

Resum

Adrià Bravo Vidal

28/04/20

Aquesta setmana m'he dedicat, sobretot, a resoldre un gran problema amb el mètode numèric i a acabar de fer comprovacions numèriques de la seva convergència.

1 Solució d'errors

Per continuar amb la comprovació de la convergència del mètode, vaig aplicar-hi el problema de l'oscil·lador harmònic. L'oscil·lador harmònic té solució analítica en MQ i podia comparar-hi la evolució de un autoestat aplicant-hi el meu mètode i la analítica. Vam escollir l'estat fonamental, és a dir, $n_x, n_y = 0$ per simplicitat. El problema, llavors, es presenta així:

L'estat fonamental:

$$\phi_w(x, y) = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar \pi}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2)} \quad (1)$$

El potencial així:

$$V_w = \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2) \quad (2)$$

Energia potencial, cinètica i total:

$$E = \hbar \omega, \quad E_c = \frac{\hbar \omega}{2}, \quad E_p = \frac{\hbar \omega}{2} \quad (3)$$

Un cop vam tenir clar quin era el marc de l'oscil·lador harmònic, vam calcular la energia potencial i cinètica del paquet discretitzat en la nostra caixa de $a=2L$ utilitzant un mètode computacional i vam comparar-ho amb l'original. D'aquesta manera vam obtenir figures com aquesta:

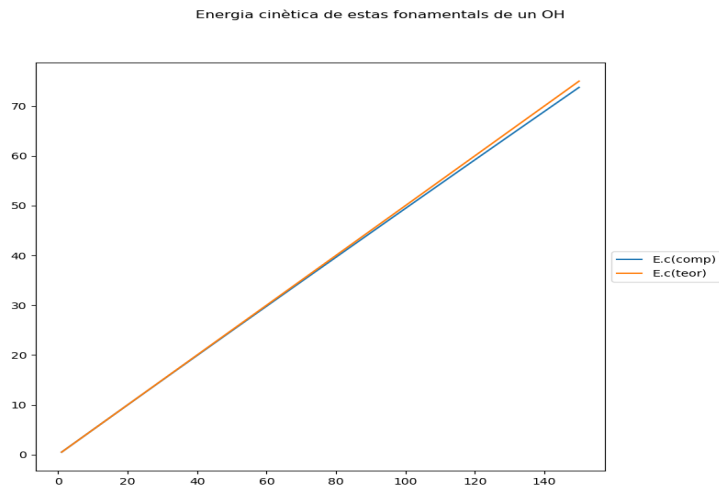
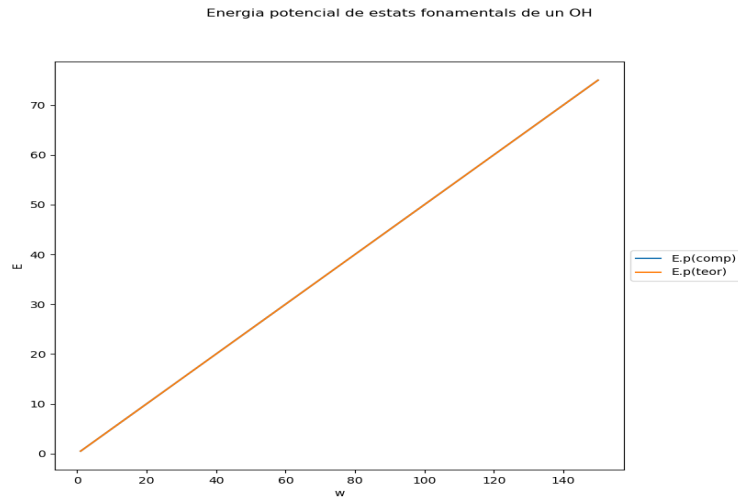


Figure 1: Energia cinètica i potèncial de l'estat fonamental ($n_x = 0, n_y = 0$) de diversos oscil·ladors harmònic

