

Figura 11: (sinistra) Modi vibrazionali in una corda tesa. (destra) catena di punti materiali come nel problema di Fermi Pasta Ulam

## Parte IV

# Il problema di Fermi Pasta Ulam

La formulazione teorica della termodinamica viene spesso espresso tramite i postulati di Gibbs:

*Postulato 0 esistenza degli stati microscopici:* un sistema macroscopico è formato da un insieme di costituenti elementari che possono in principio essere descritti con le leggi fondamentali della fisica.

*Postulato 1 equilibrio:* all'equilibrio in un sistema chiuso tutte le configurazioni possibili (ossia con stessa energia  $E$ ) sono equiprobabili

*Postulato 2 evoluzione fuori dall'equilibrio:* fuori dall'equilibrio un sistema tende ad evolvere verso l'equilibrio.

Dai postulati 0 e 1 si trova facilmente la legge dei gas perfetti nel caso di un sistema di particelle non interagenti. E' interessante notare che la situazione di equilibrio del postulato 1 non può essere raggiunta se non c'è alcuna interazione tra le particelle.

Nel 1955 Fermi, Pasta e Ulam ebbero l'idea di usare uno dei primi computer a valvole (il Maniac I) per provare a verificare il raggiungimento della situazione di equilibrio, anche chiamata *equipartizione dell'energia*, nel caso di un sistema semplificato. La loro idea era di analizzare il moto di una corda elastica tesa posta in oscillazione. Per una tale corda fissata agli estremi nel caso di termini di forza solamente elastici l'equazioni del moto ammette modi normali di oscillazione come raffigurato in Fig. 11. Se ci limitiamo ad una corda ideale elastica e se al tempo  $t_0$  il moto è descritto solo da un certo modo (ad esempio quello fondamentale), allora tutti gli altri modi non contribuiranno mai al moto in istanti di tempo successivi. Viceversa se termini di forza non lineari (non-elastici) sono presenti allora ci si aspetta, dal secondo postulato, che dopo un certo tempo tutti i modi siano equiprobabili.

Per semplicità Fermi Pasta Ulam considerarono una catena unidimensionale di  $N$  punti materiali di massa  $m$  connessi tra di loro con delle molle ideali di costante elastica  $k$ . I punti 1 e  $N$  sono connessi con molle dello stesso tipo a due punti fissi. Indichiamo con  $x_i$  lo *spostamento* del punto materiale  $i$  rispetto alla sua posizione di equilibrio. Nel caso non ci siano termini non lineari le equazioni del moto sono date da:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - x_i) + k(x_{i-1} - x_i) = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \quad (133)$$

cerchiamo ora soluzioni armoniche del tipo:

$$x_i(t) = A e^{i(\tilde{k}i - \omega t)} \quad (134)$$

dove assumiamo che la componente immaginaria abbia valore fisico. Sostituiamo e troviamo

$$\begin{aligned}
-m\omega^2 A e^{i(\tilde{k}i - \omega t)} &= kA \left( e^{i(\tilde{k}i - \omega t + \tilde{k})} - 2e^{i(\tilde{k}i - \omega t)} + e^{i(\tilde{k}i - \omega t - \tilde{k})} \right) \\
-m\omega^2 &= k \left( e^{i\tilde{k}} - 2 + e^{-i\tilde{k}} \right) \\
-m\omega^2 &= 2k \left( \cos\left(\frac{\tilde{k}}{2}\right) - 1 \right) = 2k \left( \cos^2\left(\frac{\tilde{k}}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\tilde{k}}{2}\right) - 1 \right) \\
\omega &= \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin\left(\frac{\tilde{k}}{2}\right)
\end{aligned} \tag{135}$$

i numeri d'onda  $\tilde{k}$  devono essere scelti in maniera da far sì che le condizioni agli estremi (o al contorno) siano soddisfatte: costruiamo un'onda stazionaria relativa al modo  $n$ :

$$x_{i,n}(t) = \frac{A_n}{2} \left[ e^{i(\tilde{k}i - \omega t)} - e^{i(-\tilde{k}i - \omega t)} \right] = A_n \sin\left(\frac{\tilde{k}i}{2}\right) e^{-i\omega t} \tag{136}$$

