

Numerov Shooting

CoFee 1 Blatt 5

Arto Steffan

21/07/23

Inhaltsverzeichnis

1	Das Numerov-Verfahren	1
1.1	Darstellung des Problems	1
1.2	Das Numerov-Verfahren	2
1.3	Implementierung in c++	2
2	Die Shooting-Methode	6
2.1	Darstellung des Problems	6
2.2	Implementierung	7
2.3	Die Shooting-Methode	7
3	Fazit	12
Der vollständige Code befindet sich unter meinem Git Repository: https://github.com/Tamwyn001/ComputerPhysikUniKonstanz2023/tree/main/Blatt_5		

1 Das Numerov-Verfahren

1.1 Darstellung des Problems

Wir haben eine Ladungsverteilung ρ , die lautet:

$$\rho(r) = \frac{1}{8\pi} \cdot e^{-r} \quad (1)$$

Um das Problem zu lösen, führen wir die radiale Poisson-Gleichung ein:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon} = \frac{1}{r} \cdot \partial_r^2(r\phi(r)). \quad (2)$$

Wir substituieren mit $\chi(r) = r\phi(r)$. Daraus folgt die folgende Differentialgleichung:

$$\ddot{\chi}(r) = -\frac{1}{8\pi\epsilon} \cdot r \cdot e^{-r} \quad (3)$$

Die analytische Lösung lautet:

$$\chi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \left(1 - \left(1 + \frac{r}{2}\right) e^{-r}\right) \quad (4)$$

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \left(\frac{1}{r} - \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{2}\right) e^{-r}\right) \quad (5)$$

Wir können sie später benutzen, um die Ergebnisse mit der Theorie zu vergleichen.

1.2 Das Numerov-Verfahren

Das Numerov-Verfahren eignet sich ganz gut, um das Problem zu lösen. Er liefert eine numerische Lösung auf Differentialgleichungen der Form:

$$\left(\left(\frac{d}{dx}\right)^2 + k^2(x)\right) f(x) = F(x) \quad (6)$$

Wir haben dementsprechend:

$$f(r) = \chi(r) \quad (7)$$

$$F(r) = -\frac{1}{8\pi\epsilon} \cdot r \cdot e^{-r} \quad (8)$$

$$k(r) = 0. \quad (9)$$

$$(10)$$

Das Schrittverfahren lautet im Allgemeinen:

$$f_{n+1} = \frac{\frac{h^2}{12}(F_{n+1} + 10F_n + F_{n-1}) + f_n(2 - \frac{5}{6}h^2k_n^2) - f_{n-1}(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2)}{1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2} + O(h^6) \quad (11)$$

Für $k_n^2 = 0$ haben wir:

$$f_{n+1} = \frac{h^2}{12}(F_{n+1} + 10F_n + F_{n-1}) + 2f_n - f_{n-1} + O(h^6) \quad (12)$$

1.3 Implementierung in c++

Der Sourcecode befindet sich unter dem GitHub (siehe am Anfang).

Wir wollen die Einwärts-Integration benutzen, d.h. wir fangen bei einem Radius an, wo die Ladungsverteilung vernachlässigbar ist, und integrieren bis zum zentralen Peak. Wir nehmen an, dass $e^{-x}|_{x>10}$ nah genug an 0 liegt. D.h eine Integration für Werte größer als 10 ist für uns irrelevant.

Anfangsbedingungen

$$r_0 = 10 \tag{13}$$

$$f_0 = \chi(10) \tag{14}$$

$$f_{-1} = 0 \tag{15}$$

$$\tag{16}$$

Eine naive Implementierung des Verfahrens wie die Gleichung 12 führt zu folgendem Rechenfehler:

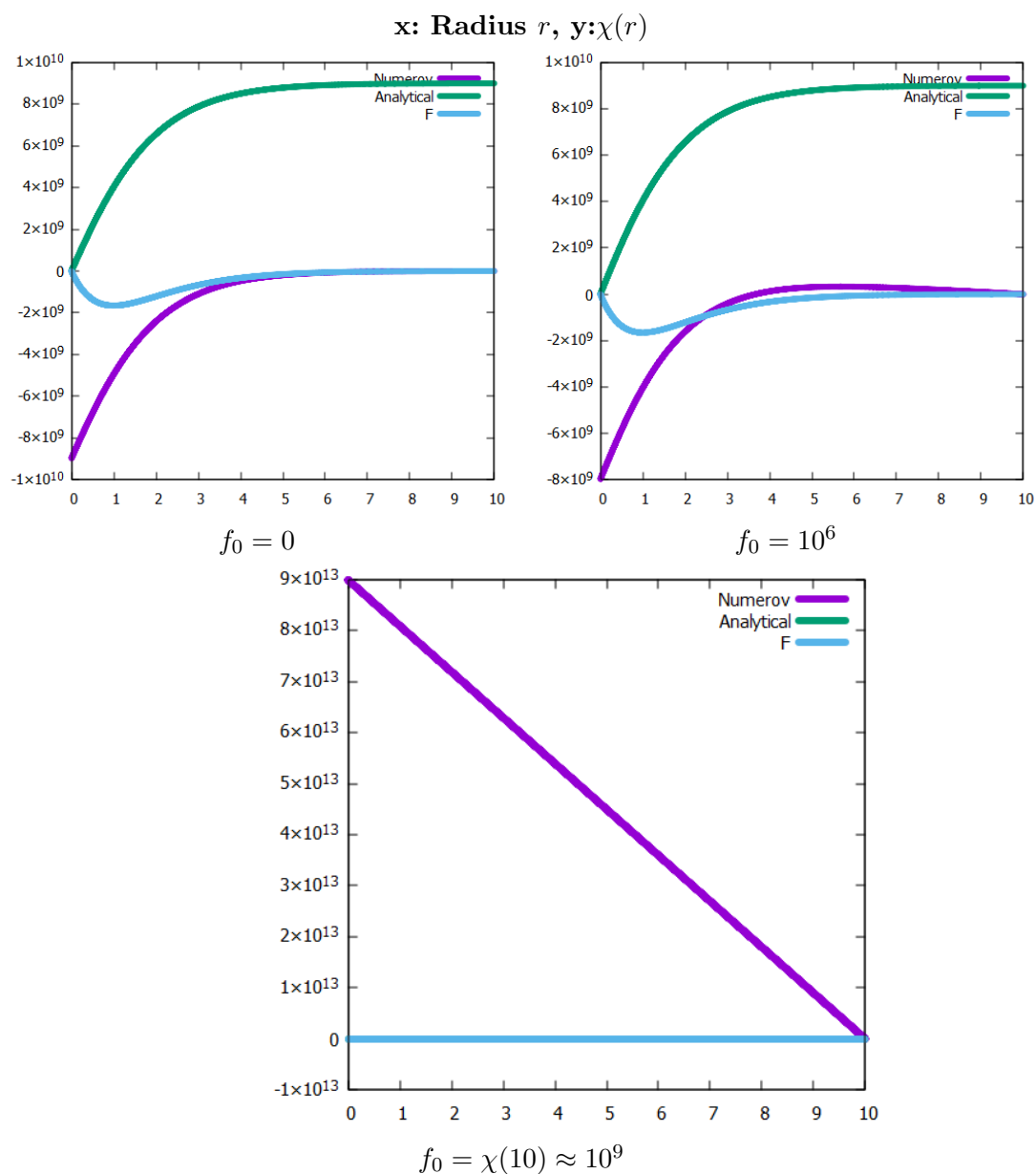


Abbildung 1: Drei Verläufe des Numerov-Verfahrens ohne Korrektur.

Bei $f_0 = 0$ haben wir eine gute Kurve, aber sie ist um -10^9 auf die y -Achse verschoben. Dafür können wir die Anfangsbedingung anders wählen. Bei $f_0 = 10^6$ merken wir, dass die Kurve linear für $r \rightarrow 0$ steigt, und dann wird durch die Funktion F auf 0 gezwungen. Leider ist $f(0) = \chi(0)$ nicht mehr gleich 0 und entfernt sich deswegen von der analytischen Lösung. Wenn wir die Anfangsbedingung $f_0 = \chi(10)$ festsetzen, um die analytische Lösung zu respektieren, merken wir, dass die Numerov-Kurve linear steigt.

Die Erklärung zur Beobachtung in der Abbildung 1 ist, dass ein linear Term und eine konstante bei der Doppelintegration ($\ddot{\chi} \rightarrow \chi$) auftauchen. Diese sind von der Anfangsbedingung abhängig. Die Steigung ist für $f_0 = 10^6$ erkennbar, aber die Funktion F schafft, die Kurve zu korrigieren. Für die richtige Anfangsbedingung ist die Steigung so hoch, dass der Verlauf der Kurve meistens von diesem linearen Term abhängig ist. Anders gesagt addiert sich zu jedem Zeitschritt ein konstanter Wert f_n , der die Steigung der Funktion ist.

Wir wollen die Anfangsbedingung $f_n = \chi(10)$ erfüllen. Um diese Problem zu lösen, können wir einfach n mal die Steigungskonstante von dem Ergebnis χ_n subtrahieren. Wir haben mittels der 3. Graphik die Abbildung 1. Weiter haben wir eine Iteration jeder 0.001, d.h wir erhalten:

$$a = \frac{(8,986 \cdot 10^{13}) - 8,9851 \cdot 10^9}{10 - 0} \cdot 0,001 \quad (17)$$

Darstellung der Lösung

Schließlich haben wir:

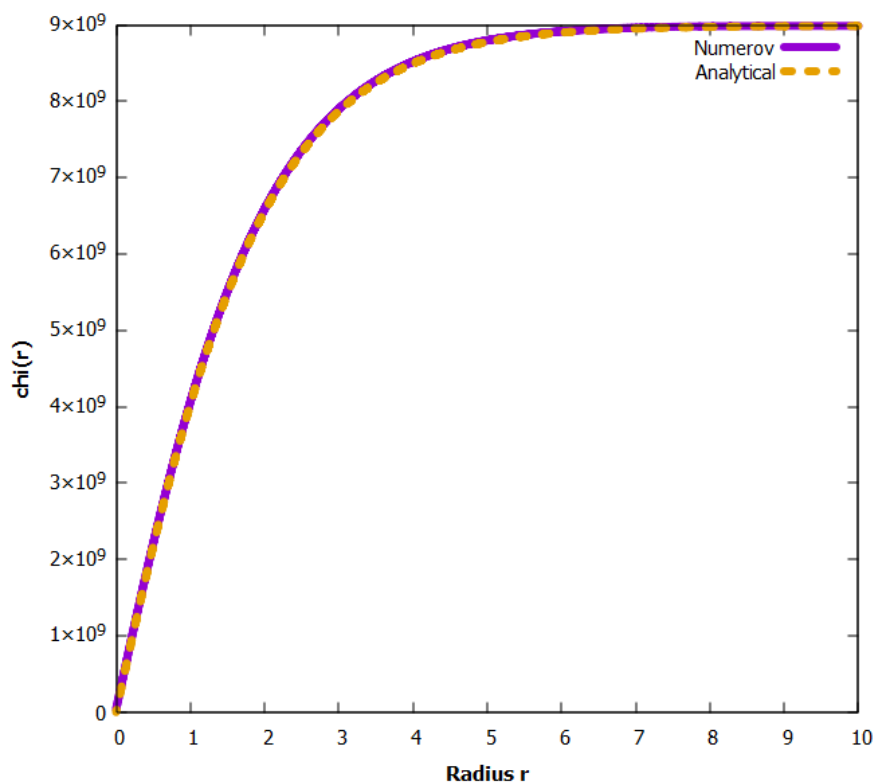


Abbildung 2: $\chi(r)$ analytisch und numerisch (*Numerov*) berechnet.

Nebenbedingung

Zum Vergleich der Anfangsbedingung $\chi(0) = 0$ können wir die nächste Tafel betrachten:

Radius r	$\chi_{Numerov}(0)$	$\chi_{analytisch}(0)$
0,002	$4,7891 \cdot 10^7$	$8,9876 \cdot 10^6$
0,001	$4,340\,21 \cdot 10^7$	$4,493\,78 \cdot 10^6$
$1,02 \cdot 10^{-13}$	$3,891\,27 \cdot 10^7$	0,00046

Tabelle 1: Verlauf der Simulation für $r \rightarrow 0$ mit einer Schrittweite von 0,001.

Hier sehen wir leicht, dass das Numerov-Verfahren Schwierigkeiten hat, die Nebenbedingung $\chi(0) = 0$ zu respektieren. Man merkt es auf dem Graph 2 nicht, denn die Größenordnung ist viel kleiner als die Größenordnung der vertikalen Achse.

2 Die Shooting-Methode

2.1 Darstellung des Problems

Wir haben nun eine eindimensionale Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad (18)$$

Wobei das Potential lautet:

$$V(x) = \begin{cases} x & (x \geq 0) \\ \infty & (\text{sonst}) \end{cases} \quad (19)$$

Wir wollen nun die fünf erste Lösungen (die Eigenfunktion) der Schrödingergleichung $\psi_n(x)$ bestimmen. Wir haben $n \in [0, 1, 2, 3, 4]$.

Wie wir bereits in der Vorlesung Experimentalphysik 4 gesehen haben, ist die Airy-Funktion eine Lösung zur Eigenwertgleichung. Wir haben:

$$\psi_n(x) = C \cdot Ai\left(\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2}}(x - E_n)\right). \quad (20)$$

Hier sollte der Vorfaktor C die Normierbarkeit $|\psi_n(x)|^2 = 1$ erfüllen. Es liegt daran, dass die Airy-Funktion die Lösung der DGL $\ddot{f} - fg = 0$ ist.

2.2 Implementierung

Die Gleichung 18 ist mit dem Numerov-Verfahren lösbar. Durch umformen erhalten wir:

$$\ddot{\psi}_n(x) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \right) \psi_n(x) = 0 \Big|_{x \geq 0} \quad (21)$$

Betrachten wir nun das Numerov-Verfahren, der für DGL der Form 6 passt. Wir erhalten damit:

$$f_n = \psi(x)_n \quad (22)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - V(x)) \quad (23)$$

$$F = 0 \quad (24)$$

Energieeigenwerte

Wir vermuten zuerst einen E_n und lösen die Schrödingergleichung mittels des Numerov-Verfahrens. Aus der Quantenmechanik folgt, dass ψ_n normiert bleiben sollte. Dafür können wir die folgenden Randbedingungen anwenden:

$$\psi_n(0) = 0 \quad (25)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_n(x) = 0 \quad (26)$$

2.3 Die Shooting-Methode

Wir bestimmen die Nullstellen der Funktion $f(x) = \mathcal{L} - 0$ für einen Energiebereich in $[0;10]$. Wir suchen die Nullstellen dieser Funktion, wobei $\mathcal{L} = \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_n(x)$. Diese Stellen sind Energien bei denen die Randbedingungen erfüllt sind, anders gesagt explodiert die Wellenfunktion nicht. Mittels des Numerov-Verfahrens kann man die Werte für $\psi(x)$ für große x bestimmen. Wir berechnen dessen Grenzwert für den Energiebereich.

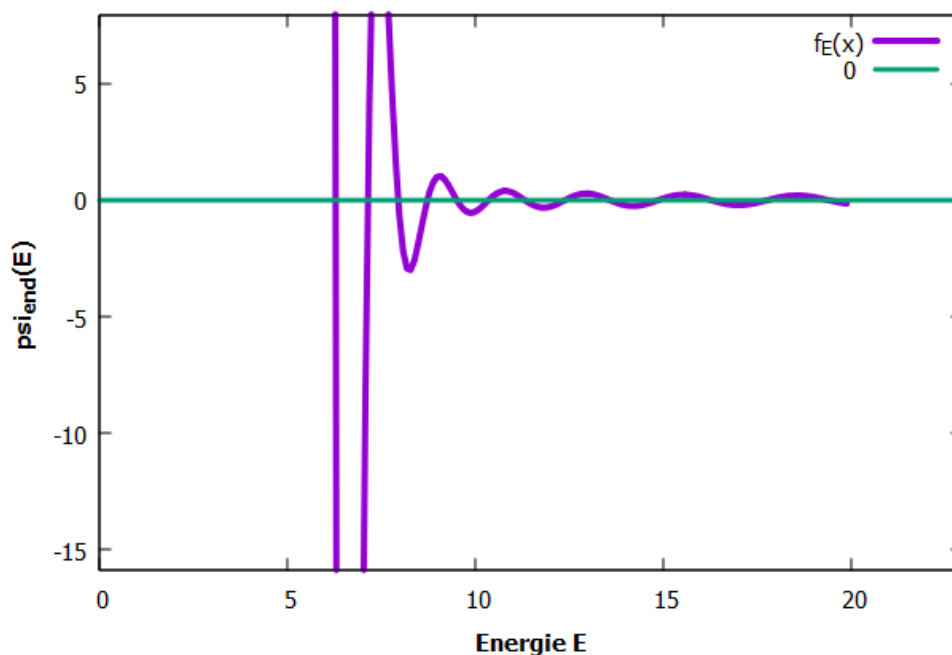


Abbildung 3: Die Funktion $f(x)$, die den Abstand zwischen $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_n(x)$ und 0 darstellt.

