

Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Lista 2

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Março de 2025

Sumário

1	Finding roots	2
1.1	Exercício 1	2
1.2	Exercício 2	3
2	Eigenvalues of the wave equation	6
2.1	Exercício 3	6
2.2	Exercício 4	6
2.3	Exercício 5	10

1 Finding roots

1.1 Exercício 1

Tarefa: Demonstrar que no método de Newton-Raphson

$$x_{k+1} = x_k + \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (1)$$

a convergência é quadrática.

Expandimos $f(x)$ em torno de $x_n - r$ - onde r é a raiz de $f(x)$ - e obtemos:

$$f(x_n) = f(r) + f'(r)(x_n - r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)^2 + O(x_n - r)^3 \quad (2)$$

E como $f(r) = 0$, obtemos:

$$f(x_n) = f'(r)(x_n - r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)^2 + O(x_n - r)^3 \quad (3)$$

Expandindo-se, também, $f'(x_n)$ e obtemos:

$$f'(x_n) = f'(r) + f''(r)(x_n - r) + O(x_n - r)^2 \quad (4)$$

Substituindo em $x_{n+1} = x_n + \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ obtemos:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(r)(x_n - r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)^2}{f'(r) + f''(r)(x_n - r)} \quad (5)$$

Subtraindo r de ambos os lados:

$$x_{n+1} - r = x_n - r - \frac{f'(r)(x_n - r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)^2}{f'(r) + f''(r)(x_n - r)} \quad (6)$$

Colocando o termo $x_n - r$ em evidência:

$$x_{n+1} - r = (x_n - r) \left[1 - \frac{f'(r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)}{f'(r) + f''(r)(x_n - r)} \right] \quad (7)$$

Para $x_n - r$ pequeno, $f''(r)(x_n - r)$ é desprezível e assim o desprezamos no denominador - obtendo:

$$x_{n+1} - r = (x_n - r) \left[1 - \frac{f'(r) + \frac{1}{2}f''(r)(x_n - r)}{f'(r)} \right] \quad (8)$$

Isolando $x_n - r$:

$$x_{n+1} - r = -(x_n - r)^2 \left[\frac{\frac{1}{2}f''(r)}{f'(r)} \right] \quad (9)$$

Rearranjando:

$$r - x_{n+1} = (r - x_n)^2 \left[\frac{\frac{1}{2}f''(r)}{f'(r)} \right] \quad (10)$$

Como $r - x_n$ é o erro cometido na n -ésima iteração e $r - x_{n+1}$ é o erro cometido na $n+1$ -ésima iteração, temos que o erro da iteração $n+1$ é proporcional ao quadrado do erro da iteração n e portanto a convergência é quadrática.

