# PROBLEMAS DE AUTOVALORES E CONDIÇÕES DE CONTORNO

# FÍSICA COMPUTACIONAL

Existe uma classe de problemas em física que requer a resolução de EDO utilizando valores conhecidos das grandezas físicas e suas derivadas no contorno de uma região específica.

Um problema de contorno típico em física é usualmente representado como uma equação diferencial de segunda ordem:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(y, \frac{dy}{dx}, x)$$

Onde y ou dy/dx são conhecidos nos pontos do contorno

# FÍSICA COMPUTACIONAL

Veja que se o sistema é finito, sempre se pode escolher um sistema de coordenadas tal que os contornos fiquem nas posições x=0 e x=1, sem perder a generalidade.

Ex: Os contornos reais estão em $x = x_1$ e $x = x_2$ para um problema dado

$$x' = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

Os contornos ficam então em x' = 0 e x' = 1

Para um problema em uma dimensão podemos ter um total de 4 possíveis condições de contorno:

1) y(0) = y0 e y(1) = y1;
2) y(0) = y0 e y'(1) = v1;
3) y'(0) = v0 e y(1) = y1;
4) y'(0) = v0 e y'(1) = v1.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

O problema com valores de contorno é mais complicado de resolver que um problema similar de valores iniciais com a mesma equação diferencial.

Por exemplo, queremos resolver:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f\left(y, \frac{dy}{dx}, x\right)$$ com condições iniciais $y(0)=y_0$ e $y'(0)=v_0$

Inicialmente transformamos a equação de 2ª ordem em um conjunto de 2 equações acopladas de primeira ordem, redefinindo $y_2=dy/dx$ como uma nova variável e integrando por alguns dos métodos descritos anteriormente.

PROBLEMA COM CONDIÇÕES DE CONTORNO

Somente conhecemos y(0) ou y'(0) $\Rightarrow$ Não é suficiente para iniciar os algoritmos estudados anteriormente.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

Os problemas típicos de autovalores são ainda mais complexos, devido a que pelo menos um parâmetro a mais estará envolvido na equação, que é o autovalor. Por exemplo:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(y, \frac{dy}{dx}, x, \lambda)$$

Com $\lambda$ podendo assumir somente certos valores, os quais originarão soluções adequadas segundo as condições de contorno dadas.

Ex:

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO DE UMA BARRA VIBRANTE

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -k^2 y$$

y → deslocamento a partir da posição de equilíbrio

$k^2$ → Autovalores do problema (somente certos valores permitidos)

Se ambos os extremos da barra estão fixos (por exemplo), as condições de contorno desse problema serão y(0)=0 e y (1) = 0.

## MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD) – Cond. de Contorno

Inicialmente convertemos a equação diferencial de segunda ordem num conjunto de 2 equações diferenciais acopladas, definindo $y_1$=y e $y_2$=dy/dx:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(y, \frac{dy}{dx}, x) \quad \Longrightarrow \quad \begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= y_2 \\ \frac{dy_2}{dx} &= f(y_1, y_2, x) \end{aligned}$$

Para ilustrar o método consideremos como condições de contorno y(0)=$y_0$ e y(1)=$y_1$. Outros tipos podem ser resolvidos da mesma forma.

A chave do método é assemelhar o problema ao de condições iniciais

$$\Downarrow$$

Introduzir um parâmetro que vai ser ajustado até
que a condição de contorno seja satisfeita

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD)

Qual vai ser o parâmetro a ser introduzido?

Precisamente o valor inicial que estaria faltando para converter o problema em um de condições iniciais

No caso que estamos analisando conhecemos y(0), então faremos uma escolha arbitrária para o termo da derivada de 1ª ordem em x=0. Ou seja, $y_2(0)=\alpha$, onde $\alpha$ será o parâmetro a ser ajustado.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD)

Com o α inicial, deve-se integrar a equação até x = 1 utilizando algum dos métodos discutidos anteriormente para o problema de valores iniciais.

Como o valor de α escolhido muito provavelmente será diferente do valor real de dy/dx em x = 0, então $y_\alpha(1)$ que resultará da integração com $y_2(0)= \alpha$ em x=1 deverá ser diferente de $y_1$.

Como achar o α correto?

A proposta do método do tiro é utilizar um dos algoritmos propostos para a busca de raízes de equações para encontrar o α apropriado que satisfaça:

$$f(\alpha) = y_\alpha(1) - y_1 = 0$$

Dentro dos limites de uma tolerância predefinida.

**O método de Newton-Raphson não é adequado pois se precisaria da derivada da função e não temos a expressão explícita dessa função**

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD)

Vejamos um exemplo numérico real para ilustrar o método.

