



# 10. naloga

## IVP PDE z diferenčnimi metodami

---

Ma-Fi praktikum 2021/22



# Parcialne Diferencialne Enačbe (dalje)

- Danes bomo naše znanje o reševanju parcialni diferencialnih enačb z začetnimi pogoji razširili še na pristop s '**klasičnimi**' differenčnimi metodami.
  - Pogledali bomo zglede **difuzijske enačbe** in **valovne enačbe**, doma vas čaka (spet) Schrödingerjeva enačba kot varianta difuzijske enačbe...
  - V bistvu bomo reciklirali pristop iz že znanih postopkov, pomembna tema danes je **stabilnost**, pač glede na izbiro **velikosti korakov** (korakamo v več smeri!).



# Difuzijska enačba (ponovimo)

- Naš prvi današnji zgled za difuzijsko enačbo bo (spet) difuzijska enačba:
  - polje  $u(x, t)$  v razsežni plasti s končno debelino  $a$  v smeri  $x$  je podano s s difuzijsko formulo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Q$$

- Ne gre pa pozabiti, da za specifično rešitev le-tega potrebujemo tudi ustrezne **začetne in robne pogoje**:

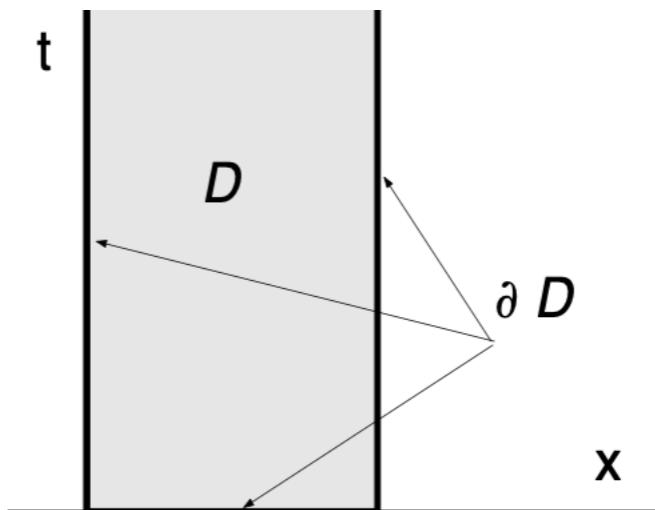
Za konstantne r.p. lahko vedno vpeljemo transformacijo do **homogenih r.p. (!)**

$$u \mapsto u - \left( g_0 + \frac{g_1 - g_0}{a} x \right) \longrightarrow$$

$$u(x, t=0) = f(x)$$

$$u(x=0, t) = g_0(t)$$

$$u(x=a, t) = g_1(t)$$



- Lahko bi se še bolj potrudili in napisali formulo brezdimenzijsko....

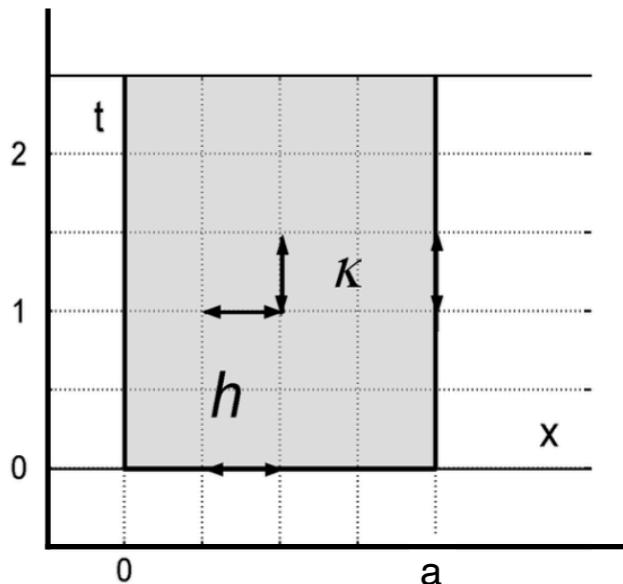


# Diskretizacija...

- Zdaj že dobro znan korak v numeričnem reševanju je, da diskretiziramo vrednosti iskane funkcije  $u(x,t)$  v vrednosti na mreži:
  - Za merjenje časa si moramo izbrati nek maksimalni čas  $T_{\max}$  ...

$$x_m = mh, \quad m = 0, 1, \dots, M, \quad (h = \frac{a}{M})$$

$$t_n = n\kappa, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (\kappa = \frac{T_{\max}}{N})$$



- Kar takoj lahko pomislimo, da morata biti **velikosti obeh korakov soodvisni..**
- Naša diskretizirana funkcija je potem oblike:
  - Z usteznimi **začetnimi** in **robnimi pogoji...**