1.2 Exercício 2

Tarefa: Achar as raízes das equações $f(x) = x^2 - 5 = 0$ e $f(x) = 5x^3 - 5x - 24 = 0$ usando os métodos de Newton-Raphson e da secante para diferentes chutes iniciais e diferentes condições de convergência.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L2-5255417-ex-2.f90 -o L2-5255417-ex-2.exe
```

Resultados:

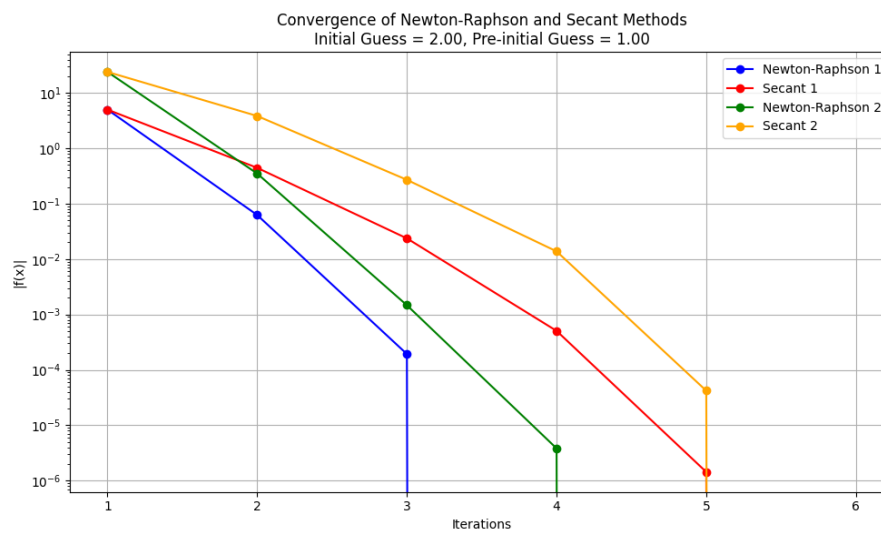


Figura 1



Figura 2

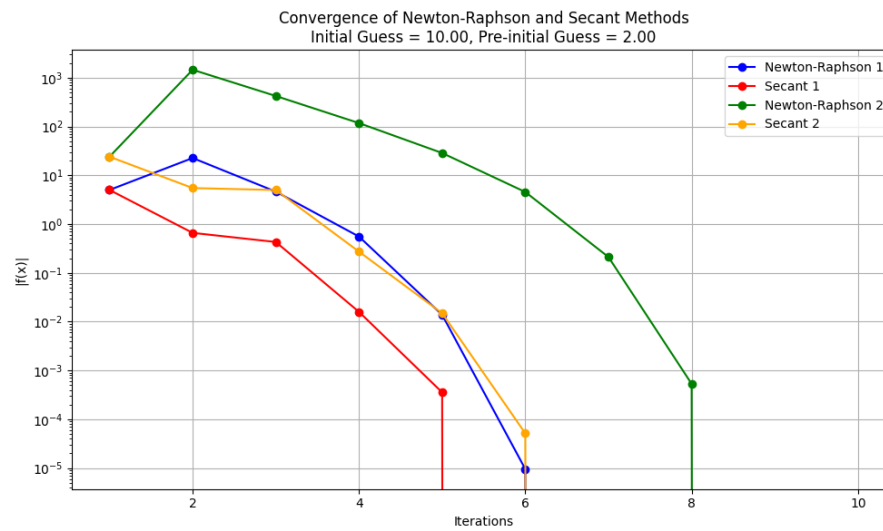


Figura 3

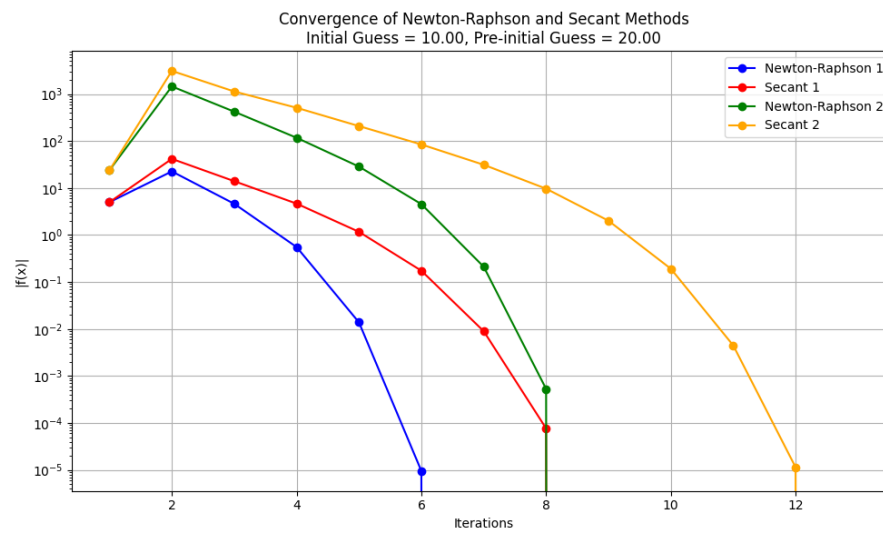


Figura 4

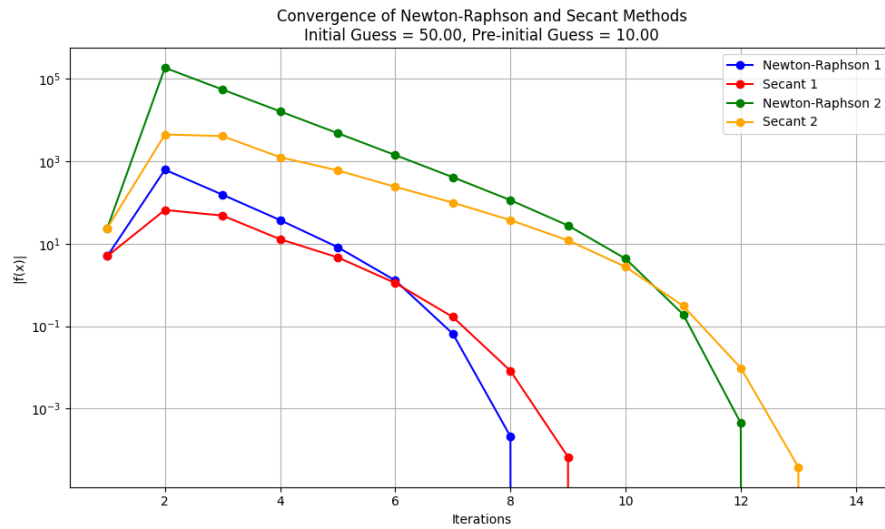


Figura 5

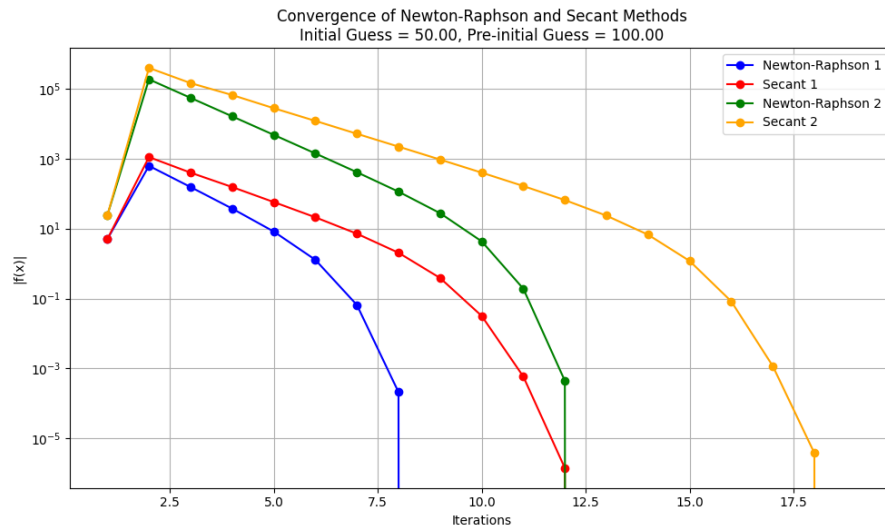


Figura 6

As raízes encontradas por ambos os métodos foram: $f(x) = x^2 - 5 = -2.23606801$ e $f(x) = 5x^3 - 5x - 24 = 1.88367081$. Percebe-se que para bons chutes o método da secante é mais eficiente, mas para chutes ruins o método de Newton-Raphson é mais eficiente.

2 Eigenvalues of the wave equation

2.1 Exercício 3

Tarefa: Escreva a transformação que permitem escrever a equação de Schrödinger para os autoestados de uma partícula em um poço infinito na forma

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad \text{com} \quad \psi(0) = 0 \text{ e } \psi(\infty) = 0 \quad (11)$$

Seja a equação de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (12)$$

Para o caso do poço infinito a equação pode ser escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq L \quad (13)$$

Para tornar adimensional, fazemos a transformação $x \rightarrow x/L$:

$$-\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (14)$$

Rearranjando:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mEL^2}{\hbar^2}\psi(x) \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (15)$$

Note que $\frac{2mEL^2}{\hbar^2}$ é adimensional - como desejado. Então, definimos $k^2 = \frac{2mEL^2}{\hbar^2}$ - obtendo:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad \text{com} \quad \psi(0) = 0 \text{ e } \psi(\infty) = 0 \quad (16)$$

que é a equação adimensional desejada.

2.2 Exercício 4

Tarefa: Escreva um código para calcular os primeiros três níveis de energia para o poço de potencial infinito, usando o shooting method e as condições de contorno $\psi(0) = 0$ e $\psi'(0) \neq 0$. Compare o resultado com a solução exata.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L2-5255417-ex-4.f90 -o L2-5255417-ex-4.exe
```

Resultados:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.922499999998538
Second energy level: 39.564099999998874
Third energy level: 88.924899999997052

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.5
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.922499999998538
Second energy level: 39.564099999998874
Third energy level: 88.924899999997052
```

Figura 7

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
1.0
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.922499999998520
Second energy level: 39.564099999998874
Third energy level: 88.924899999997052

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
2.0
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.922499999998449
Second energy level: 39.564099999998859
Third energy level: 88.924899999997052
```

Figura 8


```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.1
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 249.63999999999874
Second energy level: 992.25000000001114
Third energy level: 1672.8100000000250

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.05
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 248.06250000000279
Second energy level: 800.89000000001488
Third energy level: 989.10250000001940

```

Figura 9

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.005
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.8910249999997184
Second energy level: 39.501224999998598
Third energy level: 88.830625000001390

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
10000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.05
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 5227.28999999997162
Second energy level: 8308.3224999994472
Third energy level: 12099.999999999096

```

Figura 10

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.1
First energy level:    9.922499999998538
Second energy level:   39.564099999998874
Third energy level:    88.924899999997052

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
1.0
First energy level:    9.922499999998538
Second energy level:   39.564099999998874
Third energy level:    88.924899999997052

```

Figura 11

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
2.0
First energy level:    9.922499999998538
Second energy level:   39.564099999998874
Third energy level:    88.924899999997052

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
10
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level:    8.1795999999999029
Second energy level:   8.3520999999999006
Third energy level:    8.5263999999998976

```

Figura 12

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-4.exe
Insert the number of iterations:
100
Insert k:
0.1
Insert deltak:
0.01
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level:    9.796899999998569
Second energy level:   38.812899999998898
Third energy level:    39.187599999998888

```

Figura 13

Analisando os diversos testes conclue-se que um bom δk é da ordem de 10^{-2} e que valores maiores resultam em valores errados para os níveis de energia. Além disso, percebe-se que o chute inicial (desde de que seja menor que o valor do primeiro nível de energia) não influencia no resultado final - o mesmo vale para $\phi(\delta k)$. Ademais, percebesse que δx (1/número de interações) tem um grande impacto no resultado se for muito grande, mas sendo da ordem de 10^{-3} o código funciona bem.

Para bons valores de k , δk , δx e $\phi(\delta k)$ os resultados foram: $k_1^2 = 9.922499999998538$, $k_2^2 = 39.564099999998874$ e $k_3^2 = 88.924899999997052$.

Da definição de k , $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2}$. Logo - tomando m como a massa de um elétron e $L = 1$ -, para os resultados obtidos temos: $E_1 \approx 1.66 \times 10^{-34} \text{eV}$, $E_2 \approx 6.64 \times 10^{-34} \text{eV}$ e $E_3 \approx 1.49 \times 10^{-33} \text{eV}$.

Analiticamente, dada às condições de contorno, os níveis de energia são dados por:

$$E_n = \frac{\hbar^2 (n\pi)^2}{2mL^2} \quad (17)$$

Para $n = 1, 2$ e 3 obtemos os seguintes resultados: $E_1 \approx 1.66 \times 10^{-34} \text{eV}$, $E_2 \approx 6.62 \times 10^{-34} \text{eV}$ e $E_3 \approx 1.49 \times 10^{-33} \text{eV}$.

Portanto os resultados estão próximos à solução analítica e as diferenças podem ser atribuídas a erros numéricos.

2.3 Exercício 5

Tarefa: Escreva um código para calcular os primeiros três níveis de energia para o poço de potencial infinito, usando o método da secante e as condições de contorno $\psi(0) = 0$ e $\psi'(0) \neq 0$. Compare o resultado com a solução exata e com o resultado do exercício 4.

O código foi compilado com o comando:

```
gfortran L2-5255417-ex-5.f90 -o L2-5255417-ex-5.exe
```

Resultados:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert kminus1:
0.06
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.8498866766377482
Second energy level: 39.399449686287348
Third energy level: 88.648397969095939

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
100
Insert k:
0.1
Insert kminus1:
0.06
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.6743541602388667
Second energy level: 38.688057328112997
Third energy level: 87.013040619628299
```

Figura 14

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
10
Insert k:
0.1
Insert kminus1:
0.06
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 8.1014052771005201
Second energy level: 31.749293433764702
Third energy level: 69.027853210942965

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
1.0
Insert kminus1:
0.9
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level: 9.8498866766398052
Second energy level: 39.399449686286523
Third energy level: 88.648397969095569
```

Figura 15

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
2.0
Insert kminus1:
1.0
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level:    9.8498866766379134
Second energy level:   39.399449686286530
Third energy level:    88.648397969095981

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
1000
Insert k:
0.1
Insert kminus1:
0.06
Insert phi_deltax (non zero):
0.1
First energy level:    9.8498866766381852
Second energy level:   39.399449686283702
Third energy level:    88.648397969096806

```

Figura 16

```

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista2
> $ ./L2-5255417-ex-5.exe
Insert the number of iterations:
10000
Insert k:
0.1
Insert kminus1:
0.06
Insert phi_deltax (non zero):
0.01
First energy level:    9.8676306951251433
Second energy level:   39.470521806736791
Third energy level:    88.808670413955070

```

Figura 17

Percebe-se que os resultados são extremadamente robustos às escolhas de δx , k , $k_{anterior}$ e $\phi(\delta k)$. Dos testes feitos, apenas ao escolher $\delta x = 0.1$ o código falhou, mas para as demais variações o código retornou bons valores de k_1^2 , k_2^2 e k_3^2 . Sendo o melhor destes valores $k_1^2 = 9.8676306951251433$, $k_2^2 = 39.470521806736791$ e $k_3^2 = 88.808670413955070$ que resultam na seguintes energias:

- $E_1 \approx 1.66 \times 10^{-34} \text{eV}$
- $E_2 \approx 6.62 \times 10^{-34} \text{eV}$
- $E_3 \approx 1.49 \times 10^{-33} \text{eV}$

que são resultados muito mais precisos que os obtidos no exercício 4. Portanto, conclui-se que o método da secante é mais eficiente que o shooting method para este problema.