Suponhamos que queremos resolver a equação diferencial:

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -\frac{\pi^2}{4}(y+1)$$

Com as condições de contorno: $y(0) = 0$ e $y(1) = 1$

Definamos $y_1 = y$ e $y_2 = dy/dx$ $\Rightarrow$

$$\frac{dy_1}{dx} = y_2$$

$$\frac{dy_2}{dx} = -\frac{\pi^2}{4}(y+1)$$

Agora assume-se que a equação tem um conjunto de condições iniciais dadas por $y_1(0) = 0$ e $y_2(0) = \alpha$.

Onde $\alpha$ é o parâmetro a ser ajustado até obter $f(\alpha) = y_\alpha(1) - y(1) = 0$.

## MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD)

Será utilizado o método da secante (precisa-se de 2 pontos iniciais) e o algoritmo de integração utilizado será o de Runge-Kutta (4ª ordem):

Lembrando que:

$$\alpha_{i+1} = \alpha_i - f(\alpha_i) \frac{\alpha_i - \alpha_{i-1}}{f(\alpha_i) - f(\alpha_{i-1})}$$

Método da secante

$$f_\alpha = y_\alpha(1) - y(1)$$

$$\alpha_{i+1} = \alpha_i - \left[y_{\alpha_i}(1) - y(1)\right] \frac{\alpha_i - \alpha_{i-1}}{\left[y_{\alpha_i}(1) - y(1)\right] - \left[y_{\alpha_{i-1}}(1) - y(1)\right]}$$

Runge-Kutta 4ª ordem

$$y_{n+1} = y_n + \tfrac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

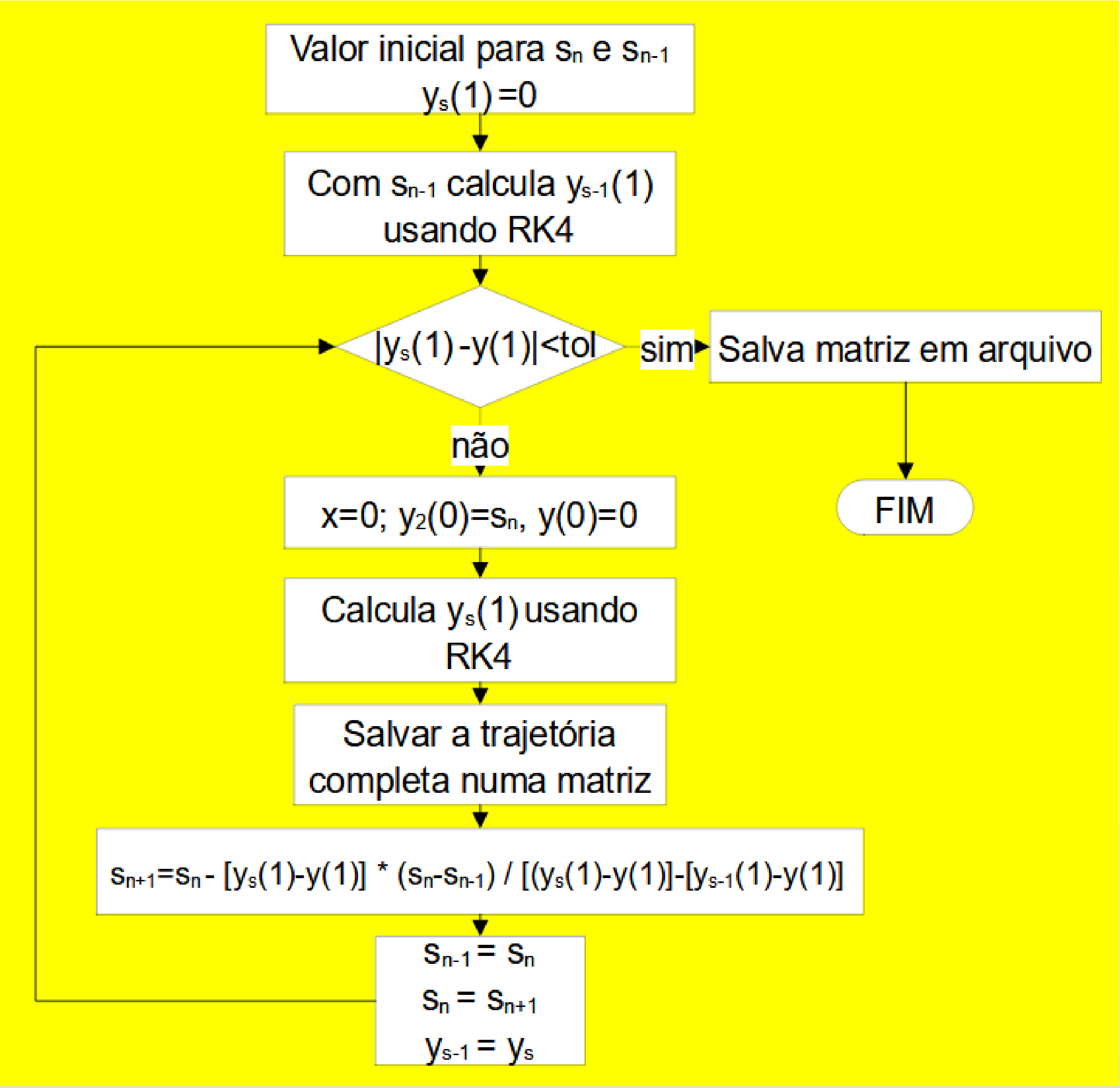
$$k_2 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2\right)$$

