

10. naloga: Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe

Samo Krejan, 28231092

norazsežna nestacionarna Schrödingerjeva 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. Izkaže se, da so za zadovoljivo natančnost višji redi nujni!

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 so bile predstavljene na predavanjih, lahko pa jih 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 $s=1$.

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

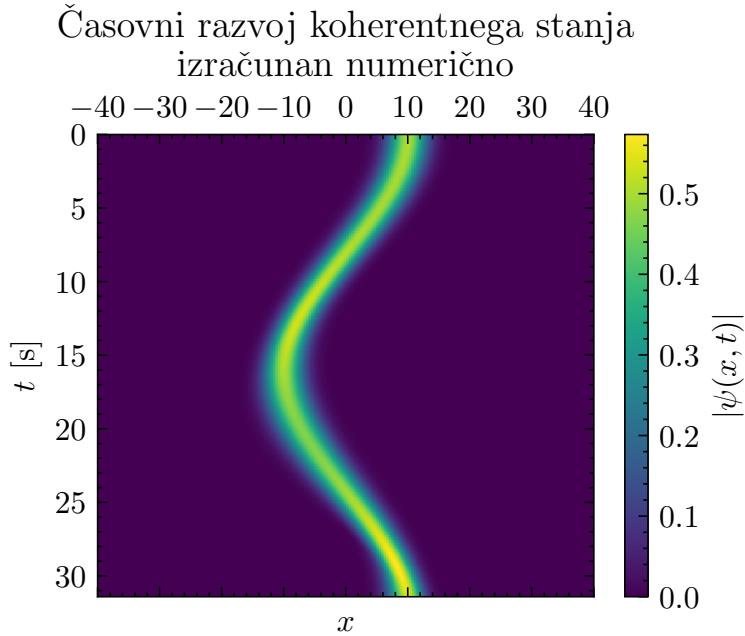
$$\psi(x, t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1+it/(2\sigma_0^2)}} \exp \left[\frac{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2 + ik_0(x-\lambda) - ik_0^2 t/2}{1+it/(2\sigma_0^2)} \right]$$

V vseh obravnavanih primerih ugotovi in uporabi dovolj natančno metodo višjega reda.

1.1 Harmonski potencial

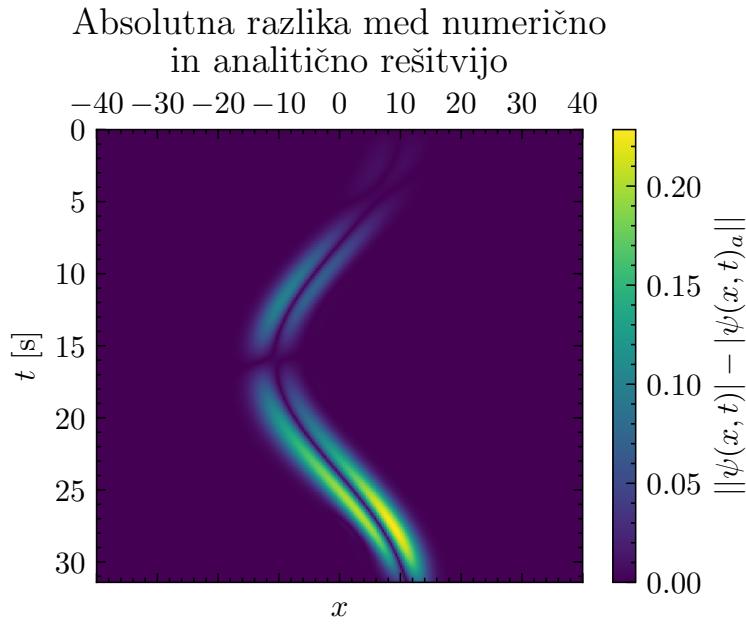
Najprej sem si ogledal numerično izračunani razvoj skozi eno periodo (300 časovnih točk). Kot pričakovano sem dobil sliko nihanja valovnega paketa, ki kvalitativno deluje popolnoma pravilno:

