son buenas aproximaciones los polinomios que presentan al menos una raíz $a_0 \approx 0$ y otra $a_J \approx 1$, siendo esta última la que genera más cambios en la solución. Dichos cambios por lo general son los picos mencionados anteriormente y un comportamiento zigzagueante en ciertas regiones de la solución. Adicionalmente estas características se ven reflejadas en las gráficas del valor esperado del factor de escala.

Considerando todo lo mencionado y de manera similar a la anterior clasificación se construyó la condición inicial de la solución de la siguiente manera

$$\Psi_j^0 = a_j(1 - a_j)h(a), \quad j = 0, \dots, J,\tag{3.29}$$

donde $h(a)$ es una función continua en el intervalo $0 < a < 1$. Se procede a mostrar ejemplos que resaltan la importancia de la existencia de las raíces en $a = 0$ y en $a = 1$ a la hora de elegir la función $f(a)$.

Usando la función $f(a) = 1 - a + a^2 - a^3$, la cual tiene una raíz en $a = 1$, se observó que existe un salto brusco cuando esta pasa de $\psi(0, \varphi)$ a $\psi(h, \varphi)$, este comportamiento se muestra en la figura 3.22 y se debe a que $f(0) \neq 0$, i.e $f(a)$ no presenta una raíz en cero. Este salto tiene repercusión en el valor esperado del factor de escala, ya que analizando la figura 3.23 se observó el mismo comportamiento cuando este pasa de $\varphi = 0$ a $\varphi = l$. Cabe mencionar que este último pudo reducirse en tamaño cuando se incrementó la resolución del programa.

El siguiente caso considerado es un polinomio que tiene solamente una raíz en $a = 0$ y $f(1)$ no es próximo a cero, su forma esta dada por $f(a) = a(1 - a + a^2)$ y la solución que genera se muestra en la figura 3.24. Es evidente que la función de onda no es estable porque en una mitad tiene un crecimiento paulatino y en la otra disminuye abruptamente a valores muy bajos, adicionalmente una vez decrecida la función de onda empieza a mostrar un comportamiento zigzagueante. Este último también se ve reflejado en la figura 3.25 ya que a partir de aproximadamente $\varphi = 0,2$ el valor esperado del factor de escala empieza zigzaguear de forma creciente a medida que el valor del campo escalar aumenta. El salto abrupto se debe a que el valor de $f(1)$ es lejano a cero, mientras que el comportamiento zigzagueante se debe a la resolución del programa, este último se justifica debido a que un incremento en la resolución disminuyó el zigzagueo de la función de onda y del valor esperado del factor de escala. Cabe mencionar que el incremento en la resolución no resolvió el problema del salto abrupto y por tanto puede descartarse que ese sea el motivo de su origen.

La figura 3.26 corresponde a la solución de la WDWE para $f(a) = 1 - a + 0,25a^2 - 0,125a^3$. Este polinomio no presenta las raíces deseadas pero $f(1) < 1$. Es posible ver que existe un salto abrupto cuando la solución pasa de $\psi(0, \varphi)$ a $\psi(h, \varphi)$ el cual también se ve reflejado en la figura 3.27 cuando el valor esperado del factor de escala pasa de $\varphi = 0$ a $\varphi = l$. Nuevamente la explicación a este

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

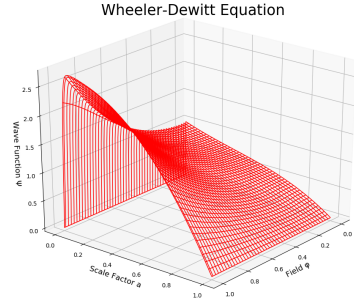


Figura 3.22: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = 1 - a + a^2 - a^3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

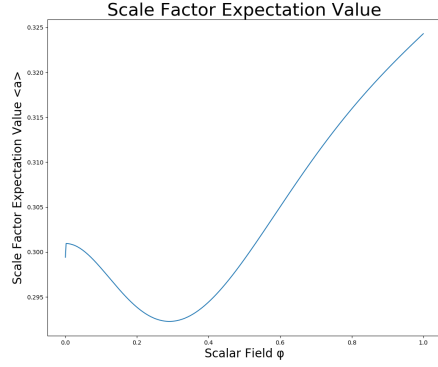


Figura 3.23: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = 1 - a + a^2 - a^3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

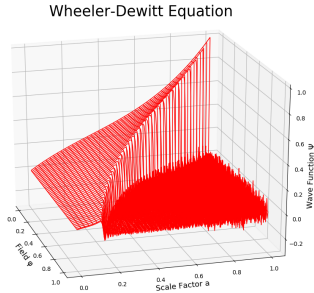


Figura 3.24: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a + a^2)$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

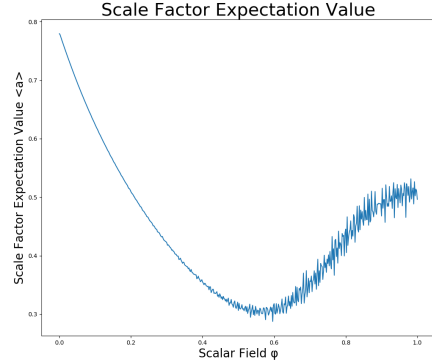


Figura 3.25: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a + a^2)$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

comportamiento se debe a que el valor de $f(0)$ no es próximo a cero. Por otro lado, existen saltos pequeños consecutivos que dividen la superficie en dos regiones; la primera es continua exceptuando el salto que se origina porque $f(0) \neq 0$ y la segunda también es continua pero presenta pequeñas perturbaciones en forma zigzagueante en las líneas que unen los nodos. Nuevamente, este último se corrigió aumentando la resolución del programa. Con la finalidad de entender mejor los motivos que subyacen en este resultado se procedió a estudiar esta función como un problema perteneciente a la anterior clasificación, i.e. $f(a) = 0$ y $g(a) = 1 - a + 0,25a^2 - 0,125a^3$, y los resultados obtenidos mostraron una gráfica de comportamiento similar pero el zigzagueo y los saltos que dividen la superficie en dos son inexistentes, lo que nos lleva a concluir que el valor que adopta $f(1)$ tiene un gran impacto que repercute en la estabilidad de la solución, ya sea por continuidad o zigzagueo. Es por eso que se recomienda que $f(1) = 0$, o en el peor de los casos un valor muy cercano a cero.

Ahora consideramos el caso de un polinomio que tiene una raíz en $a = 0$ y otra en $a = 1$. La figura 3.28 corresponde a la función de onda cuando $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$, esta es una solución estable porque no presenta ninguno de los problemas anteriormente mencionados y tiene

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

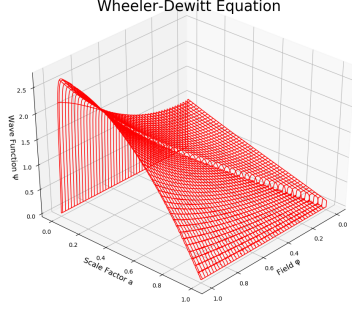


Figura 3.26: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = 1 - a + 0,25a^2 - 0,125a^3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

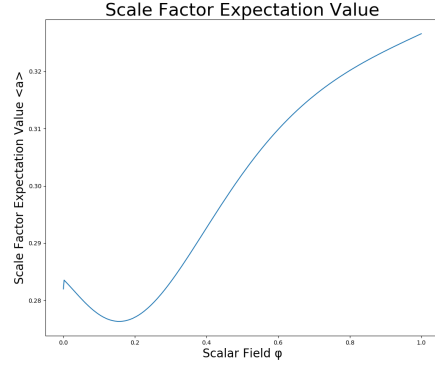


Figura 3.27: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = 1 - a + 0,25a^2 - 0,125a^3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

un comportamiento decreciente continuo. El comportamiento respectivo del valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.29 y tampoco presenta ningún tipo de inconveniente; empieza como una constante, luego decrece hasta un mínimo y finalmente aumenta aceleradamente. Puede concluirse que las raíces de la función hacen que la solución sea estable.

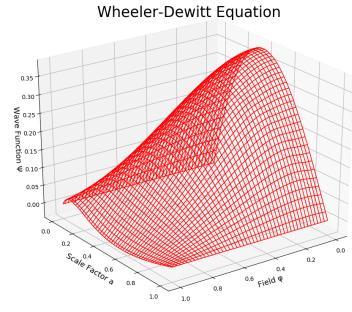


Figura 3.28: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

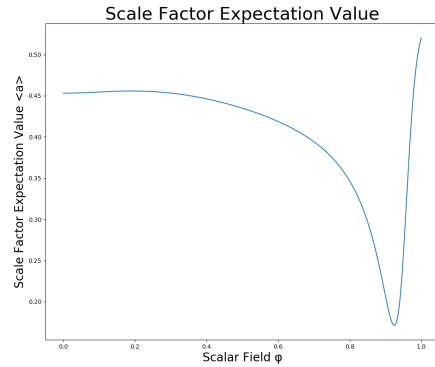


Figura 3.29: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = -1$.

La condición $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$ genera una solución estable, es por eso que se la usó para estudiar el impacto que tienen los parámetros del potencial en la construcción de la solución. La figura 3.30 fue obtenida cuando $m = 20$ y $\lambda = 0$, puede verse que es similar a su análoga dada por la figura 3.28 con la excepción de que es creciente en la esquina $0,4 \leq a \leq 1$ y $0,6 \leq \varphi \leq 1$, este incremento se ve reflejado en un comportamiento puramente creciente del valor esperado del factor de escala. Por comparación con su contraparte dada por la figura 3.29 se concluyó que un incremento en la masa implica un aumento en $\langle a \rangle$. Este comportamiento es similar cuando además λ tiene un valor negativo.

Por otro lado, si $m = 0$ y $\lambda = 10^6$ la solución tiene forma mostrada en la figura 3.32. El potencial

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

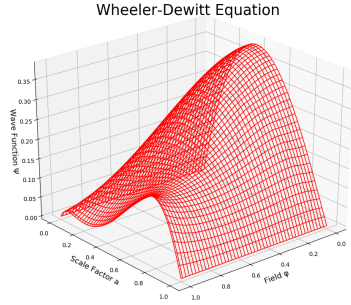


Figura 3.30: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 20$ y $\lambda = 0$.