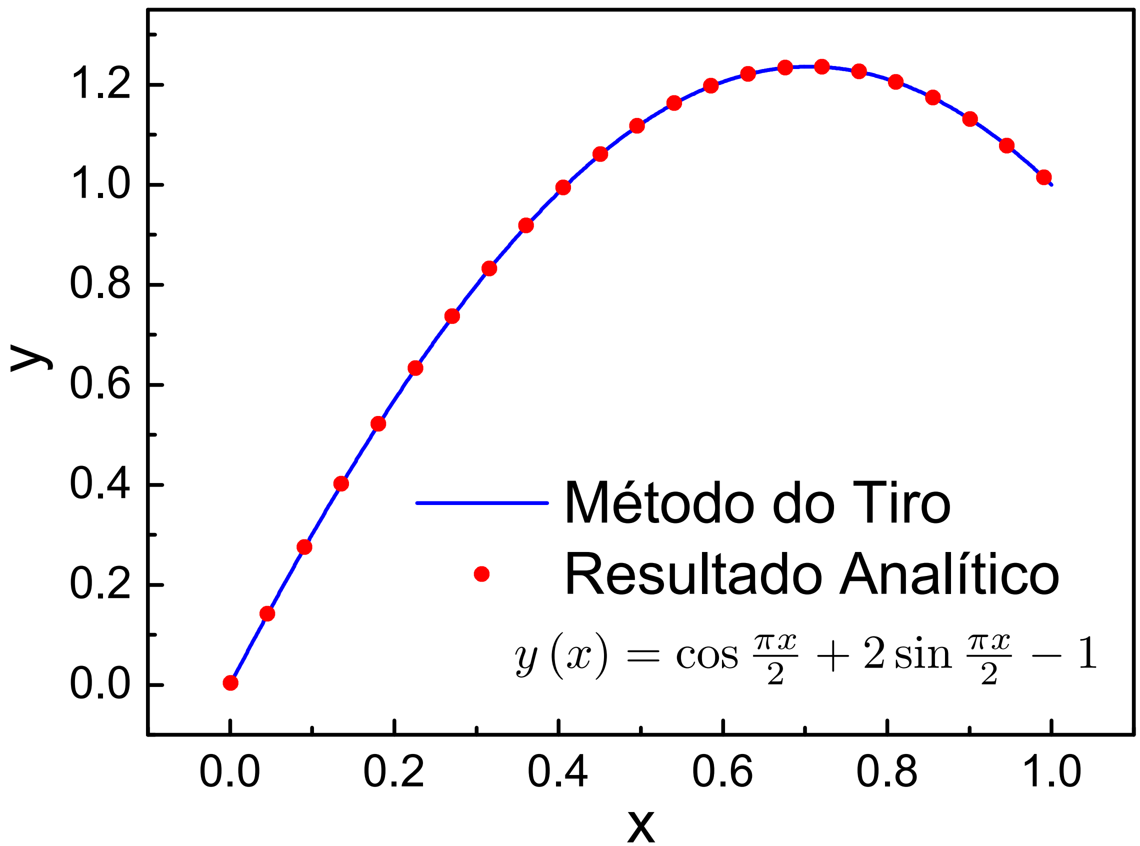
$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver pasta



# FÍSICA COMPUTACIONAL



## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Existe um tipo de equação diferencial em física que é comumente conhecido como problema de Sturm-Liouville:

$$[p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) = s(x)$$

Termo da segunda derivada combinado com o termo da primeira derivada.

