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

**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.

**Uma imagem com texto, Tipo de letra, file, captura de ecrã

Descrição gerada automaticamente**

**Uma imagem com texto, Tipo de letra, file, captura de ecrã

Descrição gerada automaticamente**

**- Método de Numerov:**

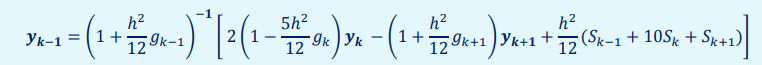
Uma imagem com Tipo de letra, escrita à mão, texto, file

Descrição gerada automaticamente É um método muito eficiente porque o erro local é de ordem 𝒪(ℎ6) e que exige menos cálculos por passo que outros métodos (Runge-Kutta) para resolver numericamente problemas de valor inicial com equações diferenciais do tipo:

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

**Progressivamente**, calculando 𝑦𝑘+1 a partir de 𝑦𝑘−1 e de 𝑦𝑘:

**E regressivamente**, calculando 𝑦𝑘−1 a partir de 𝑦𝑘+1 e de 𝑦𝑘:

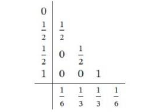
****

**-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*:



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



Uma imagem com Tipo de letra, texto, file, tipografia

Descrição gerada automaticamente

Figura - Tabela de Butcher



Obtendo a expressão:

**- Método de shooting:**

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:

**Uma imagem com file, diagrama, Gráfico, Paralelo

Descrição gerada automaticamente**Estimativa de 𝑔𝑢𝑒𝑠𝑠(𝑖+1):

**-**

Figura - O Método da secante aplicado ao ‘shooting’

**-Resultados:**

**-Discussão e conclusão:**