Per tant, la manera de calcular la energia del paquet no pot ser cap error ja que es froça correcta. Llavors, vam fer evolucionar l'estat fonamental en un cert temps t amb el mètode numèric, i vam obtenir una figura com aquesta:

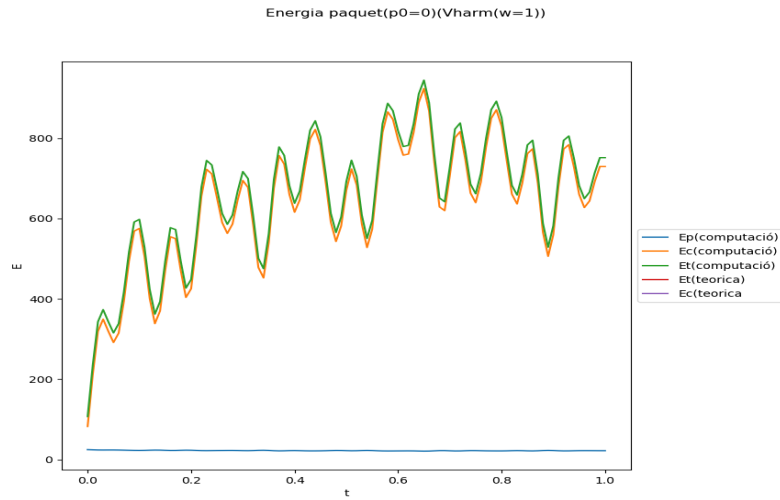


Figure 2: Energia cinètica i potèncial de l'estat fonamental ($n_x = 0, n_y = 0$) de l'oscilador $w=50$ en diversos instants de t

Obviament, això estava malament, i vaig obtenir figures similars per tots els w . Per un altre banda, també estava obtenint un error en quant al valor esperat d'un paquet gaussià amb un $p0=10$, ja que no coincideix amb el valor teòric.

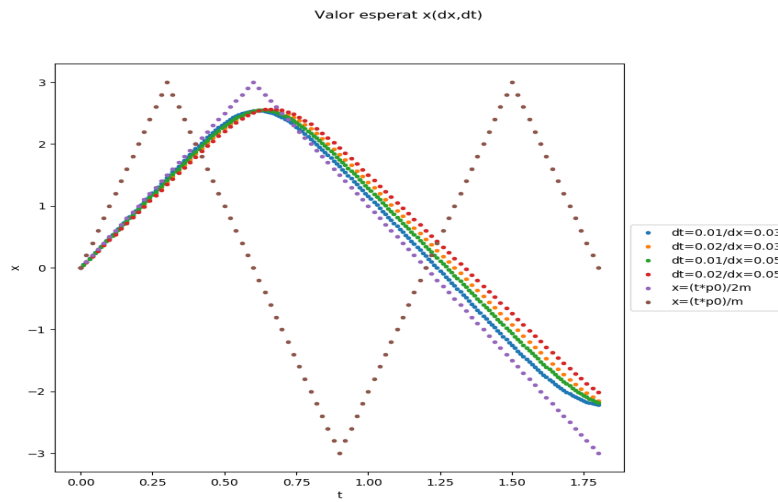


Figure 3: Valor esperat del paquet i la seva predicció

Ja que el càlcul de la energia estava bé, l'error no podia provenir d'aquí. Així, em vaig posar a estudiar el problema amb el codi. El problema amb el valor

esperat es solucionava afegint un factor 4 a la constant r , però no entenia perquè. Vaig rebuscar molt, i no vaig trobar cap error. Finalment, vaig pensar que tenia un problema conceptual amb el mètode en si. Llavors, rebuscant, resulta que em vaig equivocar a l'hora de plantejar el mètode i el vaig programar malament. El mètode es programa realment amb aquesta equació (on $r = \frac{\Delta t \hbar}{4\Delta x^2 m}$), que representa la primera iteració d'un pas:

$$\psi_{i,j}^{k+1/2} [1 + (\frac{i\Delta t}{4\hbar} V_i + 2r)] - r(\psi_{i+1,j}^{k+1} + \psi_{i-1,j}^{k+1}) = \quad (4)$$

$$\psi_{i,j}^k [1 - (\frac{i\Delta t}{4\hbar} V_i + r)] + r(\psi_{i,j+1}^k + \psi_{i,j-1}^k) \quad (5)$$

No obstant, el que jo estava fent era considerar en el membre de la dreta la mateixa derivada que en el de la esquerra, és a dir, estava aplicant un Crank-Nicolson 1D en cada fila, i després en cada columna. En canvi, el mètode funciona de manera bastant diferent, com poden induir de la equació anterior. Un cop trobat aquest error, vaig solucionar-ho, el que va implicar canviar el mètode i tornar a fer les comporvacions de conservació de norma i energia, valor esperat... Trobar l'error, modificar el mètode i tornar a comporvar que tot estava bé em van prendre bastant temps.

2 Convergència del mètode

Un cop solucionat l'error, vaig tornar a repetir els procediments anteriors, i vaig obtenir, aquest cop, solucions molt satisfactòries. Per un paquet gaussià de $p_{ox} = 5$ vam obtenir els següents resultats:

En quant al valor esperat, tenim que s'ha de satisfer:

$$\langle v \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \langle X \rangle = \langle v \rangle t \quad (6)$$

Obtenim:

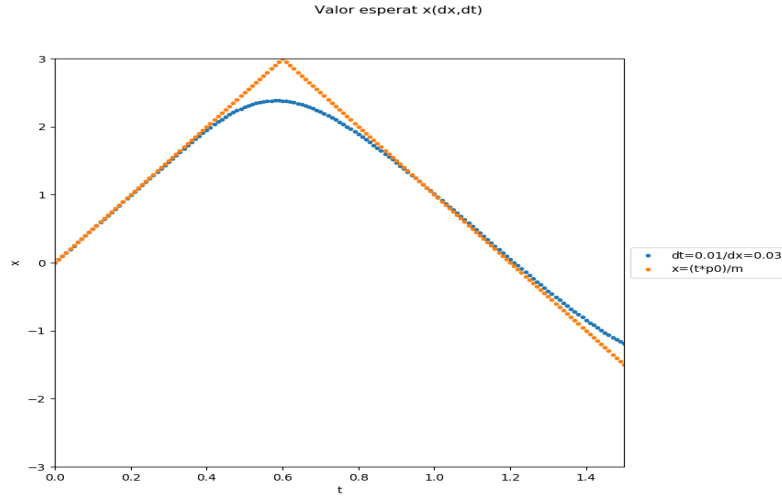


Figure 4: Valor esperat del paquet de $p_{ox} = 5, p_{oy} = 0$ i la seva predicció teòrica. Observem que coincideix bé el valor esperat teòric amb el calculat.

Per la dispersió en x i en y , tenim la següent equació analítica que s'ha de complir per un paquet gaussià lliure:

$$\sigma_x^2(t) = \sigma_x^2(0) + \frac{\sigma_p^2}{m^2} t^2, \quad \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma_x(0)^2} \quad (7)$$

El nostre paquet està tancat, però tot i així, aquesta equació és útil per fer una comparació en els instants inicials:

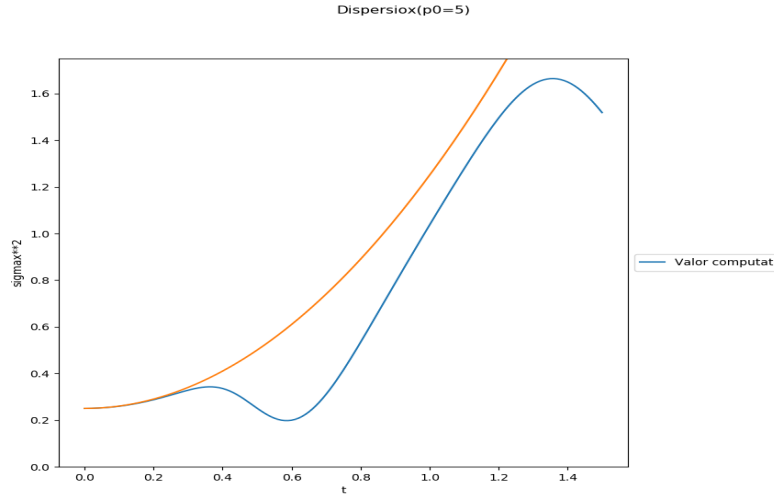


Figure 5: Dispersio en x del paquet de $p_{ox} = 5, p_{oy} = 0$ i la seva predicció teòrica. Observem que les dues funcions coincideixen bé inicialment. Posteriorment, ens trobem amb que el paquet xoca amb la paret, el que redueix repentinament la dispersió.

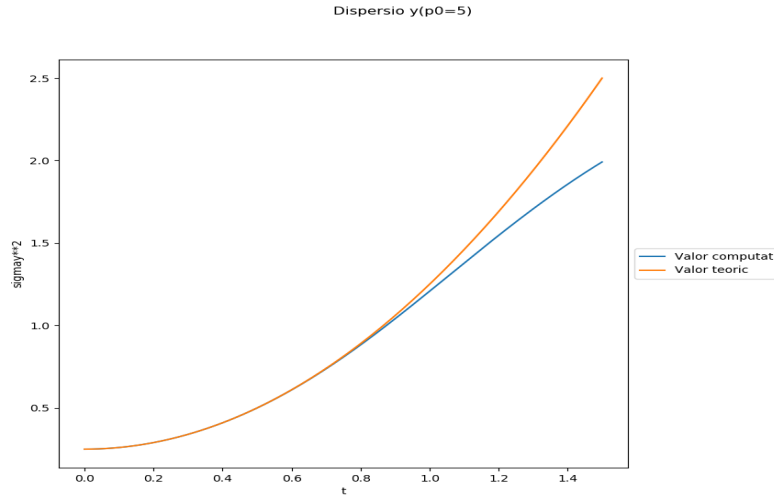


Figure 6: Dispersio en y de $p_{ox} = 5, p_{oy} = 0$ i la seva predicció teòrica. Observem que les dues funcions coincideixen bé durant un temps. Ja que no hi ha cap xoc amb les parets de $y = \pm L$, les funcions coincideixen més temps que en la figura anterior.

Finalment, vam tornar a aplicar el problema de l'oscilador harmònic i vam obtenir les següents figures:

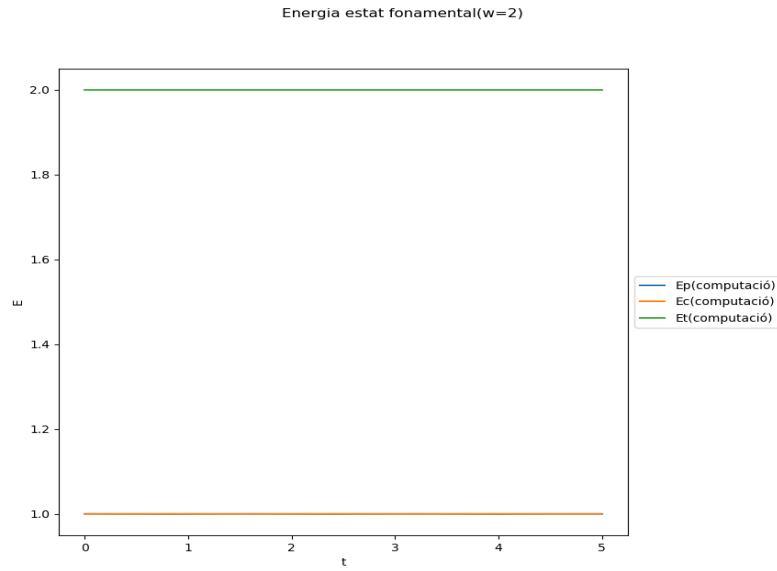


Figure 7: Energia potèncial de l'estat fonamental ($n_x = 0, n_y = 0$) de l'oscilador $w=2$ en diversos instants de t

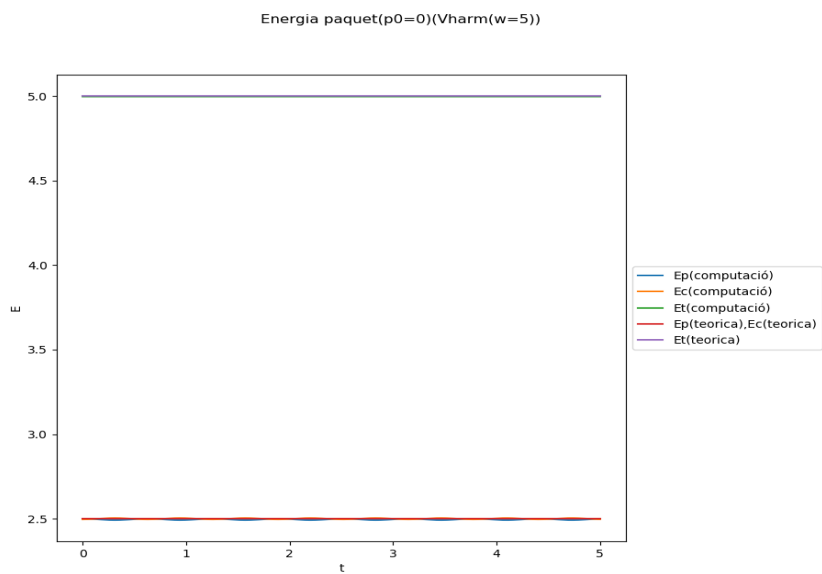


Figure 8: Energia potèncial de l'estat fonamental ($n_x = 0, n_y = 0$) de l'oscilador $w=5$ en diversos instants de t

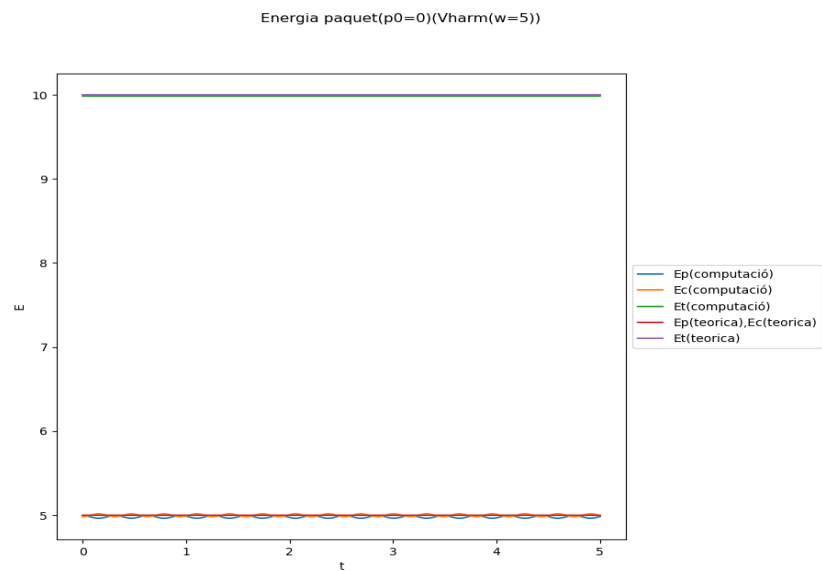


Figure 9: Energia potèncial de l'estat fonamental ($n_x = 0, n_y = 0$) de l'oscilador $w=10$ en diversos instants de t

Per tant, podem confrimar que el mètode convergeix força bé.