$p(x), q(x)\ e\ s(x) \rightarrow$ são coeficientes funções de x

Ex

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{d}{dx}P_n\left(x\right)\right] + n(n+1)P_n(x) = 0$$ Eq. Legendre

$$\frac{d}{dx}\left[x\frac{dy\left(x\right)}{dx}\right] + \left(x - \frac{\nu^2}{x}\right)y(x) = 0$$ Eq. Bessel

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Vamos a deduzir um algoritmo que permita integrar o problema

Lembrando:

fórmula 3 pontos

$$\Delta_1 = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} = y_i' + \frac{h^2 y_i^{(3)}}{6} + o(h^4)$$

Multiplicando por $p_i'$

2ª derivada

$$\Delta_2 = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = y_i'' + \frac{h^2 y_i^{(4)}}{12} + o(h^4)$$

Multiplicando por $p_i$

Somando:

$$p_i'\Delta_1 + p_i\Delta_2 = \overbrace{p_i'y_i' + p_i y_i''}^{(p_i y_i')'} + \frac{h^2}{12}(p_i y_i^{(4)} + 2p_i' y_i^{(3)}) + o(h^4)$$

Desprezar

$$p_i'\Delta_1 + p_i\Delta_2 = (p_i y_i')' + o(h^2)$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

$$p_i'\Delta_1 + p_i\Delta_2 = (p_i y_i')' + o(h^2)$$

## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Substituindo $\Delta_1$ , $\Delta_2$ e fazendo $(p_i y_i')' = s_i - q_i y_i$

$$p_i'\left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) + p_i\left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}\right) + o(h^2) = s_i - q_i y_i$$

$$p_i\left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}\right) = s_i - q_i y_i - p_i'\left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) + o(h^2)$$

$$p_i(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) = h^2 s_i - h^2 q_i y_i - h^2 p_i'\left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) + o(h^4)$$

$$p_i y_{i+1} - 2p_i y_i + p_i y_{i-1} = h^2 s_i - h^2 q_i y_i - \tfrac{1}{2} h p_i' y_{i+1} + \tfrac{1}{2} h p_i' y_{i-1} + o(h^4)$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

$$p_i y_{i+1} - 2p_i y_i + p_i y_{i-1} = h^2 s_i - h^2 q_i y_i - \tfrac{1}{2} h p_i' y_{i+1} + \tfrac{1}{2} h p_i' y_{i-1} + o(h^4) \qquad \text{x 2}$$

$$2p_i y_{i+1} - 4p_i y_i + 2p_i y_{i-1} = 2h^2 s_i - 2h^2 q_i y_i - h p_i' y_{i+1} + h p_i' y_{i-1} + o(h^4)$$

$$(2p_i + hp_i')y_{i+1} + (2p_i - hp_i')y_{i-1} = (4p_i - 2h^2 q_i)y_i + 2h^2 s_i + o(h^4)$$

$$c_{i-1} = 2p_i - hp_i'$$
$$c_i = 4p_i + 2h^2 q_i$$
$$c_{i+1} = 2p_i + hp_i'$$
$$d_i = 2h^2 s_i$$

$$\boxed{c_{i+1} y_{i+1} + c_{i-1} y_{i-1} = c_i y_i + d_i + o\left(h^4\right)}$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

$$[p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) = s(x)$$

## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Ilustremos com um exemplo: Eq. de Legendre:

$$\frac{d}{dx}\left[\left(1-x^2\right)\frac{dy}{dx}\right] + l(l+1)y = 0$$

$$p(x) = 1 - x^2 \qquad q(x) = l(l+1)$$

$$p'(x) = -2x \qquad s(x) = 0$$

cujas soluções são os polinômios de Legendre $y = P_l(x)$

Assumamos que não conhecemos o valor de *l*, mas sim os dois primeiros pontos de $P_l(x)$, então podemos tratar o problema como um problema de autovalores.