che possiamo scrivere come

$$x_{i,n}(t) = A_n \sin\left(\frac{\pi n}{N+1}i\right) \sin(-\omega t) \tag{137}$$

allora per soddisfare le condizioni al contorno scegliamo:

$$\tilde{k} = \frac{\pi n}{N+1} \quad n = 1, \dots, N \tag{138}$$

dove la frequenza del modo è data da:

$$\omega_n = \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin\left(\frac{\pi n}{2(N+1)}\right) \tag{139}$$

il modo di oscillazione con  $n = 1$  viene chiamato modo fondamentale.

Fermi Pasta Ulam aggiunsero dei termini non lineari alle forze cosicché le equazioni del moto divennero, nel caso di aggiunta di termini quadratici :

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) + \alpha \left[ (x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2 \right] \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \tag{140}$$

o nel caso di aggiunta di termini cubici:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) + \beta \left[ (x_{i+1} - x_i)^3 - (x_i - x_{i-1})^3 \right] \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \tag{141}$$

Se al tempo  $t$  gli spostamenti sono dati da  $x_i(t)$ , il contributo  $C_n(t)$  del modo  $n$  è dato da:

$$C_n(t) = \sum_{i=1,N} x_i(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \sin\left(\frac{\pi n}{N+1}i\right) \tag{142}$$

dove abbiamo usato:

$$\sum_{i=1,N} \sin^2\left(\frac{\pi n}{N+1}i\right) = N \tag{143}$$

questo ci permette di scrivere:

$$x_i(t) = \sum_{n=1,N} C_n(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \sin\left(\frac{\pi n}{N+1}i\right) \tag{144}$$

Fermi Pasta Ulam integrarono le equazioni del moto imponendo che il solo modo fondamentale contribuisca al tempo iniziale e si aspettavano di trovare che tutti i modi diventassero attivi dopo un certo periodo di equilibrizzazione. Invece trovarono che solo taluni modi contribuivano al moto e apparentemente dopo un certo tempo il moto tornava ad essere descritto principalmente dal solo modo iniziale. Per analizzare la partizione dell'energia, andarono a considerare il contributo energetico di ciascun modo tenendo conto solo dei termini cinetici ed elastici. Al tempo  $t$  l'energia del modo  $n$  è data da :

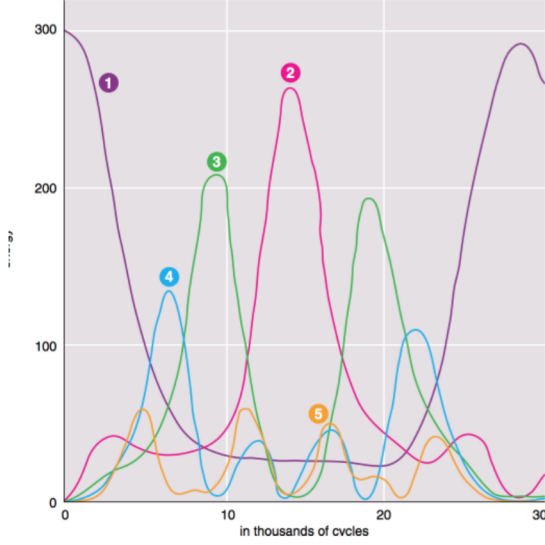


Figura 12: Evoluzione temporale della distribuzione di energia per il problema di Fermi Pasta Ulam. Sistema di 31 punti materiali,  $m = 1$ ,  $k = 1$ ,  $\alpha = \frac{1}{4}$ .

