

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FÍSICA COMPUTACIONAL

---

# Algoritmo de Numerov e funções esféricas de Bessel

---

*Autor:*

Adolfo Scheidt

*Professor:*

Lucas Nicolao

6 de Julho de 2017



# 1 Introdução

Serão apresentados aqui métodos para o cálculo de funções esféricas de Bessel e a utilização do algoritmo de Numerov para resolver equações diferenciais ordinárias (EDO's) de segunda ordem numericamente. Tais métodos foram implementados em programas e testados através de comparações com algumas soluções analíticas escolhidas para cada caso.

## 2 Métodos

### 2.1 Algoritmo de Numerov

Este método é eficiente para resolver equações do tipo

$$\ddot{x}(t) = f(t)x(t). \quad (1)$$

O método de Numerov faz uso da estrutura especial desta equação de modo a obter uma forma similar ao algoritmo de Verlet, mas com uma precisão um pouco maior<sup>1</sup>. O algoritmo é obtido expandindo-se  $x(t)$  em Taylor até a sexta ordem em torno de  $t = 0$ , para as coordenadas  $t = h$  e  $t = -h$ :

$$x(h) = x(0) + \dot{x}(0)h + \frac{\ddot{x}(0)}{2}h^2 + \frac{\dddot{x}(0)}{6}h^3 + \frac{x^{(4)}(0)}{24}h^4 + \frac{x^{(5)}(0)}{120}h^5 + \frac{x^{(6)}(0)}{720}h^6 + (\text{termos de ordem maior}) \quad (2)$$

$$x(-h) = x(0) - \dot{x}(0)h + \frac{\ddot{x}(0)}{2}h^2 - \frac{\dddot{x}(0)}{6}h^3 + \frac{x^{(4)}(0)}{24}h^4 - \frac{x^{(5)}(0)}{120}h^5 + \frac{x^{(6)}(0)}{720}h^6 + (\text{termos de ordem maior}) \quad (3)$$

onde os termos  $x^{(n)}$  representam a n-ésima derivada de  $x$  em relação ao tempo. Se somarmos as equações (2) e (3), obtemos

$$x(h) + x(-h) - 2x(0) = h^2 f(0)x(0) + \frac{h^4}{12}x^{(4)}(0) + \frac{h^6}{360}x^{(6)}(0) + (\text{termos de ordem maior}), \quad (4)$$

---

<sup>1</sup>ver Apêndice A7.1 da referência [1].

sendo que o termo  $\ddot{x}(0)$  foi substituído por  $f(0)x(0)$ , por conta da equação (1). Pelo fato de as derivadas  $x^{(4)}(0)$  e  $x^{(6)}(0)$  não serem conhecidas, esta fórmula acaba não sendo muito útil. Entretanto, se considerarmos a equação (4) apenas até os termos de ordem 2 e isolarmos  $\ddot{x}(0)$ , obtemos

$$\ddot{x}(0) = \frac{x(h) + x(-h) - 2x(0)}{h^2}. \quad (5)$$

Calculando a derivada de ordem 2 dos dois lados e usando novamente a equação (1), tem-se

$$x^{(4)}(0) = \frac{\ddot{x}(h) + \ddot{x}(-h) - 2\ddot{x}(0)}{h^2} \rightarrow x^{(4)}(0) = \frac{f(h)x(h) + f(-h)x(-h) - 2f(0)x(0)}{h^2}. \quad (6)$$

Após isso, podemos substituir (6) na (4) e, fazendo uma mudança de variável  $w(t) = [1 - (h^2/12)f(t)]x(t)$ , a Eq. (6) fica

$$w(h) + w(-h) - 2w(0) = h^2 f(0)x(0) + (\text{termos de ordem maior que } 6). \quad (7)$$

A equação acima representa o algoritmo de Numerov. Contudo, percebe-se que este não é um algoritmo auto-inicializável (de forma que o valor das condições iniciais é suficiente para que os pontos sucessivos sejam calculados). Dessa forma, é possível mostrar<sup>2</sup> que uma maneira de estimar o valor de  $w$  (com uma precisão condizente com a do algoritmo) no ponto que vem depois do inicial é usando a equação

$$x(h) = \frac{[2 + 5h^2 f(0)/6][1 - h^2 f(-h)/12]x(0) + 2h\dot{x}(0)[1 - h^2 f(-h)/6]}{[1 - h^2 f(h)/12][1 - h^2 f(-h)/6] + [1 - h^2 f(-h)/12][1 - h^2 f(h)/6]}. \quad (8)$$

Tendo os valores de  $x(0)$  e  $\dot{x}(0)$ , que são as condições iniciais do problema, o algoritmo pode ser inicializado usando a Eq. (8).

---

<sup>2</sup>os detalhes da derivação dessa expressão estão no Apêndice A7.1 da referência [1].

## 2.2 Funções Esféricas de Bessel

O método que será apresentado aqui para o cálculo destas funções é feito usando-se uma relação de recorrência, de forma que uma função de grau  $l$  é determinada a partir das funções de graus anteriores. Este método pode ser instável para algumas situações, como para quando  $l$  torna-se muito grande<sup>3</sup>, mas será levado em consideração que os problemas tratados não causarão erros graves pelo uso desta relação. As funções tratadas aqui serão as *funções esféricas de Bessel*  $j_l(x)$  e *funções esféricas de Neumann*  $n_l(x)$ . Para  $l = 0, 1$ , elas são dadas por:

$$j_0(x) = \frac{\sin(x)}{x}; \quad n_0(x) = -\frac{\cos(x)}{x}; \quad (9)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x}; \quad n_1(x) = -\frac{\cos(x)}{x^2} - \frac{\sin(x)}{x}. \quad (10)$$

Para valores mais altos de  $l$ , podemos encontrar as funções pela relação de recorrência

$$s_{l+1}(x) + s_{l-1}(x) = \frac{2l+1}{x} s_l(x) \quad (11)$$

onde  $s_l$  pode ser tanto  $j_l$  como  $n_l$ . Conhecendo por exemplo  $j_0$  e  $j_1$ , a equação (11) determina  $j_2$  e assim por diante.

## 3 Implementações e testes

### 3.1 Oscilador harmônico clássico

Escolhi este para ser meu primeiro teste por conta da sua simplicidade. Considerei a equação do movimento harmônico clássico, sem amortecimento e/ou forças externas, como segue na equação:

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) = -\omega^2 x(t), \quad (12)$$

---

<sup>3</sup>os detalhes podem ser vistos no Apêndice A2 da referência [1].

e escolhi como condições iniciais  $x(0) = 2.0$ ,  $\dot{x}(0) = 1.0$  e  $\omega = \sqrt{3}$ . A solução analítica para esta equação é

$$x(t) = 2 \cos(\sqrt{3}t) + \frac{1}{\sqrt{3}} \sin(\sqrt{3}t). \quad (13)$$

A figura a seguir mostra a comparação da solução analítica com os pontos calculados<sup>4</sup> pelo método de Numerov. Como podemos perceber, o *matching* é ótimo.

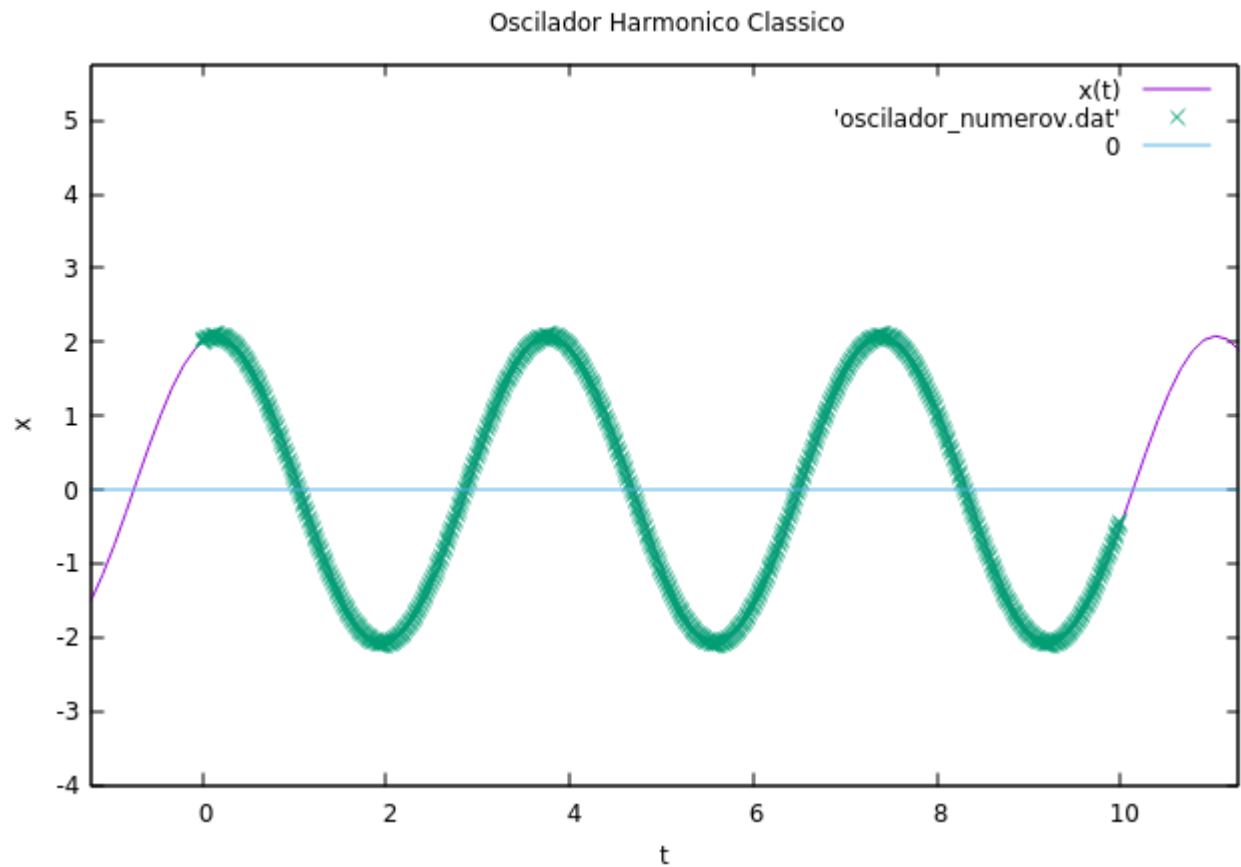


Figura 1:  $x(t)$  representa a solução analítica, e "oscilador\_numerov.dat" os dados calculados numericamente, entre  $t = 0$  e  $t = 10$  (unidades arbitrárias).

---

<sup>4</sup>Nome do programa em anexo: oscilador\_numerov.c.

### 3.2 Oscilador harmônico tridimensional quântico

No exemplo anterior, vimos um caso em que o termo  $f(t)$  que multiplica a variável  $x(t)$  na Eq. (1) era dado por uma constante. Exploraremos agora um outro caso onde isso não acontece e faremos uma análise de como adaptar o algoritmo de Numerov para este exemplo. Na situação em questão, resolveremos a equação radial de Schrödinger (estacionária)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_l(r) + \left[ E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u_l(r) = 0, \quad (14)$$

para um oscilador harmônico tridimensional (OHT). Vamos preparar a equação para posteriormente aplicar o algoritmo de Numerov. Define-se:

$$F(l, r, E) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \quad (15)$$

de forma que a equação (14) torna-se

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_l(r) = F(l, r, E) u_l(r). \quad (16)$$

A seção 2.2.1 da referência [1] fornece mais detalhes sobre a derivação das condições necessárias para implementação do algoritmo sob a equação anterior. Além disso, o teste que realizaremos em seguida encontra-se nesta mesma seção, como sugestão do autor para verificar se o programa está funcionando corretamente.

Para o OHT, é conveniente escolhermos unidades de forma que  $\hbar^2/2m = 1$ . Tomando o potencial  $V(r) = r^2$ , o estado ligado mais baixo acontece para  $l = 0$  com energia  $E = 3.0$ . A solução analítica para este caso é dada por  $u(r) = A r \exp(-r^2/2)$ , sendo  $A$  uma constante arbitrária.

No momento de implementarmos o algoritmo, devemos levar em conta a condição de contorno  $u(r = 0) = 0$ . A derivada de  $u(0)$  determinará a constante de normalização que multiplica a solução analítica (escolhi  $A$  como sendo igual a 1). As figuras a seguir mostram,

respectivamente, os dados obtidos numericamente sob estas condições e a solução analítica.

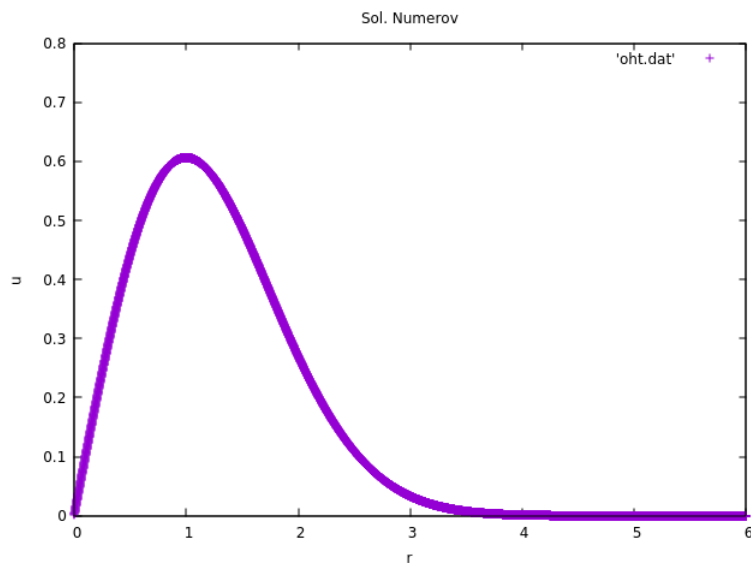


Figura 2: Solução numérica para  $u(r)$ .

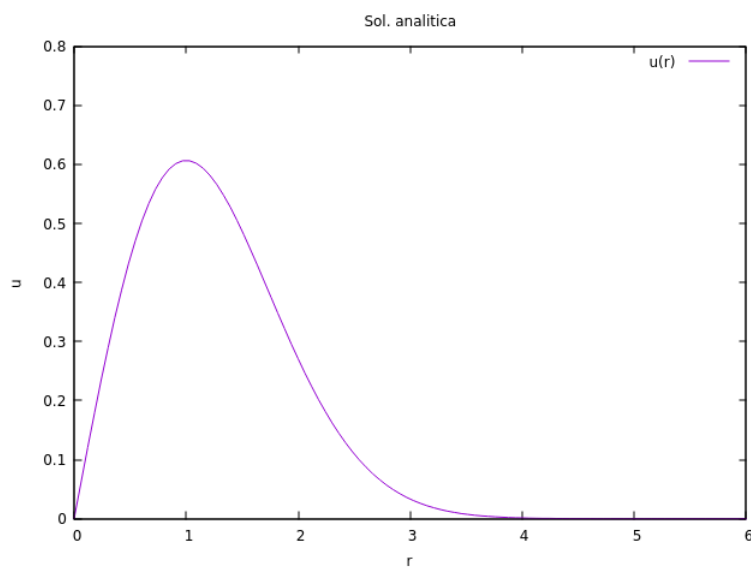


Figura 3: Solução analítica para  $u(r)$ .

Apesar de os gráficos serem condizentes, para valores de  $r$  maiores do que 6.0 meus pontos calculados numericamente explodem para o infinito, sendo que deveriam permanecer

zero. É algum erro que não consegui identificar no programa, por enquanto.

Os gráficos podem ser reproduzidos utilizando o programa "oht.c", em anexo.

### 3.3 Gráficos das funções esféricas de Bessel

Para este caso, o que fiz foi utilizar a Eq. (11) de modo a obter os gráficos das funções esféricas de Bessel e Neumann, para graus variando de  $l = 0$  a  $l = 5$ . Como veremos nas figuras a seguir, o método mostra ser eficiente para baixos valores de  $l$ .