Condicões de contorno

$$y(0) = 0 \qquad y(1) = 1$$

$$y(0,01) = 0,015$$

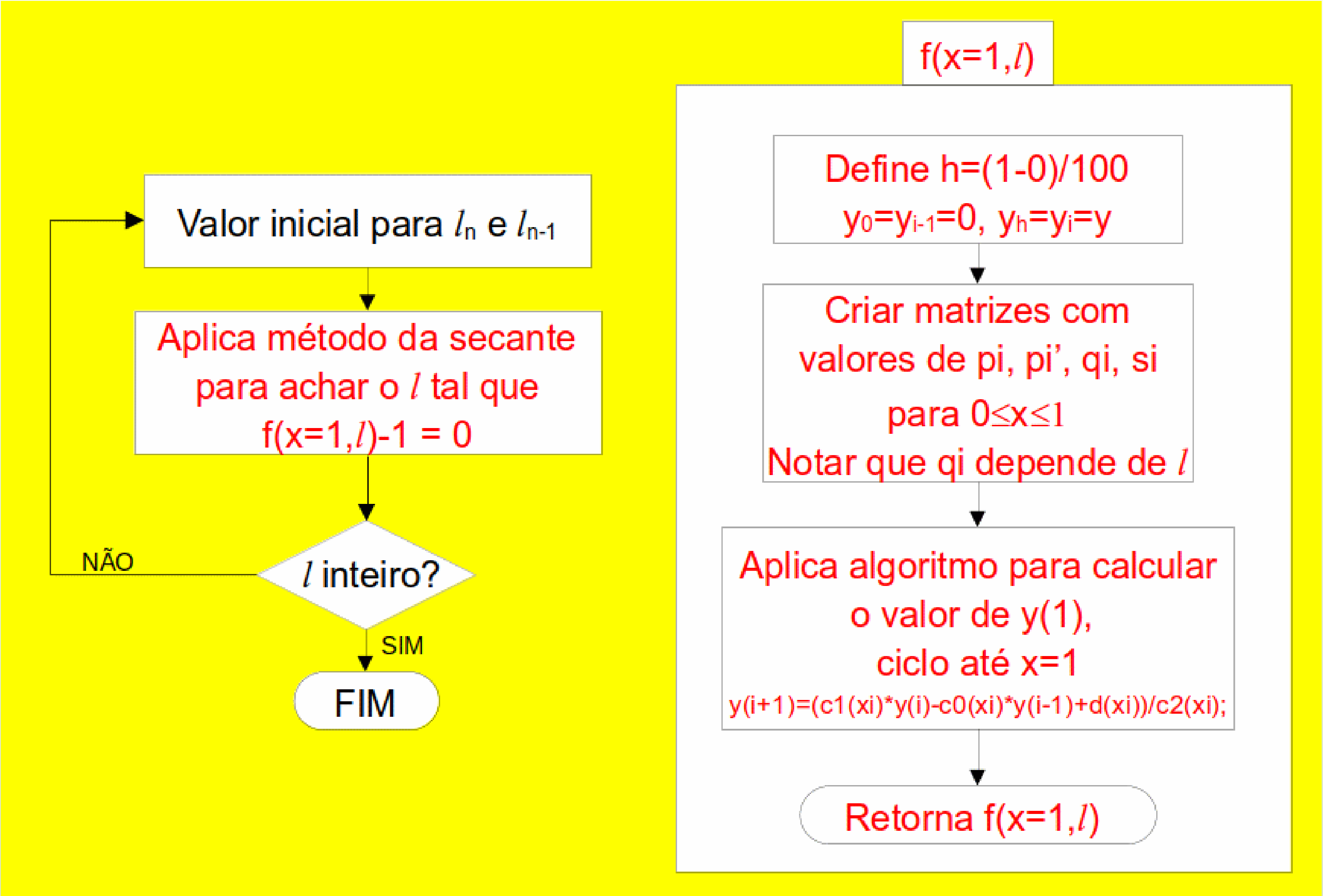
$$y_{i+1} = \frac{c_i y_i - c_{i-1} y_{i-1} + d_i}{c_{i+1}}$$

Resolver o autovalor *l* = ?

# FÍSICA COMPUTACIONAL

Ver Pasta

## PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE



Veja que o procedimento adotado no exemplo anterior é totalmente geral

**MÉTODO DO TIRO (SHOOTING METHOD) PARA O PROBLEMA DE AUTOVALORES**

Para outras equações que não sejam necessariamente do tipo do problema de Sturm-Liouville podem ser seguidos exatamente os mesmos passos.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE STURM-LIOUVILLE – MELHORA NA PRECISÃO

$$[p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) = s(x) \quad \Rightarrow \quad p'y' + py'' + qy = s$$

Diferenciando duas vezes:

$$p''y' + p'y'' + p'y'' + py^{(3)} + q'y + qy' = s' \qquad (1)$$

$$p^{(3)}y' + p''y'' + p''y'' + p'y^{(3)} + p''y'' + p'y^{(3)} + p'y^{(3)} + py^{(4)} + q''y + q'y' + q'y' + qy'' = s''$$

Agrupando convenientemente:

$$py^{(4)} + 2p'y^{(3)} = s'' - 3p''y'' - p^{(3)}y' - p'y^{(3)} - q''y - 2q'y' - qy'' \qquad (2)$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE STURM-LIOUVILLE – MELHORA NA PRECISÃO

De 1

$$y^{(3)} = \frac{1}{p}(s' - p''y' - 2p'y'' - q'y - qy')$$

Substituindo no membro direito da equação 2

$$py^{(4)} + 2p'y^{(3)} = s'' - 3p''y'' - p^{(3)}y' - p'y^{(3)} - q''y - 2q'y' - qy''$$

e combinando com:

$$p_i'\Delta_1 + p_i\Delta_2 = p_i'y_i' + p_iy_i'' + \frac{h^2}{12}(p_iy_i^{(4)} + 2p_i'y_i^{(3)}) + o(h^4)$$

Lembrando que:

$$\Delta_1 = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \qquad \Delta_2 = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE STURM-LIOUVILLE – MELHORA NA PRECISÃO

Se obtêm:

$$\boxed{c_{i+1}y_{i+1} + c_{i-1}y_{i-1} = c_i y_i + d_i + o\left(h^6\right)}$$

Com $c_{i+1}, c_{i-1}, c_i$ e $d_i$ :

$$c_{i+1} = 24p_i + 12hp_i' + 2h^2 q_i + 6h^2 p_i'' - 4h^2 \frac{(p_i')^2}{p_i} + h^3 p_i^{(3)} + 2h^3 q_i' - h^3 p_i' \frac{q_i}{p_i} - h^3 p_i' \frac{p_i''}{p_i}$$

$$c_{i-1} = 24p_i - 12hp_i' + 2h^2 q_i + 6h^2 p_i'' - 4h^2 \frac{(p_i')^2}{p_i} - h^3 p_i^{(3)} - 2h^3 q_i' + h^3 p_i' \frac{q_i}{p_i} + h^3 p_i' \frac{p_i''}{p_i}$$

$$c_i = 48p_i - 20h^2 q_i - 8h^2 \frac{(p_i')^2}{p_i} + 12h^2 p_i'' + 2h^4 p_i' \frac{q_i'}{p_i} - 2h^4 q_i''$$

$$d_i = 24h^2 s_i + 2h^4 s_i'' - 2h^4 p_i' \frac{s_i'}{p_i}$$

## ALGORITMO DE STURM-LIOUVILLE – MELHORA NA PRECISÃO

O algoritmo obtido pode ser aplicado facilmente se p(x), q(x) e s(x) são conhecidos explicitamente.

As derivadas de p, q, s pode que não sejam obtidas facilmente de forma analítica. Nesse caso se podem resolver numericamente, sempre utilizando fórmulas apropriadas para manter a alta precisão do algoritmo.

Para o caso especial em que p(x) = 1, os coeficientes podem ser reduzidos a uma forma bem mais simples.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE STURM-LIOUVILLE – MELHORA NA PRECISÃO

p(x)=1

Sem sacrificar a precisão do algoritmo, pode ser aplicada a fórmula de 3 pontos para a primeira e segunda derivada de q e s, obtendo-se assim:

$$c_{i+1} = 24 + 2h^2 q_i + 2h^3 q_i'$$

$$c_{i-1} = 24 + 2h^2 q_i - 2h^3 q_i'$$

$$c_i = 48 - 20h^2 q_i - 2h^4 q_i''$$

$$d_i = 24h^2 s_i + 2h^4 s_i''$$

$\Rightarrow$

$$c_{i+1} = 1 + \frac{h^2}{24}(q_{i+1} + 2q_i - q_{i-1})$$

$$c_{i-1} = 1 + \frac{h^2}{24}(q_{i-1} + 2q_i - q_{i+1})$$

$$c_i = 2 - \frac{h^2}{12}(q_{i+1} + 8q_i + q_{i-1})$$

$$d_i = \frac{h^2}{12}(s_{i+1} + 10s_i + s_{i-1})$$

## **ALGORITMO DE NUMEROV** (Eq. com p(x) = 1)

$$[\cancelto{1}{p(x)}\,y'(x)]' + q(x)y(x) = s(x) \qquad y'' = s - qy$$

Derivando 2 vezes em ambos os termos:

$$y^{(4)} = \frac{d^2}{dx^2}(s - qy)$$

Aplicando a fórmula de 3 pontos para a segunda derivada no membro direito da equação:

$$y_i^{(4)} = \frac{(s_{i+1} - q_{i+1}y_{i+1}) - 2(s_i - q_i y_i) + (s_{i-1} - q_{i-1}y_{i-1})}{h^2} \tag{A}$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE NUMEROV (Eq. com p(x) = 1)

Por outro lado, aplicando série de Taylor a uma função:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2}f''(x_0) + \frac{(x - x_0)^3}{6}f'''(x_0) + \frac{(x - x_0)^4}{24}f^{(4)}(x_0) + \cdots$$

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) \pm \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) \pm \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x_0) + 0(h^6)$$

