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

1.1 Exercício 1

Tarefa: Demonstrar que no método de Newton-Raphson

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

a convergência é quadrática.

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

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

E como f(r) = 0, obtemos:

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

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

$$f'(x_n) = f'(r) + f''(x_n - r)(x_n - r) + O(xn - r)^2 \tag{4}$$

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

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

Subtraindo r de ambos os lados:

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

Colocando o termo $x_n - r$ em evidência:

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

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

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

Isolando $x_n - r$:

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

Rearranjando:

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

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

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:

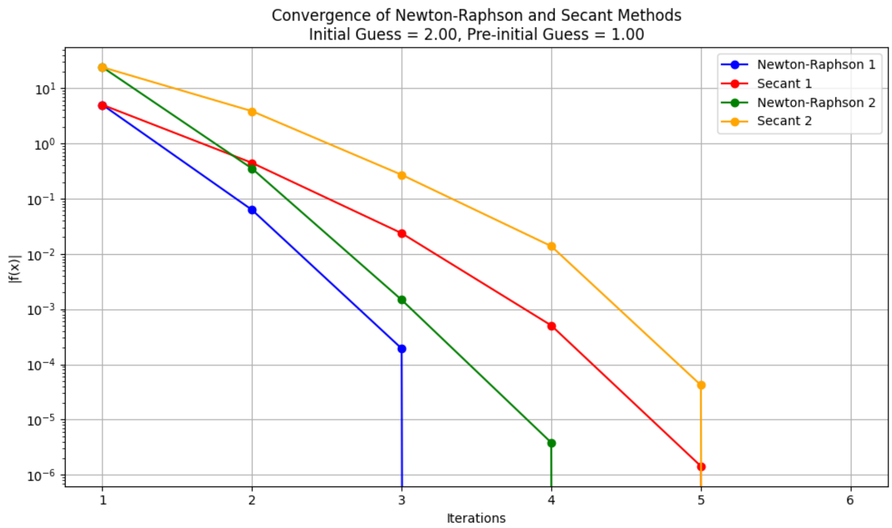

Figura 1

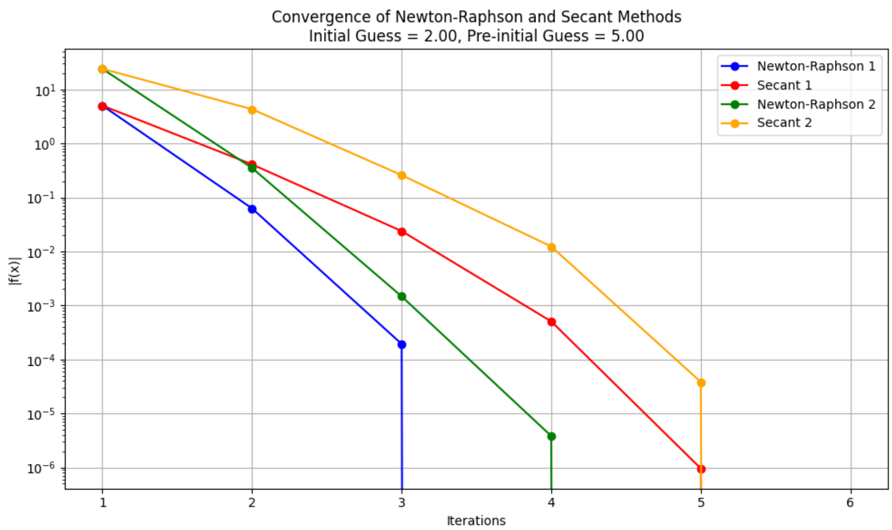

Figura 2

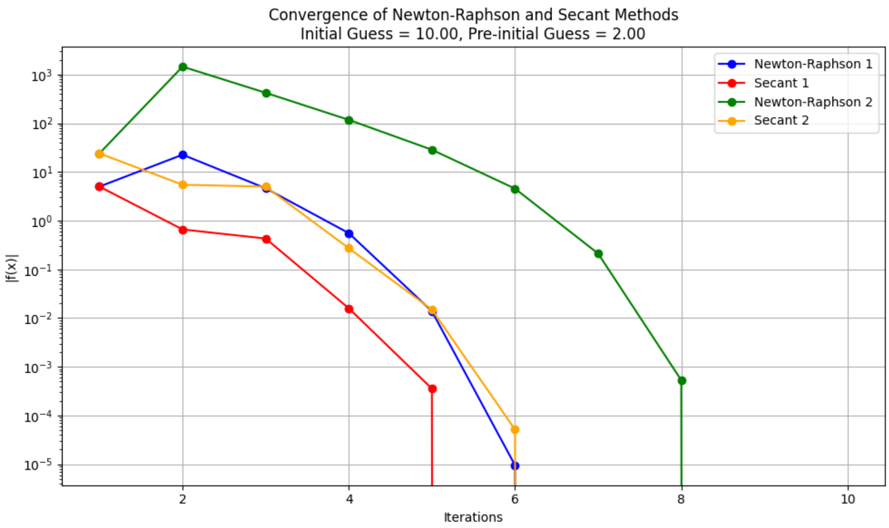

Figura 3

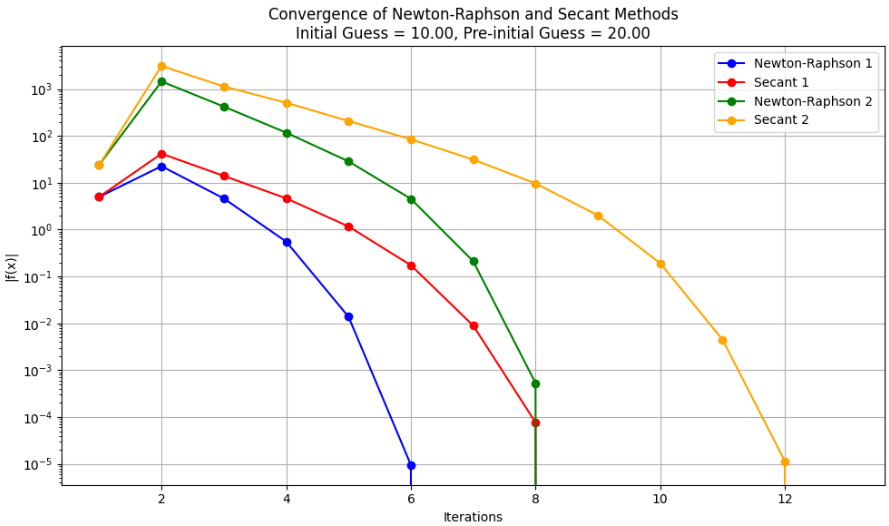

Figura 4

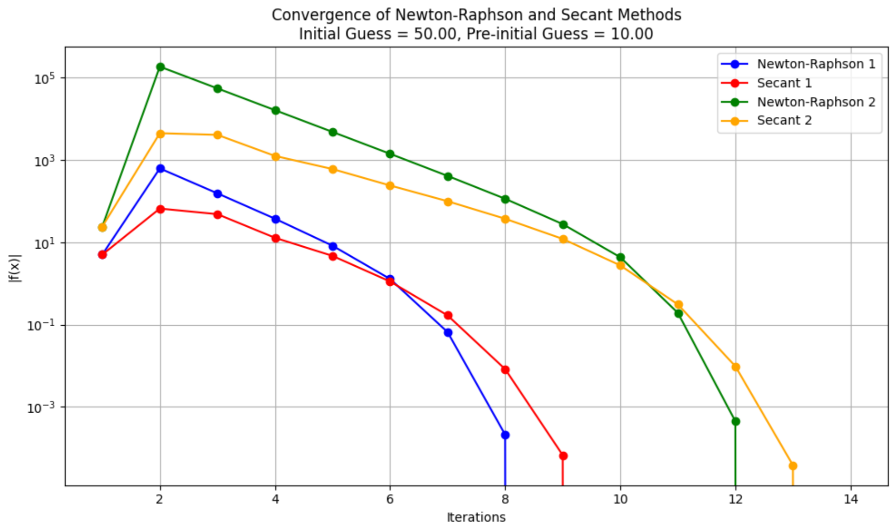

Figura 5

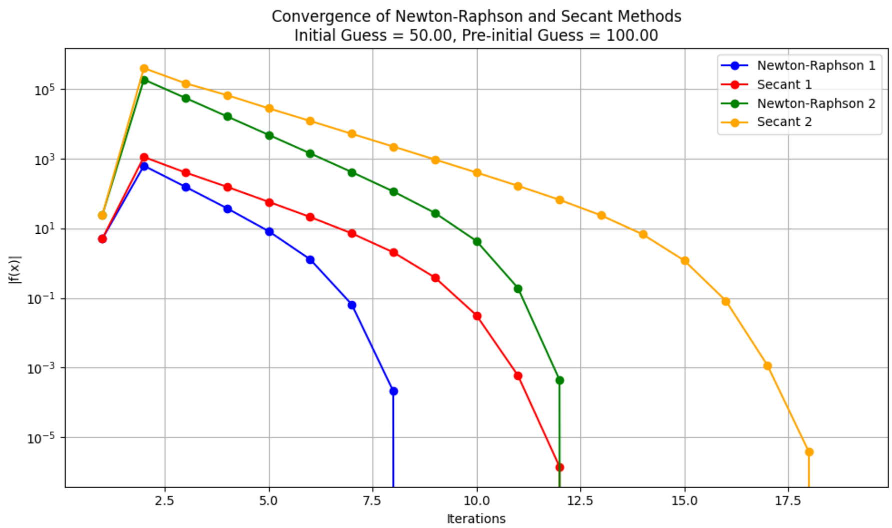

Figura 6

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 métdo 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

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

Seja a equação de Schrödinger:

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

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

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

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

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

Rearranjando:

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

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

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

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:

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: