Visje racunske metode – Naloga 1

Marcel Čampa

27. februar 2019

1 Metode

Uporabili smo tri metode za numericno resevanje parcialnih diferencialnih enacb.

1.1 Metoda koncnih diferenc

Najosnovnejsa metoda, pri kateri odvode aproksimiramo z izrazitvijo iz Taylorjeve vrste. Pri diskretizaciji naravno vzamemo, da sta clena i in $i+1$ za h narazen, kjer je h iz Taylorjevega razvoja, ki si ga lahko izberemo sami. Tako dobimo formulo za casovni korak

$$\psi_{m,n+1} = \psi_{m,n} + i\tau \left\{ \frac{1}{2h^2}(\psi_{m+1,n} + \psi_{m-1,n}) - 2\psi_{m,n}) - V_m \psi_{m,n} \right\}. \tag{1}$$

1.2 Skoki s koncnim propagatorjem

Ce razvijemo propagator za koncni korak τ v vrsto, dobimo

$$\psi_{m,n+1} = \left\{ \exp(-i\tau \bar{H})\psi \right\}_{m,n} = \sum_{k=0}^{K} \frac{(-i\tau)^k}{k!} (\bar{H}^k \psi)_{m,n}, \tag{2}$$

kjer si K izberemo poljubno. Seveda velja, da vecji kot je K, manjsa je napaka, ki je reda $\mathcal{O}(\tau^{K+1})$. Mi smo si izbrali $K = 10$.

1.3 Implicitna shema

Tokrat propagator aproksimiramo z

$$\exp(-i\tau \bar{H}) = \left(1 + i\frac{\tau}{2}\bar{H}\right)^{-1} \left(1 - i\frac{\tau}{2}\bar{H}\right).$$

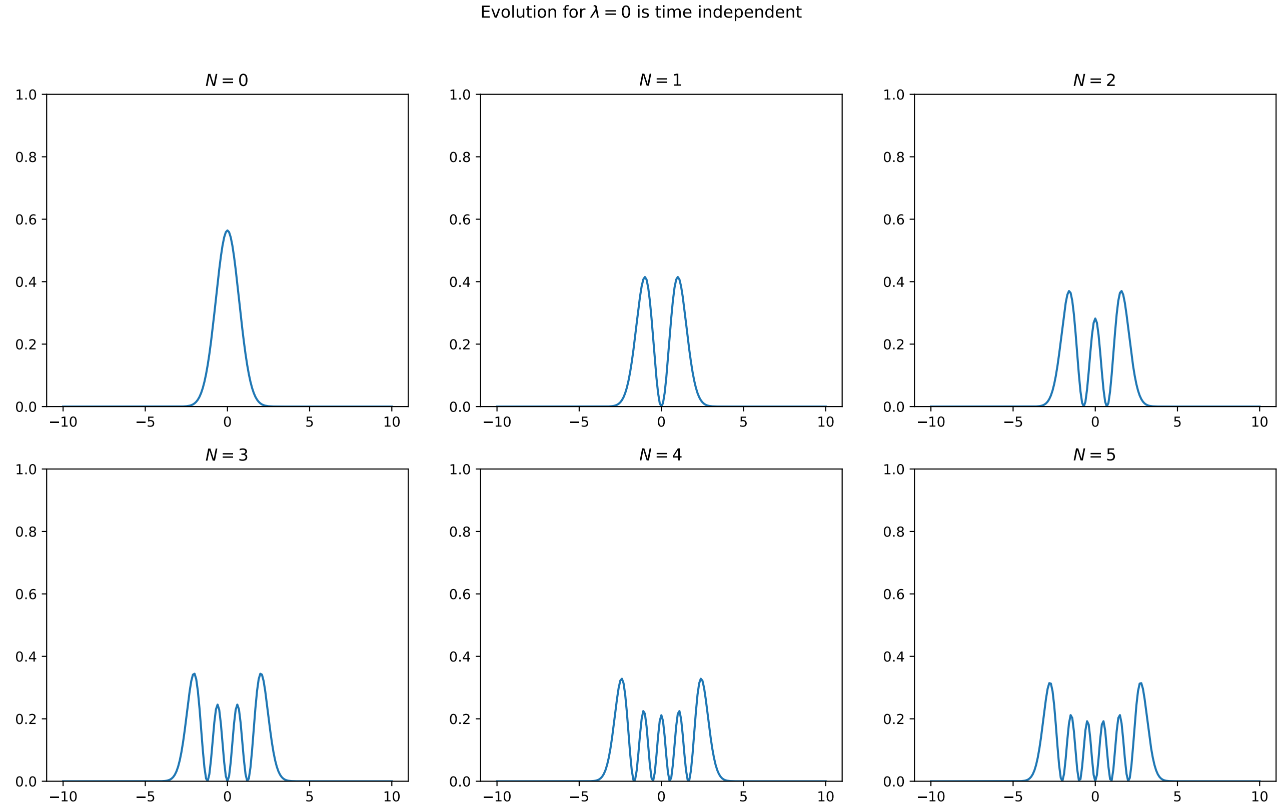
Napaka aproksimacije je reda $\mathcal{O}(\tau^3)$. Ta aproksimacija je se posebej dobra zato, ker je tudi unitaren operator, zaradi cesa bo ψ se vedno ostala pravilne oblike. Ce sedaj zapisemo casovni razvoj s koncnimi diferencami, dobimo implicitno enacbo

$$\begin{aligned} \psi_{m,n+1} - \frac{i\tau}{4} \left\{ \frac{1}{h^2}(\psi_{m+1,n+1} + \psi_{m-1,n+1} - 2\psi_{m,n+1}) - 2V_m \psi_{m,n+1} \right\} = \\ = \psi_{m,n} + \frac{i\tau}{4} \left\{ \frac{1}{h^2}(\psi_{m+1,n} + \psi_{m-1,n} - 2\psi_{m,n}) - 2V_m \psi_{m,n} \right\}, \end{aligned}$$

kar lahko zapisemo s tridiagonalno matricno enacbo

$$\begin{bmatrix} 1 + \frac{i\tau}{2h^2} + \frac{i\tau}{2}V_1 & -\frac{i\tau}{4h^2} & & & \\ -\frac{i\tau}{4h^2} & 1 + \frac{i\tau}{2h^2} + \frac{i\tau}{2}V_2 & -\frac{i\tau}{4h^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{i\tau}{4h^2} & 1 + \frac{i\tau}{2h^2} + \frac{i\tau}{2}V_{m-1} & -\frac{i\tau}{4h^2} \\ & & & -\frac{i\tau}{4h^2} & 1 + \frac{i\tau}{2h^2} + \frac{i\tau}{2}V_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1,n+1} \\ \psi_{2,n+1} \\ \vdots \\ \psi_{m,n+1} \end{bmatrix} = \text{RHS}, \tag{3}$$

kjer je RHS enako desni strani v enacbi 1.



Slika 1: Valovna funkcija je pri $\lambda = 0$ konstantno enaka zacetni funkciji $\phi_N(x)$.

2 Naloge

Naloga 1

Obravnavali smo anharmonski oscilator

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4.$$

Za zacetno valovno funkcijo smo vzeli razlicne lastne funkcije harmonskega oscilatorja

$$\phi_N(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^N N!}} H_N(x) \exp(-x^2/2),$$

kjer je $H_N(x)$ N-ti Hermitov polinom, ki ga v Pythonu izracunamo s pomocjo ze implementirane funkcije za Hermitovo vrsto `numpy.polynomial.hermite.hermval(x, c)`.

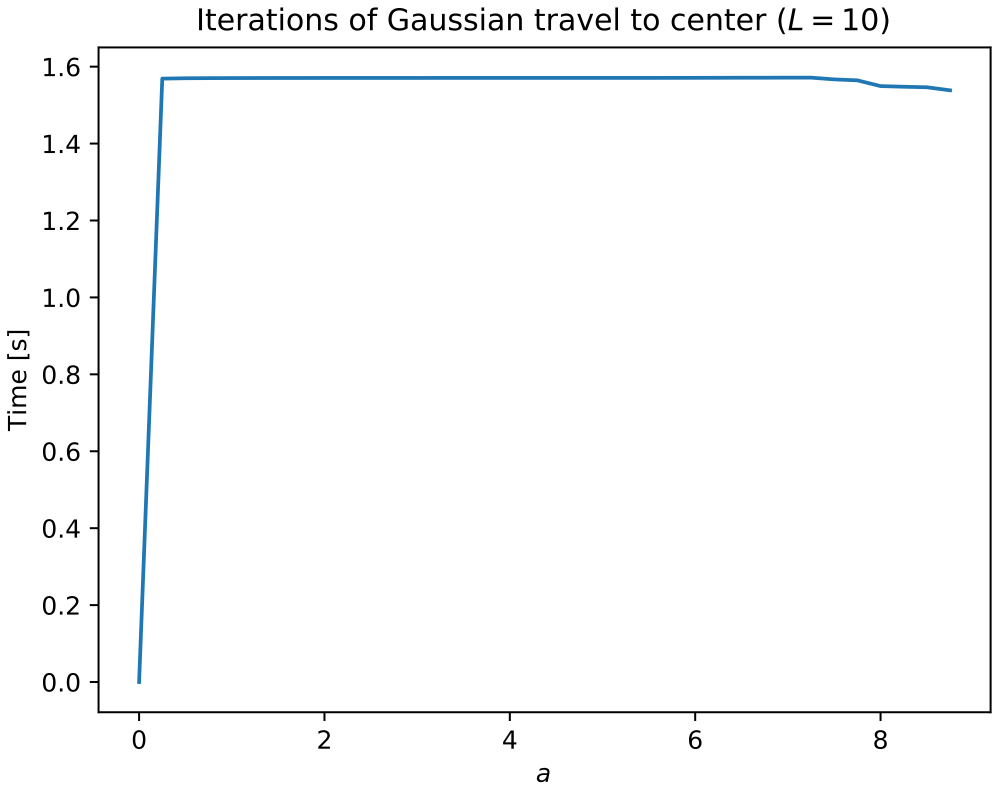
Implementirali smo vse tri zgoraj opisane metode, vendar dobro deluje le zadnja, ki je unitarna, pri vseh ostalih prej ali slej stvar zdivergira v neskoncno. Za $\lambda = 0$ dobimo tako, da se v casu stvar sploh ne razvija, kar sledi iz premisleka, da je zacetna funkcija $\varphi_N(x)|_{\lambda=0}$ lastna funkcija operatorja $\hat{H}$, kar pomeni, da se ne spreminja s casom. Omenjeno stanje prikazuje slika 1.

Poleg tega smo naredili dve animaciji casovnega razvoja. Obe prikazujeta casovni razvoj pri $N = 0, 1, \ldots, 5$ in $\lambda = 0, 0.25, 0.5$, pri eni na isti plot risemo razvoje z istim N (`naloga1_N.mp4`), pri drugi pa razvoje z isto λ (`naloga1_lambda.mp4`).

2.1 Naloga 2

Ta naloga je bila zelo podobna prejsnji, le da smo sedaj premaknili stvar za $a > 0$ v desno, torej smo za zacetno funkcijo vzeli $\phi_0(x - a)$. Vzeli smo $a = 5$, saj smo ves cas delali na intervalu $[-10, 10]$, veljati pa mora $L - a \gg 1$. Nato smo pocasi spreminjali λ, in sicer smo vzeli $\lambda \in \{0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5\}$. Stvar je pricakovano postajala vedno bolj kaoticna, casovno evolucijo pa prikazuje animacija `naloga2.mp4`.

Pri tej nalogi pa smo si dali malo duska. Vzeli smo zacetno stanje $\phi_0(x)$ in naredili dve odvisnosti:



Slika 2: Odvisnost potovanja vrha valovne funkcije do $x = 0$ v odvisnosti od a pri $L = 10$. Opazimo, da se pri $a = 7$, torej $L - a = 3$ zacne dogajati napaka zaradi nezanemarljive ploscine pod Gaussovko. $a = 0, 0.25, 0.50, 0.75, \ldots, 8.50, 8.75$.

1. Cas, da pride maksimum valovne funkcije v $x = 0$ v odvisnosti od L, pri cemer smo vzeli $a = L/2$.
2. Cas, da pride maksimum valovne funkcije v $x = 0$ pri konstantnem $L = 10, 20$ v odvisnosti od a. Tu seveda zaradi pogoja $L - a \gg 1$ nismo racunali za a „prevec" blizu L.

Dobili smo tocno take rezultate, ki smo jih pricakovali. Stvar je pri konstantnem L neodvisna od izbire a za $a > 0$, kar nam je jasno po preprostem premisleku, da vecji kot je a, vecji je potencial, torej posledicno vecja sila in hitrost potovanja vrha. To je lepo razvidno s slike 2.

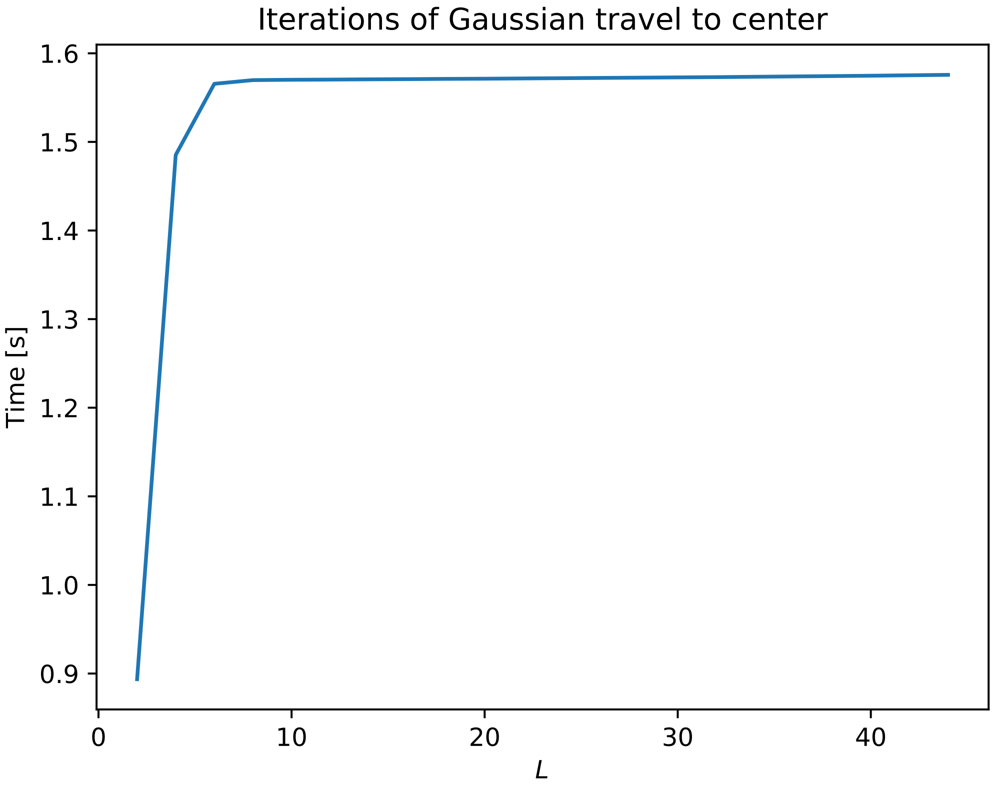
Ta in naslednji rezultat sta precej ocitna tudi z matematicnega vidika, saj je

$$\int_{-\infty}^{-3} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x + \int_{3}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x < 0.003$$