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



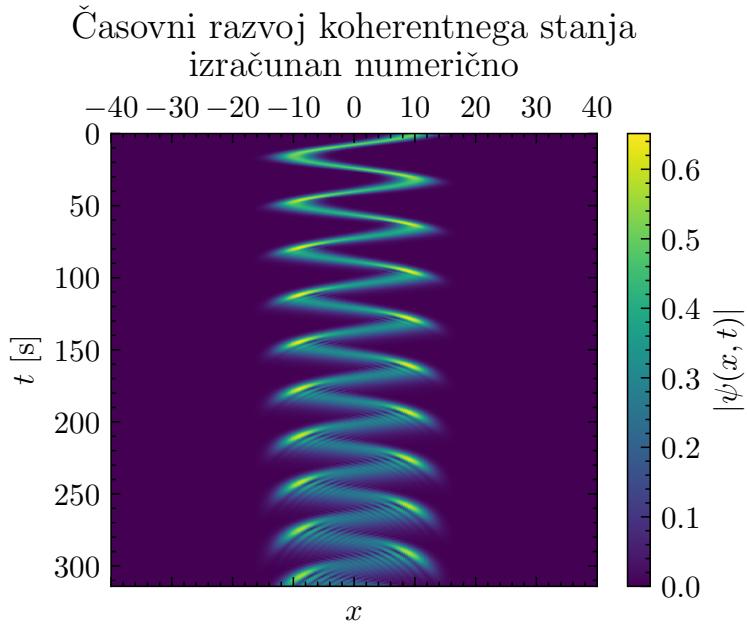
Slika 1: Časovni razvoj valovnega paketa izračunan numerično. Izgleda kot bi pričakovali.

A zadeva postane mnogo manj optimistična, ko primerjam dobljeni rezultat z analitičnim. Čeprav kvalitativno izgledata identično se čez čas očitno nakopiči kar nekaj numeričnih napak, ki povzročijo vedno slabše rezultate. Grafigranje razlike med numerično in analitično rešitvijo proizvede graf 2

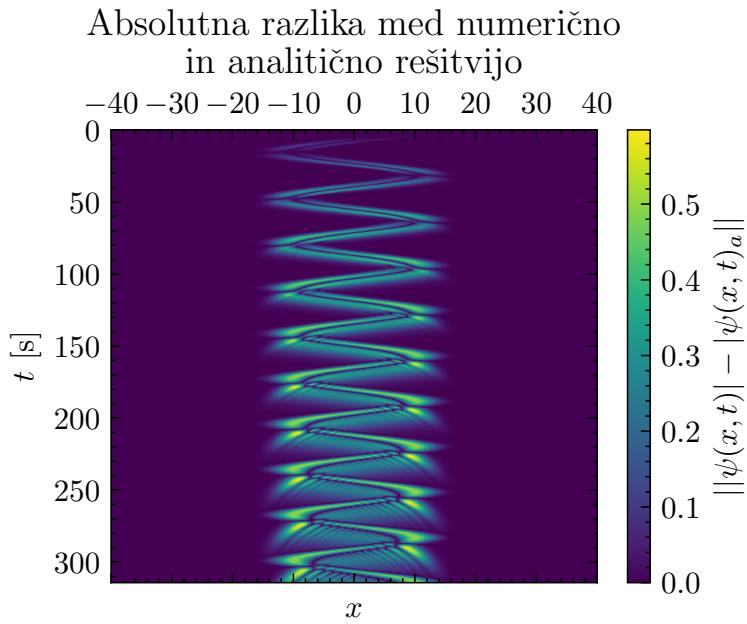


Slika 2: Napaka numerične metode skozi čas. Opazimo lahko, da dlje kot opazujemo zadevo, slabše postaja.

Že po enem samem nihaju je napaka ponekod veika skoraj polovico amplitудe valovne funkcije. S časom postaja zgodba vedno slabša, če si pogledamo rezultate za deset nihajev (3000 časovnih točk) (sliki 3, 4) vidimo, da proti koncu tudi že kvalitativno postane jasno, da se numerična napaka akumulira. Napaka je na tej točki že skoraj tako velika kot sama amplituda valovne funkcije.



Slika 3: Časovni razvoj valovnega paketa izračunan numerično. Proti koncu zaradi numeričnih napak izgubi pričakovano obliko.

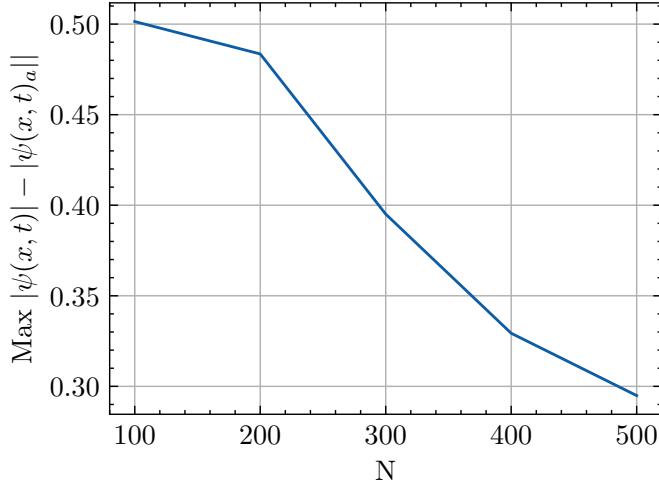


Slika 4: Napaka numerične metode skozi čas. Po desetih nihajih je že zelo slabo.

