

Soluzione numerica delle equazioni alle derivate ordinarie: metodo di Numerov

Laboratorio di Metodi Computazionali e Statistici (2022/2023)

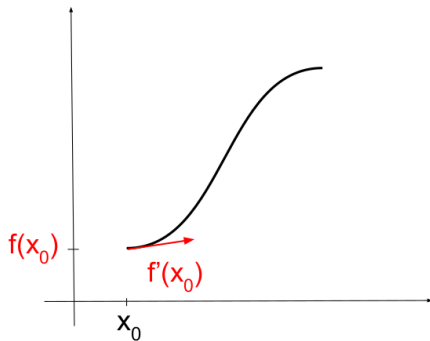
Fabrizio Parodi e Roberta Cardinale

2 Novembre 2022

Applicazioni: equ. differenziali con condizioni al contorno

Finora abbiamo visto equazioni differenziali con condizioni iniziali

$$\begin{aligned}\frac{d^2 f}{dx^2} &= g(f', f, x) \\ f(x_0) &= \alpha \\ f'(x_0) &= \beta\end{aligned}$$

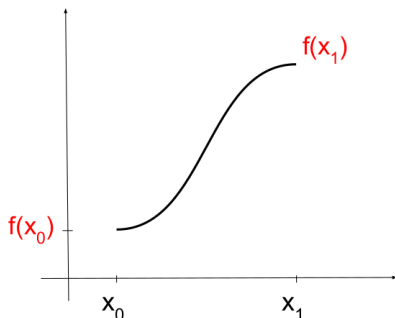


Applicazioni: equ. differenziali con condizioni al contorno

In alcuni casi, tuttavia, sono fornite condizioni al contorno in un intervallo $[x_0, x_1]$ (sono noti i valore di f agli estremi ma non la sua derivata nel punto x_0)

$$f(x_0) = \alpha$$

$$f(x_1) = \beta$$



Possiamo applicare i metodi visti applicando una procedura lievemente diversa, lo “Shooting method”:

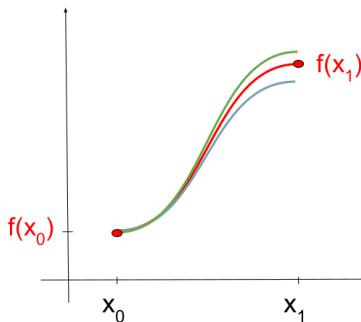
- se conosco $f(x_0)$ posso far variare la derivata in x_0 (e quindi la soluzione) finché la soluzione evolve fino a essere uguale a $f(x_1)$ in x_1

Applicazioni: equ. differenziali con condizioni al contorno

In alcuni casi, tuttavia, sono fornite condizioni al contorno in un intervallo $[x_0, x_1]$ (sono noti i valore di f agli estremi ma non la sua derivata nel punto x_0)

$$f(x_0) = \alpha$$

$$f(x_1) = \beta$$



Possiamo applicare i metodi visti applicando una procedura lievemente diversa, lo “Shooting method”:

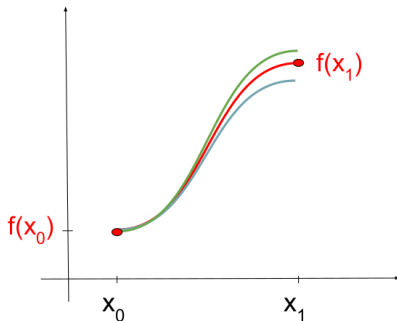
- se conosco $f(x_0)$ posso far variare la derivata in x_0 (e quindi la soluzione) finché la soluzione evolve fino a essere uguale a $f(x_1)$ in x_1

Applicazioni: equ. differenziali con condizioni al contorno

In alcuni casi, tuttavia, sono fornite condizioni al contorno in un intervallo $[x_0, x_1]$ (sono noti i valori di f agli estremi ma non la sua derivata nel punto x_0)

$$f(x_0) = \alpha$$

$$f(x_1) = \beta$$



Possiamo applicare i metodi visti applicando una procedura lievemente diversa, lo “Shooting method”:

- se conosco $f(x_0)$ posso far variare la derivata in x_0 (e quindi la soluzione) finché la soluzione evolve fino a essere uguale a $f(x_1)$ in x_1
- il problema può essere “automatizzato” tramite una ricerca di zeri della funzione

$$f_{evol}(x_1 | f'(x_0), f(x_0)) - f(x_1) = 0$$

dove $f'(x_0)$ è la “variabile” della ricerca di zeri.