$$\begin{aligned}
E_n(t) &= \frac{1}{2}m \sum_{i=1,N} \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 \frac{1}{N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) + \sum_{i=0,N} \frac{1}{2}k \frac{1}{N} \left( C_n(t) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) - C_n(t) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right)^2 \\
E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}k (C_n(t))^2 \frac{1}{N} \times \\
&\quad \left[ \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) \right) + \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right) - 2 \left( \sum_{i=0,N} \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right) \right] \\
E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}k (C_n(t))^2 \times \\
&\quad \left[ 2 - 2 \frac{1}{N} \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) + \sum_{i=0,N} \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) \right) \right] \\
E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + k (C_n(t))^2 \left( 1 - \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) \right) \\
E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + 2k (C_n(t))^2 \sin^2 \left( \frac{\pi n}{2(N+1)} \right)
\end{aligned} \tag{145}$$

dove abbiamo usato la proprietà:

$$\sum_{i=0,N+1} \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) = 0 \tag{146}$$

In Fig. 7 si vede che invece di equipartirsi, l'energia è data solo da alcuni modi. Inoltre si vede che apparentemente dopo un certo tempo il sistema ritorna (quasi) nelle condizioni iniziali. Tale comportamento continua in maniera ciclica per tempi successivi. Cosicché apparentemente sembra non si arrivi mai all'equipartizione. Studi successivi indicano che l'equilibrio viene raggiunto solo per tempo ancora maggiori. Il tempo per giungere all'equipartizione è più grande se il numero di punti materiali  $N$  è piccolo e se l'energia totale iniziale è piccola.

## Parte V

# Equazioni differenziali ordinarie con condizioni al contorno

## 16 Equazioni che studieremo

Vogliamo introdurre dei metodi che ci permettano, ad esempio, di trovare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria in una sola dimensione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (147)$$

Per ottenere un metodo più generale consideriamo equazioni differenziali del secondo ordine del tipo:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = f(x) \quad (148)$$
$$\begin{cases} \alpha_0 y(a) + \alpha_1 \frac{d}{dx} y(a) = \lambda_1 \\ \beta_0 y(b) + \beta_1 \frac{d}{dx} y(b) = \lambda_2 \end{cases}$$

dove la funzione incognita  $y(x)$  è definita nell'intervallo  $[a, b]$  e le condizioni al contorno sono disaccoppiate. Le condizioni al contorno vengono poi chiamate **di Dirichlet** se hanno la forma:

$$\begin{aligned} y(a) &= \alpha \\ y(b) &= \beta \end{aligned} \quad (149)$$

sono invece chiamate **di Neumann** se hanno la forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} y(a) &= \alpha \\ \frac{d}{dx} y(b) &= \beta \end{aligned} \quad (150)$$

## 17 Metodo delle differenze finite:

Vogliamo trasformare il problema della soluzione dell'equazione differenziale in un problema matriciale. Cominciamo col definire sull'intervallo  $[a, b]$  dell'asse  $x$  una griglia di  $N$  punti equispaziati, chiamiamo  $h$  il parametro di spaziatura e usiamo la notazione  $y_i = y(x_i)$  e  $y_i^{(n)} = \frac{d^n}{dx^n} y(x_i)$ . Notiamo che con tale scelta risulta:

$$\begin{aligned} y_1 &= y(a) \\ y_N &= y(b) \\ h &= \frac{b-a}{N-1} \end{aligned} \quad (151)$$

Possiamo quindi usare le formule di Eq. 24. Per  $i = 2, \dots, N-1$  abbiamo:

$$\begin{aligned} y_i^{(2)} &\approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \\ y_i^{(1)} &\approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \end{aligned} \quad (152)$$

allora per ogni  $i = 2, \dots, N-1$  otteniamo un'equazione lineare:

$$a_i \left( \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right) + b_i \left( \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right) + c_i y_i = f_i \quad (153)$$

che scriviamo come:

$$\left( \frac{a_i}{h^2} + \frac{b_i}{2h} \right) y_{i+1} + \left( -\frac{2a_i}{h^2} + c_i \right) y_i + \left( \frac{a_i}{h^2} - \frac{b_i}{2h} \right) y_{i-1} = f_i \quad (154)$$

Ora dobbiamo occuparci dei punti  $i = 1$  e  $i = N$ . Introduciamo i punti  $x_0$  e  $x_{N+1}$  e abbiamo le equazioni per le condizioni al contorno:

$$\begin{aligned}\alpha_0 y_1 + \alpha_1 \left( \frac{y_2 - y_0}{2h} \right) &= \lambda_1 \\ \beta_0 y_N + \beta_1 \left( \frac{y_{N+1} - y_{N-1}}{2h} \right) &= \lambda_2\end{aligned}\tag{155}$$

nel caso in cui  $\alpha_1 \neq 0$  risolvendo troviamo:

$$y_0 = \frac{\alpha_0 y_1 + \frac{\alpha_1 y_2}{2h} - \lambda_1}{\frac{\alpha_1}{2h}} = y_2 + 2h \frac{\alpha_0 y_1 - \lambda_1}{\alpha_1}\tag{156}$$

che possiamo utilizzare in Eq: 154:

$$\left( \frac{a_1}{h^2} + \frac{b_1}{2h} \right) y_2 + \left( -\frac{2a_1}{h^2} + c_1 \right) y_1 + \left( \frac{a_1}{h^2} - \frac{b_1}{2h} \right) \left( y_2 + 2h \frac{\alpha_0 y_1 - \lambda_1}{\alpha_1} \right) = f_1\tag{157}$$

che scriviamo come:

$$2 \frac{a_1}{h^2} y_2 + \left( -\frac{2a_1}{h^2} + c_1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right) \right) y_1 = f_1 + \frac{\lambda_1}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right)\tag{158}$$

mentre nel caso  $\alpha_1 = 0$  possiamo porre direttamente:

$$y_1 = \frac{\lambda_1}{\alpha_0}\tag{159}$$

Per  $i = N$  e  $\beta_1 \neq 0$  otteniamo:

$$y_{N+1} = y_{N-1} + 2h \frac{(-\beta_0 y_N + \lambda_2)}{\beta_1}\tag{160}$$

che ci permette di scrivere:

$$\left( \frac{a_N}{h^2} + \frac{b_N}{2h} \right) \left( y_{N-1} + 2h \frac{(-\beta_0 y_N + \lambda_2)}{\beta_1} \right) + \left( -\frac{2a_N}{h^2} + c_N \right) y_N + \left( \frac{a_N}{h^2} - \frac{b_N}{2h} \right) y_{N-1} = f_N\tag{161}$$

che scriviamo come:

$$\left( -\frac{2a_N}{h^2} + c_N - \frac{\beta_0}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right) \right) y_{N-1} + 2 \frac{a_N}{h^2} y_N = f_N - \frac{\lambda_2}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right)\tag{162}$$

mentre nel caso  $\beta_1 = 0$  possiamo porre direttamente:

$$y_N = \frac{\lambda_2}{\beta_0}\tag{163}$$

E' utile *pensare* al problema come a un prodotto di matrici, definiamo il vettore  $\mathbf{Y}$ :

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}\tag{164}$$

ed il vettore  $\mathbf{F}$ , nel caso  $\alpha_1, \beta_1 \neq 0$ :

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_1 + \frac{\lambda_1}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right) \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \\ f_N - \frac{\lambda_2}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right) \end{pmatrix}\tag{165}$$

mentre nel caso  $\alpha_1 = \beta_1 = 0$  definiamo:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1}{\alpha_0} \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \\ \frac{\lambda_2}{\beta_0} \end{pmatrix}\tag{166}$$

allora il nostro problema può essere scritto come il problema di trovare il vettore  $\mathbf{Y}$ , tale che:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{F} \quad (167)$$

dove la matrice  $\mathbf{M}$  è definita, nel caso  $\alpha_1, \beta_1 \neq 0$ , come:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{2a_1}{h^2} + c_1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \left(\frac{2a_1}{h} - b_1\right)\right) & \frac{2a_1}{h^2} & & & \\ & L_2 & D_2 & U_2 & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & L_i & D_i & U_i \\ & & & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & & & L_{N-1} & D_{N-1} & U_{N-1} \\ & & & & & & \frac{2a_N}{h^2} & \left(-\frac{2a_N}{h^2} + c_N - \frac{\beta_0}{\beta_1} \left(\frac{2a_N}{h} + b_N\right)\right) \end{pmatrix} \quad (168)$$

mentre nel caso  $\alpha_1, \beta_1 = 0$  come:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ L_2 & D_2 & U_2 & & & & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\ & & L_i & D_i & U_i & & \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & & L_{N-1} & D_{N-1} & U_{N-1} \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (169)$$

con:

$$L_i = \left(\frac{a_i}{h^2} - \frac{b_i}{2h}\right) \quad (170)$$

$$D_i = \left(-\frac{2a_i}{h^2} + c_i\right) \quad (171)$$

e

$$U_i = \left(\frac{a_i}{h^2} + \frac{b_i}{2h}\right) \quad (172)$$

Quindi la soluzione numerica del nostro problema è data formalmente da

$$\mathbf{Y} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{F} \quad (173)$$

dove la matrice  $\mathbf{M}$  è una matrice tridiagonale. Per risolvere il problema di Eq. 167 esistono vari metodi di algebra lineare che sfruttano la tridiagonalità di  $\mathbf{M}$ . Si veda la scomposizione in forma  $LU$  nella parte II della dispensa. Inoltre, diversi metodi sono disponibili all'interno della libreria *LAPACK*.

## 17.1 Condizioni al contorno periodiche

Consideriamo il problema che si presenta quando le condizioni al contorno sono del tipo:

$$y(a) = y(b) \quad (174)$$

con:

$$f(a) = f(b) \quad (175)$$

Ponendo  $L = b - a$  posso pensare a  $y(x)$  definita su tutto l'asse reale e con i vincoli:

$$\begin{aligned} y(x+L) &= y(x) \\ a(x+L) &= a(x) \\ b(x+L) &= b(x) \\ c(x+L) &= c(x) \\ f(x+L) &= f(x) \end{aligned} \quad (176)$$

che scriverò come

$$\begin{aligned} y_N &= y_1 \\ a_N &= a_1 \\ b_N &= b_1 \\ c_N &= c_1 \\ f_N &= f_1 \end{aligned} \tag{177}$$

e che posso anche pensare come:

$$\begin{aligned} y_{i+N-1} &= y_i \\ a_{i+N-1} &= a_i \\ b_{i+N-1} &= b_i \\ c_{i+N-1} &= c_i \\ f_{i+N-1} &= f_i \end{aligned} \tag{178}$$

allora definisco:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{N-1} \end{pmatrix} \tag{179}$$

e

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \end{pmatrix} \tag{180}$$

l'equazione da risolvere  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{F}$  è definita dalla matrice:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} D_1 & U_1 & & & L_1 \\ L_2 & D_2 & U_2 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \\ & & L_i & D_i & U_i \\ & & & \dots & \dots & \dots \\ U_{N-1} & & & & L_{N-1} & D_{N-1} \end{pmatrix} \tag{181}$$

in questo caso possiamo utilizzare le routine LAPACK per le matrici a bande.

## 18 Il problema agli autovalori

Nel caso della soluzioni dell'equazione di Schödinger stazionaria e di problemi analoghi dal punto di vista formale vogliamo trovare per  $x \in [a, b]$  gli (auto-)valori  $E$  e le (auto-)funzioni  $y(x)$  tali che:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = E y(x) \tag{182}$$

consideriamo condizioni al contorno del tipo:

$$\begin{cases} y(a) = 0 \\ y(b) = 0 \end{cases} \tag{183}$$

possiamo trasformare il problema in un problema matriciale come visto prima, chiamiamo:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_2 \\ \dots \\ \dots \\ y_{N-1} \end{pmatrix} \tag{184}$$

e poniamo

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} D_2 & U_2 & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & L_i & D_i & U_i & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & L_{N-1} & D_{N-1} \end{pmatrix} \quad (185)$$

con:

$$L_i = \left( \frac{a_i}{h^2} - \frac{b_i}{2h} \right) \quad (186)$$

$$D_i = \left( -\frac{2a_i}{h^2} + c_i \right) \quad (187)$$

e

$$U_i = \left( \frac{a_i}{h^2} + \frac{b_i}{2h} \right) \quad (188)$$

quindi il problema agli autostati-autovalori che dobbiamo risolvere è:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{Y} = E\mathbf{Y} \quad (189)$$

questo problema è facilmente risolvibile con i metodi di algebra lineari per le matrici tridiagonali. Oltretutto non è necessario salvare in memoria tutta la matrice ma soltanto la diagonale e la diagonale superiore ed inferiore.