1.2 Analiza metode

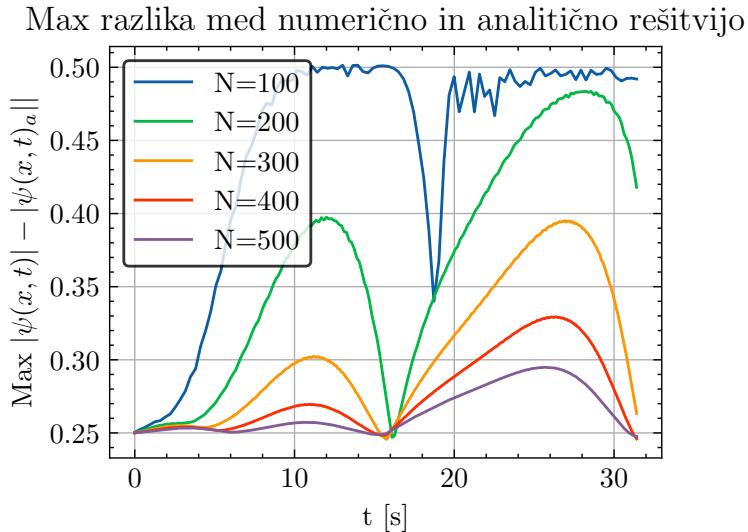
Skozi en nihajni čas s tristo časovnimi točkami sem za različna števina aktivnih točk N analiziral natančnost in "performance" metode. Najprej sem si ogledal kakšno maksimalno napako metoda pridela v enem nihaju v odvisnosti od N . Rezultat je prikazan na grafu 5

Max razlika med numerično in analitično rešitvijo



Slika 5: Maksimalno odstopanje numerične metode od analitično izračunane valovne funkcije skozi en nihaj v odvisnosti od N .

Raziskoval sem tudi, na katerih točkah metoda doseže te napake, zato sem grafigral tudi maksimalno odstopanje numerične metode skozi čas. Tako sem pridelal graf 6

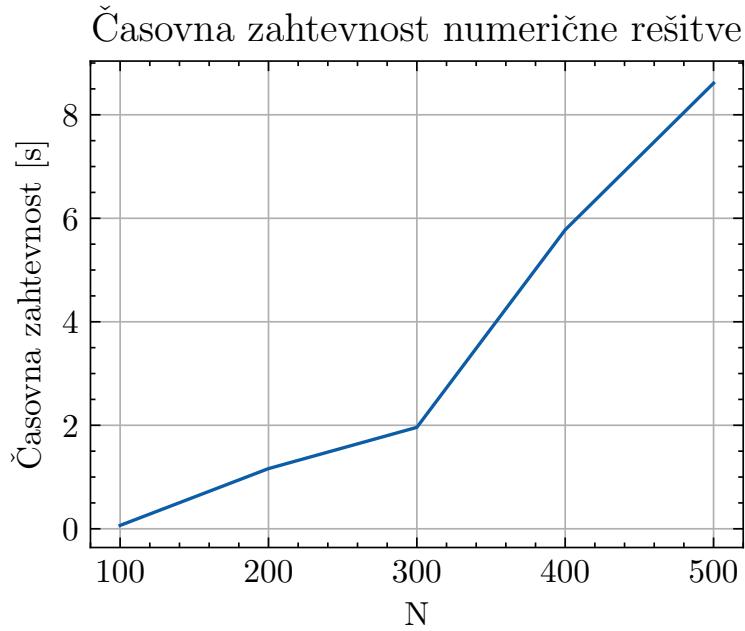


Slika 6: Maksimalno odstopanje numerične metode skozi čas za različne N .

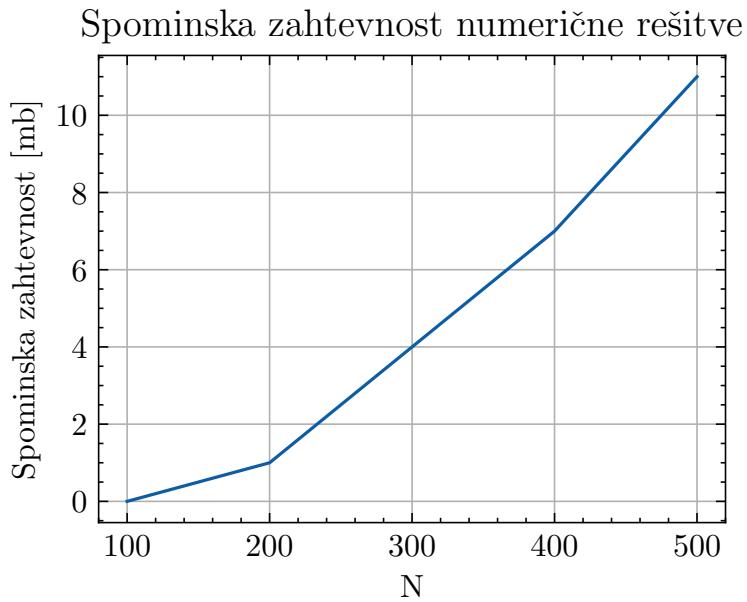
Na grafu je opaziti nekakšno nihanje, kar me je vzpodudilo k nekaj dodatne raziskave. Našel sem poročilo Simona Bukovška² - enega izmed predhodnikov, ki je opazil, da pravzaprav niha amplituda valovnega paketa, ko izračunamo valovno funkcijo numerično. Izkaže se, da se tega efekta ne da znebiti niti s 3000 aktivnimi točkami, kar je več kot bi mojemu računalniku uspelo prebaviti v zglednem času, zato višjih vrednosti nisem preverjal.

