

Física Computacional 2022/2023
Trabalho Prático de Avaliação Contínua

Estados Quânticos

- Método de 'Shooting', Método de Numerov e Método Runge-Kutta

PL8

Bruno Figueiredo 103489

Laura Villalba 102847

Rafael Morgado 104277

26/05/2023

Sumário:

Este trabalho tem como objetivo:

- Estudar o comportamento de uma partícula de massa reduzida sujeita a um potencial não harmónica (a uma dimensão), utilizando os métodos de *Numerov*, *Shooting and matching* e *Runge-Kutta*;
- Encontrar os respetivos valores próprios das energias dos estados fundamentais assim como as respetivas funções próprias;
- Comparar a eficiência dos métodos utilizados quanto ao seu desempenho, número de iterações e tempo de cálculo;
- Analisar os resultados obtidos e comparar com a teoria de perturbações de primeira ordem.

Com a realização deste trabalho prático, houve uma total concordância dos resultados obtidos com os esperados dos diferentes métodos propostos.

Introdução aos métodos usados:

Para determinar o valor próprio da energia e as funções próprias dos estados fundamentais, é necessário resolver a equação linear de *Schrödinger* com métodos numéricos apropriados.

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V \psi(x) = E \psi(x)$$

$$V(x) = \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \lambda x^4 \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0, \quad e \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x) = 0$$

- Método de *Numerov*:

É um método muito eficiente porque o erro local é de ordem $\mathcal{O}(h^6)$ e que exige menos cálculos por passo que outros métodos (Runge-Kutta) para resolver numericamente problemas de valor inicial com equações diferenciais do tipo:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + g(x) y(x) = S(x)$$

Neste trabalho foram usadas as duas formas possíveis na aplicação do método de *Numerov*:

Progressivamente, calculando y_{k+1} a partir de y_{k-1} e de y_k :

$$y_{k+1} = \left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k+1}\right)^{-1} \left[- \left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k-1}\right) y_{k-1} + 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} g_k\right) y_k + \frac{h^2}{12} (S_{k-1} + 10S_k + S_{k+1}) \right]$$

E **regressivamente**, calculando y_{k-1} a partir de y_{k+1} e de y_k :

$$y_{k-1} = \left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k-1}\right)^{-1} \left[2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} g_k\right) y_k - \left(1 + \frac{h^2}{12} g_{k+1}\right) y_{k+1} + \frac{h^2}{12} (S_{k-1} + 10S_k + S_{k+1}) \right]$$

-Método de *Runge-Kutta* de 4ª ordem:

É um método que permite a resolução de PVIs de 1ª ordem, calculando valores com maior precisão sem ser necessário o cálculo de derivadas de ordem mais elevada. As expressões necessárias são obtidas a partir da seguinte equação geral e os coeficientes de uma tabela de *Butcher*:

$$y_n = y_{n+1} - \sum_{i=0}^s b_i r_i$$

A partir da qual se obteve os coeficientes para a construção das seguintes equações auxiliares:

$$\begin{aligned} r_1 &= h \times f(x_n, y_n) \\ r_2 &= h \times f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{r_1}{2}\right) \\ r_3 &= h \times f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{r_2}{2}\right) \\ r_4 &= h \times f(x_n + h, y_n + r_3) \end{aligned}$$

0				
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
1	0	0	1	
	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$

Figura 1 - Tabela de Butcher

Obtendo a expressão:
$$y_n = y_{n+1} - \frac{r_1}{6} + \frac{r_2}{3} + \frac{r_3}{3} + \frac{r_4}{6}$$

- Método de *Shooting and Matching*:

Utiliza-se este método na aplicação da solução encontrada de problemas de valores fronteira (BVP) à solução exata (B), dentro de uma determinada fronteira, a partir de EDOs não-lineares.

- Arbitra-se as condições iniciais/parâmetros desconhecidos, *guess*(1) e *guess*(2)
- Integra-se a equação numericamente, utilizando-se os métodos anteriores;
- Verifica-se se o resultado se afasta/aproxima das condições fronteira;
- Volta a ajustar-se as condições/parâmetros iniciais para se aproximar da solução pretendida.