$$u_m^n = u(x_m, t_n)$$

$$u_m^0 = f(x_m)$$

$$u_0^n = g_0(t_n)$$

$$u_M^n = g_1(t_n)$$



# Diskretizacija...

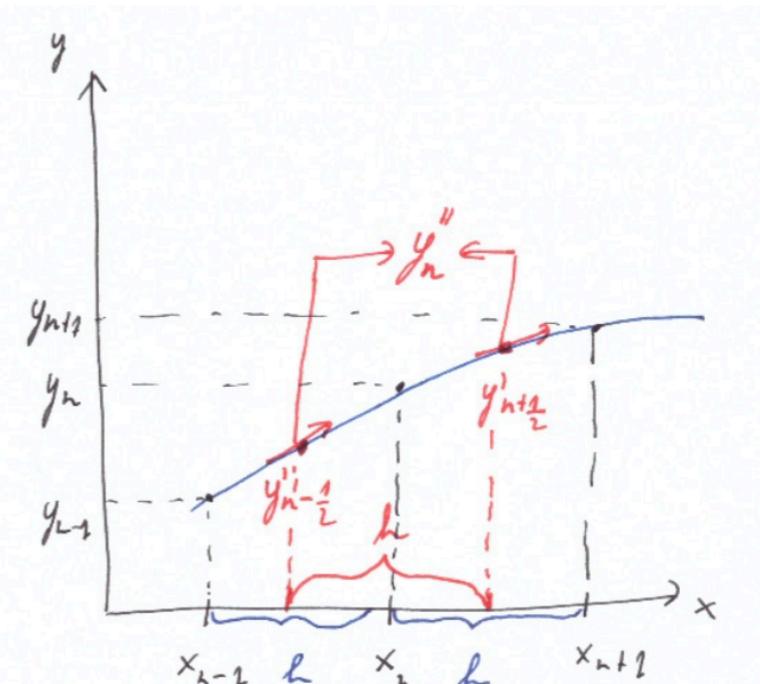
- Naslednji, tudi že uveljavljen korak v numeričnem reševanju pa je, da diskretiziramo vrednosti odvodov, torej namesto le-teh vpeljemo diference...

- Vzamemo formule v **najnižjem redu**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \rightarrow \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\kappa} \quad \text{Ne simetriziramo, ker imamo začetni pogoj (pa še nestabilno! )...}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \rightarrow \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + O_g(h^2)$$

simetrizirana CDM, z vsemi lepimi lastnostmi....



- Naša diferencialna enačba tako s diskretizacijo postane **diferenčna enačba**:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Q$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\kappa} = D \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + Q + O_g(\kappa + h^2)$$



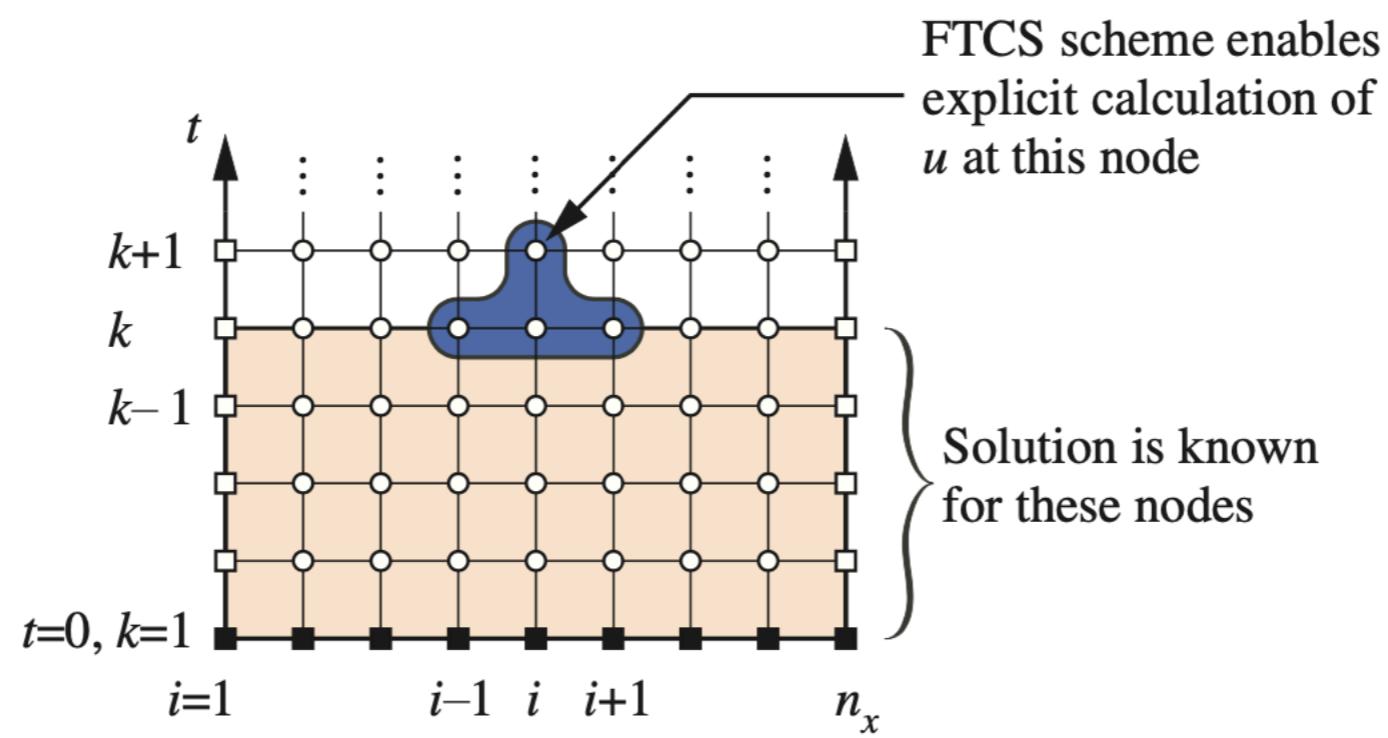
# Diskretizacija...

- Uporabna metoda se imenuje Future Time Central Space (FTCS) in se povsem zgledno reši:
  - Določimo parameter  $r$ , podan z razmerji korakov (pazi kvadrat!):

$$r = \frac{\kappa D}{h^2}$$

$$u_m^{n+1} = u_m^n + r (u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) + \kappa Q$$

- Izkaže pa se, da je metoda **nestabilna za**  $r > \frac{1}{2}$  ← Von Neumannova analiza, na spletni učilnici ....
- Natančnejše študije pa pokažejo, da je metoda **optimalna za**  $r = \frac{1}{6}$  ← Douglasova metoda:  $O_g(\kappa^2 + h^4)$  !

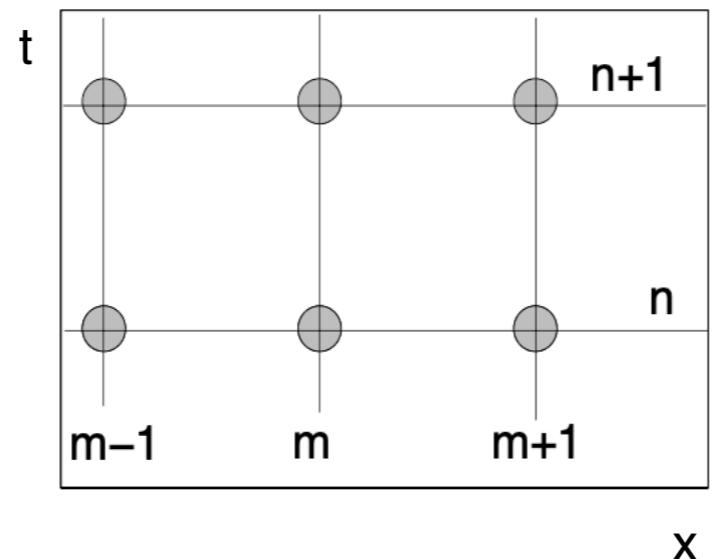




# Diskretizacija...

- Za mnogo boljšo se izkaže **Crank-Nicholsonova metoda**:
  - Vzamemo povprečje drugih odvodov na desni po času...
    - Dosežemo časovno natančnost v **drugem redu!**
    - Metoda je **stabilna za poljubno razmerje korakov!**

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\kappa} = D \frac{1}{2} \left[ \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} \right] + Q + O_g(\kappa^2 + h^2)$$



- Slaba stran je, da je metoda **implicitna**, ker tudi na desni nastopajo točke v prihodnosti.
  - Očitno bomo morali tudi tu to **rešitevati kot sistem...**



# Diskretizacija...

- Za reševanje enačbo **preuredimo** v obliko, kjer so na levi vrednosti v prihodnosti, na desni pa v sedanjosti:

$$u_m^{n+1} - r \frac{1}{2} [u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}] = u_m^n + r \frac{1}{2} [u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n] + \kappa Q$$

- To lahko še bolj kompaktno zapišemo v **matrični obliki**:
  - Vrednosti funkcije  $\mathbf{u}$  v točkah  $\mathbf{x}_m$  uredimo v  $(M-1)$ -dimenzionalen vektor:

$$\vec{\mathbf{u}}^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_{M-1}^n)^T$$

- Tako lahko zapišemo zgornji sistem v matrično obliko:

$$\left( \mathbf{I} - \frac{r}{2} \underline{\mathbf{A}} \right) \vec{\mathbf{u}}^{n+1} = \left( \mathbf{I} + \frac{r}{2} \underline{\mathbf{A}} \right) \vec{\mathbf{u}}^n + \vec{b} \quad \underline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \\ & & & & & 1 & -2 \end{pmatrix},$$

... znano od zadnjič ?

$$\vec{b} = \left( \frac{r}{2}(u_0^n + u_0^{n+1}) + \kappa Q, \kappa Q, \dots, \frac{r}{2}(u_M^n + u_M^{n+1}) + \kappa Q \right)^T$$



# Diskretizacija...

- To matrično obliko sedaj lahko **enostavno in hitro rešimo**:
  - Desna stran je znan vektor, leva stran ima tridiagonalno matriko **Q** dimenzije M s konstantnimi koeficienti:
    - To pomeni da je časovna zahtevnost  $\sim M$  (Thomasov algoritmom)

$$\underline{Q} \vec{u}^{n+1} = \vec{p}$$

- Uporabi vgrajene funkcije, npr **scipy.linalg.solve\_banded**
- Metodo se da tudi **izboljšati** (Crandall, Numerov), da dobimo večjo natančnost - **globalno**  $O_g(\kappa^2 + h^4)$ :

$$(\mathbf{I} - \vartheta r \underline{\mathbf{A}}) \vec{u}^{n+1} = (\mathbf{I} + (1 - \vartheta) r \underline{\mathbf{A}}) \vec{u}^n + \mathbf{b} \quad \vartheta = \frac{1}{2} - \frac{1}{12r}$$

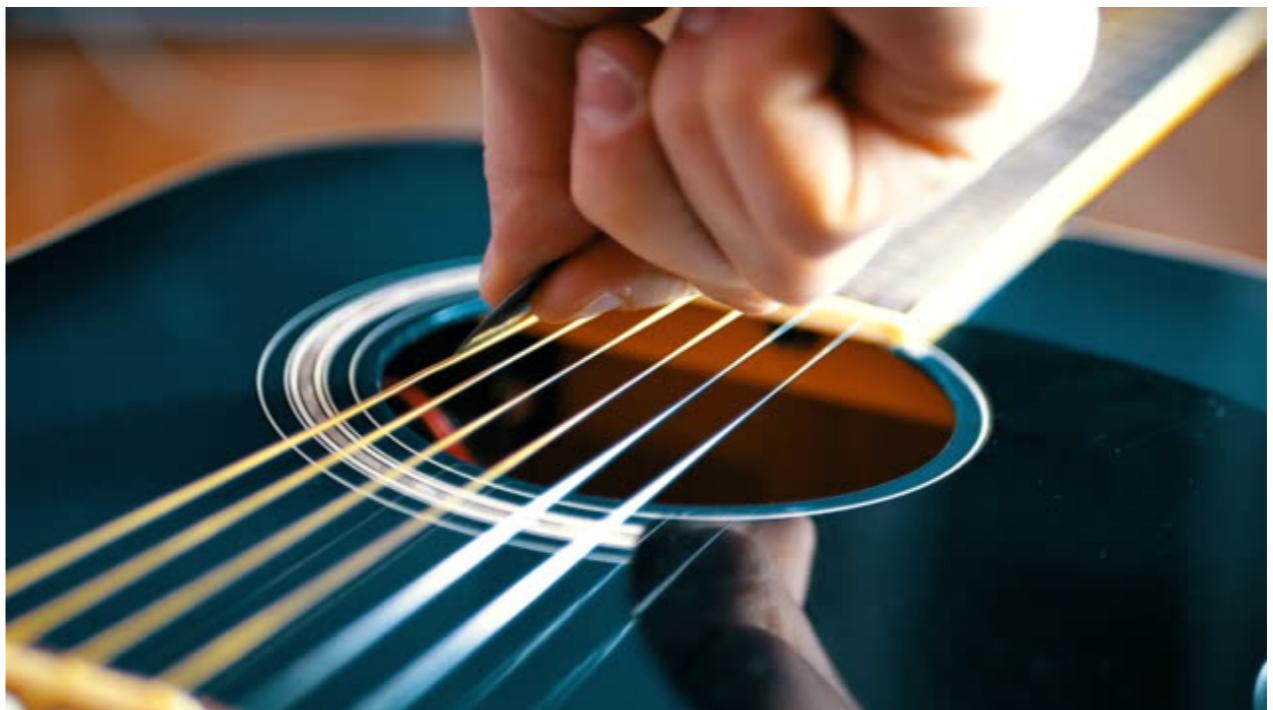
- Bistveno tu je tudi, da je **metoda vedno stabilna - ni omejitev na r!**
- Seveda je to šele 'ogrevanje', naprednejše metode obstajajo...
  - ... ampak za domačo nalogo bo to dovolj...



# Valovna enačba

- Naš drugi današnji zgled za valovno enačbo pa bo nihanje strune:
  - Definiramo funkcijo odmika strune  $u(x, t)$ , kjer se struna dolžine  $a$  v smeri  $x$ . Valovna enačba je potem podana s formulo:
$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq a$$
- Tudi tu za rešitev le-tega potrebujemo tudi ustrezne **začetne in robne pogoje**:
  - V našem zgledu je struna na robovih vpeta in je nastavek preprost...

$$u(x, t = 0) = f_0(x)$$
$$\frac{\partial u(x, t = 0)}{\partial t} = f_1(x)$$
$$u(x = 0, t) = g_0(t) = 0$$
$$u(x = a, t) = g_1(t) = 0$$





# Valovna enačba

- Tudi tu si pomagamo z diskretizacijo, popolnoma enako kot prej:
  - Z globalno natančnostjo drugega reda v kraju in času:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \rightarrow \frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{\kappa^2} + O_g(\kappa^2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \rightarrow \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + O_g(h^2)$$

simetrizirana, ker si to  
tu lahko privoščimo...

- Diskretiziramo torej enačbo in tudi **začetne in robne pogoje**.

- Posebej za **začetno hitrost enako nič dobimo:**

$$\frac{\partial u(x_m, t_0 = 0)}{\partial t} \simeq \frac{u_m^1 - u_m^{-1}}{2h} = 0$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{\kappa^2} = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + O_g(h^2 + \kappa^2)$$

$$u_m^0 = f_0(x_m)$$

$$u_m^1 = u_m^0 + \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{c\kappa}{h} \right)^2 \cdot (u_{m+1}^0 - 2u_m^0 + u_{m-1}^0)$$

$$u_0^n = 0$$

$$u_M^n = 0$$

... uporabimo izraz iz začetne hitrosti, pa imamo  
še eno točko - dovolj, za začetek računanja...



# Valovna enačba

- Metoda je **stabilna** pri (*Courantov pogoj*):  $\frac{c\kappa}{h} \leq 1$
- Ko smo enkrat uredili naše začetne pogoje pa lahko eksplisitno rešimo:

$$u_m^{n+1} = 2u_m^n - u_m^{n-1} + \left(\frac{c\kappa}{h}\right)^2 [u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n] + O_g(h^2 + \kappa^2)$$

$$u_m^0 = f_0(x_m)$$

$$u_m^1 = u_m^0 + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{c\kappa}{h}\right)^2 \cdot (u_{m+1}^0 - 2u_m^0 + u_{m-1}^0)$$

$$u_0^n = 0$$

$$u_M^n = 0$$

- Metoda deluje **bolje od pričakovanega**, ker je **simplektična (že vemo)**, kar izboljša učinkovitost metode...
  - Seveda obstajajo še boljši pristopi, ampak za danes bo to dovolj...



