dfis universidade de aveiro
departamento de física

Estados Quânticos

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

— Trabalho Prático — Física Computacional — Fábio Caldas (80248) — Inês Leite (98490)

16 de junho de 2022

Sumário:

Neste trabalho pretende-se:

- Estudar o comportamento de uma partícula de massa reduzida que se encontra num poço de potencial a uma dimensão, utilizando os métodos de *Numerov* Regressivo, *Shooting* e *Runge-Kutta*;
- Encontrar os respetivos valores próprios das energias dos estados fundamentais assim como as suas funções próprias;
- Comparar a eficiência dos métodos utilizados quanto ao número de iterações e tempo de execução;
- Analisar os resultados analíticos obtidos com a função de *Airy Ai* em comparação com os resultados práticos.

Os métodos utilizados são concordantes, os resultados obtidos estão de acordo com a análise teórica.

Introdução aos métodos utilizados:

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.

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x), \text{com } V(x) = \begin{cases} +\infty, & para\ x \le 0 \\ x, & para\ x > 0 \end{cases}$$

—***Numerov:*** É um método de ordem $\mathcal{O}(h6)$ e que exige menos cálculos por passo que outros métodos para resolver numericamente problemas de valor inicial com equações diferenciais do tipo:

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

No trabalho proposto é pedida a integração a partir de um ponto afastado de zero (x_{max}) até zero, então utilizou-se o método de forma regressiva. Desta forma, para se calcular y_{k-1} utiliza-se a seguinte expressão generalizada:

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

—***Runge-Kutta de 4ª Ordem:*** 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* (figura 1):

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

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

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

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

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

Figura 1: Tabela de Butcher

—***Método de 'Shooting'***- utiliza-se 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: $m = \frac{result(i) - result(i-1)}{guess(i) - guess(i-1)}$

Estimativa de $guess(i+1)$:

$$guess(i+1) = guess(i) + \frac{B - result(i)}{m}$$

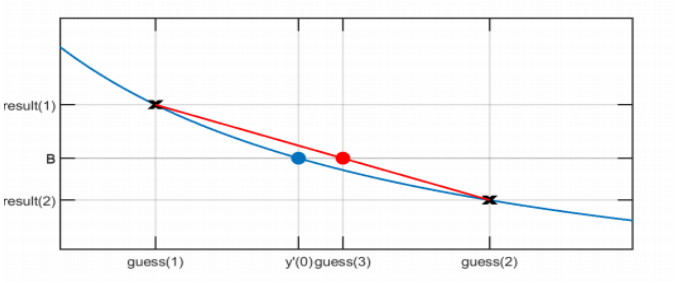

Figura 2: Shooting Ilustrado

Métodos e resultados:

Alínea a)

Para aplicar o método de *Numerov* desenvolveu-se a equação de *Schrödinger*:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 2(E - V(x))\,\psi(x) = 0$$

E comparou-se esta com a equação tipo do método de *Numerov*, verificando-se que:

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

As inicializações necessárias foram as seguintes:

- $\mathrm{h} = 0.001$; $\mathrm{xmax} = 10$; $\mathrm{x} = 0\mathrm{:h:xmax}$;

Para aplicar o método de *Shooting*, uma vez que se sabe que a energia do estado fundamental é próxima de 1.8, definiu-se 2 aproximações iniciais próximos deste valor, $E = [1.8; 1.7]$. Outra condição inicial foi definir o resultado pretendido, este é a condição fronteira, $\mathrm{x}(0) = \mathrm{B} = 0$.

Com uma tolerância de 10^{-9} (diferença entre o valor inicial obtido e o valor desejado (B)), obteve-se $\mathrm{E} = 1.855757081487187$ Ha e a seguinte função própria normalizada.