Metodo di Numerov

- Si sviluppa in realtà in genere un metodo specifico: il metodo di Numerov per risolvere specificatamente equazioni del tipo:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + k(x)f(x) = 0$$

Metodo di Numerov

Sviluppiamo $f(x + h)$ e $f(x - h)$:

Metodo di Numerov

Riscriviamo la relazione precedente come:

$$f_{n+1} + f_{n-1} = 2f_n + \frac{h^2}{12}f''_{n+1} + \frac{h^2}{12}f''_{n-1} + h^2(1 - \frac{1}{6})f''_n$$

Utilizziamo $f'' = -kf$, discretizzata $f''_n = -k_n f_n$ e sostituiamola:

Esplicitiamo f_{n+1} e definiamo $b_n = \frac{h^2}{12}k_n$

Metodo di Numerov

Abbiamo ottenuto:

$$f_{n+1} = \frac{2f_n(1-5b_n) - f_{n-1}(1+b_{n-1})}{(1+b_{n+1})} \quad \text{con } b_n = \frac{h^2}{12} k_n$$

- Estende il metodo Verlet Position fino ad un ordine superiore
- Svantaggi?
 - È un metodo generale?

Metodo di Numerov

Abbiamo ottenuto:

$$f_{n+1} = \frac{2f_n(1-5b_n) - f_{n-1}(1+b_{n-1})}{(1+b_{n+1})} \quad \text{con } b_n = \frac{h^2}{12} k_n$$

- Estende il metodo Verlet Position fino ad un ordine superiore
- Svantaggi?
 - È un metodo generale? È valido solo per equazioni differenziali del tipo $f''(x) = -k(x)f(x)$ in cui non è presente $f'(x)$

Metodo di Numerov

Abbiamo ottenuto:

$$f_{n+1} = \frac{2f_n(1-5b_n) - f_{n-1}(1+b_{n-1})}{(1+b_{n+1})} \quad \text{con } b_n = \frac{h^2}{12} k_n$$

- Estende il metodo Verlet Position fino ad un ordine superiore
- Svantaggi?
 - È un metodo generale? È valido solo per equazioni differenziali del tipo $f''(x) = -k(x)f(x)$ in cui non è presente $f'(x)$
 - Non ricavo la velocità da questo metodo, ma solo la posizione (come in Verlet Position)

Metodo di Numerov

Abbiamo ottenuto:

$$f_{n+1} = \frac{2f_n(1-5b_n) - f_{n-1}(1+b_{n-1})}{(1+b_{n+1})} \quad \text{con } b_n = \frac{h^2}{12} k_n$$

- Estende il metodo Verlet Position fino ad un ordine superiore
- Svantaggi?
 - È un metodo generale? È valido solo per equazioni differenziali del tipo $f''(x) = -k(x)f(x)$ in cui non è presente $f'(x)$
 - Non ricavo la velocità da questo metodo, ma solo la posizione (come in Verlet Position)
 - Per ricavare f_{n+1} , devo conoscere f_n e f_{n-1} : utilizzando lo shooting method, posso dare al valore f_n un valore arbitrario (variazione della derivata)

Applicazione: soluzione equazione di Schrodinger per l'oscillatore armonico 1D

$$\hat{H}\psi(r) = (\hat{T} + \hat{V})\psi(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r) = E\psi(r)$$

Oscillatore armonico 1D

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Con un cambio di variabile

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi$$

si ottiene:

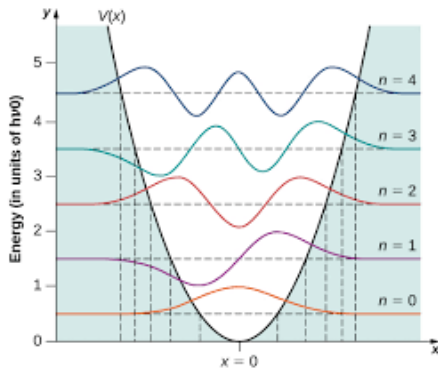
$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - \xi^2)\psi(\xi) = \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - V(\xi))\psi(\xi) = \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + k(\xi)\psi(\xi) = 0$$

Applicazione: soluzione equazione di Schrodinger per l'oscillatore armonico 1D

Le funzioni d'onda (il cui modulo quadro rappresenta la densità di probabilità della posizione) rappresentano stati legati (se $E < V_{max}$) a energia discreta.

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Metodo di Numerov: condizioni al contorno

- Vogliamo trovare una funzione d'onda tale che

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1$$

che implica $\psi(|\xi|)$ tende a 0 rapidamente per $\xi \rightarrow \infty$.

Metodo di Numerov: condizioni al contorno

- Vogliamo trovare una funzione d'onda tale che

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1$$

che implica $\psi(|\xi|)$ tende a 0 rapidamente per $\xi \rightarrow \infty$.

- Tuttavia imporre condizioni a $\xi = \pm\infty$ è impossibile.

Metodo di Numerov: condizioni al contorno

- Vogliamo trovare una funzione d'onda tale che

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1$$

che implica $\psi(|\xi|)$ tende a 0 rapidamente per $\xi \rightarrow \infty$.

- Tuttavia imporre condizioni a $\xi = \pm\infty$ è impossibile.
- Scelta intervallo $[\xi_{left}, \xi_{right}]$ opportuno:
 - la soluzione va a zero velocemente nella regione classicamente proibita ($V(\xi) > E$). Nel nostro caso, nella variabile ξ , se scelgo

$$\xi_{left} \ll -\sqrt{2\varepsilon}$$

$$\xi_{right} \gg \sqrt{2\varepsilon}$$

posso ragionevolmente porre $\psi(\xi_{left}) = 0$ and $\psi(\xi_{right}) = 0$.

Metodo di Numerov: scelta del punto di partenza

- Una volta scelto un intervallo che approssima $[-\infty, \infty]$, occorre calcolare ψ_0 e ψ_1 per far partire l'iterazione.

Metodo di Numerov: scelta del punto di partenza

- Una volta scelto un intervallo che approssima $[-\infty, \infty]$, occorre calcolare ψ_0 e ψ_1 per far partire l'iterazione.
- Possiamo senz'altro settare $\psi_0 = \psi(\xi_{left}) = 0$ ma $\psi_1 = \psi(\xi_{left} + h)$?

Metodo di Numerov: scelta del punto di partenza

- Una volta scelto un intervallo che approssima $[-\infty, \infty]$, occorre calcolare ψ_0 e ψ_1 per far partire l'iterazione.
- Possiamo senz'altro settare $\psi_0 = \psi(\xi_{left}) = 0$ ma $\psi_1 = \psi(\xi_{left} + h)$?
- Non è difficile convincersi che un **valore arbitrario** va bene.. Stiamo calcolando una funzione d'onda non normalizzata !

$$\psi(\xi_{left}) = 0$$

$$\psi(\xi_{left} + h) = \Delta$$

Δ piccolo per non perdere precisione

Metodo di Numerov: scelta del punto di partenza

- Una volta scelto un intervallo che approssima $[-\infty, \infty]$, occorre calcolare ψ_0 e ψ_1 per far partire l'iterazione.
- Possiamo senz'altro settare $\psi_0 = \psi(\xi_{\text{left}}) = 0$ ma $\psi_1 = \psi(\xi_{\text{left}} + h)$?
- Non è difficile convincersi che un **valore arbitrario** va bene.. Stiamo calcolando una funzione d'onda non normalizzata !

$$\psi(\xi_{\text{left}}) = 0$$

$$\psi(\xi_{\text{left}} + h) = \Delta$$

Δ piccolo per non perdere precisione

- La normalizzazione sarà poi imposta usando

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = \alpha$$

e normalizzando l'ampiezza della funzione d'onda per $\sqrt{\alpha}$

Metodo di Numerov: trovare l'energia

- Finora abbiamo barato: abbiamo usato l'energia giusta.. La funzione d'onda quindi tende naturalmente a 0 (è la soluzione “giusta”)
- Suppongo ora di non conoscere l'energia

Metodo di Numerov: trovare l'energia

- Finora abbiamo barato: abbiamo usato l'energia giusta.. La funzione d'onda quindi tende naturalmente a 0 (è la soluzione "giusta")
- Suppongo ora di non conoscere l'energia
 - Approccio "naif": fisso E , integro da ξ_{left} a ξ_{right} e controllo che $\psi(\xi_{right})$ sia 0, se non lo è aggiusto E .
 - Sfortunatamente non funziona... Il problema è che nella regione classicamente vietata ci sono due soluzioni: una esponenzialmente decrescente (quella giusta) e una esponenzialmente crescente. Bastano piccole errori numerici per creare instabilità.

$$|\xi| > \sqrt{2\varepsilon} \rightarrow k = (2\varepsilon - \xi^2) < 0$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - \xi^2)\psi(\xi) = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = -k\psi(\xi) = \alpha\psi(\xi) \quad \alpha > 0$$

Metodo di Numerov: trovare l'energia

La soluzione all'instabilità consiste in

- Costruire due soluzioni
 - ψ_{left} ottenuta integrando da $\psi_{left}(\xi_{left}) = 0$ e $\psi_{left}(\xi_{left} + h) = \Delta$ verso destra
 - ψ_{right} ottenuta integrando da $\psi_{right}(\xi_{right}) = 0$ e $\psi_{right}(\xi_{right} - h) = \Delta$ verso sinistra
- Imporre che siano uguali in valore (ed in derivata prima) in qualche punto
 - Un punto “naturale” è quello per cui $E = V(x)$, ossia $\xi^2 = 2\epsilon$
- L'uguaglianza delle funzioni è banale e può essere ottenuta tramite normalizzazione
- L'uguaglianza delle derivate:

$$\frac{d\psi_{left}}{d\xi} = \frac{\psi_{left}(\xi_{match} + h) - \psi_{left}(\xi_{match} - h)}{2h}$$
$$\frac{d\psi_{right}}{d\xi} = \frac{\psi_{right}(\xi_{match} + h) - \psi_{right}(\xi_{match} - h)}{2h}$$

è riconducibile ad un problema di ricerca di zeri. L'energia per cui le funzioni si raccordano è l'energia cercata dello stato legato.

Riassunto

- Equazione differenziale generica (no derivata prima)

$$f''(x) = -k(x)f(x)$$

Equazione di Schrodinger indipendente dal tempo per l'oscillatore armonico

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - V(\xi))\psi(\xi) = \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (2\varepsilon - \xi^2)\psi(\xi) = \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + k(\xi)\psi(\xi) = 0$$

(autostati dell'energia $\varepsilon = (n + 1/2)$)

- Metodo di Numerov

$$\psi_{n+1} = \frac{2\psi_n(1 - 5b_n) - \psi_{n-1}(1 + b_{n-1})}{(1 + b_{n+1})}$$

$$b_n = \frac{h^2}{12} k_n$$

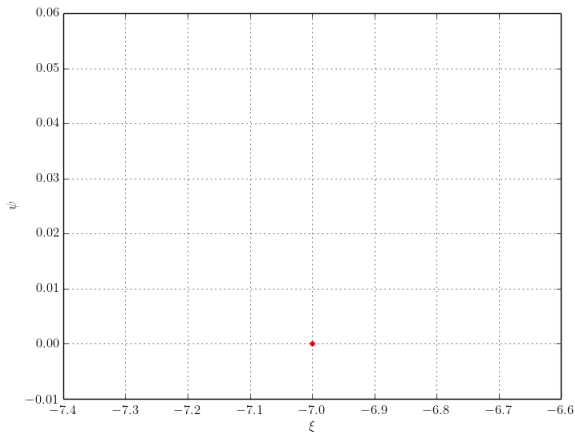
- Scelgo intervallo $[-\xi_{left}, \xi_{right}]$ che approssimi $[-\infty, \infty]$.
- Per far "partire" l'algoritmo possiamo porre $\psi_0 = \psi(\xi_{left}) = 0$ ma $\psi_1 = \psi(\xi_{left} + h) = \Delta$ (Δ piccolo per non perdere precisione).
- La normalizzazione sarà poi imposta in un secondo tempo sfruttando

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 d\xi = \alpha$$

(cioè normalizzando l'ampiezza della funzione d'onda per $\sqrt{\alpha}$)

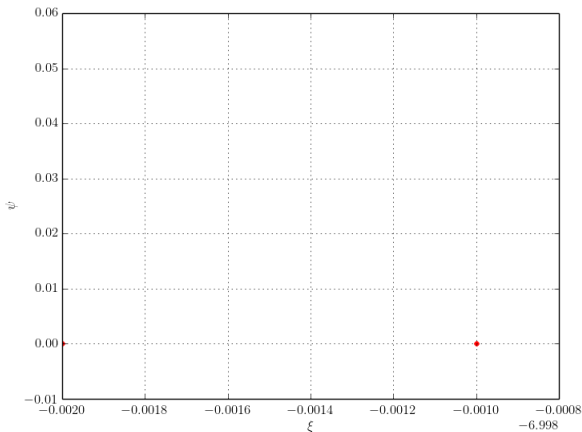
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



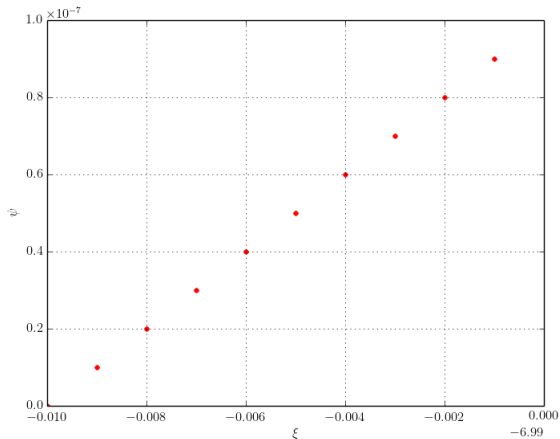
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



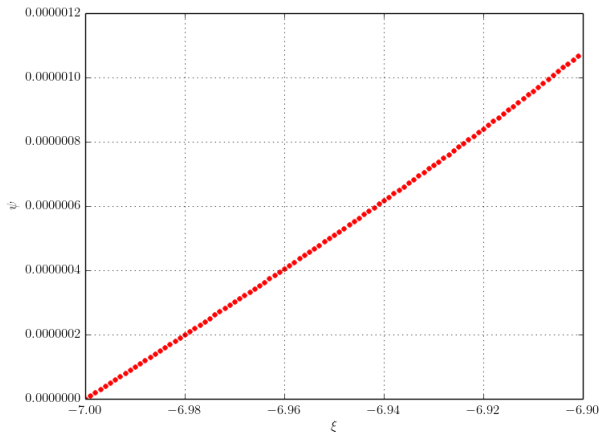
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