Očitno sicer vidimo, da se natančnost izboljuje z večanjem N , a se s tem seveda veča potreben čas in spomin za izvedbo. Za odločitev kako velik N se splača uporabiti, se mi je zdelo smiseln raziskati časovno in spominsko zahtevnost metode. Rezultate sem prikazal na grafih 7 in 8

²Glej https://sim0nbu.github.io/Simonovi-fizikalni-zapiski/Files/Mafijski_20praktikum/simon'bukovsek'10.pdf pg. 7



Slika 7: Časovna zahtevnost metode v odvisnosti od N

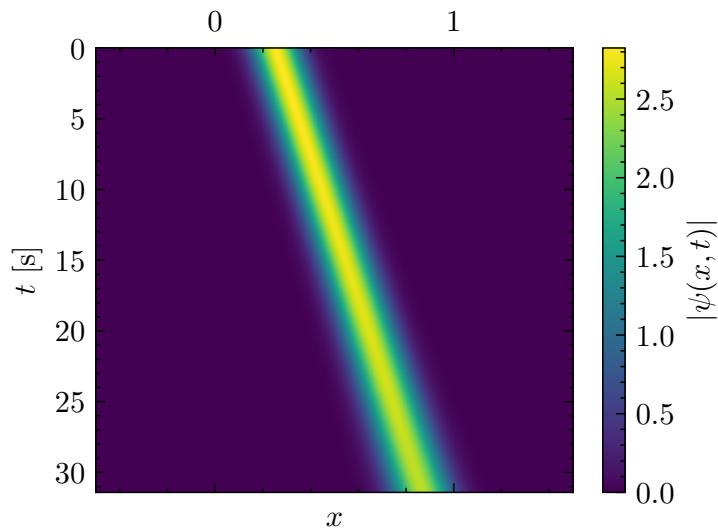


Slika 8: Spominska zahtevnost metode.

1.3 Prost valovni paket

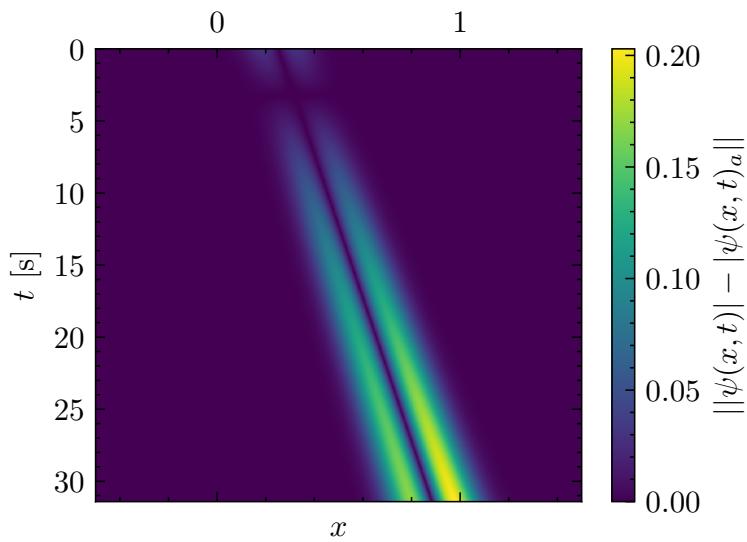
V drugem delu sem si pogledal še kako se širi valovni paket izven potenciala. Delo je bilo razen spremembe začetnega stanja in implementacije potenciala, identično kot prej, zato bom na tej točki le predstavil rezultat metode ter odstopanje le te od analitične rešitve (slike 9 in 10)

Časovni razvoj Gaussovega valovnega paketa
izračunan numerično



Slika 9: Časovni razvoj valovnega paketa izračunan numerično. Rezultat je kvalitativno pravilen.

Absolutna razlika med numerično
in analitično rešitvijo



Slika 10: Napaka numerične metode skozi čas. Proti koncu opazimo, da je napaka že res precej velika.

Napake so bile v obeh delih naloge zares precej velike. Smiselno bi bilo uporabiti metode višjega reda
...

1.4 Metode višjega reda