Numerieke Methoden
3de Bachelor Fysica

# Practicum 10: Partiële differentiaalvergelijkingen IV: Impliciete methoden

*Contact: jeroen.mulkers@uantwerpen.be U.305*

In practicum 7 hebben we als voorbeeld van een parabolische PDE de diffusievergelijking opgelost met het FTCS schema. In dit practicum gaan we nog een ander voorbeeld van een parabolische PDE behandelen, nl. de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking. Het FTCS schema is een expliciete methode. Om de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking op te lossen gaan we een impliciete methode gebruiken.

## 1 De Schrödinger vergelijking

De ééndimensionale tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking wordt gegeven door

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \tag{1}$$

met

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

De formele oplossing is

$$\psi(x,t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}Ht\right]\psi(x,0) \tag{3}$$

Het FTCS schema toepassen op (1) levert

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{j+1}^n + \psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n}{h^2} + V_j\psi_j^n$$

met $\psi_j^n \equiv \psi(x_j, t_n)$ en $V_j \equiv V(x_j)$. Omdat de Hamiltoniaan een lineaire operator is kunnen we voorgaande uitdrukking herschrijven als

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \sum_{k=1}^{N} H_{jk}\psi_k^n \tag{4}$$

met de matrix $\mathbf{H}$ de discrete vorm van de Hamiltoniaan

$$H_{jk} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\delta_{j+1,k} + \delta_{j-1,k} - 2\delta_{j,k}}{h^2} + V_j\delta_{j,k}$$

Uitdrukking (4) oplossen naar $\psi_j^{n+1}$ levert het te gebruiken numerieke schema, in matrix notatie wordt dit

$$\Psi^{n+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{i\tau}{\hbar}\mathbf{H}\right)\Psi^n \tag{5}$$

met $\Psi^n$ een kolomvector en $\mathbf{I}$ de eenheidsmatrix. Dit is het expliciete FTCS schema voor de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking. Omdat $e^{-z} \approx 1 - z$ kunnen we (5) interpreteren als het gebruiken van de eerste term in de Taylor ontwikkeling van (3) om de oplossing voor de volgende tijdsstap te berekenen.

## 2 Impliciete schema's

Het nadeel van het FTCS schema is dat het onstabiel is als de tijdsstap te groot wordt genomen. Een alternatieve aanpak is de volgende. Laten we de Hamiltoniaan eens inwerken op de *toekomstige waarde* voor $\psi$:

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \sum_{k=1}^{N} H_{jk}\psi_k^{n+1}$$

of

$$\Psi^{n+1} = \Psi^n - \frac{i\tau}{\hbar}\mathbf{H}\Psi^{n+1}$$

Oplossen naar $\Psi^{n+1}$ levert

$$\Psi^{n+1} = \left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{\hbar}\mathbf{H}\right)^{-1}\Psi^n \tag{6}$$

Dit is de *impliciete FTCS methode*. Beide schema's zijn uiteraard equivalent in de limiet $\tau \to 0$. Omdat $e^{-z} = 1/e^z \approx (1+z)^{-1}$ is (6) gewoon een alternatieve manier om de eerste term in de Taylor ontwikkeling van (3) te gebruiken om de oplossing voor de volgende tijdsstap te bekomen.

Deze nieuwe methode vereist de evaluatie van een matrix inverse. Dit is altijd zo bij impliciete schema's. Dit extra werk willen we natuurlijk enkel doen als het een groot voordeel oplevert. Het voordeel is dat impliciete schema's altijd stabiel zijn.

Uiteraard is een stabiel schema erg aantrekkelijk, maar de oplossing moet natuurlijk ook nog accuraat zijn. 't Is niet omdat de oplossing niet opblaast, dat de oplossing correct is. Een accurater schema is de *Crank-Nicolson methode.* Het neemt gewoon het gemiddelde van het expliciete en impliciete FTCS schema:

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\tau}=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}H_{jk}(\psi_k^n+\psi_k^{n+1})$$

Dit wordt in matrixvorm

$$\Psi^{n+1}=\Psi^n-\frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}(\Psi^n+\Psi^{n+1})$$

Oplossen naar $\Psi^{n+1}$ levert

$$\Psi^{n+1}=\left(\mathbf{I}+\frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)^{-1}\left(\mathbf{I}-\frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)\Psi^n \tag{7}$$

Een Padé-approximant voor de exponentiële functie is

$$e^{-z}\approx\frac{1-z/2}{1+z/2}$$

zodat we (7) opnieuw interpreteren als een alternatieve vorm voor het gebruiken van de formele oplossing (3). Merk op dat als $z$ imaginair is, dan is $(e^{-z})^*$ de inverse van $e^{-z}$, wat betekent dat $e^{-z}$ unitair is. De operator $\exp[-iHt/\hbar]$ in (3) is unitair. Van de drie beschouwde benaderingen voor de exponentiële functie, $1-z$,$1/(1+z)$ en $(2-z)/(2+z)$, bewaart enkel de Padé-approximant deze unitaire eigenschap.

# 3 Golfpakket voor een vrij deeltje

Vooraleer het programma te bestuderen dat het Crank-Nicolson schema implementeert voor de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking moeten we de BVW kiezen. We nemen een genormeerd Gaussisch golfpakket, de begingolffunctie is

$$\psi(x,t=0)=\frac{1}{\sqrt{\sigma_0\sqrt{\pi}}}e^{ik_0x}e^{-(x-x_0)^2/2\sigma_0^2}$$

gecenterd rond $x_0$ , met breedte $\sigma_0$ en met impuls $p_0=\hbar k_0$. Een Gaussisch golfpakket heeft de bijzondere eigenschap dat het product $\Delta x\Delta p$ gelijk is aan de minimale theoretische waarde $\hbar/2$.