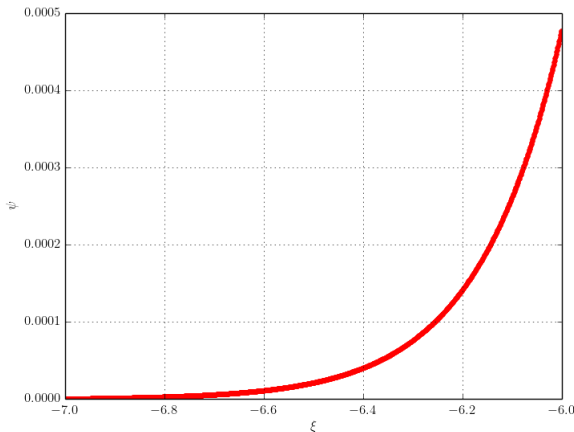
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



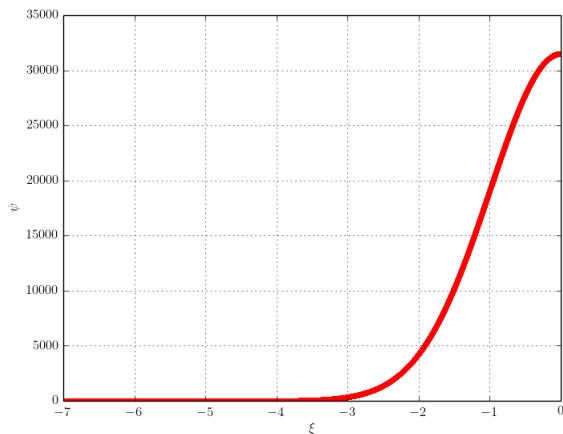
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



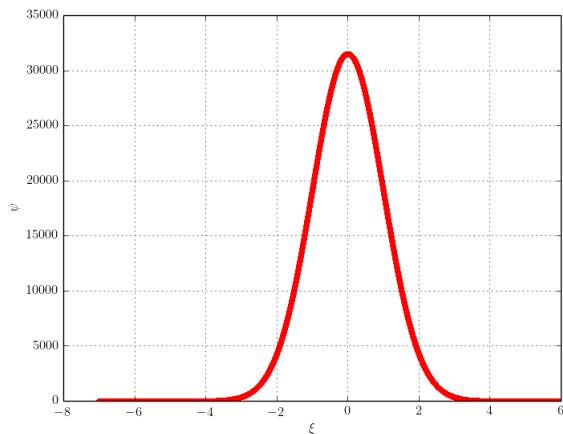
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



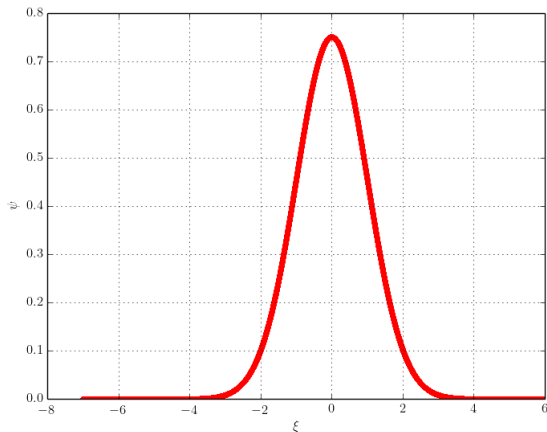
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Suppongo l'energia nota (ad es. $\varepsilon = 0.5$ stato fondamentale) e trovo la funzione d'onda $\psi(\xi)$ con Numerov



Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Problema: trovare energia (e funzione d'onda) di uno stato (o di tutti gli stati possibili) conoscendo solo il potenziale.

- “shooting” method variando l'energia:
 - Approccio “naif”: fisso ε , integro da ξ_{left} a ξ_{right} e controllo che $\psi(\xi_{right})$ sia 0, se non lo è aggiusto ε .
 - Sfortunatamente non funziona... Il problema è che nella regione classicamente vietata ci sono due soluzioni: una esponenzialmente decrescente (quella giusta) e una esponenzialmente crescente. Bastano piccole errori numerici per creare instabilità.

Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Problema: trovare energia (e funzione d'onda) di uno stato (o di tutti gli stati possibili) conoscendo solo il potenziale.

- “shooting” method evoluto:
 - Si prendono due soluzioni ψ_{left} ottenuta integrando da $\psi_{left}(\xi_{left}) = 0$ e $\psi_{left}(\xi_{left} + h) = \Delta$ verso destra e ψ_{right} ottenuta integrando da $\psi_{right}(\xi_{right}) = 0$ e $\psi_{right}(\xi_{right} - h) = \Delta$ verso sinistra
 - Si impone che siano uguali in valore (ed in derivata prima) in qualche punto (punto naturale quello in cui $E = V(x)$ (cioè $\xi = \sqrt{2\varepsilon}$)
 - L'uguaglianza delle funzioni è banale e può essere ottenuta tramite normalizzazione
 - L'uguaglianza delle derivate:

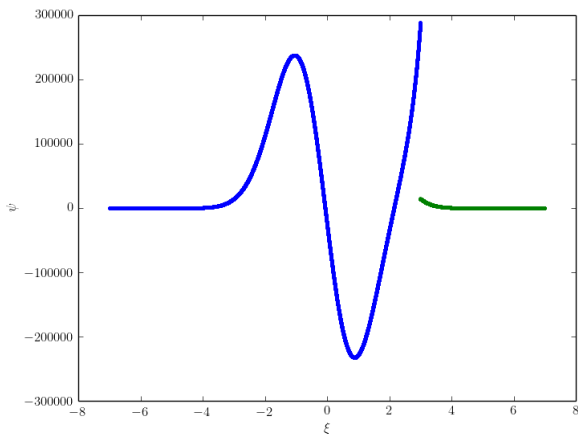
$$\frac{d\psi_{left}}{d\xi} = \frac{\psi_{left}(\xi_{match} + h) - \psi_{left}(\xi_{match} - h))}{2h}$$
$$\frac{d\psi_{right}}{d\xi} = \frac{\psi_{right}(\xi_{match} + h) - \psi_{right}(\xi_{match} - h))}{2h}$$

è riconducibile ad un problema di ricerca di zeri. L'energia per cui le funzioni si raccordano è l'energia cercata dello stato legato.

Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Come esempio effettuiamo la ricerca nell'intervallo $\varepsilon \in [1.2, 1.7]$ (alla ricerca dello stato con energia pari a $\varepsilon = 1.5$).

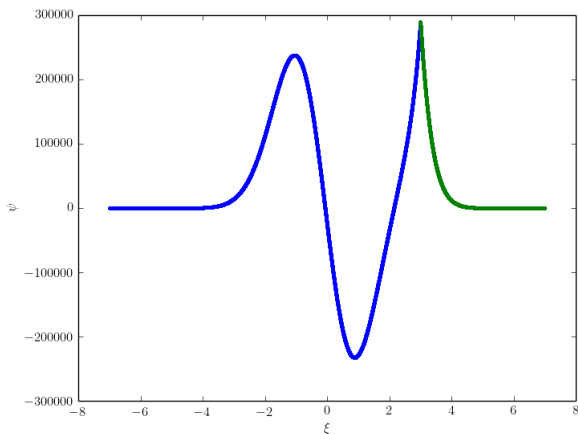
$$\varepsilon = 1.575$$



Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

Come esempio effettuiamo la ricerca nell'intervallo $\varepsilon \in [1.2, 1.7]$ (alla ricerca dello stato con energia pari a $\varepsilon = 1.5$).

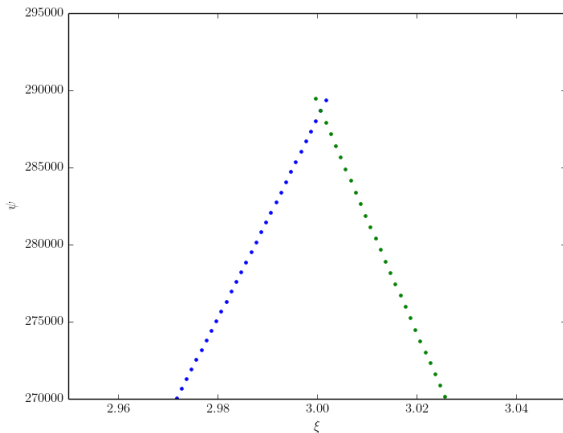
$$\varepsilon = 1.575$$



Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

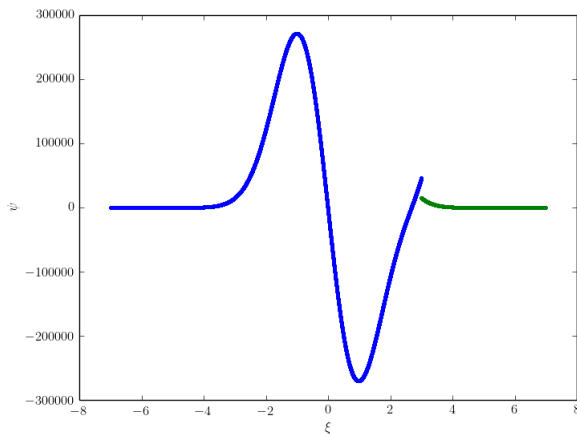
Come esempio effettuiamo la ricerca nell'intervallo $\varepsilon \in [1.2, 1.7]$ (alla ricerca dello stato con energia pari a $\varepsilon = 1.5$).

$$\varepsilon = 1.575$$



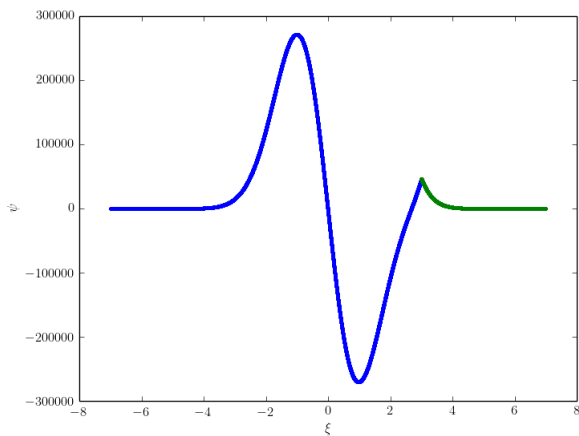
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.512$$



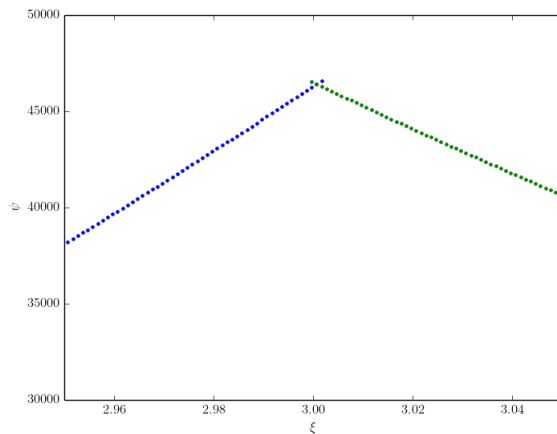
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.512$$



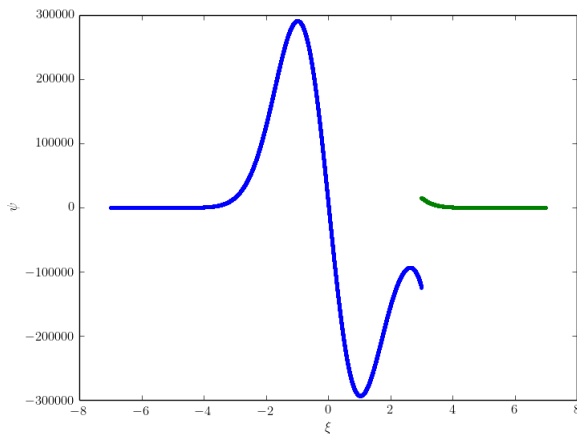
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.512$$



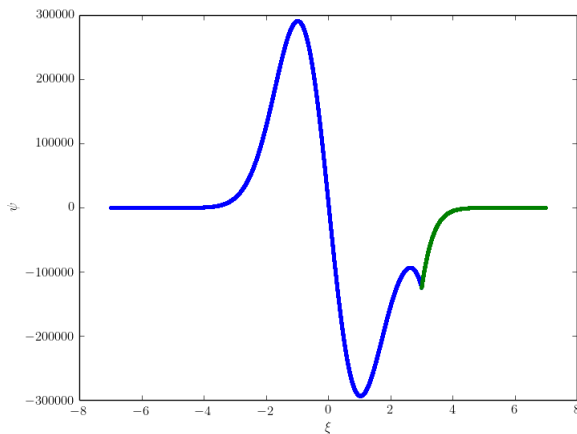
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.481$$



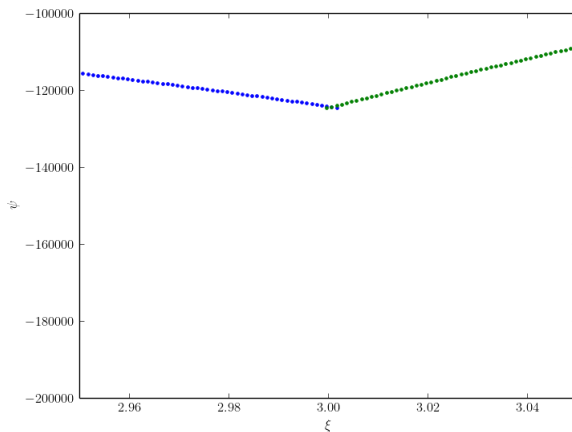
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.481$$



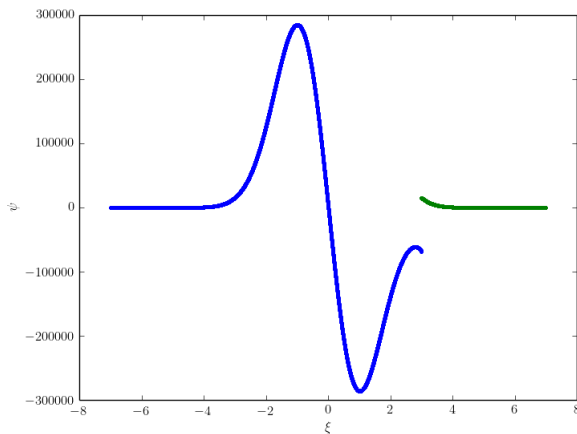
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.481$$



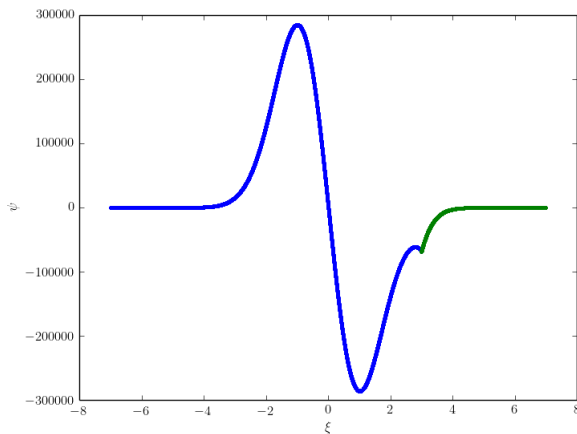
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.497$$



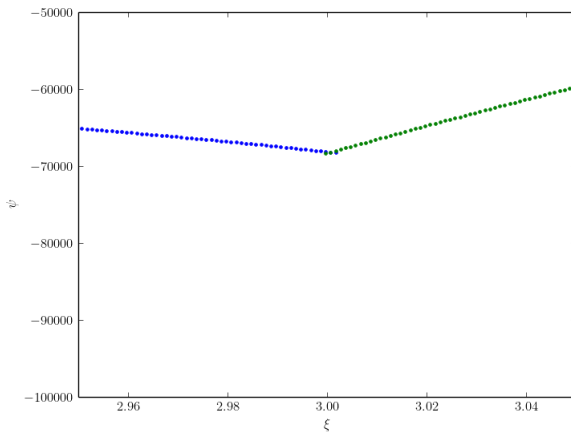
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.497$$



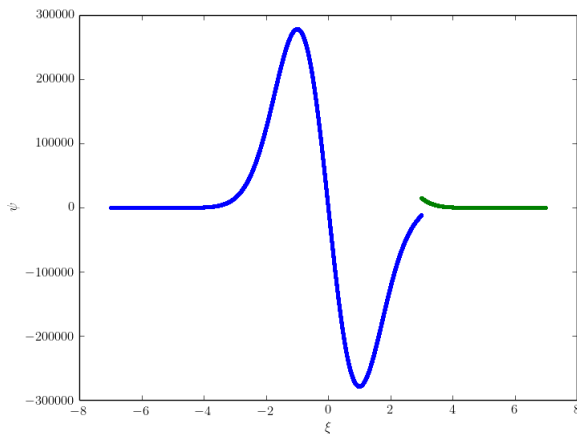
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.497$$



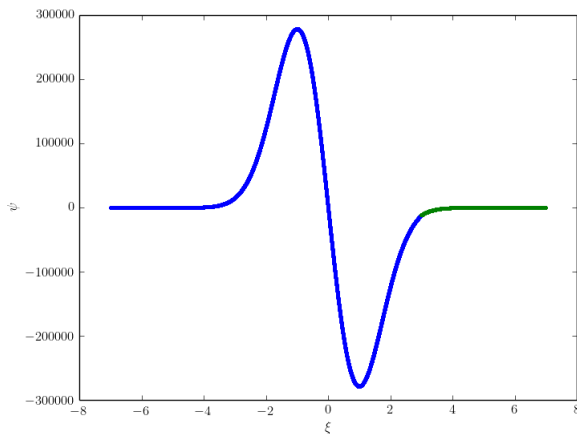
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.5008$$



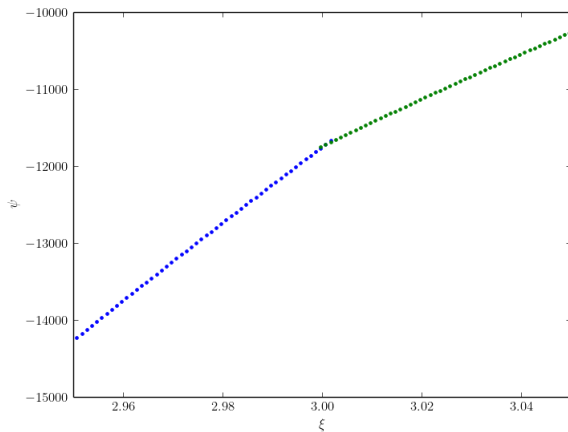
Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.5008$$



Metodo di Numerov: dimostrazione grafica

$$\varepsilon = 1.5008$$



Prequel:

Risolvere numericamenre l'equazione differenziale

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{x^2}{\sigma^4} f - \frac{1}{\sigma^2} f$$

(la cui soluzione analitica è una gaussiana centrata in 0 con dev. std. sigma) usando lo schema [verlet_os.py](#).

In particolare

- si completi a (definizione della derivata seconda) e si dia come valore iniziale $f_0=0$ e f_1 un valore qualunque (si assuma che la normalizzazione della gaussiana non sia rilevante)
- completare la soluzione numerica dell'eq. differenziale sfruttando verlet position
- graficare la soluzione
- ottimizzare la soluzione dell'equazione in moto che il punto di partenza possa essere indifferentemente un valore a $-n$ sigma o $+n$ sigma