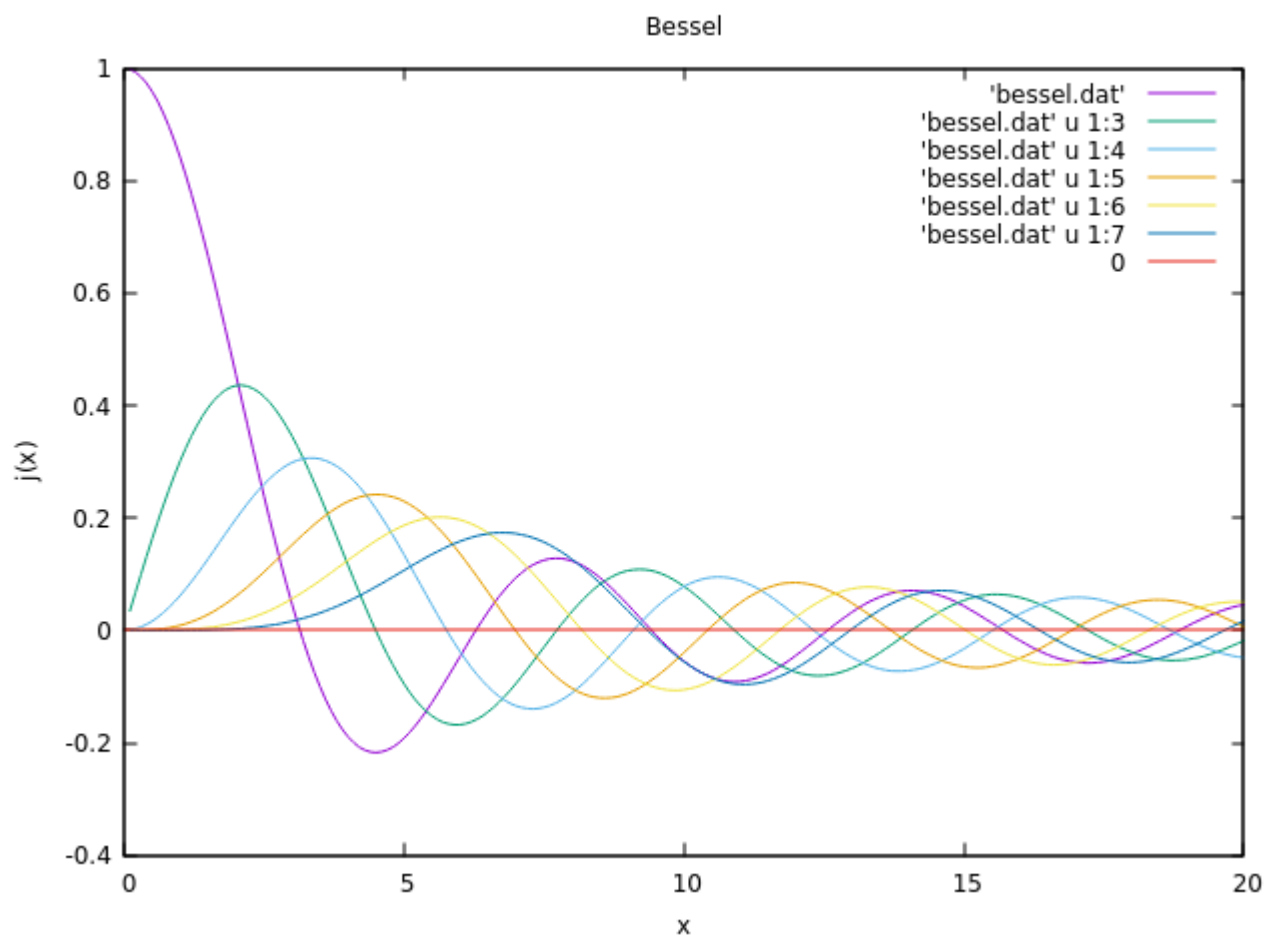


Figura 4: Funções esféricas de Bessel. "bessel.dat" representa  $j_0(x)$ , "bessel.dat u 1:3"  $j_1(x)$  e assim sucessivamente.