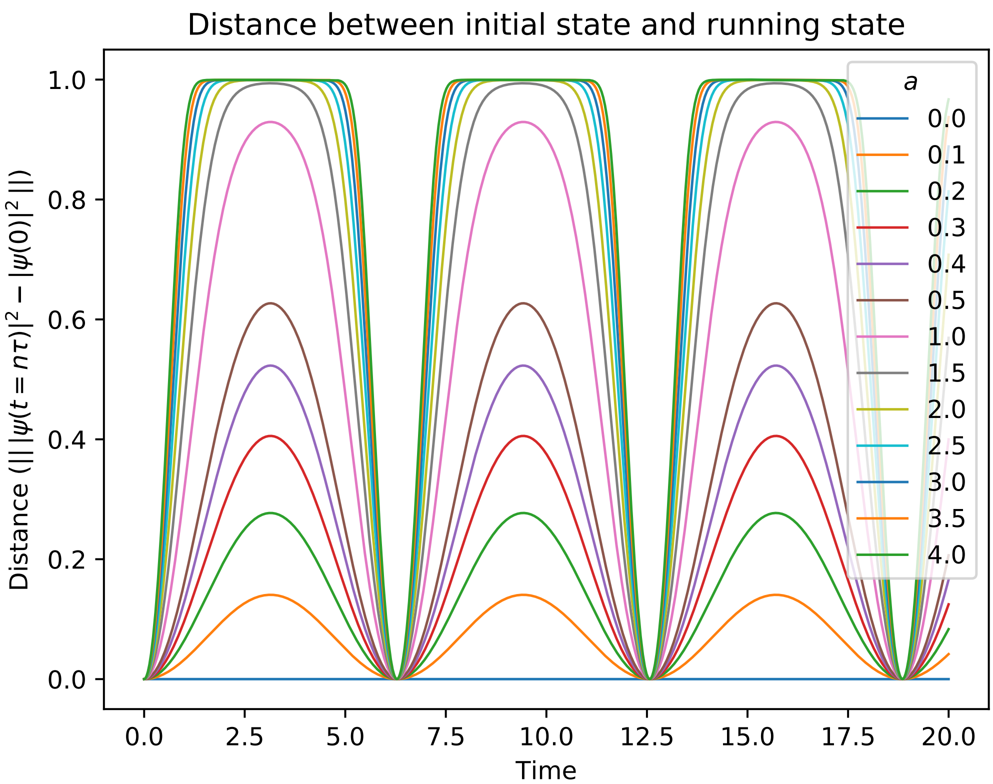
kar pomeni, da ce vzamemo $L - a = 3$ ali pa $L - a = 100$, ne naredimo skoraj nobene razlike. To je razvidno s slike 3.

Ce pa pogledamo animaciji `naloga2_L10_a1.mp4` in `naloga2_L10_a5.mp4` pa vidimo, da se napaka zaradi zanemarjanja Gaussovke izven $[-L, L]$ in diskretizacije intervala pocasi nabira (pri $a = 5$ v bistvu kar precej hitro). Za boljso natancnost oziroma daljsi cas do opazljive napake bi morali vzeti vecji h in L, vendar bi na tako slabi masini, kot jo imam, izracun trajal celo vecnost, zato tega nisem storili.

Naredili pa smo se graf razlike med tekoco valovno funkcijo in zacetno, kjer se lepo vidi, da je perioda neodvisna od a za $L - a \gg 1$. Zasicenje okrog vrednosti $y = 1$ pa se zgodi zato, ker je prekrivanje med ploscino pod tekoco valovno funkcijo in zacetno za dovolj velik a vmes skoraj nicelno. Graf oddaljenosti smo normirali, tako vrednost $y = 1$ pomeni, da valovni funkciji nimata skupne ploscine, ceprav je tam razlika ploscine dejansko 2 (1 za vsako). Graf je prikazan na sliki 4.



Slika 3: Odvisnost casa, da pride maksimum valovne funkcije do $x = 0$ v odvisnosti od L (in $a = L/2$). Rezultati so pricakovani, ce ne upostevamo nenatancnosti pri majhnih L.



Slika 4: Razlika med tekoco valovno funkcijo in zacetno v odvisnosti od a in iteracije. Zlahka vidimo, da je perioda neodvisna od a, kar smo ze dvakrat premislili v tekstu.