Uns interessieren also die Energien, bei denen $f(x) = 0$ ist.

Bestimmung der Nullstellen E_n : Das Newton-Verfahren

Nun hat man die gewünschte Funktion, und wir suchen davon die Nullstellen. Dafür eignet sich das Newton-Verfahren ganz gut. Die Nullstellen werden wie folgt bestimmt:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (27)$$

Wir werden hier einfach die Animation auf der Wikipedia Seite implementieren: https://de.wikipedia.org/wiki/Newtonverfahren#Konstruktion_am_Graphen. Wir nehmen zwei benachbarte Punkte $f(\alpha_0)$ und $f(\beta_0)$ und zeichnen eine Sekante. Wir speichern die Nullstelle α_1 dieser linearen Funktion. Weiter bestimmen wir eine neue Sekante aus der Auswertung $f(\alpha_1)$ dieses Punktes mit einem anderen in seiner Nähe. Die Abbruchbedingung wird genau dann erreicht, wenn $|f(\alpha_n) - f(\alpha_{n-1})| < 10^{-10}$.

Um einen Anfangswert zu bestimmen, müssen wir über die Daten iterieren und für Vorzeichenwechsel suchen. Aber ein Vorzeichenwechsel taucht genau zwischen zwei Werten auf oder wenn ein Wert selbst null ist. Das heißt, die Punkten haben an dieser Stelle alle möglichen Informationen geliefert. Das Newton-Verfahren ist dann nur relevant, um die Nullstelle der Sekante zu bestimmen. Genauer kann man hier nicht sein.

Eigentlich sollte man hier eine Energie schießen und unter der Betrachtung des Grenzwertes der Wellenfunktion diese Energie durch ein Bisektionsverfahren verbessern. Leider hat mir die Zeit gefehlt.

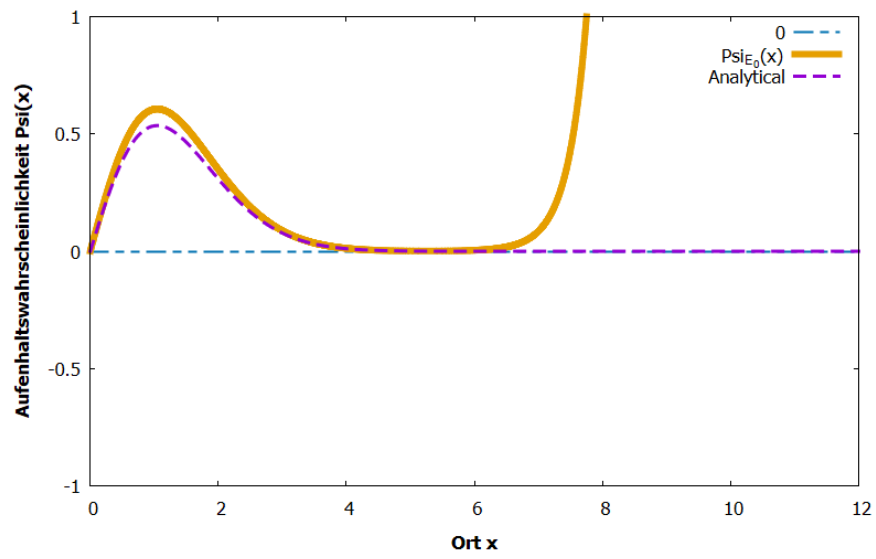
Energie	E_0	E_1	E_2	E_3	E_4
Werte	1,85576	3,2446	4,38167	5,38661	6,30526

Tabelle 2: Energieeigenwerte der Hamiltonian nach dem Newton-Verfahren.

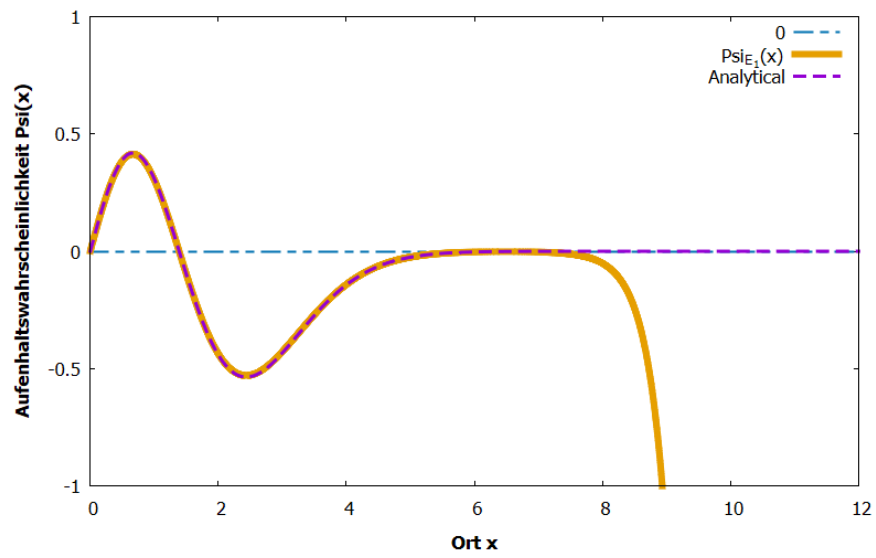
Da die Energien nur mit einer unpräzise Genauigkeit bestimmen werden können, divergiert die Wellenfunktion an einer Stelle. Man kann trotzdem den Verlauf der Airy Funktion erkennen.

Für die analytische Lösung benutzen wir die Variabel `double ai` von der Funktion `alglig::airy()` von der Library AlgLib <https://www.alglib.net/>. Das Ortsargument erfüllt die Gleichung 20.

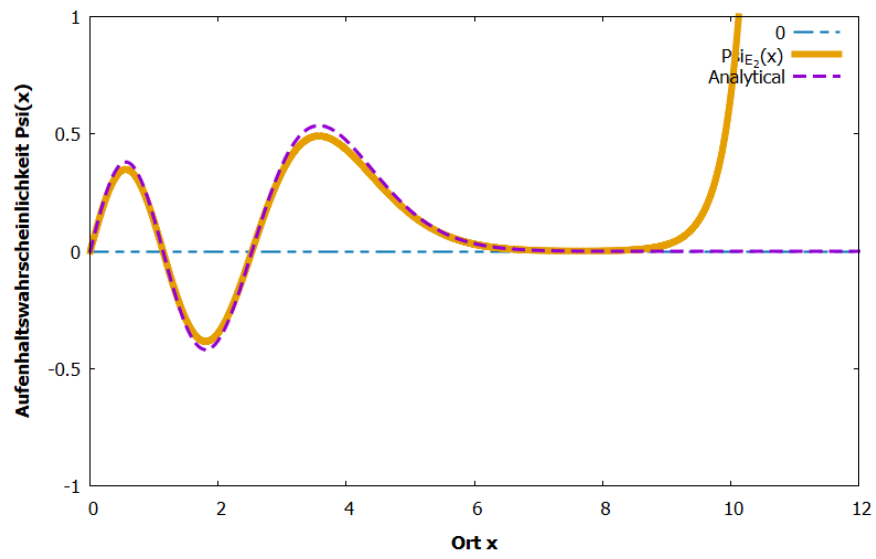
Da die Daten divergieren, ist es nicht (leicht) möglich sie zu normieren. Wir hätten hier eine Summe über allen Werte der Amplitude berechnen sollen und jede Wert durch diese Summe dividieren sollen. Wir erhalten die folgenden Graphen.