Mais genericamente o método da secante pode ser aplicado com as seguintes fórmulas:

Declive da secante:
$$m = \frac{\text{result}(i) - \text{result}(i-1)}{\text{guess}(i) - \text{guess}(i-1)}$$

Estimativa de *guess*(i+1):
$$\text{guess}(i+1) = \text{guess}(i) + \frac{B - \text{result}(i)}{m}$$

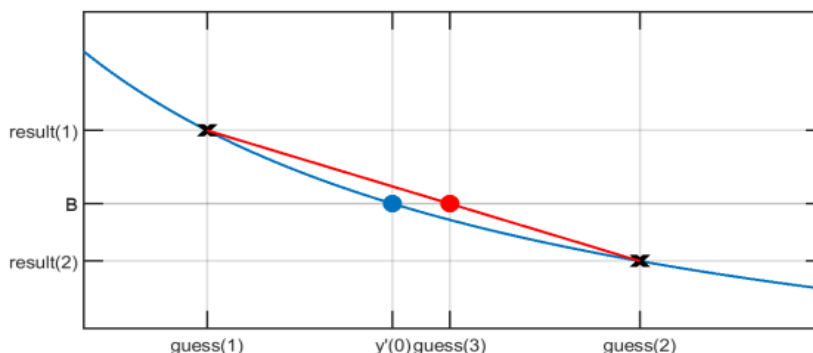


Figura 2 - O Método da secante aplicado ao 'shooting'

-Métodos e Resultados:

Alínea a)

Para aplicar o método de *Numerov* desenvolveu-se a equação de *Schrödinger* e comparou-se com a equação tipo do método de *Numerov*, verificando-se:

$$\begin{cases} S(x) = 0 \\ g(x) = -2(V(x) - E) \\ y(x) = \psi(x) \end{cases}$$

As inicializações necessárias foram as seguintes:

- $h = 0.01$; $x_{max} = 8$; $x_{min} = -8$

A escolha do intervalo de x foi feita com base no potencial, foram vistos dois limites de x para o qual o potencial tende para $+\infty$ e $-\infty$.

Para aplicar o método de *Shooting and Matching*, uma vez que se sabe a energia do oscilador harmónico ($E_3^{harm} = 10.5$), definiu-se duas aproximações iniciais deste valor, $E = [10.4; 10.6]$, e definiu-se o resultado pretendido, $B = 0$, bem como o $x_{match} = -1.61$ (ponto de descontinuidade entre o *Numerov* progressivo e regressivo). O nosso *result* é dado por pela expressão:

$$\frac{\frac{\psi'_{prog}(x_{match})}{\psi_{prog}(x_{match})} - \frac{\psi'_{regr}(x_{match})}{\psi_{regr}(x_{match})}}{\frac{\psi'_{prog}(x_{match})}{\psi_{prog}(x_{match})} + \frac{\psi'_{regr}(x_{match})}{\psi_{regr}(x_{match})}}$$

Com uma tolerância de 10^{-10} , obteve-se $E_3 = 10.510396 \text{ Ha}$ e a seguinte função própria normalizada:

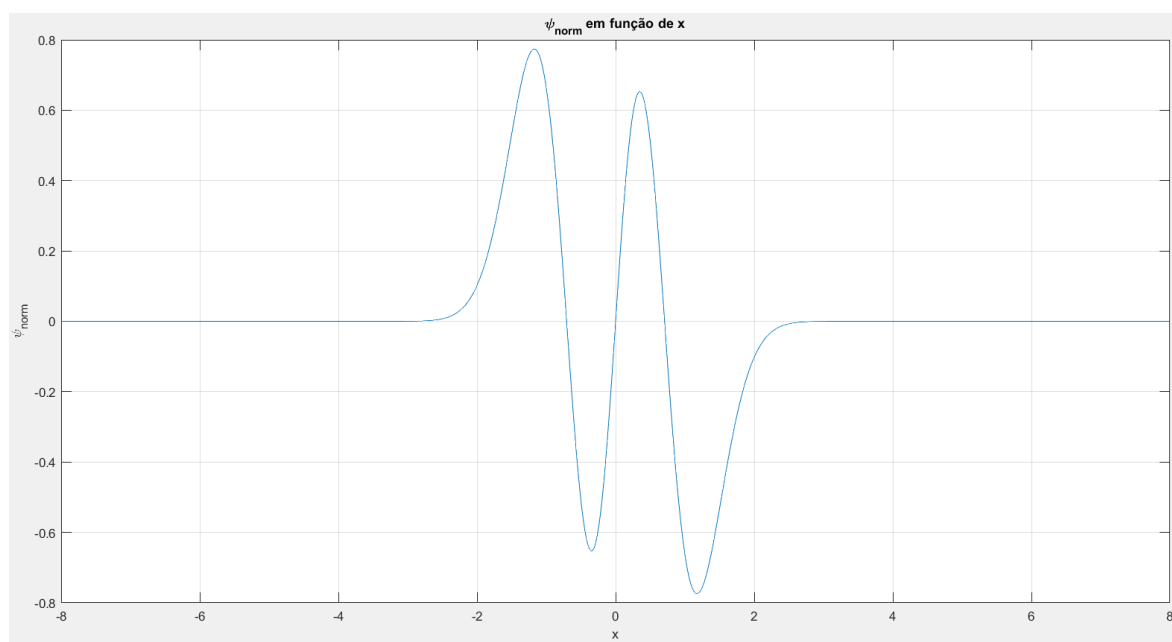


Figura 3 - Função própria para E_3 ($\psi_{normalizado}(x)$)

Alínea b)

Para aplicar o método de *Runge-Kutta* de 4ª ordem é necessário começar por discretizar a equação de *Schrödinger* dada, obtendo assim o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = Dy \\ \frac{dDy}{dx} = 2 \times y(x)(V - E) \end{cases}$$

Usando funções anónimas, obtêm-se as equações r_x assim estimando o valor de y_{k-1} e Dy_{k-1} nas diferentes iterações. O método de *shooting* é aplicado da mesma forma que a alínea a), o que difere é o nosso *result* que é comparado que neste caso é o último valor de y de cada iteração.

As inicializações necessárias foram as seguintes:

- $h = 0.01$; $x_{max} = 3$; $x_{min} = -3$

Com uma tolerância de 10^{-10} , obteve-se $E_3 = 10.510435 \text{ Ha}$ e a seguinte função própria normalizada:

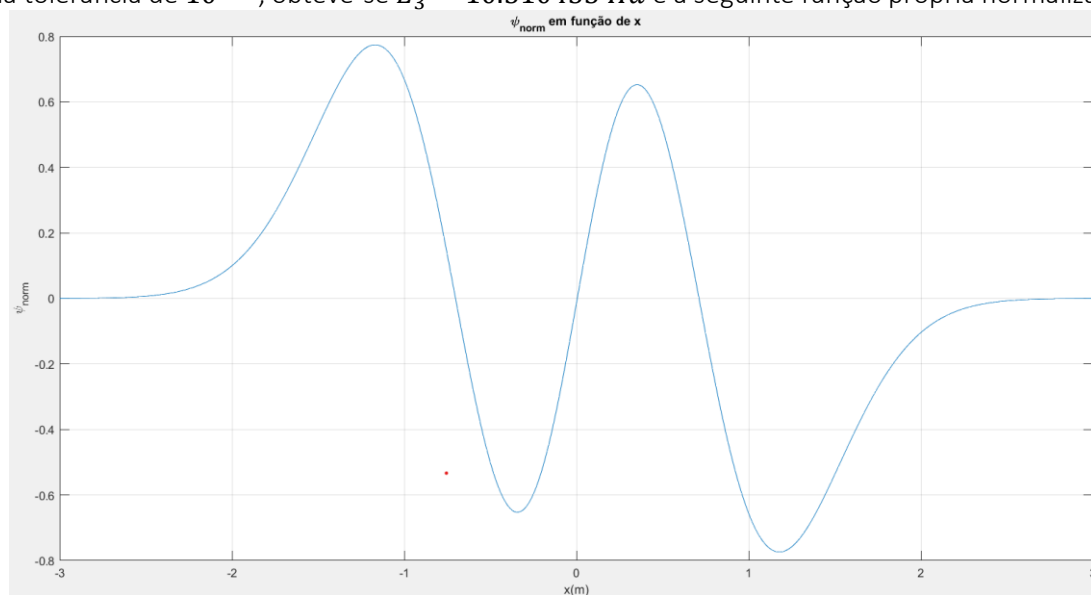


Figura 4 - Função própria para E_3 ($\psi_{\text{normalizado}}(x)$)

Para avaliarmos a eficiência dos métodos de *RK4* e *Numerov*, estes foram testados para diferentes tolerâncias e passos. Os resultados obtidos foram:

Numerov:

Número de iterações


Tol \ h	$1e^{-3}$	$1e^{-6}$	$1e^{-9}$
0.01	22	48	64
0.001	21	48	94
0.00001	15	38	93

Tempo de execução

Tol \ h	$1e^{-3}$	$1e^{-6}$	$1e^{-9}$
0.01	0.0217	0.033	0.0397
0.001	0.0358	0.0837	0.1074
0.00001	0.5263	1.2085	2.9439

Runge-Kutta:

Número de iterações

Tol h	 $1e^{-3}$	$1e^{-6}$	$1e^{-9}$
0.01	6	7	7
0.001	6	7	7
0.00001	6	7	7

Tempo de execução

Tol h	$1e^{-3}$	$1e^{-6}$	$1e^{-9}$
0.1	0.0221	0.0235	0.0254
0.001	0.0545	0.0713	0.0915
0.00001	2.9354	3.4579	3.5002

Pela observação das tabelas, verificamos que a nível de iterações o método de *Numerov* leva algumas iterações a mais que o método de *RK4*, isto deve-se a estarmos a utilizar ambos os dois *Numerov* possíveis (progressivo e regressivo) e a calcular um parâmetro que dê a diferença relativa entre as duas derivadas estimadas.

Quanto ao tempo de cálculo de cada um dos métodos, o *RK4* leva mais tempo, uma vez que o mesmo apresenta mais cálculos para a obtenção das derivadas.

Alínea c)

Utilizando o mesmo procedimento que na alínea a), foi-se obter os valores próprios e as respetivas funções próprias normalizadas para outros valores de n .

- $n = 0$; $E_0 = 1.5004 \text{ Ha}$
- $n = 1$; $E_0 = 4.5021 \text{ Ha}$
- $n = 2$; $E_0 = 7.5054 \text{ Ha}$
- $n = 4$; $E_0 = 13.5170 \text{ Ha}$

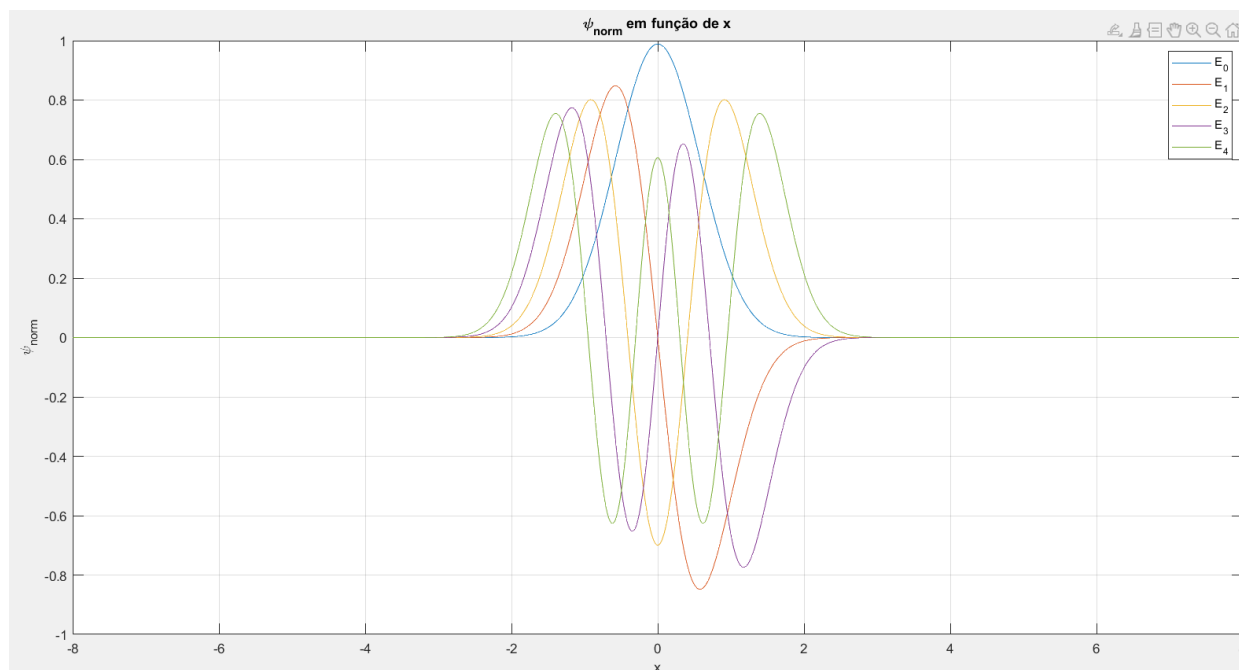


Figura 5 - Funções próprias para E_n ($\psi_{\text{normalizado}}(x)$)

Com estes 5 valores de energia próprios obtidos foi-se criar um gráfico do poço de potencial $V(x)$ juntamente com as 5 linhas das energias próprias:

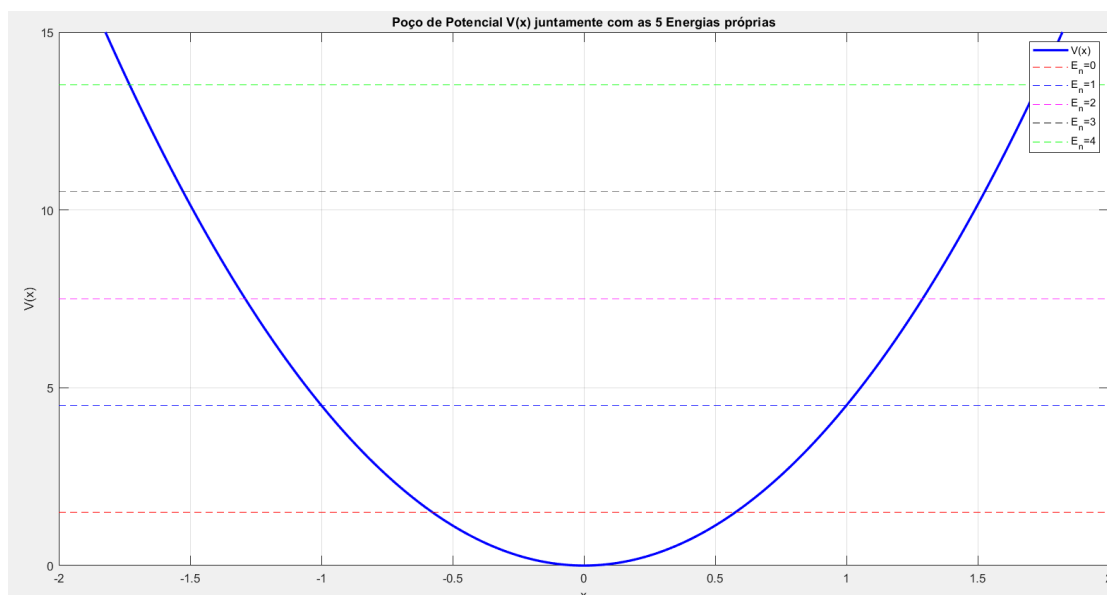


Figura 6 - Poço de Potencial $V(x)$ com as 5 Energias próprias

Estes resultados estão dentro dos esperados, uma vez que, as energias próprias obtidas são bastante próximas as respetivas energias do oscilador harmónico. Estes valores também são válidos uma vez que, estão todas dentro do poço.

Alínea d)

Com os valores das energias próprias e os valores respetivos das energias do oscilador harmónico, fomos calcular os vários ΔE_n e compará-los com o ajuste polinomial de ordem 2:

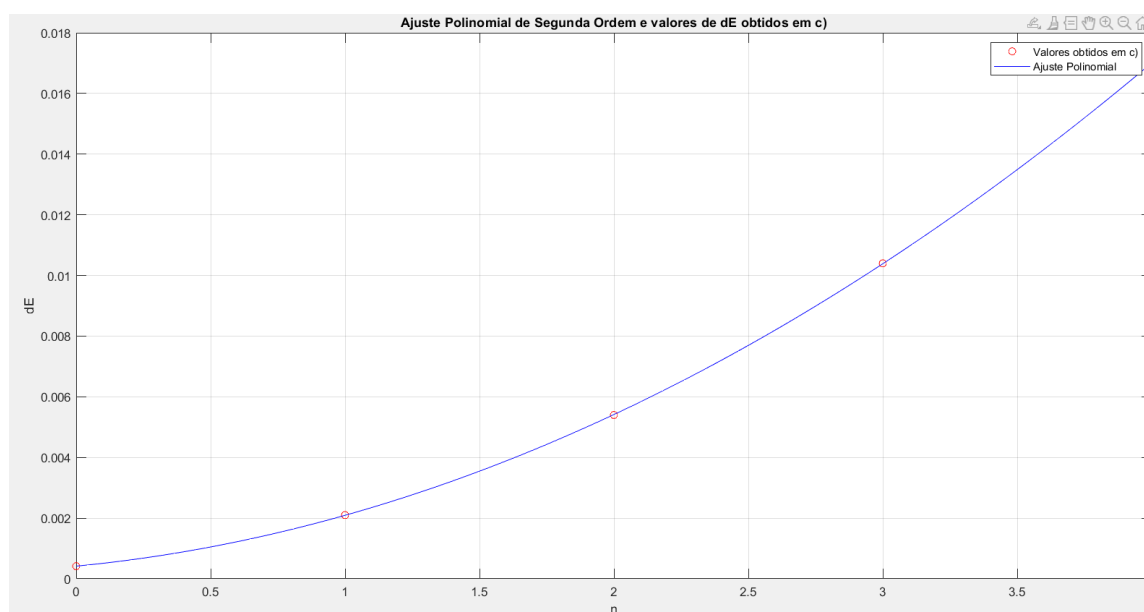


Figura 7 - Valores obtidos de ΔE_n e respetivo ajuste polinomial de ordem 2

O ajuste polinomial obtido ($8.2377 \times 10^{-4}x^2 + 8.5164 \times 10^{-4}x + 4.1737 \times 10^{-4}$) encaixou perfeitamente nos vários ΔE_n obtidos.

Comparando os resultados obtidos com os resultados previstos pela teoria das perturbações de primeira ordem, obteve-se:

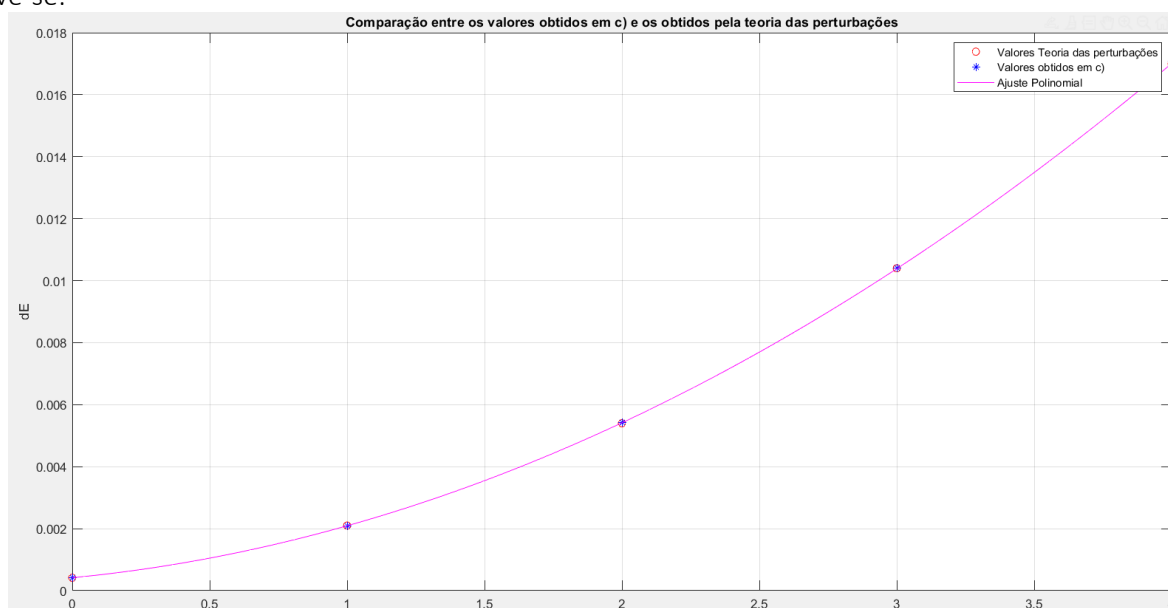


Figura 8 - Comparação dos resultados obtidos com os previstos pela teoria das perturbações de primeira ordem

Os resultados obtidos estiveram em total concordância com os resultados da teoria das perturbações de primeira ordem.

Alínea e)

Para estudar o problema para apenas $x \leq 0$, foi aplicado apenas o método de *Numerov* progressivo e após disso foi calculado os valores de $\psi(x) = -\psi(-x)$ para obter a outra metade da função de onda.

Aplicando isto, obteve-se:

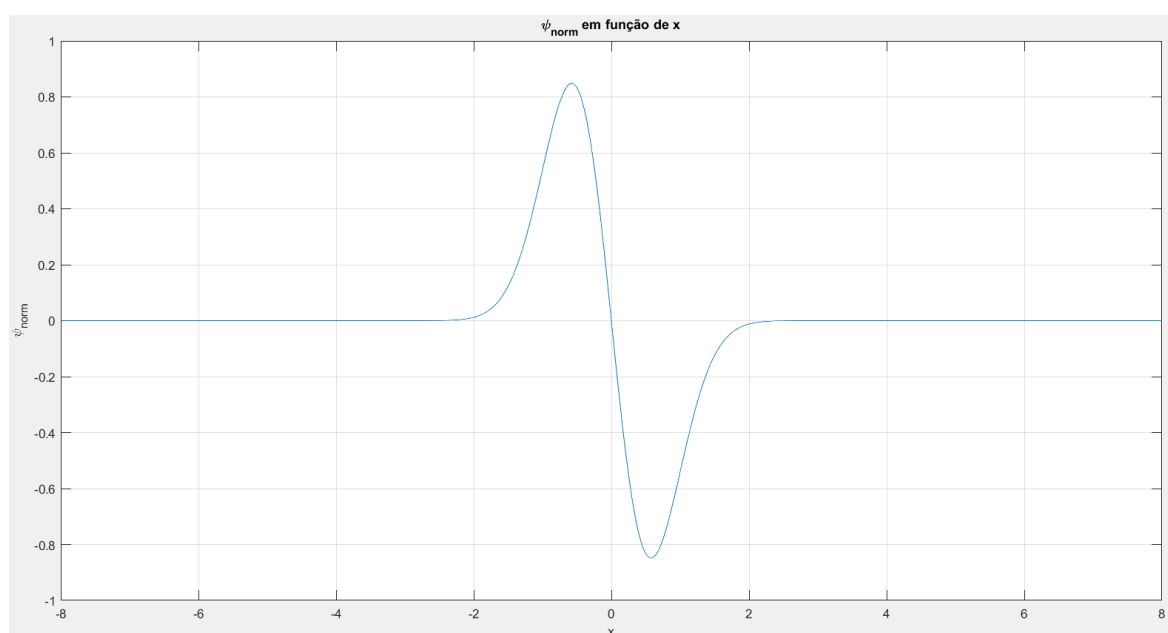


Figura 9 - Função de onda antissimétrica

O valor da energia obtido era o esperado, uma vez que o mesmo deu igual ao E_1 da alínea c) ($E_1 = 4.502081$).

-Discussão e conclusão:

Os objetivos foram concluídos e os resultados estão dentro dos esperados.

- Observou-se a semelhança entre os vários métodos usados.
- Verificou-se que o método de *Numerov* em relação ao *Runge-Kutta* de 4ª ordem tem uma melhor performance temporal, como era esperado.
- Foram obtidos os valores de ΔE_n pela teoria das perturbações de primeira ordem e ao comparados com os resultados obtidos experimentalmente, estes estiveram em total concordância.
- A aplicação do método de *Numerov* juntamente com o método de *Shooting sem Matching* só para metade do problema, confirmou-nos que em potencias simétricos, as funções de onda só podem ser simétricas ($\psi(x) = \psi(-x)$), ou antissimétricas ($\psi(x) = -\psi(-x)$), no nosso caso.