In de vrije ruimte (dus $V(x)=0$) evolueert de golffunctie in de tijd als

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{\sigma_0\sqrt{\pi}}}\frac{\sigma_0}{\alpha}e^{ik_0(x-p_0t/m)}e^{-(x-x_0-p_0t/m)^2/2\alpha^2}$$

met $\alpha^2 = \sigma_0^2 + i\hbar t/m$. De waarschijnlijkheidsdichtheid $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ is

$$P(x,t) = \frac{\sigma_0}{|\alpha|^2\sqrt{\pi}} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_0}{|\alpha|}\right)^4 \frac{(x - x_0 - p_0 t/m)^2}{\sigma_0^2}\right]$$

en blijft dus Gaussisch in de tijd. De piek verplaatst zich in de tijd als $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx = x_0 + p_0 t/m$. De breedte van de piek neemt toe als

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{\left(\frac{|\alpha|}{\sigma_0}\right)^4} = \sigma_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma_0^4}}$$

# 4 Het programma

Het programma schro.m lost de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking op gebruik makende van het Crank-Nicolson schema. Het algoritme gaat als volgt:

- Initialiseer de parameters $(h, \tau, \ldots)$
- Creëer de matrix $\mathbf{H}$.
- Bereken de Crank-Nicolson matrix $(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H})^{-1}(\mathbf{I} - \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H})$. Initialiseer de begingolffunctie.
- Plot de begingolffunctie (reëel en imaginair gedeelte).
- Initialiseer de loop en de plot variabelen.
- Loop over het gewenste aantal stappen (**totdat het golfpakket terug op de beginpositie uitkomt**).
  - Bereken de nieuwe golffunctie m.b.v. de Crank-Nicolson matrix.
  - Houd regelmatig waarden bij om te plotten.
- Plot de waarschijnlijkheid $P(x,t)$ voor verschillende tijden.

De eerste en laatste rij van de matrix $\mathbf{H}$ verdienen speciale aandacht. Als we kiezen voor periodische RVW worden ze gegeven door

$$\begin{aligned} H_{1,k} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta_{2,k} + \delta_{N,k} - 2\delta_{1,k}}{h^2} \\ H_{N,k} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta_{1,k} + \delta_{N-1,k} - 2\delta_{N,k}}{h^2} \end{aligned}$$

# 5 Opgave

1. Bestudeer het programma schro.m. Om een goed resultaat te krijgen heb je een groot aantal gridstappen nodig. Dit kan echter leiden tot zeer grote matrices en dus tot geheugenproblemen. Bovendien neemt de tijd om een $N \times N$ matrix te inverteren snel toe als $N^3$. Deze problemen kunnen vermeden worden als we er rekening mee houden dat de matrix $\mathbf{H}$ *sparse* is. We moeten dan de nullen niet opslaan in het geheugen. Het berekenen van een inverse kunnen we vermijden als we het Crank-Nicolson schema als volgt herschrijven:

$$\begin{aligned}
\Psi^{n+1} &= \left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)^{-1}\left(\mathbf{I} - \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)\Psi^n \\
&= \left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)^{-1}\left[2\mathbf{I} - \left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)\right]\Psi^n \\
&= \left[2\left(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\mathbf{H}\right)^{-1} - \mathbf{I}\right]\Psi^n \\
&= (\mathbf{Q}^{-1} - \mathbf{I})\Psi^n \\
&= \mathbf{Q}^{-1}\Psi^n - \Psi^n
\end{aligned}$$

   met $\mathbf{Q} = \frac{1}{2}[\mathbf{I} + (i\tau/2\hbar)\mathbf{H}]$. De berekening van de matrix inverse kan nu vermeden worden door eerst het stelsel

$$\mathbf{Q}\chi = \Psi^n$$

   op te lossen en dan de oplossing te updaten via

$$\Psi^{n+1} = \chi - \Psi^n$$

   Nu moeten we wel geen inverse berekenen, maar wel elke tijdsstap opnieuw een stelsel oplossen. Deze methode zal in het algemeen dus zeker niet sneller zijn. Echter misschien wel als we gebruik maken van het feit dat $\mathbf{Q}$ sparse is.
   Implementeer deze methode (dus rekening houdend met het feit dat $\mathbf{Q}$ sparse is) en vergelijk de snelheid met de vorige methode bv. voor $\tau = 0.1$ en $N = 1000$. Herhaal dit voor bv. $N = 2000$.

2. Vervang de periodische RVW door Dirichlet RVW $\psi(x = \pm L/2, t) = 0$. Dit komt overeen met een deeltje in een oneindig diepe put.

3. Verander de BVW nu eens door
   - de grondtoestand van een oneindig diepe put.

- de grondtoestand plus de eerste geëxciteerde toestand van een oneindig diepe put.

4. Verander het programma met de periodische RVW zodat het de potentiaal $V(x) = U\delta(x - L/2)$ bevat. Bekijk het resultaat voor verschillende waarden van de amplitude $U$ (groter en kleiner dan de energie $E$ van het deeltje).

5. Bestudeer de verstrooiing aan een potentiaalberg.