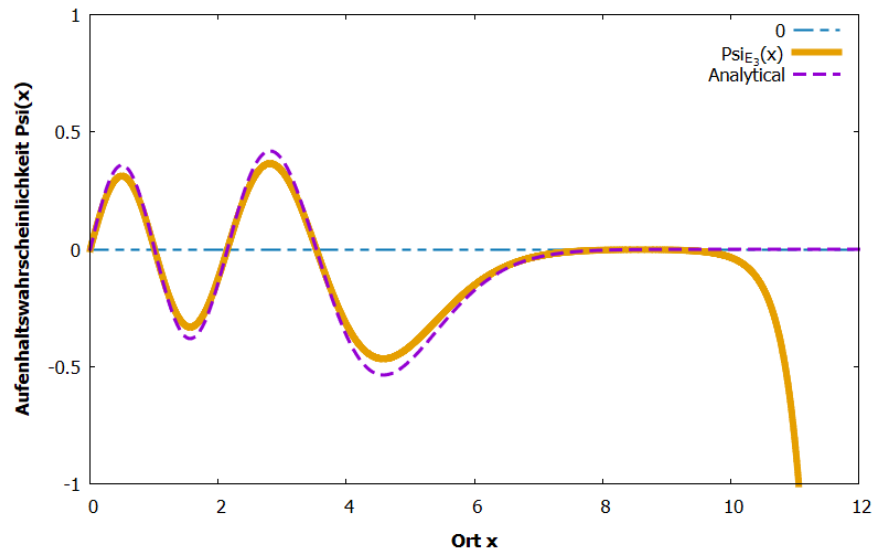
$$E_0 = 1,85576$$



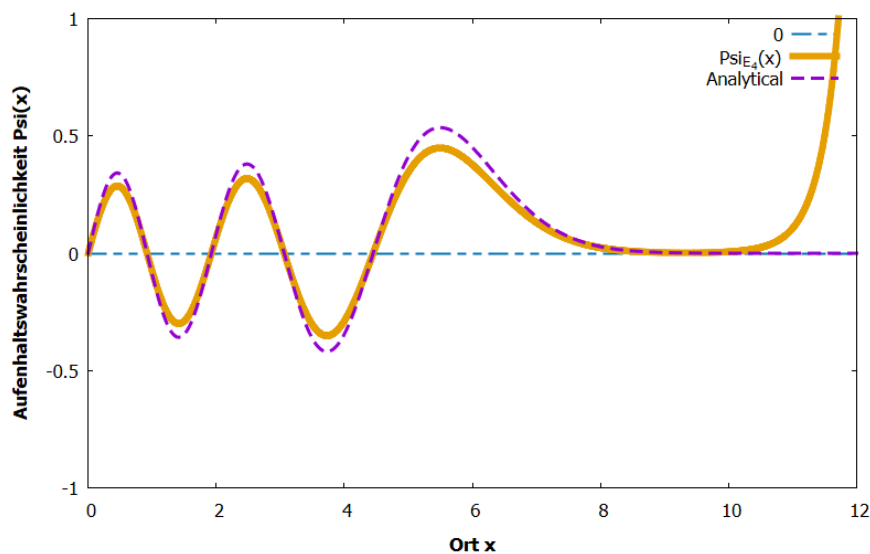
$$E_1 = 3,2446$$



$$E_2 = 4,38167$$



$$E_3 = 5,38661$$



$$E_4 = 6,30526$$

Abbildung 4: Die Wellenfunktionen für fünf Unterschiedliche Eigenenergien 2.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten sind nicht normiert.

Hier ist $C = 1$ in der analytischen Lösung, und die Funktionen sind proportional zu den physikalischen Lösungen.

3 Fazit

Wir haben die Poissongleichung für eine exponentiell abfallende Ladungsverteilung angewendet, um ein geladenes Teilchen mittels das Numerov-Verfahren zu lösen. An dieser Stelle hat eine Lösung für das Potential gefehlt. Weiter haben wir die Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem links unendlich- und rechts linear steigenden Potential gelöst. Hier wurde die Shooting-Methode mittels das Bisektionsverfahren angewendet. Das Ziel ist die Bestimmung der Nullstellen des Grenzwertes der Wellenfunktion. Das Numerov-Verfahren wurde zur Lösung der DGL angewendet. Es hat hier die Normierungsbedingung gefehlt.

Abbildungsverzeichnis

1	Drei Verläufe des Numerov-Verfahrens ohne Korrektur.	4
2	$\chi(r)$ analytisch und numerisch (<i>Numerov</i>) berechnet.	5
3	Die Funktion $f(x)$, die den Abstand zwischen $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_n(x)$ und 0 darstellt.	8
4	Die Wellenfunktionen für fünf Unterschiedliche Eigenenergien 2.	12

Tabellenverzeichnis

1	Verlauf der Simulation für $r \rightarrow 0$ mit einer Schrittweite von 0,001.	6
2	Energieeigenwerte der Hamiltonian nach dem Newton-Verfahren.	9