# Valovna enačba

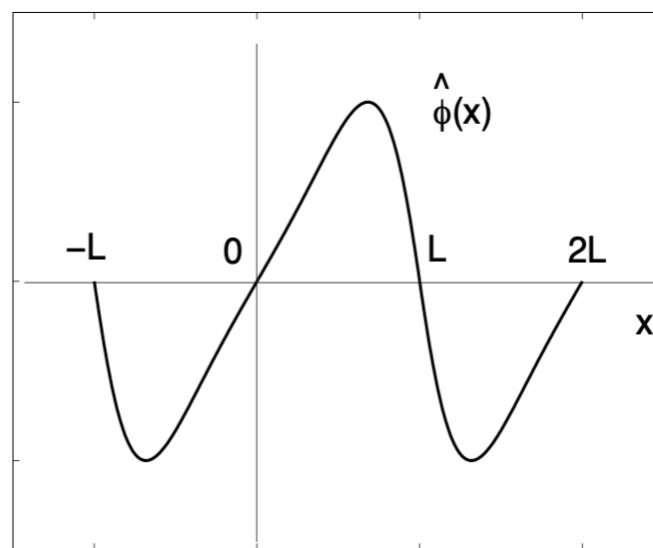
- No, ja, skoraj dovolj: Matematično se lahko valovno enačbo izrazi z d'Alembertovo rešitvijo (karakteristikami).
  - Brez robnih pogojev ta zgleda kot:

$$u(x, t = 0) = \phi(x), \quad u_t(x, t = 0) = \psi(x), \quad -\infty < x < \infty$$

$$u(x, t) = \frac{1}{2}(\phi(x - ct) + \phi(x + ct)) + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} \psi(s) ds$$

- Za dovolj preproste robne pogoje (npr. homogene) se da to **dovolj smiselno sprogramirati (!)**
  - **Recepti odvisni od primera do primera**, za homogene r.p. lahko spet uporabimo trike z **liho razširitvijo začetnih pogojev** in potem rešujemo zgornjo enačbo...

$$\hat{\phi}(x) = \begin{cases} \dots & \dots \\ -\phi(-x), & -L \leq x \leq 0 \\ \phi(x), & 0 \leq x \leq L \\ -\phi(2L - x), & L \leq x \leq 2L \\ \dots & \dots \end{cases}$$





# Domača naloga

- Danes rešujemo problem enorazsežne nestacionarne Schrödingerjeve enačbe:

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

- Za časovno neodvisni potencial zapišemo Hamiltonian kot:

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

in z ustrezeno menjavo spremenljivk (ali enot):  $H/\hbar \mapsto H$ ,  $x\sqrt{m/\hbar} \mapsto x$  in  $V(x\sqrt{m/\hbar})/\hbar \mapsto V(x)$  dobimo elegantnejši zapis:

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

- Potem lahko uporabimo Cayley-ev zapis kot trik, ki **ohrani tudi unitarnost** pri diskretizaciji časovnega koraka in je tudi reda  $O_g(\kappa^3)$ :

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

ozioroma simetričnega zapisa ( $H$  bo slej ko prej spet matrika ...):

$$\left( 1 + \frac{1}{2}iH\kappa \right) \psi_m^{n+1} = \left( 1 - \frac{1}{2}iH\kappa \right) \psi_m^n$$



# Domača naloga

- To nas spet pripelje do analoga C-N sheme v difuzijski enačbi ( $t \mapsto it$ ):

$$\psi_m^{n+1} - i\frac{\kappa}{4h^2} (\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}) + i\frac{\kappa}{2} V_m \psi_m^{n+1} = \psi_m^n + i\frac{\kappa}{4h^2} (\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n) - i\frac{\kappa}{2} V_m \psi_m^n,$$

vrednost v točki:  $V_m = V(x_m)$

oziroma v vektorskem (matričnem) zapisu:

$$\vec{\Psi}^n = (\psi_0^n, \psi_1^n, \dots, \psi_{N-1}^n)^T$$

Robne pogoje tu vzamemo za **homogene!**  
(drugače pač prilagodimo matriko...)

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

kjer so matrične vrednosti tridiagonalne matrike A podane z:

$$b = i\frac{\kappa}{2h^2}, \quad a = -\frac{b}{2}, \quad d_j = 1 + b + i\frac{\kappa}{2} V_j.$$

- Za račun boš potreboval **kompleksno aritmetiko: from cmath import \*** za kompleksne funkcije v Pythonu (sama kompleksna aritmetika pa je vgrajena).



# Domača naloga

- Za domačo nalogo boste konkretno računali problem **gausovega začetnega stanja (valovni paket)** v dveh konfiguracijah:
    - **V harmonskem potencialu**, kjer to vodi do valovnega paketa **koherenčnega stanja**:
$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\xi - \xi_\lambda \cos \omega t)^2 - i \left( \frac{\omega t}{2} + \xi \xi_\lambda \sin \omega t - \frac{1}{4} \xi_\lambda^2 \sin 2\omega t \right) \right],$$
  - **V praznem prostoru**, kjer ravni val ‘**difuzijsko razpade**’:
- $$\psi(x, t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1 + it/(2\sigma_0^2)}} \exp \left[ \frac{-(x - \lambda)^2/(2\sigma_0^2) + ik_0(x - \lambda) - ik_0^2 t/2}{1 + it/(2\sigma_0^2)} \right]$$
- V nalogi imate nekaj napotkov za parametrizacijo v obeh primerih (intervali, vrednosti, koraki ipd...).
  - **Opozorilo, glede na pretekle izkušnje:** Najpreprostejše metode niso popolne, zapis s to osnovno C-N metodo se bo poznal (verjetnost se ne ohranja, funkcije ‘razpadajo’ itd ipd...) - da ne iščete (predolgo) hroščev....
    - Osnovna natančnost vas bo dobesedno ‘zdeprimirala’ ... **pomembna lekcija** ...
    - **(Nujno) poskusite še z izboljšavami višjih redov (ali pa kakšno spektralno metodo?)**



# Višja natančnost

- Višja natančnost iz van Dijkovega članka (oz. recepta) - na učilnici:

- ... **krajevna:** višja aproksimacija drugega odvoda (**več-diag. matrika!**):

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} y(x + kh) + \mathcal{O}(h^{2r})$$

$$\psi_{j,n+1} - \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \left[ \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} \psi(j+k, n+1) \right] + \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j \psi_{j,n+1}$$

$$= \psi_{j,n} + \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \left[ \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} \psi(j+k, n) \right] - \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j \psi_{j,n}$$

$r$	$k = 0$	1	2	3	4	5	6	7
1	-2	1						
2	− $\frac{5}{2}$	$\frac{4}{3}$	− $\frac{1}{12}$					
3	− $\frac{49}{18}$	$\frac{3}{2}$	− $\frac{3}{20}$	$\frac{1}{90}$				
4	− $\frac{205}{72}$	$\frac{8}{5}$	− $\frac{1}{5}$	$\frac{8}{315}$	− $\frac{1}{560}$			
5	− $\frac{5269}{1800}$	$\frac{5}{3}$	− $\frac{5}{21}$	$\frac{5}{126}$	− $\frac{5}{1008}$	$\frac{1}{3150}$		
6	− $\frac{5369}{1800}$	$\frac{12}{7}$	− $\frac{15}{56}$	$\frac{10}{189}$	− $\frac{1}{112}$	$\frac{2}{1925}$	− $\frac{1}{16632}$	
7	− $\frac{266681}{88200}$	$\frac{7}{4}$	− $\frac{7}{24}$	$\frac{7}{108}$	− $\frac{7}{528}$	$\frac{7}{3300}$	− $\frac{7}{30888}$	$\frac{1}{84084}$

$$c_{-k}^{(r)} = c_k^{(r)}$$

- ... **časovna:** Pade-jeva (racionalna) aproksimacija:

$$e^z = \frac{a_0 + a_1 + \cdots + a_M z^M}{b_0 + b_1 + \cdots + b_M z^M} = \frac{\sum_{m=0}^M a_m z^m}{\sum_{m'=0}^M b_{m'} z^{m'}}$$

Rešujemo sistem s Taylorjem ( $c_n = 1/n!$ ) ..

$$\left( \sum_{m'=0}^M b_{m'} z^{m'} \right) \left( \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i \right) = \left( \sum_{m=0}^M a_m z^m \right)$$

Faktoriziramo (z ničlami ki so kompl. konjugirane za števec in imenovalec :  $z$ ,  $\bar{z}$ ), numpy.roots (matrično znamo...).

$$e^z = \prod_{s=1}^M \left( \frac{1 - z/z_s^{(M)}}{1 + z/\bar{z}_s^{(M)}} \right) \quad K_s^{(M)} \equiv \frac{1 - \frac{iH\Delta t/\hbar}{z_s^{(M)}}}{1 + \frac{iH\Delta t/\hbar}{\bar{z}_s^{(M)}}}$$

Rekurzivno reševanje vmesnih stanj ( $s=1, \dots, M$ ):

$$\psi_{n+\frac{1}{M}} = K_1^{(M)} \psi_n$$

$$\psi_{n+1} = e^{-iH\Delta t/\hbar} \psi_n = \prod_{s=1}^M K_s^{(M)} \psi_n$$

$$\psi_{n+\frac{s}{M}} \equiv K_s^{(M)} \psi_{n+\frac{s-1}{M}}$$



# Višja natančnost

- Višja natančnost iz van Dijkovega članka (oz. recepta) - na učilnici:

- ... **krajevna:** višja aproksimacija drugega odvoda (**več-diag. matrika!**):

$$y''(x) = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} y(x + kh) + \mathcal{O}(h^{2r})$$

$$\psi_{j,n+1} - \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \left[ \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} \psi(j+k, n+1) \right] + \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j \psi_{j,n+1}$$

$$= \psi_{j,n} + \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \left[ \sum_{k=-r}^r c_k^{(r)} \psi(j+k, n) \right] - \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j \psi_{j,n}$$

$r$	$k = 0$	1	2	3	4	5	6	7
1	-2	1						
2	− $\frac{5}{2}$	$\frac{4}{3}$	− $\frac{1}{12}$					
3	− $\frac{49}{18}$	$\frac{3}{2}$	− $\frac{3}{20}$	$\frac{1}{90}$				
4	− $\frac{205}{72}$	$\frac{5}{8}$	− $\frac{1}{5}$	$\frac{8}{315}$	− $\frac{1}{560}$			
5	− $\frac{5269}{1800}$	$\frac{5}{3}$	− $\frac{5}{21}$	$\frac{5}{126}$	− $\frac{5}{1008}$	$\frac{1}{3150}$		
6	− $\frac{5369}{1800}$	$\frac{12}{7}$	− $\frac{15}{56}$	$\frac{10}{189}$	− $\frac{1}{112}$	$\frac{2}{1925}$	− $\frac{1}{16632}$	
7	− $\frac{266681}{88200}$	$\frac{7}{4}$	− $\frac{7}{24}$	$\frac{7}{108}$	− $\frac{7}{528}$	$\frac{7}{3300}$	− $\frac{7}{30888}$	$\frac{1}{84084}$

$$c_{-k}^{(r)} = c_k^{(r)}$$

- ... **časovna:** Pade-jeva (racionalna) aproksimacija:

$$e^z = \frac{a_0 + a_1 z + \dots + a_M z^M}{b_0 + b_1 z + \dots + b_m z^m}$$

Well, there are explicit expressions for the numerator  $N_{pq}(z)$  and denominator  $D_{pq}(z)$  of the  $(p, q)$  Padé approximant for  $\exp(z)$ :

