Matematično-fizikalni praktikum: Diferencne metode za PDE

Andrej Kolar-Požun

December 21, 2016

1 Uvod

V tej nalogi bomo reševali Schrödingerjevo enačbo:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\psi(x,t) = 0$$
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Oziroma z zamenjavo spremenljivk:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

S pomočjo operatorja časovnega razvoja lahko pridemo do tele aproksimacije: Časovni razvoj spremljamo ob časih $t_n = n\Delta t$

$$\psi(x, t+\Delta t) \approx \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t}\psi(x,t)$$

Po kraju pa lahko območje, ki nas zanima diskretiziramo kot $x_j = a + j\Delta x$ $\Delta x = (b-a)/(N-1)$ in krajevni odvod aproksimiramo kot diferenco:

$$\psi''(x) = \frac{\psi^n_{j+1} - 2\psi^n_j + \psi^n_{j-1}}{\Delta x^2}$$

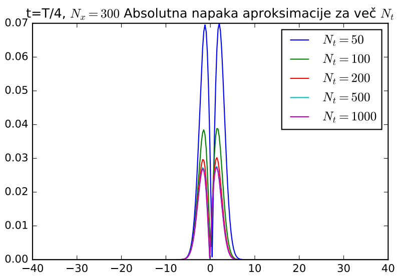
Kjer smo uvedli oznako $\psi(x_j, t_n) = \psi^n_j$

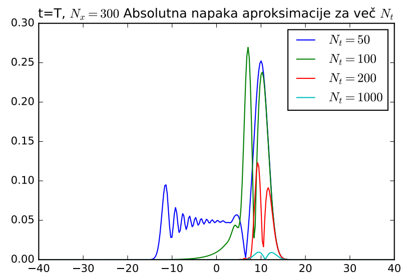
Ko ti aproksimaciji vstavimo v enačbo dobimo sistem enačb katerega lahko zapišemo v matrični obliki kot $A\psi^{n+1} = A^*\psi^n$, kjer je $\psi^n = (\psi^n_0, \psi^n_1, ..., \psi^n_{N-1})$ in kjer je A tridiagonalna matrika, z komponentami $A_{ii} = d_i$ in $A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = a$, kjer je $a = -i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}$ in $d_j = 1 - 2a + i\frac{\Delta t}{2}V(x_j)$

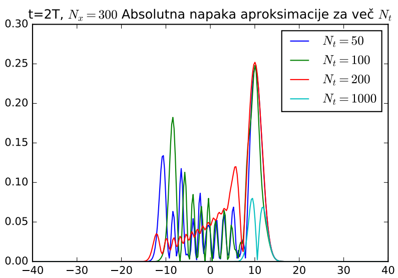
2 Reševanje

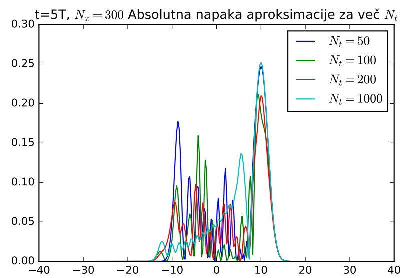
Naše začetno stanje je $\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\alpha^2(x-\lambda)^2/2}$ Nihajni čas je $T = 10\pi$, v nadaljevanju bom z N_x označeval na koliko delov sem diskretiziral po iksu, z N_t pa po času. Na vseh grafih je prikazana verjetnostna gostota torej $|\psi(x,t)|^2$

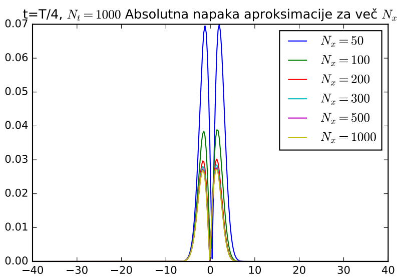
Poglejmo si najprej napake.

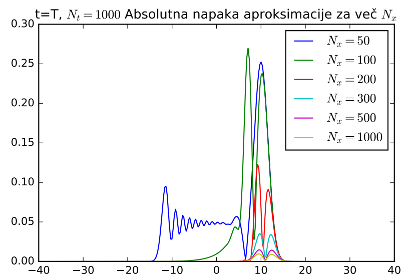

t=T/4, $N_x = 300$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_t
$N_t = 50$
$N_t = 100$
$N_t = 200$
$N_t = 500$
$N_t = 1000$

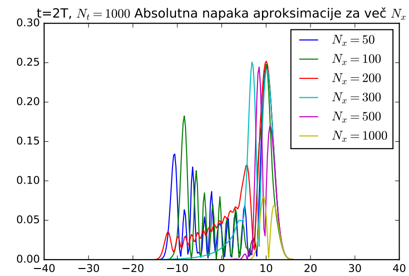

t=T, $N_x = 300$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_t
$N_t = 50$
$N_t = 100$
$N_t = 200$
$N_t = 1000$


t=2T, $N_x = 300$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_t
$N_t = 50$
$N_t = 100$
$N_t = 200$
$N_t = 1000$


t=5T, $N_x = 300$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_t
$N_t = 50$
$N_t = 100$
$N_t = 200$
$N_t = 1000$