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + h^2 f''(x_0) + \frac{h^4}{12}f^{(4)}(x_0) + o(h^6) \quad /h^2$$

$$\frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + o(h^4) = f''(x_0) + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_0)$$

ou

$$y_i'' + \frac{h^2 y_i^{(4)}}{12} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + o(h^4)$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## **ALGORITMO DE NUMEROV** (Eq. com p(x) = 1)

$$y_i'' + \frac{h^2 y_i^{(4)}}{12} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + o(h^4)$$

$$\Big\Downarrow \quad y'' = s - qy$$

$$y_i^{(4)} = \frac{12}{h^2}\left[\left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - (s_i - q_i y_i)\right) + o(h^4)\right] \qquad \text{B}$$

Igualando A e B temos que:

$$\frac{12}{\cancel{h^2}}\left[\left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - (s_i - q_i y_i)\right) + o(h^4)\right] = \frac{(s_{i+1} - q_{i+1} y_{i+1}) - 2(s_i - q_i y_i) + (s_{i-1} - q_{i-1} y_{i-1})}{\cancel{h^2}}$$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## ALGORITMO DE NUMEROV (Eq. com p(x) = 1)

Se obtêm:

$$\boxed{c_{i+1}y_{i+1} + c_{i-1}y_{i-1} = c_i y_i + d_i + o\left(h^6\right)}$$

**NUMEROV**

Com $c_{i+1}, c_{i-1}, c_i$ e $d_i$ :

$$c_{i+1} = 1 + \frac{h^2}{12} q_{i+1} \longrightarrow \quad x_0 + 2h$$

$$c_{i-1} = 1 + \frac{h^2}{12} q_{i-1} \longrightarrow \quad x_0$$

$$c_i = 2 - \frac{5h^2}{6} q_i \longrightarrow \quad x_0 + h$$

$$d_i = \frac{h^2}{12}\left(s_{i+1} + 10 s_i + s_{i-1}\right)$$

## EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Serão aplicados os métodos que estudamos para resolver o problema de autovalores, definido através da equação de Schrödinger em uma dimensão

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = \epsilon\phi(x)$$

$m - massa\ da\ partícula$

$\varepsilon - níveis\ de\ energia$

$\hbar - cte\ de\ Planck/2\pi$

$V(x) - potencial\ externo$

re-escrevendo: $\phi(x)'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\epsilon - V(x)\right)\phi(x) = 0$

$$[p(x)y'(x)]' + q(x)y(x) = s(x)$$

**Sturm-Liouville**

$$p(x) = 1$$

$$q(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\epsilon - V(x)\right)$$