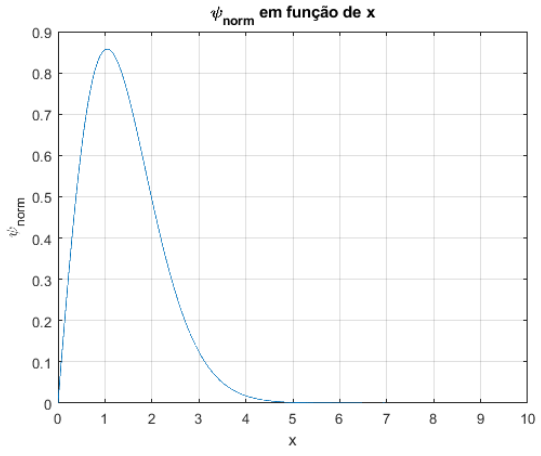

Figura 3: Função própria para o primeiro nível de energia ($\psi_{normalizado}(x)$) [Numerov]

Alínea b)

Para aplicar o método de *Runge-Kutta* de 4ª ordem é, em primeiro lugar, necessário discretizar a equação de *Schrödinger* dada (sendo que esta é de 2ª ordem) obtendo assim o seguinte sistema de equações que nos vai permitir construir o algoritmo:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f\psi(x)}{\partial x} = 2 \times \psi(x)(V(x) - E) \\ \dfrac{\partial \psi(x)}{\partial x} = f\psi(x) \end{cases}$$

Utilizando funções anónimas, obtêm-se as equações r_x (mencionadas na introdução ao método) assim estimando o valor de ψ_{k-1} e ψ'_{k-1}nas diferentes iterações. Aplica-se, da mesma forma como na alínea anterior, o método de *Shooting* estimando assim o valor próprio da energia do estado fundamental com este método.

As inicializações necessárias foram as seguintes:

- $\mathrm{h} = 0.001$; $\mathrm{xmax} = 10$; $\mathrm{x} = 0\mathrm{:h:xmax}$;

Com uma tolerância de 10^{-9}, obteve-se $\mathrm{E} = 1.856759836556786$ Ha e a seguinte função própria normalizada.

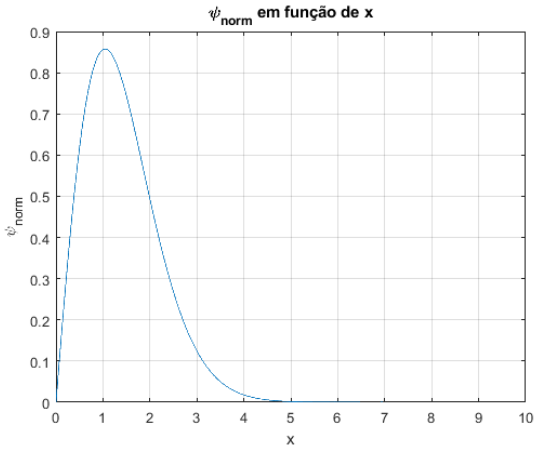

Figura 4:Função própria para o primeiro nível de energia ($\psi_{normalizado}(x)$) [RK4]

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

Tol / h	1,00E-03	1,00E-06	1,00E-09
0.01	5	7	8
0.001	5	7	8
0.00001	5	7	8

Tabela 1: Método de Numerov, nº de iterações

Tol / h	1,00E-03	1,00E-06	1,00E-09
0.01	6	7	8
0.001	5	7	8
0.00001	5	7	8

Tabela 2: Método RK4, nº de iterações

Tol / h	1,00E-03	1,00E-06	1,00E-09
0.01	0.000198200	0.000160100	0.000143500
0.001	0.001050100	0.001515700	0.001971800
0.00001	0.135870200	0.184393000	0.211134100

Tabela 3: Método de Numerov, tempo de execução (s)

Tol / h	1,00E-03	1,00E-06	1,00E-09
0.01	0.004340700	0.006493900	0.005806300
0.001	0.023799900	0.033032900	0.039715300
0.00001	2.380751600	3.352846400	3.919601100

Tabela 4: Método RK4, tempo de execução (s)

Por observação das tabelas 1 e 2, verificamos que não há grandes distinções entre métodos a nível das diferentes tolerâncias. Isto deve se ao facto de ambos os métodos serem de ordem $\mathcal{O}(h^6)$ (*Numerov*) e $\mathcal{O}(h^5)$ (*RK4*), ou seja, de ordem elevada.

As diferenças entre métodos são mais óbvias a nível de tempo de execução o que seria de esperar uma vez que o método *RK4* exige mais cálculos para a obtenção das derivadas em comparação com o método de *Numerov*.

Alínea c)

Nesta alinea pretende-se usar a função de *Airy Ai* para determiar os 3 primeiros valores próprios de energia analíticamente. Obteve-se a função $Ai(\mathrm{x})$ com $\mathrm{x} = [-10\colon \mathrm{h}\colon 10]$, com $\mathrm{h} = 0.001$. Para interpolar linearmente os três primeiros zeros mais à direita, aplicou-se um ciclo "*for*" regressivo ao valores de $Ai(\mathrm{x})$ com a condição de mínimo $x_k . x_{k-1} \leq 0$, obtendo a_n. $\mathrm{E_n}$ é dado por $-2^{-1/3} a_n$.

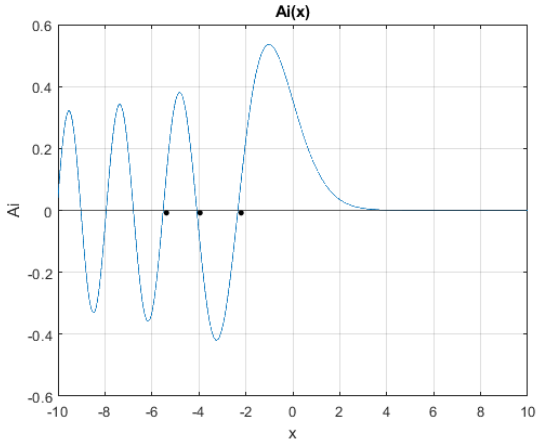

Figura 5: Gráfico da função Ai(x) e dos pontos a_n

n	x_k	x_{k+1}	a_n	E_n
1	-2.338	-2.339	-2.338107410489104	1.85575708151252
2	-4.087	-4.088	-4.087949444101580	3.24460762397983
3	-5.520	-5.521	-5.520559828068432	4.38167123926461

Tabela 5: Resultados obtidos para a alínea c)

Alínea d)

Para encontrar os três primeiros valores próprios da energia a partir do método da alínea a) implementou-se um ciclo "*for*" que executa o método de *Numerov* e o método de *Shooting* três vezes com três estimativas iniciais de energias diferentes. Estas são $E_1 = [1.8;\ 1.9]$, $E_2 = [3.1; 3.2]$ e $E_3 = [4.0;\ 4.1]$, valores estes próximos aos obtidos na alínea c).

n	E_n
1	1.85575708151252
2	3.24460762397983
3	4.38167123926461

Tabela 6: Resultados obtidos para a alínea d)

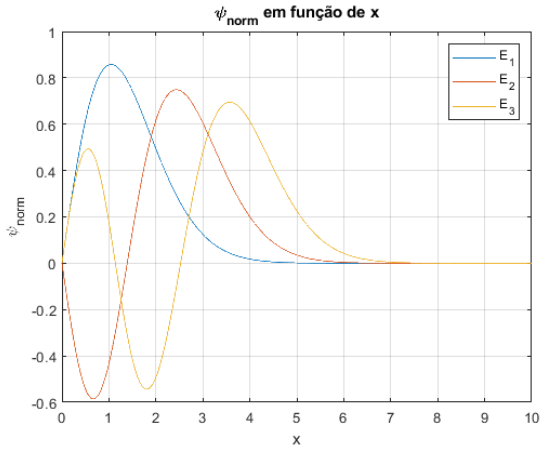

Figura 6: Evolução das funções próprias para diferentes níveis de energia (pratico)

Alínea e)

As funções próprias são obtidas teoricamente também com recurso à função de *Airy Ai*, $C_n Ai\left(2^{\frac{1}{3}}(x-En)\right)$. C_n é obtido de forma semelhante às outras alíneas:

- Integra-se $Ai\left(2^{\frac{1}{3}}(x-En)\right)^2$ em x utilizando a função *trapz* do *MATLAB*;
- C_n é igual ao inverso da raiz do resultado da integração

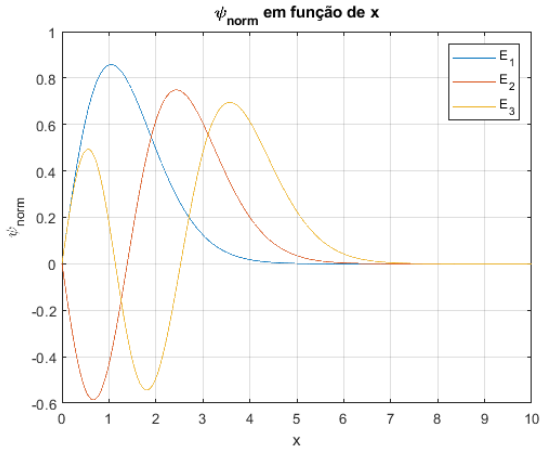

Figura 7: Evolução das funções próprias para diferentes níveis de energia (teórico) [h = 0.001]

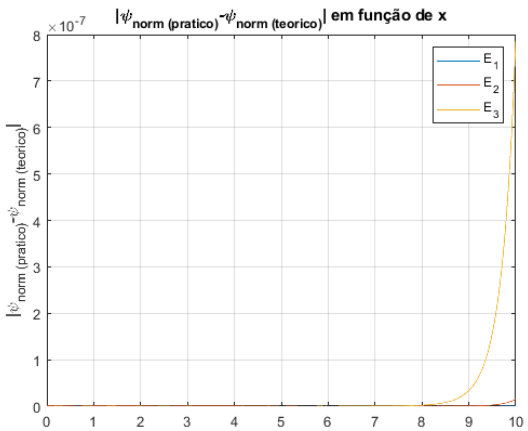

Figura 9: Diferença entre PSI pratico e PSI teorico para um h=0.001

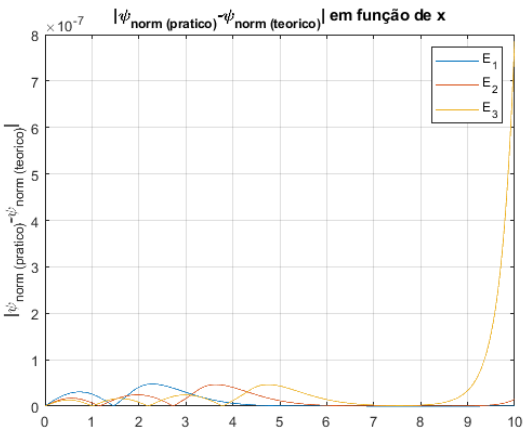

Figura 8: Diferença entre PSI pratico e PSI teorico para um h=0.00001

Observa-se um erro muito reduzido da ordem de 10^{-7}. A pequena diferença observada entre os valores de h deve se ao critério de estabilidade do método $0 \leq \lambda^2 h^2 \leq 6$, sendo que com $\mathrm{h} = 0.00001$ aproxima-se mais ao limite da estabilidade.

Discussão e conclusão:

Os objetivos foram concluídos e os resultados obtidos estão dentro do esperado.

- Observou-se a semelhança entre soluções dos métodos numéricos utilizados;
- Verificou-se a melhor performance temporal do método de *Numerov* em relação ao *RK4* como esperado, devido à complexidade das expressões generalizadas do último;
- Foram obtidos os valores da energia fundamental para os diferentes métodos, não se encontrando disparidade entre os valores obtidos;
- Os diferentes valores de energia obtidos por *Shooting* e *Numerov* encontram-se com um erro muito pequeno (da ordem de 10^{-7}) em relação aos encontrados com a função de *Airy Ai*.