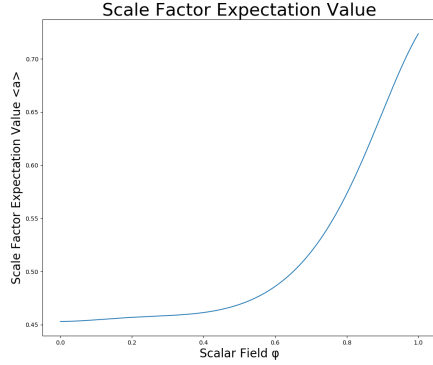


Figura 3.31: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 20$ y $\lambda = 0$.

se hace presente en la región decreciente en $0,4 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,6 \leq \varphi \leq 1$, donde la función de onda tiene un carácter decreciente hasta generar dos pulsos con picos negativos, luego adopta un valor constante $\psi \approx 0$. Esto se traduce en un comportamiento decreciente del valor esperado del factor de escala como se muestra en la figura 3.33.

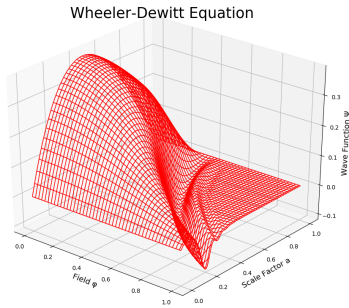


Figura 3.32: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 0$ y $\lambda = 10^6$.

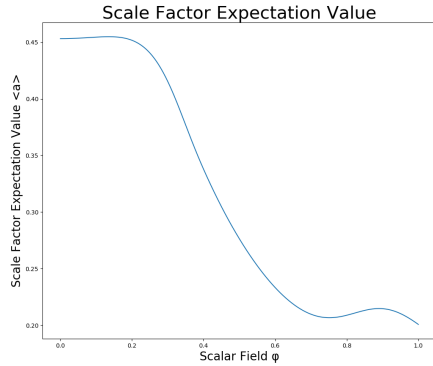


Figura 3.33: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 0$ y $\lambda = 10^6$.

Finalmente, la figura 3.34 tiene como parámetros $m = 100$ y $\lambda = 10^6$, la región de efecto es decreciente en $0,4 \leq a \leq 1$ y creciente en $0,6 \leq \varphi \leq 1$ y puede verse que la solución crece, decrece y tiene varios pulsos. La figura 3.35 muestra el valor esperado del factor de escala y se ve que entre la región $0,2 \leq \varphi \leq 0,4$ adopta su máximo valor y luego decrece, este comportamiento se debe a que primeramente la masa tiene una mayor influencia y luego el parámetro de interacción es el dominante.

De esta manera, podemos decir que a mayor masa y menor parámetro de interacción el factor de escala incrementa, mientras que a mayor parámetro de interacción el factor de escala disminuye.

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

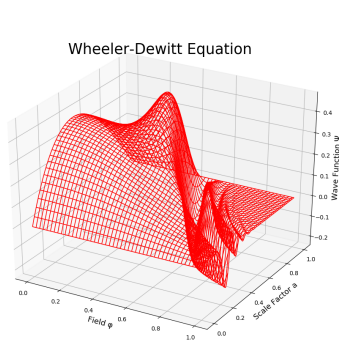


Figura 3.34: Solución de la WDWE para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 100$ y $\lambda = 10^6$.

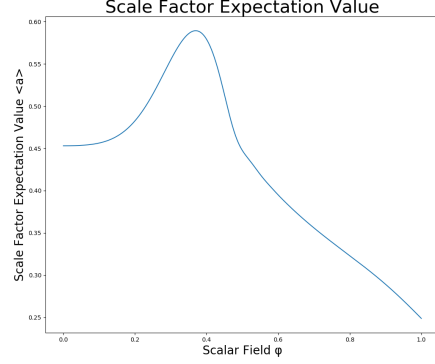


Figura 3.35: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a) = a(1 - a)(2 - a)$. Los parámetros del potencial son $m = 100$ y $\lambda = 10^6$.

Función Seno

Ya se conoce la importancia de que al menos dos raíces de la función inicial sean cero y uno, esto para asegurar la continuidad de la solución respecto a las condiciones iniciales. Entonces, de la misma manera que la anterior clasificación, la función inicial $f(a) = A \sin \left[2\pi f a - \arcsin \left(\frac{D}{A} \right) \right] + D$ garantiza soluciones estables siempre y cuando se cumpla $-1 \leq \frac{D}{A} \leq 1$; recordemos que A representa la amplitud, f el número de ondas que entran en un ciclo, $\arcsin \left(\frac{D}{A} \right)$ el desfase horizontal y D el desfase vertical. De esta manera, la condición inicial de la solución adopta la forma

$$\Psi_j^0 = A \sin \left(2\pi f a_j - \sin^{-1} \frac{D}{A} \right) + D, \quad j = 0, \dots, J. \quad (3.30)$$

Cuando los parámetros de la función inicial tienen los valores $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$ se obtiene la solución dada por la figura 3.36, puede verse que la función de onda es estable y existen 3 familias de crestas (valles) continuas correspondientes con el número f . Sin embargo, esto no se ve reflejado en la gráfica del valor esperado del factor de escala mostrada en la figura 3.37 ya que tanto la cantidad de crestas y valles son mayores al valor de f . Esta observación fue verificada con varias pruebas ya que en ninguna se observó una correlación entre estas cantidades, aun así el comportamiento ondulatorio de la función inicial si se vio plasmada en la gráfica.

Los parámetros $A = 1$, $f = 4$ y $D = 1$ corresponden a una función inicial senoidal con valores positivos solamente y la solución que genera se muestra en la figura 3.38. Nuevamente se ve la correlación entre el número de crestas (valles) y el número f , sin embargo la función de onda presenta valores negativos. Por otro lado, la contribución puramente positiva de la condición inicial surte efecto en el comportamiento del valor esperado del factor de escala ya que la figura 3.39 muestra valores más grandes y además un crecimiento a partir de $\varphi = 0,7$ en adelante. Se realizó la prueba de una contribución puramente negativa de la condición inicial y se obtuvo una solución invertida a la figura 3.38 pero un comportamiento del valor esperado del factor de escala idéntico al de la figura 3.39.

Finalmente, usando los parámetros de la función inicial $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$ se estudió el comportamiento del potencial cuando sus parámetros son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$. Su solución correspondiente se muestra en la figura 3.40 y pudo verse que las ondas crecen más aceleradamente que su contra parte dada por la figura 3.36, además la región aproximada $0,6 \leq a \leq 1$ está dominada por dos pulsos seguidos de $\psi \approx 0$. En cuanto a la figura 3.41 se observó un comportamiento similar

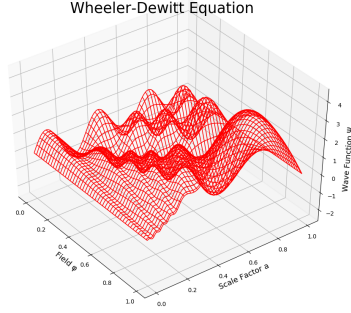


Figura 3.36: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

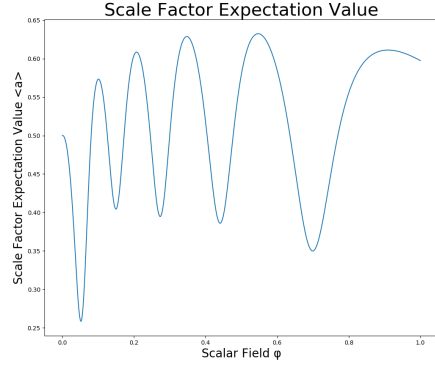


Figura 3.37: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

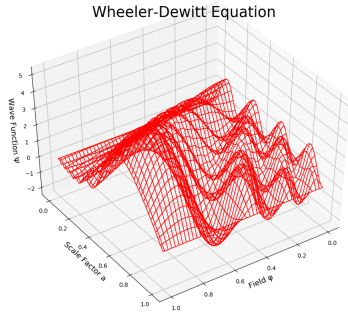


Figura 3.38: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 4$ y $D = 1$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

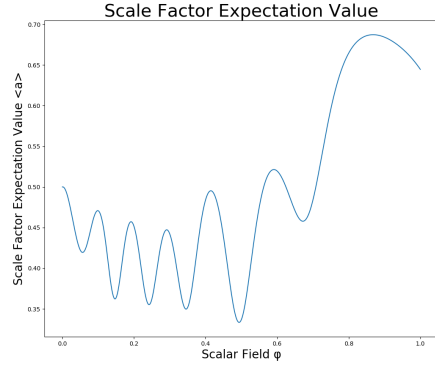


Figura 3.39: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 4$ y $D = 1$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

al de su contraparte dada por la figura 3.37, pero a partir de $\varphi \approx 0,5$ su valor empieza a disminuir. De esta manera podemos concluir que si el potencial es grande entonces el valor esperado del factor de escala disminuye en a medida que se acerca a $\varphi = 1$.

Distribución Gaussiana

Si la función inicial $f(a)$ es una distribución normal entonces la condición inicial de la solución adopta la forma

$$\Psi_j^0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{a_j - \mu}{\sigma} \right)^2 \right], \quad j = 0, \dots, J, \quad (3.31)$$

donde μ es el valor medio y σ la variación. Recordemos que los valores que pueden adoptar estos parámetros son aproximadamente $0,2 \leq \mu \leq 0,8$ y $0,04 \leq \sigma \leq 0,1$, esto con el fin de evitar soluciones inestables.

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

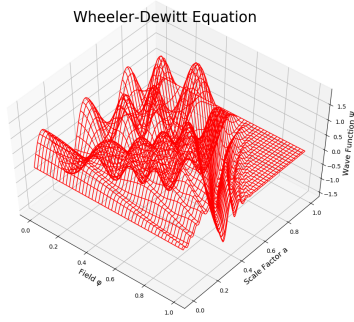


Figura 3.40: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

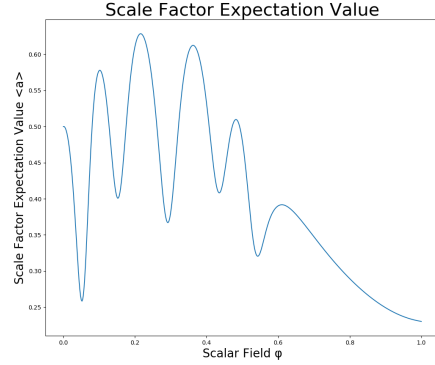


Figura 3.41: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una función seno con parámetros $A = 1$, $f = 3$ y $D = 0$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

Cuando los valores de los parámetros son $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,04$ se genera la solución dada por la figura 3.42. Es posible ver que que la función de onda se divide en dos regiones a partir de la condición inicial en $\psi(0,2,0)$, la primera se encuentra aproximadamente entre $0 \leq a \leq 0,2$ y se caracteriza porque a medida que el campo escalar aumenta el valor máximo de la distribución decrece, mientras que la segunda se encuentra entre $0,2 \leq a \leq 1$, aproximadamente, y su comportamiento es creciente a medida que el campo incrementa su valor hasta que llega a la región $0,8 \leq \varphi \leq 1$ en donde la cresta empieza a transformarse en un valle. La correspondiente gráfica del valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.43 y puede verse que tiene un comportamiento creciente pero en la región $0,7 \leq \varphi \leq 0,9$ forma un valle. Cabe resaltar que el comportamiento en forma de valle siempre aparece en este tipo de clasificación.

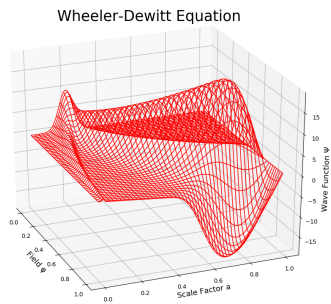


Figura 3.42: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

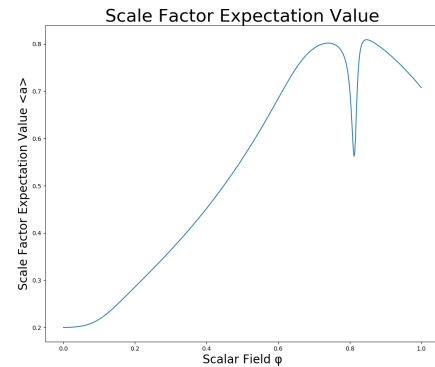


Figura 3.43: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,2$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

La figura 3.44 se obtiene cuando los parámetros de la gaussiana son $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$ y su forma es muy similar al de la figura 3.42 pero con algunas excepciones: para empezar la escala de

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

valores es menor, luego la región donde acaba las crestas y se forman valles es aproximadamente en $0,4 \leq \varphi \leq 1$ y finalmente el valor máximo de la gaussiana inicial se encuentra en $a = 0,5$, lo cual concuerda con el valor medio. De manera similar, al comparar la figura 3.45 con su antecesora se vio que el comportamiento es similar y solamente cambia la escala, la región donde se encuentra el valle y el valor mínimo del mismo. Diversas pruebas mostraron que el valor de μ afecta en la región donde puede encontrarse el valle y el valor mínimo que este puede tener; si este valor se acerca a 0,5 el valle se encontrara en una región más cercana al centro y su pico será más agudo, en cambio si el valor se aleja de 0,5 el pico tendrá menos valor y la región será más cercana a cero, para valores mayores a 0,5, o más cercana a uno, para valores menores a 0,5.

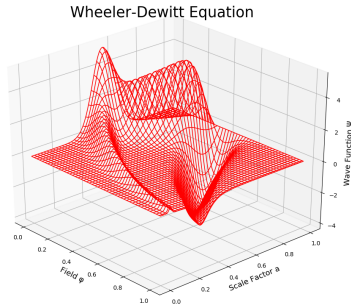


Figura 3.44: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

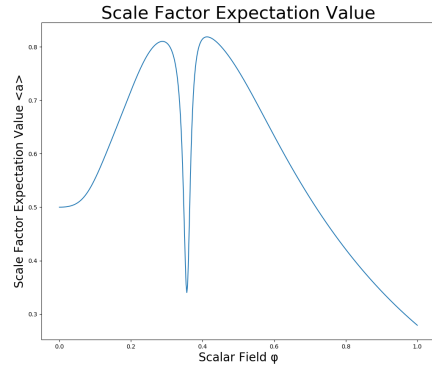


Figura 3.45: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

Si los parámetros adoptan los valores $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$ producen la solución dada por la figura 3.46. En este caso el comportamiento de la función de onda es similar al anterior pero el valor aproximado donde termina la cresta y empieza el valle es aun menor, además el largo del valle es más grande. Lo propio sucede con la figura 3.47 ya que el valor mínimo del valle disminuyó y su ubicación se movió a la izquierda. Con todo lo mencionado anteriormente pudo concluirse de manera general que si el valor de μ es más cercano a uno la función de onda se encuentra más “aplastada” ya que la región del valle aumenta, caso contrario la región del valle disminuye.

Para valores límite de los parámetros del potencial la solución tiene un comportamiento similar a los mostrados anteriormente, pero la diferencia radica en que en la región aproximada creciente en $0,4 \leq \varphi \leq 1$ y decreciente en $0,2 \leq a \leq 1$ aparecen pulsos que luego se atenúan hasta tener un valor cercano a cero. Por ejemplo la figura 3.48, la cual es solución con parámetros $\mu = 0,5$, $\sigma = 0,075$, $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$, muestra este comportamiento. En cuanto al efecto del potencial en el valor esperado del factor de escala se observó que genera un decrecimiento abrupto que generalmente se origina en la región aproximada dada por $0,4 \leq \varphi \leq 1$, adicionalmente a medida que el valor de μ se acerca a 0,5 los valles hondos se van haciendo más pequeños. Por ejemplo en la figura 3.49 se aprecia un valle de poca profundidad y también una cresta que tiende a disminuir a medida que el campo escalar aumenta.

Resumiendo los resultados se concluyó que para obtener soluciones estables es necesario que $f(0)$ y $f(1)$ sean igual a cero o lo más próximo a cero, en especial si $f(1)$ no es lo suficientemente cercano a cero se generaran discontinuidades muy abruptas. Adicionalmente, el problema de zig-zagueo se resuelve incrementado la resolución del programa. En cuanto al aporte del potencial, independientemente de la forma de la condición inicial de la solución, tiene el siguiente patrón:

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

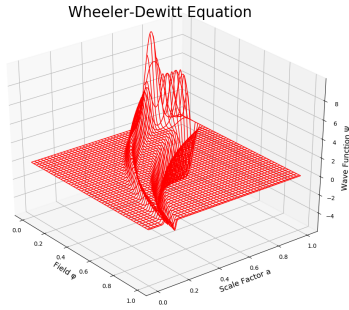


Figura 3.46: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

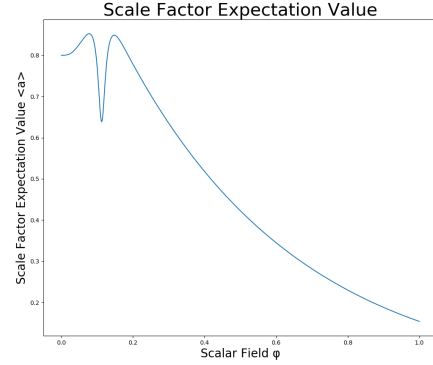


Figura 3.47: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

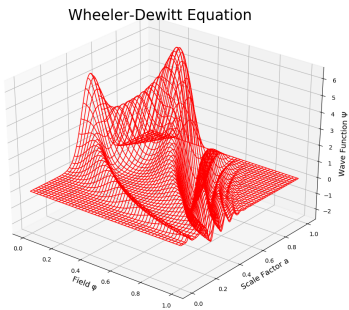


Figura 3.48: Solución para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

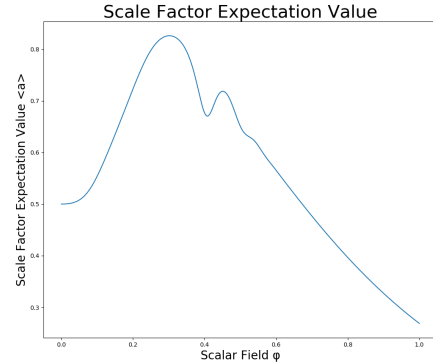


Figura 3.49: Valor esperado del factor de escala para $g(a) = 0$ y $f(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,5$ y $\sigma = 0,075$. Los parámetros del potencial son $m = 10^2$ y $\lambda = 10^6$.

El valor límite de la masa y del parámetro de interacción negativo generan un comportamiento creciente en la región aproximada compuesta por $0,5 \leq \varphi \leq 1$ y $0,5 \leq a \leq 1$, en cambio el valor límite del parámetro de interacción positivo genera pulsos que pueden incrementar en número si se introduce el valor límite de la masa. Finalmente, de manera general el aporte del potencial genera un decrecimiento abrupto en el valor esperado del factor de escala.

3.7.3. Funciones Iniciales Distintas de Cero

En esta sección se estudiaron casos donde $f(a) \neq 0$ y $g(a) \neq 0$, por tanto las condiciones iniciales adoptan la forma más general

$$\begin{aligned}\Psi_j^0 &= f(a_j), \quad j = 0, 1, \dots, J \\ \Psi_j^1 &= f(a_j) + lg(a_j), \quad j = 1, 2, \dots, J - 1.\end{aligned}\tag{3.32}$$

En este caso se vio que el término $lg(a)$ puede tener tres papeles: el primero se da cuando tiene valores muy cercanos a cero y prácticamente $\Psi_j^1 \approx f(a_j)$, el segundo ocurre cuando sus valores son del orden de $f(a_j)$ o menores y/o cuando el programa tiene alta resolución (l pequeño) y se caracteriza por actuar como una perturbación, finalmente el tercero se obtiene cuando sus valores son mayores a los de $f(a_j)$ y por tanto es la función dominante. Los resultados obtenidos en las anteriores clasificaciones mostraron que la elección de las condiciones iniciales no son arbitrarias y en esta sección se debe tener aún más cuidado debido a que se escogen dos funciones que tienen que generar una solución estable. Como existe una gran variedad de combinaciones posibles se optó por automatizar el programa y obtener gran cantidad de soluciones para distintos parámetros de las funciones iniciales pero solamente se mostraron los resultados más relevantes.

Función Inicial de la Solución Igual a un Polinomio

En esta subclasificación $f(a) = a(1 - a)$ y $g(a)$ una función distinta de cero. La elección de la función $f(a)$ se debe a que corresponde a un polinomio con raíces en $a = 0$ y $a = 1$, lo que garantiza estabilidad de la solución porque no existan ni los saltos ni los picos mencionados en anteriores secciones. La figura 3.50 se obtiene cuando $g(a)$ es un polinomio de Legendre de decimoquinto orden el cual actúa como una perturbación, puede verse que la solución tiene un comportamiento decreciente. Por otro lado, el valor esperado del factor de escala correspondiente a esta solución se muestra en la figura 3.51 y tiene un carácter creciente en todo el dominio con la excepción de la región aproximada $0,6 \leq \varphi \leq 0,8$. Adicionalmente se estudió el comportamiento de otros polinomios de Legendre de grado impar y no se observaron ningún tipo de irregularidades en la solución ni en el valor esperado del factor de escala, por lo general se vió que este último tiene un comportamiento decreciente, forma al menos un valle, crece y se estabiliza. La elección de los polinomios de Legendre se deben a que son funciones normalizadas cuyo dominio contiene al del factor de escala.