$$s(x) = 0$$

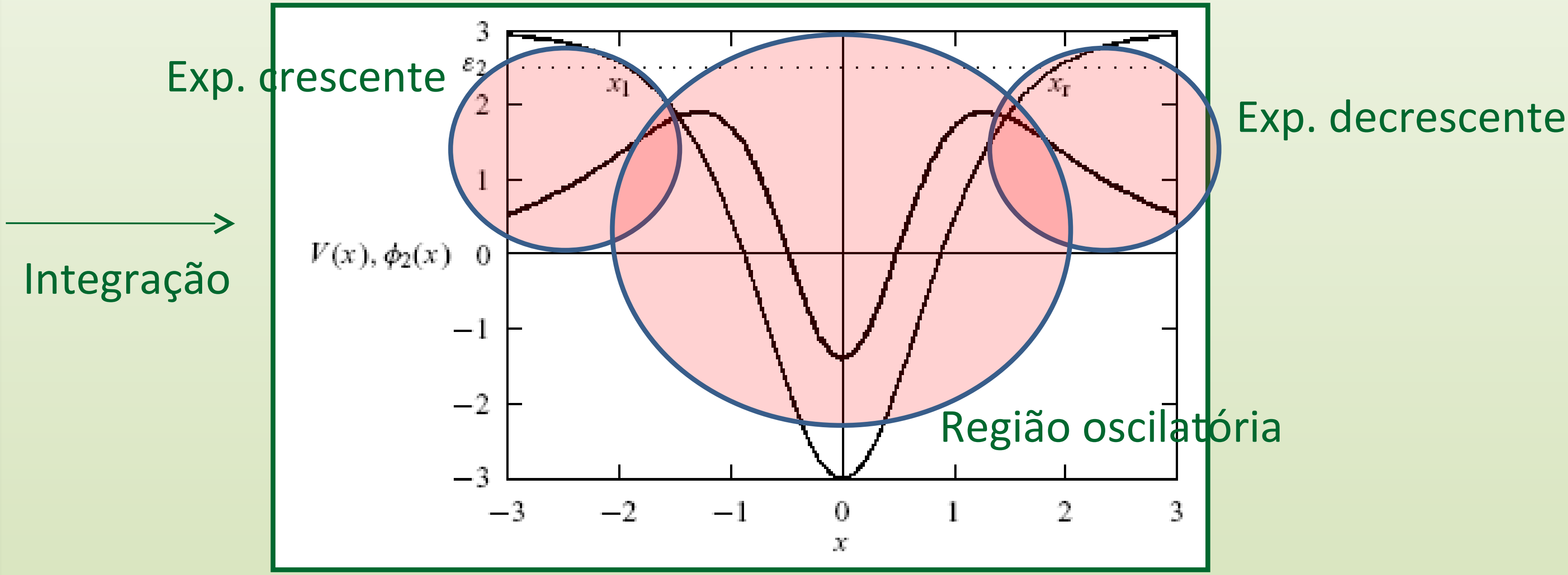
## FÍSICA COMPUTACIONAL

### EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

A partícula está confinada pelo poço de potencial V(x) de forma que:

$\phi(x) \to 0$ quando $|x| \to \infty$

Para resolver o problema dos autovalores se poderia integrar a equação usando o algoritmo de Numerov de esquerda a direita ou de direita a esquerda.



## EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

O erro acumulado poderá ser significante quando passemos da região oscilatória para a região que decresce exponencialmente.

A solução exponencial crescente é também uma possível solução da equação, podendo entrar na integração numérica para destruir a precisão do algoritmo.

A regra é integrar as soluções a partir de ambos os lados e fazer que estas coincidam na região do poço.

Geralmente o ponto de encontro de ambas as soluções se escolhe como um dos pontos de retorno, onde $\varepsilon = V(x)$, como $x_l$ (denominado em diante $\rightarrow x_e$) e $x_r$ (denominado em diante $\rightarrow x_d$) na figura anterior.

## EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

valor inicial para ε → ajustar até que a solução integrada a partir da direita ($\phi_d$) e a partir da esquerda ($\phi_e$), satisfaçam as condições de continuidade em um dos pontos de retorno.

Se escolhermos o ponto $x_d$ , por exemplo:

$$\phi_e(x_d) = \phi_d(x_d)$$

$$\phi'_e(x_d) = \phi'_d(x_d)$$ Utilizando a fórmula de 3 pontos para substituir as derivadas:

$$f(\epsilon) = \frac{\phi_e(x_d+h) - \phi_e(x_d-h)}{2h} - \frac{\phi_d(x_d+h) - \phi_d(x_d-h)}{2h} = 0$$

O valor correto do autovalor ε, pode ser encontrado aplicando um dos algoritmos para busca de raízes à equação anterior e comprovando depois:

$$\phi_e(x_d) - \phi_d(x_d) < tolerancia$$

**Normalizar ambas funções pelo máximo da função que integra a região do poço**

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Passos para o cálculo das energias (autovalores)

- Providenciar uma escolha razoável de $\varepsilon_n$ para iniciar o algoritmo
- Achar $x_d$ (ou $x_e$).
- Integrar a equação para $\phi_e$ até $x_d$+h e para $\phi_d$ até $x_d$–h. Pode-se escolher zero como o primeiro ponto e uma quantidade bem pequena como segundo ponto para iniciar o algoritmo **(Essa quantidade pode ser negativa dependendo do valor do autovalor.**
- Avaliar f(ε). $f(\epsilon) = \frac{\phi_e(x_d+h) - \phi_e(x_d-h)}{2h} - \frac{\phi_d(x_d+h) - \phi_d(x_d-h)}{2h}$
- Aplicar um método de busca de raízes para obter $\varepsilon_0$ que cumpra $f(\varepsilon_n) = 0$
- Achado o $\varepsilon_n$ correto, normalizar as funções pelo máximo da função que integra a região do poço
- Repetir os passos acima para a busca do próximo autovalor. Pode-se iniciar a busca com um valor ligeiramente superior que o último autovalor encontrado. Deve-se verificar que nenhum auto-estado seja pulado, para isso pode-se contar os nodos ($\phi(x) = 0$). O estado n deve ter n nodos.

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## PROJETO 3 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Integrar com o algoritmo de Numerov, e encontrar os 3 primeiros níveis de energia permitidos, utilizando:

$$V(x) = \frac{6\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\cosh^2(x)}\right)$$

Faça os gráficos de $\phi_n(x)$ vs x para n = 0, 1 e 2 e $x \in [-10,10]$.

Faça os gráficos de $\varepsilon_n$ vs x para n = 0, 1 e 2 e coloque junto o gráfico de V(x) vs x para $x \in [-10,10]$.

Para facilitar o cálculo, considere $\hbar = m = 1$

# FÍSICA COMPUTACIONAL

## PROJETO 3 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM UMA DIMENSÃO

Exemplos de gráficos esperados: