

DIFERENČNE METODE ZA PDE

Deseta naloga pri predmetu Matematično-fizikalni praktikum

Gašper Lotrič, 28191019

13. januar 2022

Kazalo

1 Uvod	2
1.1 Naloga	3
1.2 Dodatna naloga	3
2 Razvoj koherentnega stanja	4
2.1 Gibanje težišča	4
2.2 Spreminjanje ploščine	5
2.3 Napaka numerične metode	5
3 Prost Gaussov valovni paket	6
3.1 Gibanje težišča	7
3.2 Spreminjanje ploščine GVP	7
3.3 Napaka	8
4 Zaključek	8

1 Uvod

Enorazsežna nestacionarna Schödingerjeva enačba

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

je osnovno orodje za nerelativistični opis časovnega razvoja kvantnih stanj v različnih potencialih. Tu obravnavamo samo od časa neodvisne hamiltonske operatorje

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

Z menjavo spremenljivk $H/\hbar \mapsto H$, $x\sqrt{m/\hbar} \mapsto x$ in $V(x\sqrt{m/\hbar})/\hbar \mapsto V(x)$, efektivno postavimo $\hbar = m = 1$,

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

Razvoj stanja $\psi(x, t)$ v stanje $\psi(x, t + \Delta t)$ opišemo s približkom

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

ki je unitaren in je reda $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Območje $a \leq x \leq b$ diskretiziramo na krajevno mrežo $x_j = a + j\Delta x$ pri $0 \leq j < N$, $\Delta x = (b - a)/(N - 1)$, časovni razvoj pa spremljamo ob časih $t_n = n\Delta t$. Vrednosti valovne funkcije in potenciala v mrežnih točkah ob času t_n označimo $\psi(x_j, t_n) = \psi_j^n$ oziroma $V(x_j) = V_j$. Krajevni odvod izrazimo z diferenco

$$\Psi''(x) \approx \frac{\psi(x + \Delta x, t) - 2\psi(x, t) + \psi(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} = \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2}.$$

Ko te približke vstavimo v enačbo (2) in razpišemo Hamiltonov operator po enačbi (1), dobimo sistem enačb

$$\psi_j^{n+1} - i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} [\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}] + i\frac{\Delta t}{2} V_j \psi_j^{n+1} = \psi_j^n + i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} [\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n] - i\frac{\Delta t}{2} V_j \psi_j^n,$$

v notranjih točkah mreže, medtem ko na robu ($j \leq 0$ in $j \geq N$) postavimo $\psi_j^n = 0$. Vrednosti valovne funkcije v točkah x_j uredimo v vektor

$$\Psi^n = (\psi_1^n, \dots, \psi_{N-1}^n)^T$$

in sistem prepišemo v matrično obliko

$$\mathbf{A}\Psi^{n+1} = \mathbf{A}^*\Psi^n, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} d_1 & a & & & \\ a & d_2 & a & & \\ & a & d_3 & a & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a & d_{N-2} & a \\ & & & & a & d_{N-1} \end{pmatrix},$$

kjer je

$$b = i \frac{\Delta t}{2\Delta x^2}, \quad a = -\frac{b}{2}, \quad d_j = 1 + b + i \frac{\Delta t}{2} V_j.$$

Dobili smo torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku, da iz stanja Ψ^n dobimo stanje Ψ^{n+1} . Matrika A in vektor Ψ imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki¹.

1.1 Naloga

Spremljaj časovni razvoj začetnega stanja

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2(x-\lambda)^2/2}$$

v harmonskem potencialu $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, kjer je v naravnih enotah $\alpha = k^{1/4}$, $\omega = \sqrt{k}$. Analitična rešitev je koherentno stanje

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\xi - \xi_\lambda \cos \omega t)^2 - i \left(\frac{\omega t}{2} + \xi \xi_\lambda \sin \omega t - \frac{1}{4} \xi_\lambda^2 \sin 2\omega t \right) \right],$$

kjer je $\xi = \alpha x$, $\xi_\lambda = \alpha \lambda$. Postavi parametre na $\omega = 0.2$, $\lambda = 10$. Krajevno mrežo vpni v interval $[a, b] = [-40, 40]$ z $N = 300$ aktivnimi točkami. Nihajni čas je $T = 2\pi/\omega$ – primerno prilagodi časovni korak Δt in stanje opazuj deset period.

Opazuj še razvoj gaussovskega valovnega paketa

$$\psi(x, 0) = (2\pi\sigma_0^2)^{-1/4} e^{ik_0(x-\lambda)} e^{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0^2)}$$

v prostoru brez potenciala. Postavi $\sigma_0 = 1/20$, $k_0 = 50\pi$, $\lambda = 0.25$ in območje $[a, b] = [-0.5, 1.5]$ ter $\Delta t = 2\Delta x^2$. Časovni razvoj spremljaj, dokler težišče paketa ne pride do $x \approx 0.75$. Analitična rešitev je

$$\psi(x, t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1+it/(2\sigma_0^2)}} \exp \left[\frac{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0^2) + ik_0(x-\lambda) - ik_0^2 t/2}{1+it/(2\sigma_0^2)} \right]$$

1.2 Dodatna naloga

Z uporabljenim približkom za drugi odvod reda $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ dobimo tridiagonalno matriko. Z diferencami višjih redov dobimio večdiagonalno (pasovno) matriko, a dosežemo tudi večjo krajevno natančnost. Diference višjih redov lahko hitro izračunaš na primer v Mathematici s funkcijo

```
FD[m_,n_,s_] := CoefficientList[Normal[Series[x^s Log[x]^m, {x, 1, n}]/h^m], x];
```

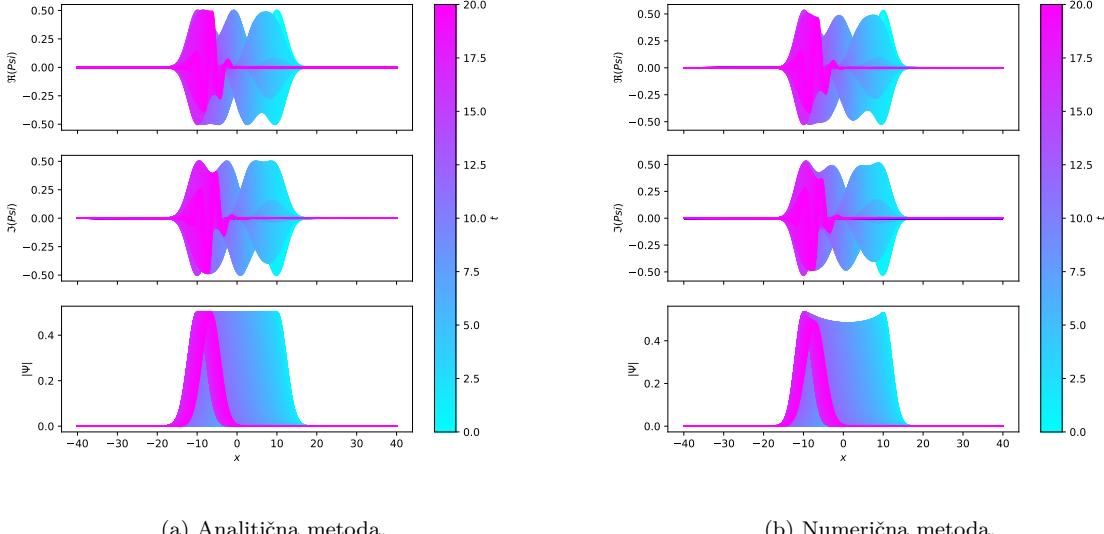
kjer je m red diference (odvoda), n število intervalov širine $h = \Delta x$, ki jih diferenca upošteva, in s število intervalov med točko, kjer differenco računamo, in skrajno levo točko differenčne sheme. Zgornjo tritočkovno sheme za drugo differenco dobimo kot $FD[2, 2, 1]$, saj se razpenja čez $n=2$ intervala, sredinska točka pa je v točki z indeksom $s=1$.

Tudi korakanje v času je mogoče izboljšati z uporabo Padéeve aproksimacije za eksponentno funkcijo, glej [1] in/ali predavanja.

¹#include <complex.h> v c, #include <complex> v c++, from cmath import * za kompleksne funkcije v Pythonu (sama kompleksna aritmetika pa je vgrajena).

2 Razvoj koherentnega stanja

V prvem delu naloge bom opazoval časovni razvoj koherentnega začetnega stanja v harmonskem potencialu. Parametre sem nastavil kot jih priporoča navodilo, da se lepo vidi časovno dogajanje. Primerjal sem diferenčno metodo (slika 1b) z analitično rešitvijo problema (slika 1a).

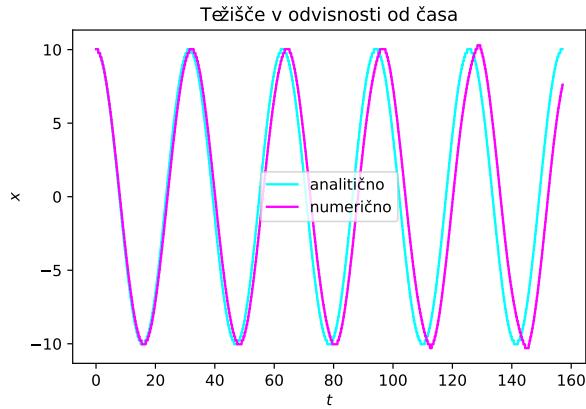


Slika 1: Časovni razvoj valovnega paketa v harmoničnem potencialu.

Pri analitični rešitvi na levi strani (1a) vidimo, kaj bi se moglo dogajati. Potencial se premika iz desne proti levi in se na koncu odbije nazaj. Ves čas ohranja višino. Za razliko od tega se pa pri numerični rešitvi vrednost potenciala spreminja. Opazimo lahko zmanjšanje na sredini nihaja in naraščanje na drugi strani. Pozorno oko opazi, da bo imel naslednji nihaj še večjo 'luknjo' na sredini. V nadaljevanju bom večinoma opazoval absolutno vrednost $|\Psi|$.

2.1 Gibanje težišča

Prepričajmo se, da je se potencial res giblje, kot smo predvideli. Spremljal sem gibanje težišča valovnega paketa za prvih pet nihajev.

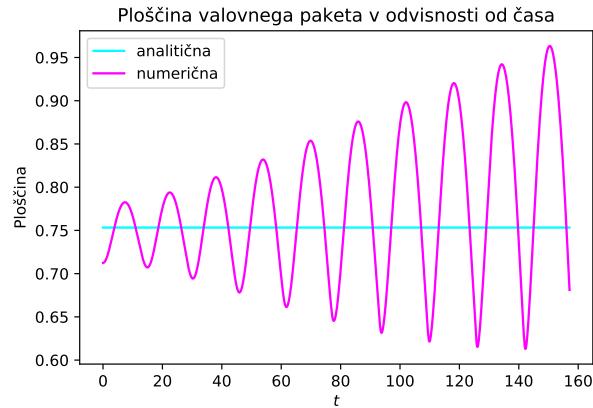


Slika 2: Gibanje težišča valovnega paketa po harmonskem potencialu

Na sliki 2 vidimo, kako se giblje težišče za obe rešitvi. Numerična rešitve vedno bolj zamuja za analitično.

2.2 Spreminjanje ploščine

Poglejmo si, če lahko bolj natančno opredelimo dogajanje, ki smo ga opazili kot višanje in nižanje valovnega paketa. Spremljal bom, kaj se dogaja s ploščino valovnega paketa med nihanjem (??).

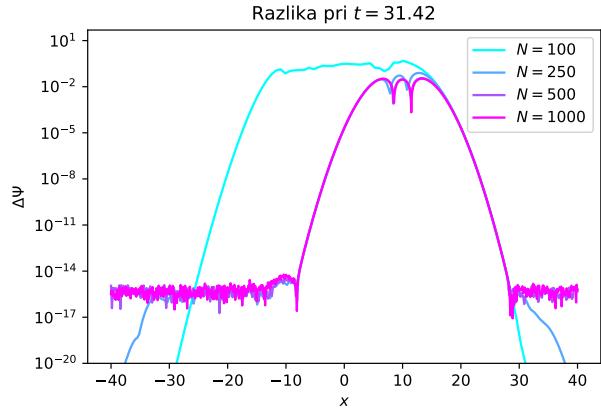


Slika 3: Velikost ploščine valovnega paketa v odvisnosti od časa.

Pri analitični rešitvi ploščina valovnega paketa ostaja enaka začetni vrednosti, pri numerični implementaciji pa ta vrednost vedno bolj izrazito niha okrog začetne vrednosti.

2.3 Napaka numerične metode

Pogledal si bom še absolutno napako numerične metode po celiem območju glede na analitično rešitev.

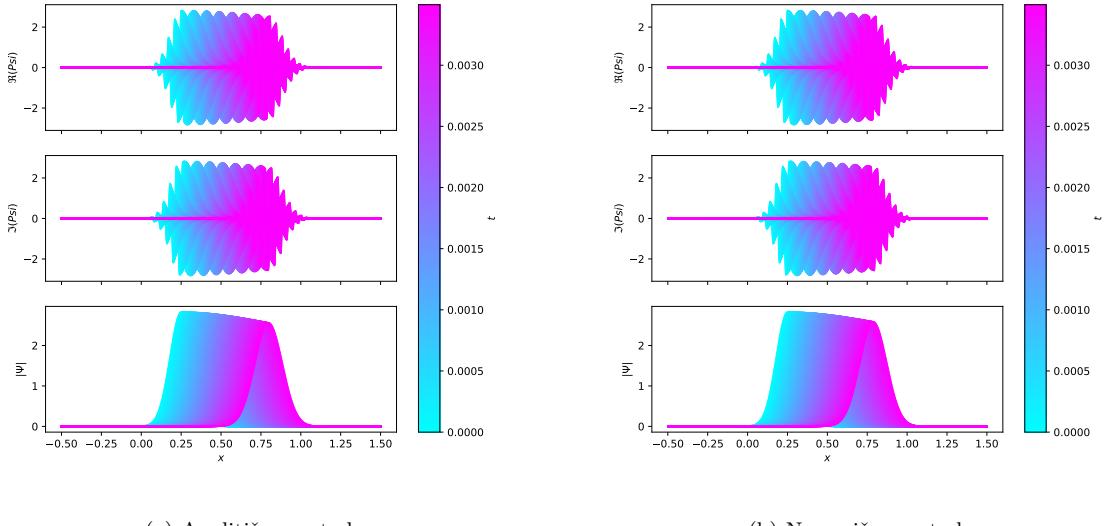


Slika 4: Napaka numerične metode za različne N po enem nihaju $t = 31.42$ po začetku v logaritemski skali.

Valovni paket naj bi se nahajal na začetnem mestu pri $x = 10$. Napaka je največja pri vrhu valovnega paketa in dokaj počasi pada z manjšanjem Δx oz. večanjem N .

3 Prost Gaussov valovni paket

V nadaljevanju naloge pa bom raziskal še obnašanje prostega Gaussovega valovnega paketa (GVP). Kot prej sem primerjal analitično (slika 5a) z numerično rešitvijo (slika 5b).

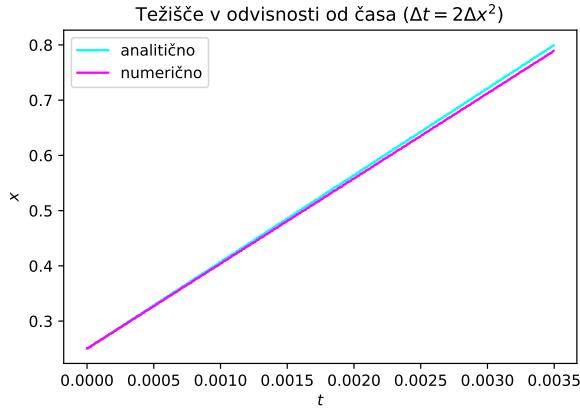


Slika 5: Časovni razvoj prostega Gaussovega valovnega paketa.