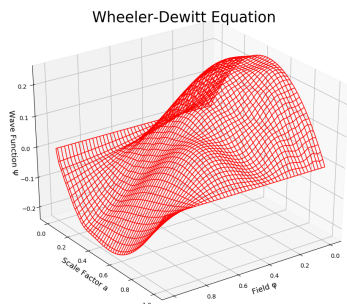


Figura 3.50: Solución para $f(a) = a(1 - a)$ y $g(a)$ un polinomio de Legendre de decimoquinto orden. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

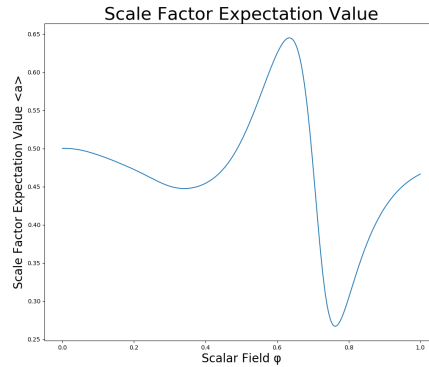


Figura 3.51: Valor esperado del factor de escala para $f(a) = a(1 - a)$ y $g(a)$ un polinomio de Legendre de decimoquinto orden. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

Cuando $g(a) = \sin 2\pi 4a$ esta actúa como una perturbación en la condición inicial de la derivada y genera la solución mostrada en la figura 3.52, su comportamiento esta relacionado con el carácter ondulatorio de $g(a)$ porque se aprecian ondas con cuatro familia de crestas. El carácter sinusoidal se mantiene si se cambia el numero de ondas f , se incrementa la amplitud o también si existe desfase. El valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.53 y puede verse que parte del comportamiento ondulatorio de $g(a)$ se proyecta en esta gráfica. Por otro lado, si la amplitud de la función senoidal es muy cercana a cero la solución de onda recupera gran parte de la forma mostrada en la figura 3.28, lo mismo sucede con el valor esperado del factor de escala porque su comportamiento es similar al de la figura 3.29. Ahora, si se considera que la amplitud de la función seno es muy grande entonces tanto la solución como el valor esperado del factor de escala muestran un comportamiento más ondulatorio que el de las figuras 3.52 y 3.53, respectivamente, esto se debe a que la función dominante es $g(a)$ y $f(a)$ actúa como perturbación.

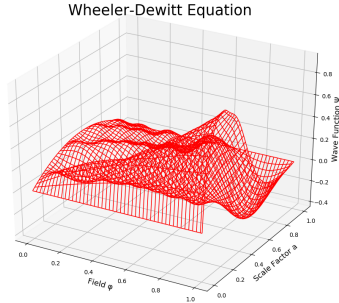


Figura 3.52: Solución para $f(a) = a(1-a)$ y $g(a) = \sin 2\pi 4a$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

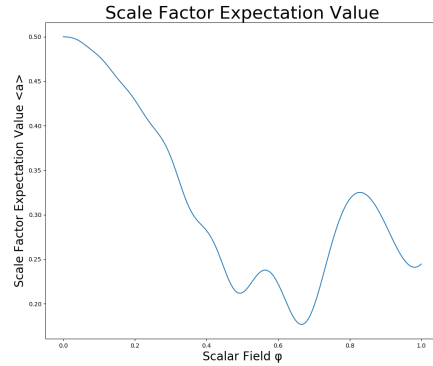


Figura 3.53: Valor esperado del factor de escala para $f(a) = a(1-a)$ y $g(a) = \sin 2\pi 4a$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

Finalmente, si $g(a)$ corresponde a una función gaussiana con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$ se obtiene la figura 3.54, es posible ver que valor máximo se encuentra en el intervalo $0 \leq \varphi \leq 0,2$ y disminuye a medida que el valor del campo aumenta. Por otro lado, el valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.55 y su comportamiento es creciente hasta llegar a un máximo, luego disminuye de manera casi lineal hasta un mínimo y finalmente vuelve a crecer en el tramo final. Nuevamente fue posible verificar que si el aporte de $lg(a)$ es muy pequeño respecto al de $f(a)$ entonces la función de onda se acerca al comportamiento de la figura 3.28, mientras que si es mayor entonces la solución se aproxima a la mostrada en la figura 3.17.

Función Inicial de la Solución Igual a una Función Seno

Para las siguiente clasificación se considera que $f(a) = \sin 2\pi 4a$, su elección se debe a que este tipo de funciones generan soluciones estables. Cuando $g(a) = 2 \sin 2\pi 6a$ se obtiene la solución mostrada en la figura 3.56, puede verse que la función $f(a)$ tiene mayor impacto en la solución debido a que el número de familias de crestas que aparecen está asociada con el número de ondas que posee la función $f(a)$. Es importante resaltar que cuando la amplitud de $g(a)$ incrementa en valor también lo hace el impacto de la misma en la solución ya que el número de familias de crestas cambia al número de ondas que posee la función $g(a)$. Las pruebas mostraron que a mayor incremento en la amplitud de $g(a)$ mayor similitud adopta la forma de la solución al mostrado en la figura 3.12. Por otro lado, el valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.57 y puede observarse que el comportamiento ondulatorio de la función inicial se refleja en esta. Cuando

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS
3.7. CLASIFICACIÓN BÁSICA DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA Y SUS SOLUCIONES

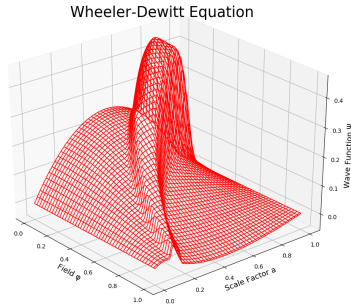


Figura 3.54: Solución para $f(a) = a(1 - a)$ y $g(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

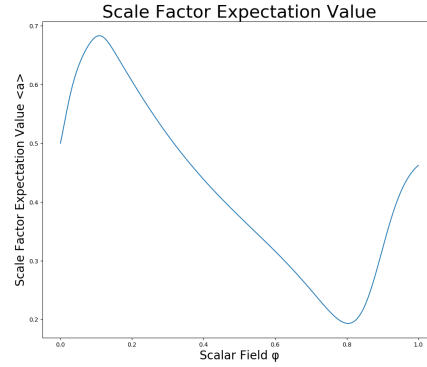


Figura 3.55: Valor esperado del factor de escala para $f(a) = a(1 - a)$ y $g(a)$ una distribución normal con parámetros $\mu = 0,8$ y $\sigma = 0,04$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

se incrementa la amplitud de $g(a)$ el zigzaguo del valor esperado del factor de escala disminuye, mientras que si se incrementa la amplitud el zigzaguo no cambia mucho pero si las regiones en donde se encuentran.

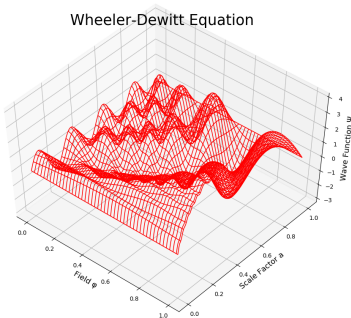


Figura 3.56: Solución para $f(a) = \sin 2\pi 4a$ y $g(a) = 2 \sin 2\pi 6a$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

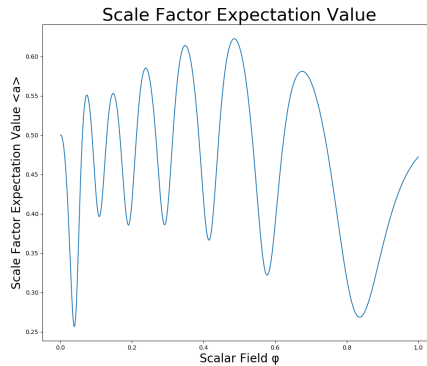


Figura 3.57: Valor esperado del factor de escala para $f(a) = \sin 2\pi 4a$ y $g(a) = 2 \sin 2\pi 6a$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

Se procede a considerar el caso donde $g(a)$ corresponde a una función gaussiana con parámetros $\mu = 0,8$, $\sigma = 0,04$ y amplitud igual a 100, el valor de la amplitud hace que dicha función tenga un mayor impacto en la solución. Dicha solución se muestra en la figura 3.58 y puede observarse que se asemeja a una combinación de una solución gaussiana y de otra ondulatoria. Mientras que el valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.59 y se caracteriza por tener un inicialmente un comportamiento creciente muy acelerado.

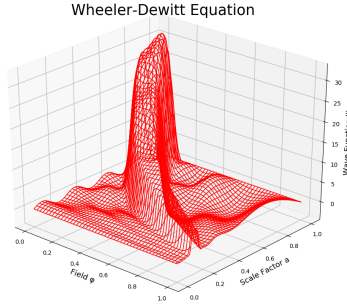


Figura 3.58: Solución para $f(a) = \sin 2\pi 4a$ y $g(a)$ una función gaussiana con parámetros $\mu = 0,8$, $\sigma = 0,04$ y amplitud igual a 100. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

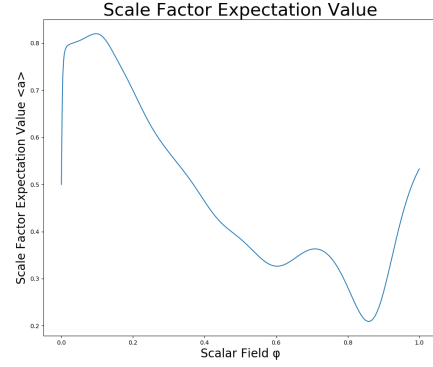


Figura 3.59: Valor esperado del factor de escala para $f(a) = \sin 2\pi 4a$ y $g(a)$ una función gaussiana con parámetros $\mu = 0,8$, $\sigma = 0,04$ y amplitud igual a 100. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

Función Inicial de la Solución Igual a una Gaussiana

En los siguientes casos se considera que las funciones iniciales $f(a)$ y $g(a)$ tengan la forma de una distribución normal con parámetros μ y σ y μ_2 y σ_2 , respectivamente, adicionalmente se introdujo una ponderación del tipo $(1 - a)a$, de tal manera que las funciones iniciales adoptan la forma

$$\begin{aligned} f(a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{a - \mu}{\sigma}\right)^2\right] (1 - a)a, \\ g(a) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{a - \mu_2}{\sigma_2}\right)^2\right] (1 - a)a, \end{aligned} \tag{3.33}$$

la introducción del término adicional hace que la función se comporte de manera más suave. Además, el dominio de los parámetros de las gaussianas son, en este caso, distintos a los obtenidos en anteriores clasificaciones, esto se debe porque la condición inicial de la derivada involucra dos gaussianas cuya combinación produce soluciones estables para una mayor cantidad de valores en los parámetros. Empezamos por considerar la figura 3.60 que corresponde a la solución de la WDWE para los parámetros $\mu = -2$, $\mu_2 = 1$, $\sigma = 0,3$ y $\sigma_2 = 0,3$, puede observarse que la función tiene un crecimiento suave y se parece a una campana de gauss pero en tres dimensiones. El valor esperado del factor de escala tiene un crecimiento abrupto y luego empieza a decrecer paulatinamente, este comportamiento se refleja en la figura 3.61.