## 18.1 Il metodo Shooting e quello di Numerov

Consideriamo il problema agli autovalori:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = E y(x) \quad (190)$$

con le condizioni al contorno:

$$\begin{cases} y(a) = 0 \\ y(b) = 0 \end{cases} \quad (191)$$

il metodo di shooting per trovare le coppie autostati-autovalori consiste nello scegliere un certo valore per  $y^{(1)}(a)$  e poi risolvere un'equazione differenziale ordinaria alle condizioni iniziali. Usiamo il formalismo di Sezione 7:

$$\mathbf{y}(x) = \begin{pmatrix} y(x) \\ \frac{d}{dx} y(x) \end{pmatrix} \quad (192)$$

e

$$\mathbf{f}(x) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dx} y(x) \\ -\frac{b(x)}{a(x)} \frac{d}{dx} y(x) + \frac{(E-c(x))}{a(x)} y(x) \end{pmatrix} \quad (193)$$

questo ci permette dato un valore per  $E$  di propagare  $y(x)$  da  $a$  a  $b$ . L'  $E$  usato nella propagazione sarà un buon autovalore solo se la condizione  $y(b) = 0$  è soddisfatta. In tal caso  $E$  sarà un autovalore e  $y(x)$  sarà la corrispondente auto-funzione. E' facile mostrare che la scelta del  $y^{(1)}(a)$  non incide sugli  $E$  trovati ma solo sulla norma delle autofunzioni  $y(x)$ .

Nel caso particolare di un'equazione analoga a quella di Schrödinger:

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) + c(x) y(x) = E y(x) \quad (194)$$

che posso scrivere come:

$$y_i^{(2)} = (E - c_i) y_i \quad (195)$$

Il metodo di Numerov permette di propagare  $y(x)$  in maniera veloce e precisa. Si parte dallo sviluppo in serie di Taylor

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + y_i^{(1)} h + \frac{1}{2} y_i^{(2)} h^2 + \frac{1}{6} y_i^{(3)} h^3 + \frac{1}{24} y_i^{(4)} h^4 + \frac{1}{120} y_i^{(5)} h^5 + O(h^6) \\ y_{i-1} = y_i - y_i^{(1)} h + \frac{1}{2} y_i^{(2)} h^2 - \frac{1}{6} y_i^{(3)} h^3 + \frac{1}{24} y_i^{(4)} h^4 - \frac{1}{120} y_i^{(5)} h^5 + O(h^6) \end{cases} \quad (196)$$



ora sommo le due equazione membro a membro:

$$y_{i+1} + y_{i-1} = 2y_i + y_i^{(2)}h^2 + \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^4 + O(h^6) \quad (197)$$

da cui ricavo:

$$y_i^{(2)} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^2 + O(h^4) \quad (198)$$

ora uso Eq.195 e trovo:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^2 + O(h^4) = (E - c_i)y_i \quad (199)$$

ora scrivo  $y_i^{(4)}$  come:

$$y_i^{(4)} = \frac{y_{i+1}^{(2)} - 2y_i^{(2)} + y_{i-1}^{(2)}}{h^2} = \frac{(E - c_{i+1})y_{i+1} - 2(E - c_i)y_i + (E - c_{i-1})y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (200)$$

e inserisco nella precedente equazione:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{(E - c_{i+1})y_{i+1} - 2(E - c_i)y_i + (E - c_{i-1})y_{i-1}}{12} + O(h^4) = (E - c_i)y_i \quad (201)$$

ora risolvo per  $y_{i+1}$  e trovo il propagatore cercato:

$$y_{i+1} = \frac{1}{12 - (E - c_{i+1})h^2} [(10h^2(E - c_i) + 24)y_i + ((E - c_{i-1})h^2 - 12)y_{i-1}] + (h^4) \quad (202)$$