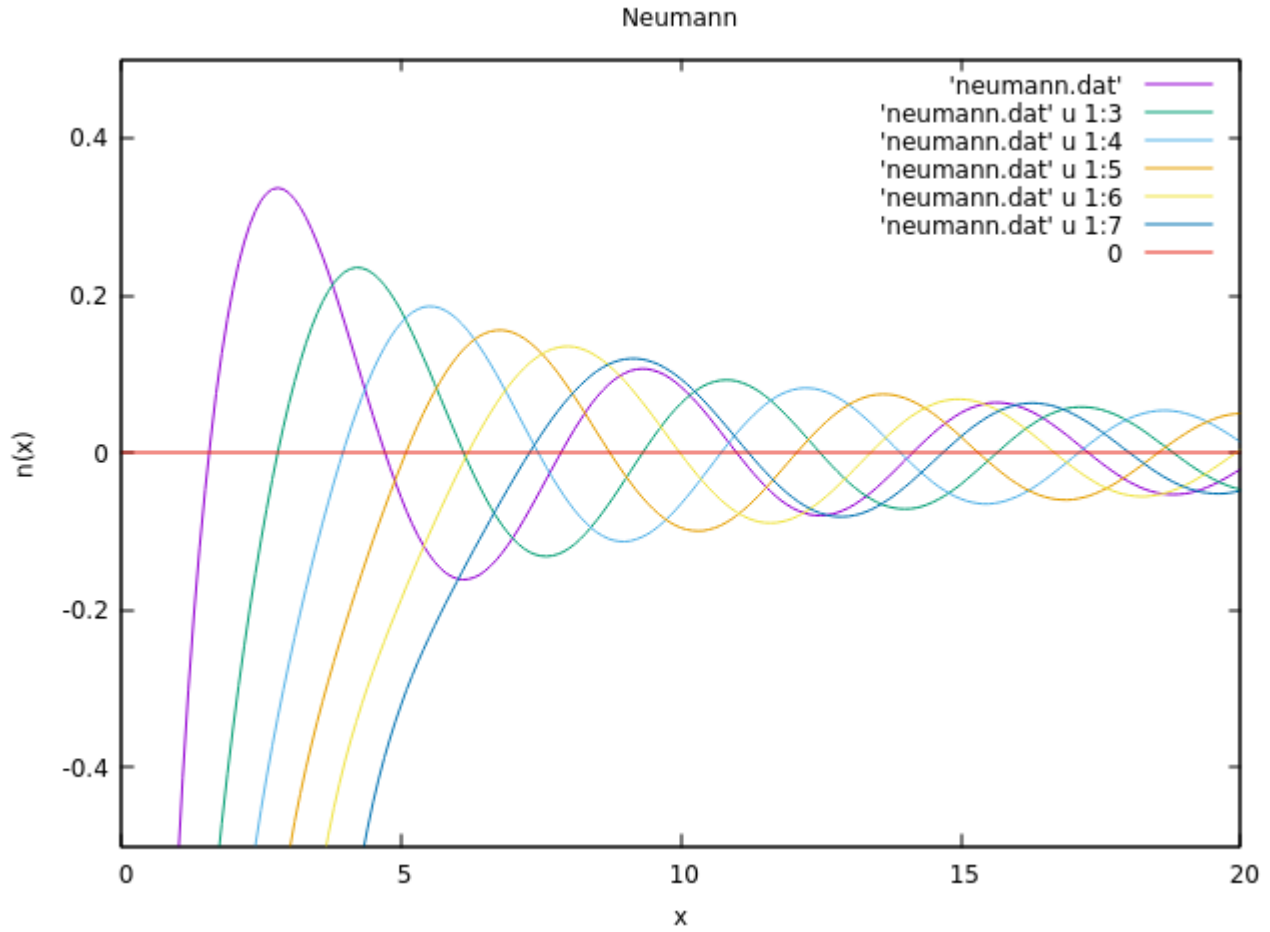


Figura 5: Funções esféricas de Neumann. "neumann.dat" representa  $n_0(x)$ , "neumann.dat u 1:3"  $n_1(x)$  e assim sucessivamente.

Os dados para reprodução dos gráficos podem ser reproduzidos através do programa "sphericalbessel.c", em anexo.

## 4 Considerações finais

Os métodos testados aqui tem como proposta serem usados em um programa que realize o cálculo de seções de choque totais entre átomos de Hidrogênio e Criptônio, no qual estou trabalhando para construí-lo. A vantagem de realizar estes testes é a diminuição considerável

na possibilidade de erro no programa final; espero, portanto, conseguir realizar este objetivo em breve utilizando os recursos que foram apresentados neste relatório.

## Referências

- [1] THIJSEN, J.M. Computational Physics, 2nd edition.