Finalmente, si los parámetros de ambas gaussianas son $\mu = -2$, $\mu_2 = 1$, $\sigma = 1$ y $\sigma_2 = 0,1$ la solución adopta la forma dada por la figura 3.62, puede verse que su comportamiento es muy similar al de la figura 3.54 pero en las regiones de crecimiento de la función de onda lo hace de manera más acelerada. Por otro lado el comportamiento del valor esperado del factor de escala se muestra en la figura 3.62 y se caracteriza por tener un incremento muy acelerado en la región aproximada $0 \leq \varphi \leq 0,1$, luego decrece y finalmente permanece aproximadamente estable en $\langle a \rangle = 0,45$.

En resumen, la soluciones generadas por las condiciones iniciales 3.32 corresponden a una combinación de las funciones iniciales $f(a)$ y $g(a)$. Por lo general la segunda actúa como una perturbación porque está multiplicada por el pequeño número l pero esto no significa que existan casos en donde pueda desempeñar el papel de función dominante. En toda esta clasificación no se incluyó el análisis del potencial debido a que se consideraba un poco repetitivo ya que tiene un

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.8. SOLUCIONES CON UNA POSIBLE INTERPRETACIÓN FÍSICA

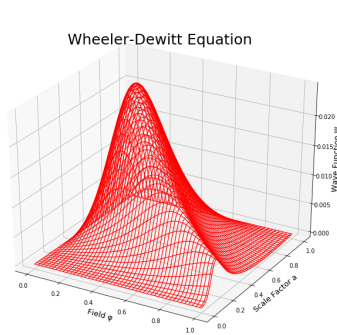


Figura 3.60: Solución para $f(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = -2$ y $\sigma = 0,3$, y $g(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = 1$ y $\sigma = 0,3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

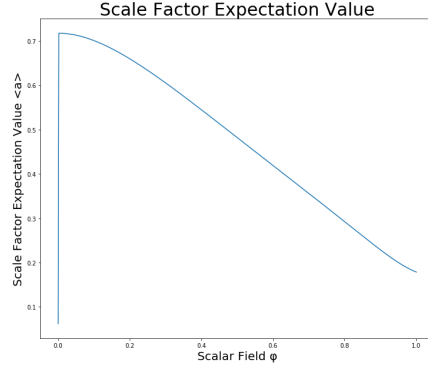


Figura 3.61: Valor esperado del factor de escala para $f(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = -2$ y $\sigma = 0,3$, y $g(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = 1$ y $\sigma = 0,3$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

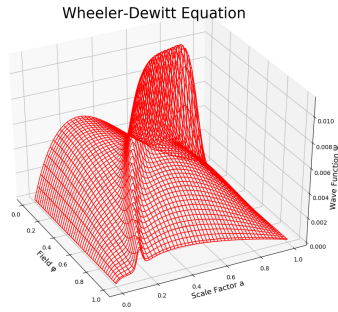


Figura 3.62: Solución para $f(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = -2$ y $\sigma = 1$, y $g(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = 1$ y $\sigma = 0,1$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

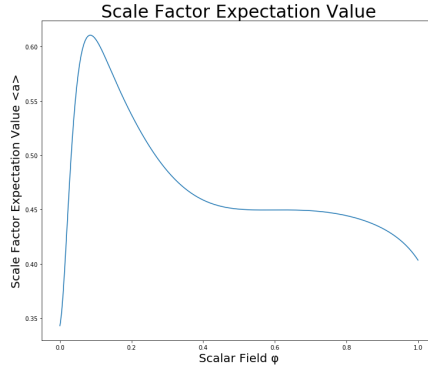


Figura 3.63: Valor esperado del factor de escala para $f(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = -2$ y $\sigma = 1$, y $g(a)$ una gaussiana con parámetros $\mu = 1$ y $\sigma = 0,1$. Los parámetros del potencial son $m = 1$ y $\lambda = 1$.

comportamiento muy similar al estudiado en anteriores clasificaciones. Recordemos que esto quiere decir, de manera general, que a medida que la masa aumenta y también el parámetro de interacción negativo la solución diverge en la región aproximada $0,5 \leq a \leq 1$ y $0,5 \leq \varphi \leq 1$, mientras que si la masa incrementa y el parámetro de interacción positivo también entonces se genera un valle seguido por pulsos que se atenúan en la región aproximada $0,1 \leq a \leq 1$ y $0,3 \leq \varphi \leq 1$.

3.8. Soluciones con una Posible Interpretación Física

A pesar de que se realizó una clasificación básica de las soluciones de la ecuación de Wheeler-DeWitt no todas las soluciones tienen un significado físico. Como se mencionó anteriormente, las soluciones obtenidas bajo la clasificación dada por $f(a) = 0$ no tienen significado físico porque la función de onda no es normalizable y por tanto no se puede calcular el valor esperado del factor de escala, aún así sirvieron para estudiar el impacto de $g(a)$ en la estabilidad de la solución. Por

CAPÍTULO 3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

3.8. SOLUCIONES CON UNA POSIBLE INTERPRETACIÓN FÍSICA

otro lado, las soluciones que generan un comportamiento senoidal en el factor de escala podrían representar modelos cíclicos del universo, los cuales establecen que el mismo atraviesa por muchos “big bangs” y “big crunchs” [35], ejemplos de estas son los valores esperados del factor de escala mostradas en las figuras 3.37, 3.39 y 3.57. Finalmente, de acuerdo con la teoría inflacionaria el universo tiene una expansión muy acelerada, esto esta relacionado con el crecimiento abrupto del valor esperado del factor de escala y las soluciones obtenidas que podrían ajustarse a esta teoría son las obtenidas en las figuras 3.61, 3.63.

Capítulo 4

Conclusiones

En la presente tesis se estudió las consecuencias de las condiciones de frontera en la función de onda del universo de la ecuación de Wheeler-DeWitt para modelos de cosmología cuántica con una geometría FLRW y con un potencial escalar cuártico, para ello se elaboró una clasificación básica de las condiciones de frontera la cual se divide en tres partes. La primera corresponde a soluciones obtenidas cuando la función inicial de la solución $f(a)$ es igual a cero y la función inicial de la derivada de la solución $g(a)$ es una función bien comportada, su importancia radica en que permitió concluir que para la obtención de soluciones estables es necesario que la función $g(a)$ tenga al menos dos raíces: una en $a = 0$ y otra en $a = 1$, si esto no es posible los valores de $g(0)$ y $g(1)$ deben ser muy cercanos a cero para garantizar la estabilidad. La segunda clasificación agrupa a las funciones de onda que se obtuvieron para $f(a)$ una función bien comportada y $g(a) = 0$ y se observó que también es necesario la existencia de dos raíces en los mismos puntos o al menos que $f(0)$ y $f(1)$ sean valores muy próximos a cero, en particular el valor de $f(1)$ tiene una mayor influencia en la estabilidad de la solución que las demás y se recomienda que su valor sea lo más cercano posible a cero. La tercera clasificación considera que tanto $f(a)$ como $g(a)$ sean distintas de cero y bien comportadas, de estas soluciones pudo observarse que su estructura es una combinación de ambas funciones y la forma predominante está asociada con la función que tiene más peso, i.e. la función que tiene los valores más grandes.

De las tres clasificaciones realizadas solamente la primera no tiene significado físico, esto debido a que no es posible normalizar la función de onda en todos sus puntos. De todas maneras, las otras dos clasificaciones tienen soluciones que se asemejan al modelo inflacionario y otras a modelos cíclicos del universo. Por otro lado, en la WDWE se usó el potencial cuártico y se observó que cuando la masa y el parámetro de interacción tienen valores límites su comportamiento puede ser de dos maneras; el primero es de carácter divergente y surge a partir de que el parámetro de interacción es negativo, mientras que el segundo se manifiesta en forma de un valle seguido por pulsos que se disipan y se da cuando el parámetro de interacción es positivo. La región aproximada donde el potencial tiene efecto es $0,2 \leq a \leq 1$ y $0,2 \leq \varphi \leq 1$.

Uno de los resultados obtenidos que es indispensable para poder resolver la WDWE es el criterio de convergencia $\frac{l}{h} \leq \sqrt{\frac{6}{\kappa} \frac{1}{a_j}}$ el cual debe cumplirse para que el método numérico no genere soluciones divergentes. La obtención de esta expresión surge análogamente a la del criterio CFL del método de diferencias finitas para la ecuación de onda, a pesar de que su derivación no resultó ser muy laboriosa, la idea por la cual se obtuvo no fue tan intuitiva, esto porque la ecuación de onda y la WDWE no son la misma y por tanto no deberían tener condiciones de convergencia muy parecidas.

La importancia de este trabajo radica en que muestra como las condiciones iniciales pueden generar distintos tipos de universos y que, debido a restricciones matemáticas, estas no pueden ser funciones arbitrarias porque no generarían universos estables. Además, muestra como puede

CAPÍTULO 4. CONCLUSIONES

aplicarse el método de diferencias finitas a PDEs que no son muy comunes, ya que la bibliografía básica se enfoca solamente en PDEs conocidas, como ser la de difusión, la de onda o la de Laplace.

Apéndice A

Códigos de Soluciones Numéricas

En la presente sección se muestran los códigos de las soluciones numéricas de distintas ecuaciones diferenciales parciales por el método de diferencias finitas. Los programas se encuentran escritos en Python, versión 3.7 y compilador Spyder.

A.1. Ecuación de Onda

El programa resuelve la ecuación de onda

$$\begin{aligned}u_{tt} &= v^2 u_{xx}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < 16, \\u(0, t) &= u(1, t) = 0, \quad 0 < t < 16, \\u(x, 0) &= 0, \quad u_t(x, 0) = x - x^2, \quad 0 < x < 1.\end{aligned}\tag{A.1}$$

Los parámetros son: paso espacial $h = 0,125$, paso temporal $k = 0,1$ y velocidad de onda $v = 0,25$.

```
## WAVE EQUATION – FINITE DIFFERENCE METHOD ##
```

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d

#                               GRID
xmin    = 0
xmax    = 1
h       = 0.125
J = int((xmax-xmin)/h)
x = np.arange(xmin, xmax + h, h)
tmin    = 0
tmax    = 16
k       = 0.1
N = int((tmax-tmin)/k)
t = np.arange(tmin, tmax + k, k)
T, X = np.meshgrid(t, x)

#                               INITIAL AND BOUNDARY CONDITIONS
U = np.zeros([J+1, N+1])
for n in range(1, N+1):
    U[0][n] = 0
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.2. ECUACIÓN WHEELER-DEWITT CON MÉTRICA FLRW

```

U[J][n] = 0
print(U)
for j in range(0, J+1):
U[j][0] = 0
for j in range(1, J):
U[j][1] = U[j][0] +k*x[j]*(1-x[j])

#                               EXPLICIT SCHEME
v = 0.25
s = v*k/h
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = 2*(1-s**2)*U[j][n]
+(s**2)*(U[j-1][n] + U[j+1][n]) -U[j][n-1]

#                               GRAPH
fig = plt.figure(figsize=[14,12],
facecolor='forestgreen')
ax = plt.axes(projection='3d')
ax.plot_wireframe(T, X, U, color='k',
rstride=1, cstride=1, linewidth=0.8)
ax.set_title("Wave_Equation")
ax.set_xlabel("Time_t[s]")
ax.set_ylabel("Space_x[m]")
ax.set_zlabel("Amplitude_u")
plt.show()

```

A.2. Ecuación Wheeler-DeWitt con Métrica FLRW

El programa resuelve la ecuación de Wheeler-DeWitt 3.12 para $a_f = 1$, $\varphi_f = 1$, $f(a) = 0$, $g(a) = a(1 - a)$; el factor de escala se dividió en 240 subintervalos y el campo escalar en 500. La nomenclatura de las variables y los parámetros es la siguiente: Rapidez de la luz c , constante de gravitación universal G , constante de curvatura p , constante de acoplamiento ka , masa m , parámetro de interacción lam , factor de escala a , campo escalar t , número de subintervalos ‘espaciales’ J , número de subintervalos ‘temporales’ N , condición de estabilidad CFL , función de onda U , norma de la función de onda a campo escalar constante P , función de onda normalizada V y valor esperado del factor de escala EVa . El sistema de unidades empleado es el geométrico.

```

### WHEELER-DEWITT EQUATION – FLRW METRIC ###

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl\__toolkits import mplot3d

#                               PARAMETERS
c   = 1
G   = 1
p   = 0
ka  = 8*np.pi*G/c**4
m   = 1
lam = -1

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.2. ECUACIÓN WHEELER-DEWITT CON MÉTRICA FLRW

```

#           SPACE-TIME GRID
# Domain variables.
a0 = 0
af = 1
J  = 240
h  = (af-a0)/J
t0 = 0
tf = 1
N  = 500
k  = (tf-t0)/N
# Discretization 'space-time' intervals
a = np.arange(a0, af+h, h)
t = np.arange(t0, tf+k, k)
# 'Space-Time' Grid
T, A = np.meshgrid(t, a)
# Convergence condition
CFL = ((tf-t0)/(af-a0))*np.sqrt(6/ka)/af

# INITIAL AND BOUNDARY CONDITIONS
U = np.zeros([J+1, N+1])
# Boundary Conditions
#for n in range(1, N+1):
# U[0][n] = 0
# U[J][n] = 0
# Intial conditions
for j in range(0, J+1):
U[j][0] = 0
for j in range(1, J):
U[j][1] = U[j][0] +k*a[j]*(1-a[j])

# NUMERICAL SOLUTIONS
# Explicit Scheme
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = (2-ka*k**2*a[j])**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U[j][n]
+(ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U[j-1][n]
+(ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U[j+1][n]
-U[j][n-1]
# Wave function 's norm ('n' index fixed)
P = np.zeros(N+1)
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
P[n] += (np.absolute(U[j][n])**2
+np.absolute(U[j-1][n])**2)*h/2
# Normalized wave function
V = np.zeros([J+1, N+1])
for n in range(0, N+1):

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
for j in range(0, J+1):
V[j][n] = U[j][n]/(P[n]**0.5)
# Expected Value a
EVa = np.zeros(N+1)
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
EVa[n] += (a[j]*np.absolute(V[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V[j-1][n])**2)*h/2

#           GRAPHs
# Wave function
fig1 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, U, linewidth = 1.2,
color = 'r')
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation",
fontsize=25)
ax.set_xlabel("Field \u03C6", fontsize=13)
ax.set_ylabel("Scale Factor a", fontsize=13)
ax.set_zlabel("Wave Function \u03A8", fontsize=13)
plt.show()
# Scale factor expectation value
fig2 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.plot(t, EVa)
plt.xlabel("Scalar Field \u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Scale Factor Expectation Value <a>",
fontsize=20)
plt.title("Scale Factor Expectation Value",
fontsize=30)
plt.show()
```

A.3. Programas para la ecuación de Wheeler-Dewitt

Se incluyen los cuatro programas que calculan la función de onda U de la ecuación de Wheeler-Dewitt por el método de diferencias finitas. El motivo de cuatro programas se debe a que cada uno resuelve la PDE para uno o dos parámetros variables. Los parámetros que se consideran son: la masa y la fuerza de interacción del potencial cuártico, y la media y desviación estándar de las dos gaussianas que corresponden a las condiciones iniciales. También los programas calculan la amplitud de probabilidad P , la función de onda normalizada V y el valor esperado del factor de escala EVa y además realiza las gráficas de la función de onda y el valor esperado del factor de escala.

A.3.1. Código con medias variables

En este código la masa m , la fuerza de interacción λm y las desviaciones estándar σ y σ^2 son constantes. Los parámetros que cambian son las medias μ y μ^2 que corresponden a la posición inicial de las gaussianas. El cambio de estas es en una unidad e e incluye todas las combinaciones posibles de los signos, e.g. $\mu=2$ y $\mu^2=-1$, es por eso que se observan cuatro funciones de onda U , U_2 , U_3 , U_4 .

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
from mpl\\_toolkits import mplot3d
#Rejillas
a0 = 0
af = 1
J = 100
h = (af-a0)/J
t0 = 0
tf = 1
N = 100
k = (tf-t0)/N
a = np.arange(a0, af+h, h)
t = np.arange(t0, tf+k, k)
T, A = np.meshgrid(t, a)
#Variables y Parametros
U = np.zeros([J+1, N+1])
U2= np.zeros([J+1, N+1])
U3 = np.zeros([J+1, N+1])
U4= np.zeros([J+1, N+1])
S = np.zeros([J+1, N+1])
S2 = np.zeros([J+1, N+1])
S3 = np.zeros([J+1, N+1])
S4 = np.zeros([J+1, N+1])
R = np.zeros([J+1, N+1])
R2 = np.zeros([J+1, N+1])
R3 = np.zeros([J+1, N+1])
R4 = np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
P2= np.zeros(N+1)
P3= np.zeros(N+1)
P4= np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
V2= np.zeros([J+1, N+1])
V3= np.zeros([J+1, N+1])
V4= np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
EVa2 = np.zeros(N+1)
EVa3 = np.zeros(N+1)
EVa4 = np.zeros(N+1)
G = 1
p = 0
ka = 8*np.pi*G
l = -1000
lam = -1
mu = 4
mu2 = 4
sig = np.sqrt(1/100)
sig2 = np.sqrt(1/100)
#Programa
for muu in range(mu+1):
for muu2 in range(mu2+1):
for j in range(0, J+1):
U[j][0] =(1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

*np.exp(-1/2*((a[j]-muu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U[j][1] = ((1/(sig**2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-muu2)/sig**2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
U2[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-muu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U2[j][1] = ((1/(sig**2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]+muu2)/sig**2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
U3[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]+muu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U3[j][1] = ((1/(sig**2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-muu2)/sig**2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
U4[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]+muu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U4[j][1] = ((1/(sig**2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]+muu2)/sig**2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) ) *U[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) ) *U[j+1][n]
-U[j][n-1]
U2[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U2[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) ) *U2[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) ) *U2[j+1][n]
-U2[j][n-1]
U3[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U3[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) ) *U3[j-1][n]
+(ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) ) *U3[j+1][n]
-U3[j][n-1]

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

U4[j][n+1] = (2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h)
+ka*k**2/9 -6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U4[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U4[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U4[j+1][n]
-U4[j][n-1]
R = U-S
R2 = U2-S2
R3 = U3-S3
R4 = U4-S4
S = U
S2 = U2
S3 = U3
S4 = U4
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
P[n] += ( np.absolute((U[j][n]**2
+U[j-1][n]**2)/2) )*h
P2[n] += ( np.absolute((U2[j][n]**2
+U2[j-1][n]**2)/2) )*h
P3[n] += ( np.absolute((U3[j][n]**2
+U3[j-1][n]**2)/2) )*h
P4[n] += ( np.absolute((U4[j][n]**2
+U4[j-1][n]**2)/2) )*h
for n in range(0, N+1):
for j in range(0, J+1):
V[j][n] = U[j][n]/(P[n])**0.5
V2[j][n] = U2[j][n]/(P2[n])**0.5
V3[j][n] = U3[j][n]/(P3[n])**0.5
V4[j][n] = U4[j][n]/(P4[n])**0.5
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
Eva[n] += (a[j]*np.absolute(V[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V[j-1][n])**2)*h/2
Eva2[n] += (a[j]*np.absolute(V2[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V2[j-1][n])**2)*h/2
Eva3[n] += (a[j]*np.absolute(V3[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V3[j-1][n])**2)*h/2
Eva4[n] += (a[j]*np.absolute(V4[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V4[j-1][n])**2)*h/2
#Graficas
fig1 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, U, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Positive_Gaussian_2')
ax.plot_wireframe(T, A, U2, linewidth = 1.2,
color = 'r',
label='Negative_Gaussian_2')
ax.legend()

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig2 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, R, linewidth = 1.2,
color = 'm',
label='Dif_Positive_Gaussian_2')
ax.plot_wireframe(T, A, R2, linewidth = 1.2,
color = 'y',
label='Dif_Negative_Gaussian_2')
ax.legend()
ax.set_title("Difference_Wave_Function", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig3 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.plot(t, EVa, color = 'b',
label='Positive_Gaussian_2')
plt.plot(t, EVa2, color = 'r',
label='Negative_Gaussian_2')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.xlabel("Scalar_Field_\u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Expectation_Value_<a>", fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.show()
fig4 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, U3, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Positive_Gaussian_2')
ax.plot_wireframe(T, A, U4, linewidth = 1.2,
color = 'r',
label='Negative_Gaussian_2')
ax.legend()
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig5 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, R3, linewidth = 1.2,
color = 'm',
label='Dif_Positive_Gaussian_2')
ax.plot_wireframe(T, A, R4, linewidth = 1.2,
color = 'y',
label='Dif_Negative_Gaussian_2')
ax.legend()
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS

A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
ax.set_title("Wave_Function_Difference", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig6 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.plot(t, EVa3, color = 'b',
label='Positive_Gaussian_2')
plt.plot(t, EVa4, color = 'r',
label='Negative_Gaussian_2')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.xlabel("Scalar_Field_\u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Expectation_Value_<a>", fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.show()
# RESET ALL THE VARIABLES TO ZERO
U = np.zeros([J+1, N+1])
U2= np.zeros([J+1, N+1])
U3= np.zeros([J+1, N+1])
U4= np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
P2= np.zeros(N+1)
P3= np.zeros(N+1)
P4= np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
V2= np.zeros([J+1, N+1])
V3= np.zeros([J+1, N+1])
V4= np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
EVa2 = np.zeros(N+1)
EVa3 = np.zeros(N+1)
EVa4 = np.zeros(N+1)
S = np.zeros([J+1, N+1])
S2 = np.zeros([J+1, N+1])
S3 = np.zeros([J+1, N+1])
S4 = np.zeros([J+1, N+1])
```

A.3.2. Código con sigmas variables

En este código la masa m , la fuerza de interacción λm y las medias μ y μ_2 son constantes. Los parámetros que cambian son las desviaciones estándar que corresponden al ancho de las gaussianas. El cambio para cada desviación estándar es en multiplicaciones de 10, es por eso que para estos parámetros se tiene los términos 10^{s_1} y 10^{s_2} . Se incluyen cuatro funciones de onda U , U_2 , U_3 , U_4 correspondientes a la combinación de valores mayores y menores a uno, e.g. $\text{sig}=10$ y $\text{sig}_2=0.01$.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
#Rejillas
a0 = 0
af = 1
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

J    = 100
h = (af-a0)/J
t0  = 0
tf  = 1
N    = 100
k = (tf-t0)/N
a = np.arange(a0, af+h, h)
t = np.arange(t0, tf+k, k)
T, A = np.meshgrid(t, a)
# Variables y parámetros
U = np.zeros([J+1, N+1])
U2= np.zeros([J+1, N+1])
U3 = np.zeros([J+1, N+1])
U4= np.zeros([J+1, N+1])
S = np.zeros([J+1, N+1])
S2 = np.zeros([J+1, N+1])
S3 = np.zeros([J+1, N+1])
S4 = np.zeros([J+1, N+1])
R = np.zeros([J+1, N+1])
R2 = np.zeros([J+1, N+1])
R3 = np.zeros([J+1, N+1])
R4 = np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
P2= np.zeros(N+1)
P3= np.zeros(N+1)
P4= np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
V2= np.zeros([J+1, N+1])
V3= np.zeros([J+1, N+1])
V4= np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
EVa2 = np.zeros(N+1)
EVa3 = np.zeros(N+1)
EVa4 = np.zeros(N+1)
G    = 1
p    = 0
ka  = 8*np.pi*G .
m    = 1
lam = -1
w1  = 3
mu  = 1
w2  = 3
mu2 = 1
sig = np.sqrt(1/100)
sig2 = np.sqrt(1/100)
#Programa
for s1 in range(w1):
for s2 in range(w2):
for j in range(0, J+1):
U[j][0] = (1/(10**(s1)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/(10**(s1)))**2)
*(af-a[j])*a[j]

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

U[j][1] = (1/(10**(s2)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/(10**(s2)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U2[j][0] = (1/(10**(-s1)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/(10**(-s1)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U2[j][1] = (1/(10**(-s2)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/(10**(-s2)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U3[j][0] = (1/(10**(s1)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/(10**(s1)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U3[j][1] = (1/(10**(-s2)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/(10**(-s2)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U4[j][0] = (1/(10**(-s1)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/(10**(-s1)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
U4[j][1] = (1/(10**(s2)*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/(10**(s2)))**2)
*(af-a[j])*a[j]
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U[j+1][n]
-U[j][n-1]
U2[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h)
+ka*k**2/9 -6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U2[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U2[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U2[j+1][n]
-U2[j][n-1]
U3[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U3[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U3[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U3[j+1][n]
-U3[j][n-1]
U4[j][n+1] = (2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) )*U4[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U4[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U4[j+1][n]
-U4[j][n-1]
R = U-S
R2 = U2-S2
R3 = U3-S3
R4 = U4-S4
S = U
S2 = U2
S3 = U3
S4 = U4
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
P[n] += (np.absolute((U[j][n]**2
+U[j-1][n]**2)/2) )*h
P2[n] += (np.absolute((U2[j][n]**2
+U2[j-1][n]**2)/2) )*h
P3[n] += (np.absolute((U3[j][n]**2
+U3[j-1][n]**2)/2) )*h
P4[n] += (np.absolute((U4[j][n]**2
+U4[j-1][n]**2)/2) )*h
for n in range(0, N+1):
for j in range(0, J+1):
V[j][n] = U[j][n]/(P[n])**0.5
V2[j][n] = U2[j][n]/(P2[n])**0.5
V3[j][n] = U3[j][n]/(P3[n])**0.5
V4[j][n] = U4[j][n]/(P4[n])**0.5
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
Eva[n] += (a[j]*np.absolute(V[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V[j-1][n])**2)*h/2
Eva2[n] += (a[j]*np.absolute(V2[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V2[j-1][n])**2)*h/2
Eva3[n] += (a[j]*np.absolute(V3[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V3[j-1][n])**2)*h/2
Eva4[n] += (a[j]*np.absolute(V4[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V4[j-1][n])**2)*h/2
#Graficas
fig1 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, U, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Large_Values_of_\u03C3')
ax.plot_wireframe(T, A, U2, linewidth = 1.2,
color = 'r', label='Small_Values_of_\u03C3')
ax.legend()
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig2 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, R, linewidth = 1.2,
color = 'm', label='Dif_Large_Values_of_\u03C3')
ax.plot_wireframe(T, A, R2, linewidth = 1.2,
color = 'y', label='Dif_Small_Values_of_\u03C3')
ax.legend()
ax.set_title("Difference_Wave_Function", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig3 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.plot(t, EVa, color = 'b',
label='Large_Values_of_\u03C3')
plt.plot(t, EVa2, color = 'r',
label='Small_Values_of_\u03C3')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.xlabel("Scalar_Field_\u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Expectation_Value_<a>", fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.show()
fig4 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, U3, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Large-Small_Values_of_\u03C3')
ax.plot_wireframe(T, A, U4, linewidth = 1.2,
color = 'r', label='Small-Large_Values_of_\u03C3')
ax.legend()
ax.set_title("Wheeler-Dewitt_Equation", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig5 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.plot_wireframe(T, A, R3, linewidth = 1.2,
color = 'm',
label='Dif_Large-Small_Values_of_\u03C3')
ax.plot_wireframe(T, A, R4, linewidth = 1.2,
color = 'y',
label='Dif_Small-Large_Values_of_\u03C3')
ax.legend()
ax.set_title("Wheeler-Dewitt_Equation", fontsize=24)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=14)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=14)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=14)
plt.show()
fig6 = plt.figure(figsize = [12,10])
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
plt.plot(t, EVa3, color = 'b',
label='Large-Small_Values_of_\u03C3')
plt.plot(t, EVa4, color = 'r',
label='Small-Large_Values_of_\u03C3')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.xlabel("Scalar_Field_\u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Expectation_Value_<a>", fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.show()
# RESET ALL THE VARIABLES TO ZERO
U = np.zeros ([J+1, N+1])
U2= np.zeros ([J+1, N+1])
U3= np.zeros ([J+1, N+1])
U4= np.zeros ([J+1, N+1])
P = np.zeros (N+1)
P2= np.zeros (N+1)
P3= np.zeros (N+1)
P4= np.zeros (N+1)
V = np.zeros ([J+1, N+1])
V2= np.zeros ([J+1, N+1])
V3= np.zeros ([J+1, N+1])
V4= np.zeros ([J+1, N+1])
EVa = np.zeros (N+1)
EVa2 = np.zeros (N+1)
EVa3 = np.zeros (N+1)
EVa4 = np.zeros (N+1)
S = np.zeros ([J+1, N+1])
S2 = np.zeros ([J+1, N+1])
S3 = np.zeros ([J+1, N+1])
S4 = np.zeros ([J+1, N+1])
```

A.3.3. Código con lambda variable

En este código las medias μ y μ_2 , las desviaciones estándar σ y σ_2 y la masa m son constantes, el parámetro variable es la fuerza de interacción λ . El cambio de este es en multiplicaciones de 10, es por eso que para estos parámetros se tiene los términos 10^l . Se incluyen dos funciones de onda U y U_2 correspondientes a un signo positivo y negativo del parámetro de interacción.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
#Rejilla
a0 = 0
af = 1
J = 100
h = (af-a0)/J
t0 = 0
tf = 1
N = 100
k = (tf-t0)/N
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

a = np.arange(a0, af+h, h)
t = np.arange(t0, tf+k, k)
T, A = np.meshgrid(t, a)
#Variables y parametros
U = np.zeros([J+1, N+1])
U2= np.zeros([J+1, N+1])
S = np.zeros([J+1, N+1])
S2 = np.zeros([J+1, N+1])
R = np.zeros([J+1, N+1])
R2 = np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
P2= np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
V2= np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
EVa2 = np.zeros(N+1)
G = 1
p = 0
ka = 8*np.pi*G
m = 1000
lam = 7
mu = 2
mu2 = -1
sig = np.sqrt(1/100)
sig2 = np.sqrt(1/100)
#Programa
for l in range(lam +1):
for j in range(0, J+1):
U[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U[j][1] = ((1/(sig2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/sig2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
U2[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U2[j][1] = ((1/(sig2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/sig2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
-(10**(1))*t[n]**4/24) )*U[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U[j+1][n]
-U[j][n-1]
U2[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(m**2*t[n]**2/2
+(10**(1))*t[n]**4/24) )*U2[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) )*U2[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) )*U2[j+1][n]
-U2[j][n-1]
R = U-S
R2 = U2-S2
S = U
S2 = U2
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
P[n] += (np.absolute((U[j][n]**2
+U[j-1][n]**2)/2) )*h
P2[n] += (np.absolute((U2[j][n]**2
+U2[j-1][n]**2)/2) )*h
for n in range(0, N+1):
for j in range(0, J+1):
V[j][n] = U[j][n]/(P[n])**0.5
V2[j][n] = U2[j][n]/(P2[n])**0.5
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
EVA[n] += (a[j]*np.absolute(V[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V[j-1][n])**2)*h/2
EVA2[n] += (a[j]*np.absolute(V2[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V2[j-1][n])**2)*h/2
#Graficas
fig1 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation", fontsize=25)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=13)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=13)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=13)
ax.plot_wireframe(T, A, U, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Positive_interaction')
ax.plot_wireframe(T, A, U2, linewidth = 1.2,
color = 'r', label='Negative_interaction')
ax.legend()
plt.show()

fig2 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.set_title("Wave-Function_Difference", fontsize=25)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=13)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=13)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=13)
ax.plot_wireframe(T, A, R, linewidth = 1.2,
color = 'm', label='U:_Positive_Interaction')
ax.plot_wireframe(T, A, R2, linewidth = 1.2,
color = 'y', label='U2:_Negative_interaction')

```

```
ax.legend()
plt.show()
fig3 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.xlabel("Scalar_Field", fontsize=20)
plt.ylabel("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.plot(t, EVa, color = 'b',
label='Positive_interaction')
plt.plot(t, EVa2, color = 'r',
label='Negative_interaction')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.show()
# RESET ALL THE VARIABLES TO ZERO
U = np.zeros([J+1, N+1])
U2= np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
P2= np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
V2= np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
EVa2 = np.zeros(N+1)
```

A.3.4. Código con masa variable

En este código las medias μ y μ_2 , las desviaciones estándar σ y σ_2 y el parámetro de interacción λm son constantes, el parámetro variable es la masa. El cambio este es en multiplicaciones de 10^2 , es por eso que para estos parámetros se tiene los términos 10^{2z} .

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
#Rejilla
a0 = 0
af = 1
J = 100
h = (af-a0)/J
t0 = 0
tf = 1
N = 100
k = (tf-t0)/N
a = np.arange(a0, af+h, h)
t = np.arange(t0, tf+k, k)
T, A = np.meshgrid(t, a)
#Variables y parametros
U = np.zeros([J+1, N+1])
S = np.zeros([J+1, N+1])
R = np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```

G = 1
p = 0
ka = 8*np.pi*G
w = 4
m = 10**w
lam = -1
mu = 1
mu2 = 2
sig = np.sqrt(1/100)
sig2 = np.sqrt(1/100)
#Programa
for z in range(w):
for j in range(0, J+1):
U[j][0] = (1/(sig*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu)/sig)**2)
*(af-a[j])*a[j]
U[j][1] = ((1/(sig2*np.sqrt(2*np.pi)))
*np.exp(-1/2*((a[j]-mu2)/sig2)**2)
*(af-a[j])*a[j])
for n in range(1, N):
for j in range(1, J):
U[j][n+1] = ( 2-ka*k**2*a[j]**2/(3*h**2)
+ka*k**2*a[j]/(6*h) +ka*k**2/9
-6*p*k**2*a[j]**4/ka
+2*k**2*a[j]**6*(10**(2*z))*t[n]**2/2
-lam*t[n]**4/24) *U[j][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2) ) *U[j-1][n]
+( ka*k**2*a[j]**2/(6*h**2)
-ka*k**2*a[j]/(6*h) ) *U[j+1][n]
-U[j][n-1]
R = U-S
S = U
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
P[n] += (np.absolute((U[j][n]**2
+U[j-1][n]**2)/2) ) *h
for n in range(0, N+1):
for j in range(0, J+1):
V[j][n] = U[j][n]/(P[n])**0.5
for n in range(0, N+1):
for j in range(1, J+1):
EVA[n] += (a[j]*np.absolute(V[j][n])**2
+a[j-1]*np.absolute(V[j-1][n])**2) *h/2
$Graficas
fig1 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.set_title("Wheeler-Dewitt Equation", fontsize=25)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=13)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=13)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=13)
ax.plot_wireframe(T, A, U, linewidth = 1.2,
color = 'b', label='Positive_interaction')

```

APÉNDICE A. CÓDIGOS DE SOLUCIONES NUMÉRICAS
A.3. PROGRAMAS PARA LA ECUACIÓN DE WHEELER-DEWITT

```
ax.legend()
plt.show()
fig2 = plt.figure(figsize = [12, 10])
ax = plt.axes(projection = '3d')
ax.set_title("Wave-Function-Difference", fontsize=25)
ax.set_xlabel("Field_\u03C6", fontsize=13)
ax.set_ylabel("Scale_Factor_a", fontsize=13)
ax.set_zlabel("Wave_Function_\u03A8", fontsize=13)
ax.plot_wireframe(T, A, R, linewidth = 1.5,
color = 'g', label='Difference')
ax.legend()
plt.show()
fig3 = plt.figure(figsize = [12,10])
plt.xlabel("Scalar_Field_\u03C6", fontsize=20)
plt.ylabel("Scale_Factor_Expectation_Value_<a>",
fontsize=20)
plt.title("Scale_Factor_Expectation_Value",
fontsize=30)
plt.plot(t, EVa, color = 'b',
label='Positive_interaction')
plt.legend(loc='lower_right')
plt.show()
#Reseteo de las variables
U = np.zeros([J+1, N+1])
P = np.zeros(N+1)
V = np.zeros([J+1, N+1])
EVa = np.zeros(N+1)
```


Bibliografía

- [1] Peacock John A. *Cosmological Physics*. Cambridge University Press, Ninth printing, Cambridge, United Kingdom, 2010.
- [2] D’Inverno Ray, *Introducing Einsteins Relativity*. Oxford University Press, Fifth printing, New York, United States, 1998.
- [3] Kirshner Robert P. *Hubble’s diagram and cosmic expansion*. Harvard–Smithsonian Center for Astrophysics, Massachusetts, United States, 2004.
- [4] Hoyt William Graves. *Vesto Melvin Slipher 1875-1969*. National Academy of Sciences, Washington D.C., United States, 1980.
- [5] Lemaître, G. *The Beginning of the World from the Point of View of Quantum Theory*. Nature 127, 706 (1931). <https://doi.org/10.1038/127706b0>
- [6] Liddle Andrew. *An Introduction to Modern Cosmology*. Wiley, Second edition, West Sussex, England, 2003
- [7] Hack Thomas-Paul. *The Lambda CDM-model in quantum field theory on curved spacetime and Dark Radiation*. arXiv:1306.3074
- [8] Trimble Virginia. *Existence and Nature of Dark Matter in the Universe*. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, Vol. 25:425-472
- [9] Peebles P. J. E. and Ratra Bharat. *The Cosmological Constant and Dark Energy*. Rev.Mod.Phys.75:559-606,2003, arXiv:astro-ph/0207347.
- [10] Liddle Andrew, David Lyth. *Cosmological Inflation and Large-Scale Structure*. Cambridge University Press, First edition, Cambridge, United Kingdom, 2000.
- [11] L Rosenfeld. *Zur Quantelung der Wellenfelder*. Ann der Physik 5, 113, 1930.
- [12] L Rosenfeld. *Über die Gravitationswirkungen des Lichtes*. Zeit fur Phys 65, 589, 1930.
- [13] Bronstein Matvei. *Republication of: Quantum theory of weak gravitational fields*. Gen Relativity and Gravitation 44, 267–283 (2012). <https://doi.org/10.1007/s10714-011-1285-4>
- [14] Carlo Rovelli. *Notes for a brief history of quantum gravity*. arXiv:gr-qc/0006061v3, 2001.
- [15] Halliwell J. J. *Introductory Lectures on Quantum Cosmology*. arXiv:0909.2566v1, 2009.
- [16] M. Bojowald. *Canonical Gravity and Applications - Cosmology, black holes, quantum gravity*. Cambridge University Press, 2011.
- [17] P.A.M. Dirac. *Lectures of Quantum Mechanics*. Belfer Graduate School of Science-Yeshiva University, 1964.

- [18] R. Arnowitt, S. Deser, and C. W. Misner. *Dynamical Structure and Definition of Energy in General Relativity*. Phys. Rev. 116, 1322, 1 December 1959.
- [19] Robert M. Wald. *General Relativity*. The University of Chicago Press, First Edition, 1984.
- [20] Francis Tong. *A Hamiltonian Formulation of General Relativity*. Central Eur.J.Phys.9:576-615, 2011, arXiv:0809.0097.
- [21] Gianluca Calcagni. *Classical and Quantum Cosmology*. Springer, 2017.
- [22] Øyvind Grøn and Sigbjørn Hervik. *Einstein's General Theory of Relativity With Modern Applications in Cosmology*. Springer, 2007.
- [23] B. S. DeWitt. *Quantum Theory of Gravity. I. The Canonical Theory*. Phys. Rev. 160 (1967) 1113.
- [24] T. P. Shestakova. *On the meaning of the wave function of the Universe*. nt. J. Mod. Phys. D28 (2019) 1941009, arXiv:1909.05588.
- [25] J. David Logan. *Applied Partial Differential Equations*. Springer, Third Edition, 2015.
- [26] A. D. Polyanin. *Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists*. Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, 2002, ISBN 1-58488-299-9.
- [27] H. M. Atassi. *Class notes on Quasilinear Partial Diferential Equations*, University of Notre Dame.
- [28] Richard L. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison Wesley, Fourth Edition, 2003.
- [29] David J. Griffiths. *Introductory Quantum Mechanics*. Prentice Hall, First Edition, 1995.
- [30] Steven C. Chapra and Raymond P. Canale. *Numerical Methods for Engineers*. McGraw-Hill, Seventh Edition, 2015.
- [31] Tom Lancaster & Stephen J. Blundell, *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*, Oxford University Press, First Edition, 2014.
- [32] Brian C. Hall, *Quantum Theory for Mathematicians*, Springer, First Edition, 2013.
- [33] C. Ramírez and V. Vázquez-Báez, *Quantum supersymmetric FRW cosmology with a scalar field*, Phys. Rev. D 93, 043505, 4 February 2016.
- [34] Planck Collaboration, *Planck 2015 results. XIII. Cosmological parameters*, A&A 594, A13 (2016), arXiv:1502.01589v3.
- [35] Paul J. Steinhardt and Neil Turok, *Cosmic Evolution in a Cyclic Universe*, Phys.Rev.D65:126003, 2002, arXiv:hep-th/0111098.