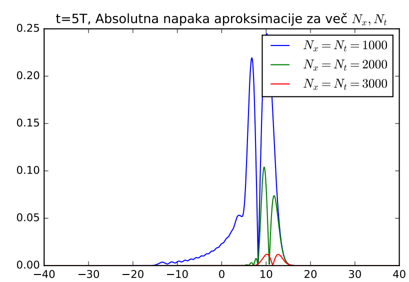

t=T/4, $N_t = 1000$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_x
$N_x = 50$
$N_x = 100$
$N_x = 200$
$N_x = 300$
$N_x = 500$
$N_x = 1000$


t=T, $N_t = 1000$ Absolutna napaka aproksimacije za več N_x
$N_x = 50$
$N_x = 100$
$N_x = 200$
$N_x = 300$
$N_x = 500$
$N_x = 1000$



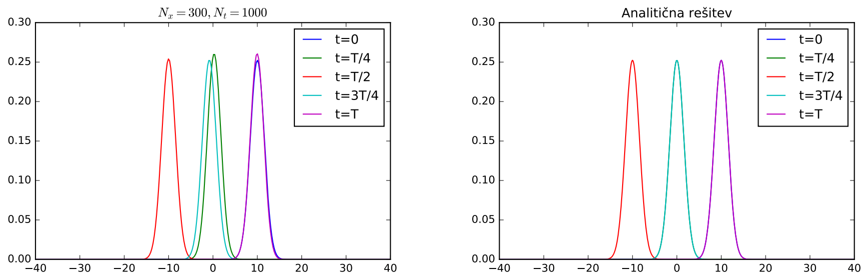
Vidimo torej, da (vsaj v območju do N je nekajkrat tisoč) večji N pomeni boljšo natančnost. Na začetku se razlika med recimo N=500 in N=1000 ne pozna, pri poznejših časih pa jo opazimo. Poleg tega pri poznejših časih(Po t=T) napaka tako naraste, da je metoda za te N-je čisto narobe.

Sedaj bom pogledal pri še večjih N-jih, da vidim kaj je z napako. Gledal bom pri času 5T, saj napaka očitno narašča s časom.

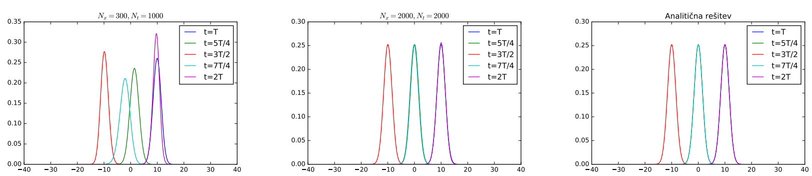


Očitno lahko torej še vedno dobimo zadovoljiv rezultat, le N mora biti toliko večji. Žal program potem tudi teče občutno več časa.

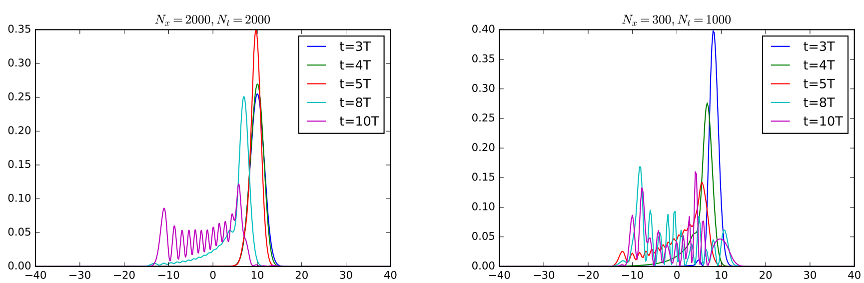
Naredimo sedaj nekaj plottov:



Vidimo, da v bistvu opazno metoda malo peša že tukaj

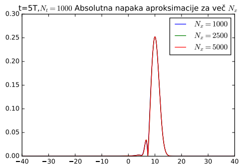


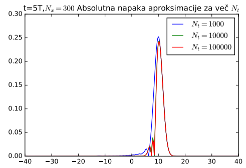
Veliki N-ji torej res pomagajo, a žal zelo upočasnijo izvedbo

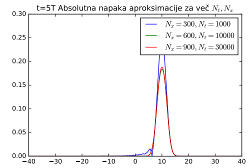


Pri večjem času tudi N=2000 odpove in bi morali vzeti še večji N in čakati še dalj časa

Kaj pa če močno povečamo le diskretizacijo po iksu oziroma času?





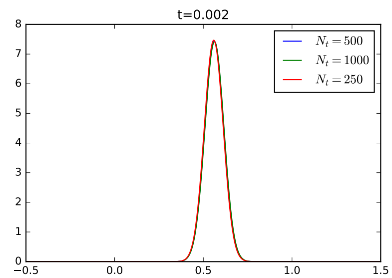


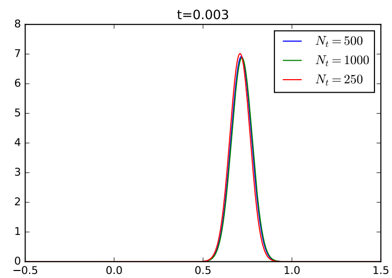
Ne izgleda veliko bolje

Poglejmo si naslednjo nalogo in sicer časovni razvoj gaussovega paketa:

$$\psi(x,0) = (2\pi\sigma_0^2)^{-0.25} e^{ik_0(x-\lambda)} e^{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2}$$

Kjer so $\sigma_0 = 1/20$, $k_0 = 50\pi$, $\lambda = 0.25$. Po navodilih bom pri reševanju vedno upošteval $\Delta t = 2\Delta x^2$





Najprej na hitro pogledam kako sprememba diskretizacije v času(in s tem tudi v kraju) vpliva na rešitev. Vidim, da ne veliko.