Faktoriziramo (z ničlami ki so

$$N_{pq}(z) = \sum_{j=0}^p \frac{(p+q-j)! p!}{(p+q)! j! (p-j)!} z^j$$

$$D_{pq}(z) = \sum_{j=0}^q \frac{(p+q-j)! q!}{(p+q)! j! (q-j)!} (-z)^j$$

$$\psi_{n+1} = e^{-i}$$

from which the Padé approximant is  $R_{pq}(z) = \frac{N_{pq}(z)}{D_{pq}(z)}$ .

$s=1$

Rešujemo sistem s Taylorjem ( $c_n = 1/n!$ ) ..

$$\left( \begin{array}{cccccc} M & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & \\ 1 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{array} \right) \left( \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i \right) = \left( \sum_{m=0}^M a_m z^m \right)$$

dots (matrično znamo...).

anje vmesnih stanj ( $s=1, \dots, M$ ):

$$= K_1^{(M)} \psi_n$$

$$\equiv K_s^{(M)} \psi_{n+\frac{s-1}{M}}$$



# Ekstremna natančnost

- Lahko gremo tudi do numeričnih limit...

$$\mathcal{E} = \int_{x_0}^{x_j} |\psi(x, t_N) - \psi_{\text{analytic}}(x, t_N)|^2 dx$$

Lanska študija

QHO Error versus  $M$  and  $r$  at  $t = 10T_0$

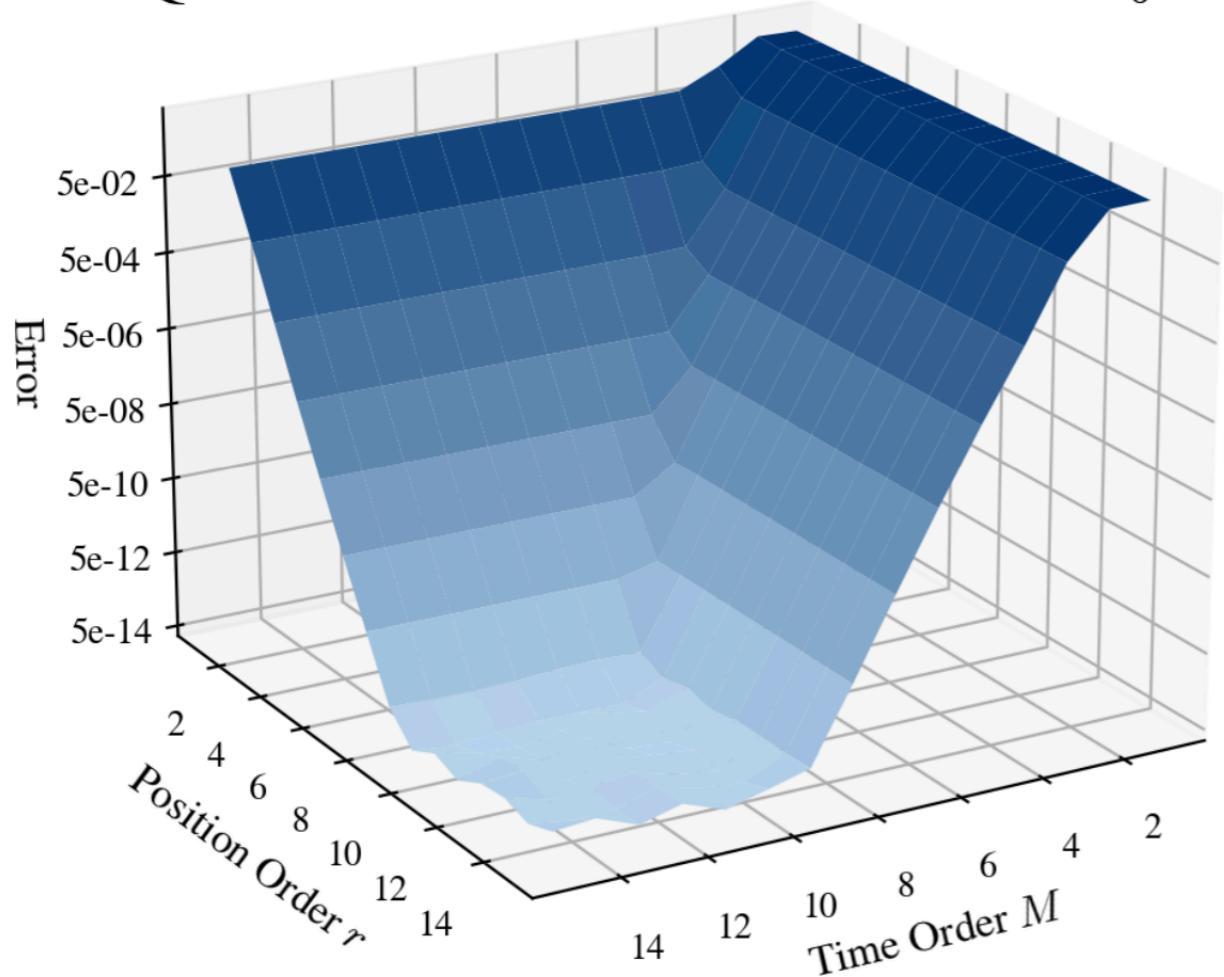


Figure 1: Error in the coherent state solution after a ten-period simulation as a function of  $r$  and  $M$ —note the logarithmic scale. High  $M$  improves the solution more than high  $r$  (compare the curves at  $r \equiv 1$  and  $M \equiv 1$ ). Found with  $\Delta t = 0.2\pi$ ; error is calculated according to Equation 1. Note also the onset of a plateau at  $r \gtrsim 7$  and  $M \gtrsim 8$  beyond which the error does not improve—this evidently corresponds to the regime of non-negligible floating point error, as investigated more thoroughly in the Airy function report.

Free Wave Packet Error versus  $M$  and  $r$

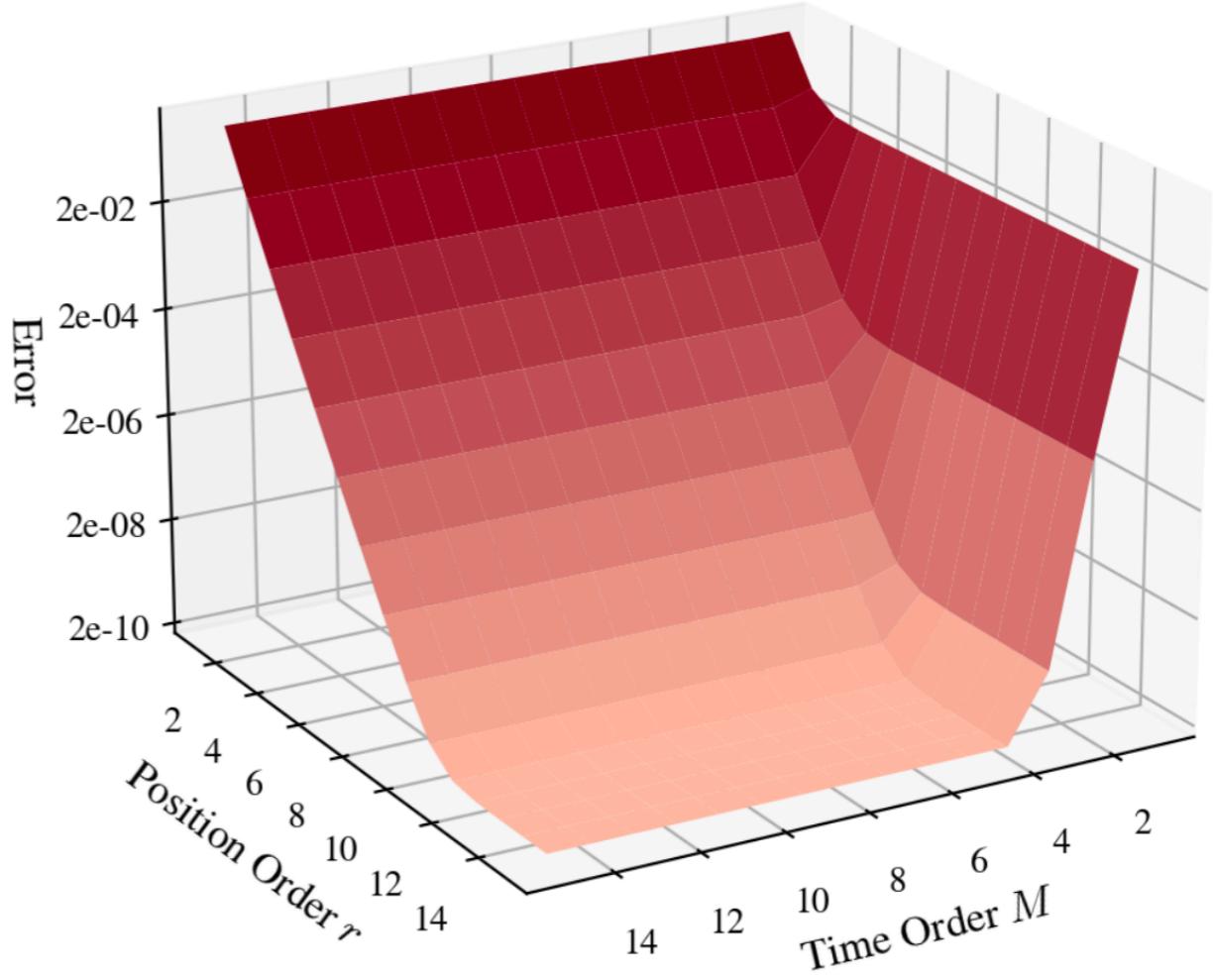


Figure 2: Error in the numerical solution for the wave packet at  $a \approx 1.0$  as a function of  $r$  and  $M$ —note the logarithmic scale. Higher  $r$  improves the solution more than high  $M$  (compare the curves at  $r \equiv 1$  and  $M \equiv 1$ ). Found with  $N = 500$ . Note that the solution does not improve for  $r \gtrsim 10$  and  $M \gtrsim 4$ , corresponding to the regime of non-negligible floating point error.