Dogajanje je zdaj veliko bolj podobno v obeh primerih, kot je bilo v primeru s harmoničnim potencialom. Kvalitativne razlike pravzaprav niso opazne. Pri analitični in prav tako numerični rešitvi se valovni paket razširi in zniža.

3.1 Gibanje težišča

Poglejmo si, kako se giblje težišče GVP, če je v prostoru brez potenciala.

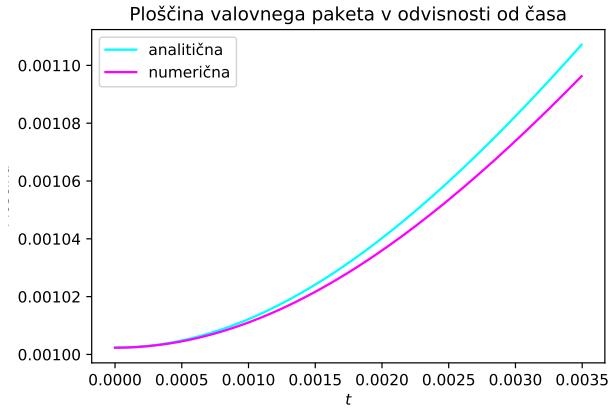


Slika 6: Gibanje težišča prostega Gaussovega valovnega paketa.

Na sliki 6 vidimo, da se težišče v obeh primerih giblje s konstantno hitrostjo v desno. Razlika v hitrostih je minimalna. Za drugačne Δt , bi verjetno lahko opazili večjo razliko.

3.2 Spreminjanje ploščine GVP

Opaženo nižaje in širjenje valovnega paketa poglejmo še natančneje. Spreminjanje ploščine skozi čas sem izračunal še za prost GVP.

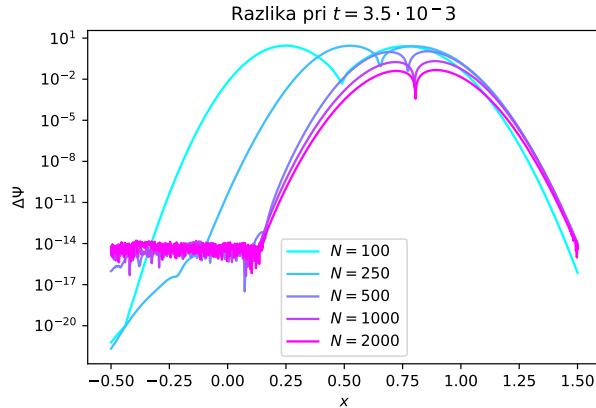


Slika 7: Velikost ploščine prostega Gaussovega valovnega paketa v odvisnosti od časa.

Na sliki 7 lahko vidimo, da ploščina narašča od začetka s kvadratom časa, potem pa se nekoliko upočasni razmerje postane bolj linearne. Pogledal sem si še, kaj se zgodi na koncu, saj ploščina GVP-ja ne more naraščati kar v nedogled. Izkaže se, da analitični rešitvi ploščina po $t = 0.015$ strmo pada proti ničli, numerična ploščina pa se obnaša čudno in zaniha.

3.3 Napaka

Na sliki 8 je še absolutna napaka numerične metode za časovni razvoj prostega GVP ob času $t = 3.5 \cdot 10^{-3}$.



Slika 8: Napaka numerične metode za različne N po $t = 3.5 \cdot 10^{-3}$ v logaritemski skali.

Napaka spet ne pada prav hitro gelde na višanje parametra N , lepo pa je opazno, da se končni položaj težišča (vdrtina na vrhu grafa napake) premika vedno bolj proti desni. Iz tega lahko sklepam, da se hitrost širjenja GVP vedno bolj približuje analitični.

4 Zaključek

Metoda je zaradi uporabe matrik dokaj počasna in natančnost ne narašča bistveno z manjšanjem koraka Δx . Verjetno bi natančnost lahko drastično izboljšali z uporabo diferenc višjih redov.

Literatura

- [1] W. van Dijk, F. M. Toyama, Phys. Rev. E **75**, 036707 (2007).