10 - DIFERENČNE METODE ZA ZAČETNE PROBLEME PDE

Matematično-fizikalni praktikum, avgust 2024
Luka Skeledžija, 28201079

1. Uvod

Enorazsežna nestacionarna Schrödingerjeva enačba

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

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

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

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 $\hbar = m = 1$,

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

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

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

ki je unitaren in je reda $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Območje $a \le x \le b$ diskretiziramo na krajevno mrežo $x_j = a + j\Delta x$ pri $0 \le j < N$, $\Delta x = (b-a)/(N-1)$, 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 razvoja in razpišemo Hamiltonov operator po enačbi Hamiltonjana, dobimo sistem enačb

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

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

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

in sistem prepišemo v matrično obliko

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

kjer je

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

Dobili smo torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku, da iz stanja $\mathbf{\Psi}^n$ dobimo stanje $\mathbf{\Psi}^{n+1}$. Matrika A in vektor $\mathbf{\Psi}$ imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki `from cmath import *` za kompleksne funkcije v Pythonu (sama kompleksna aritmetika pa je vgrajena). Izkaže se, da so za zadovoljivo natančnost višji redi nujni (glej dodatni del naloge).

2. 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

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

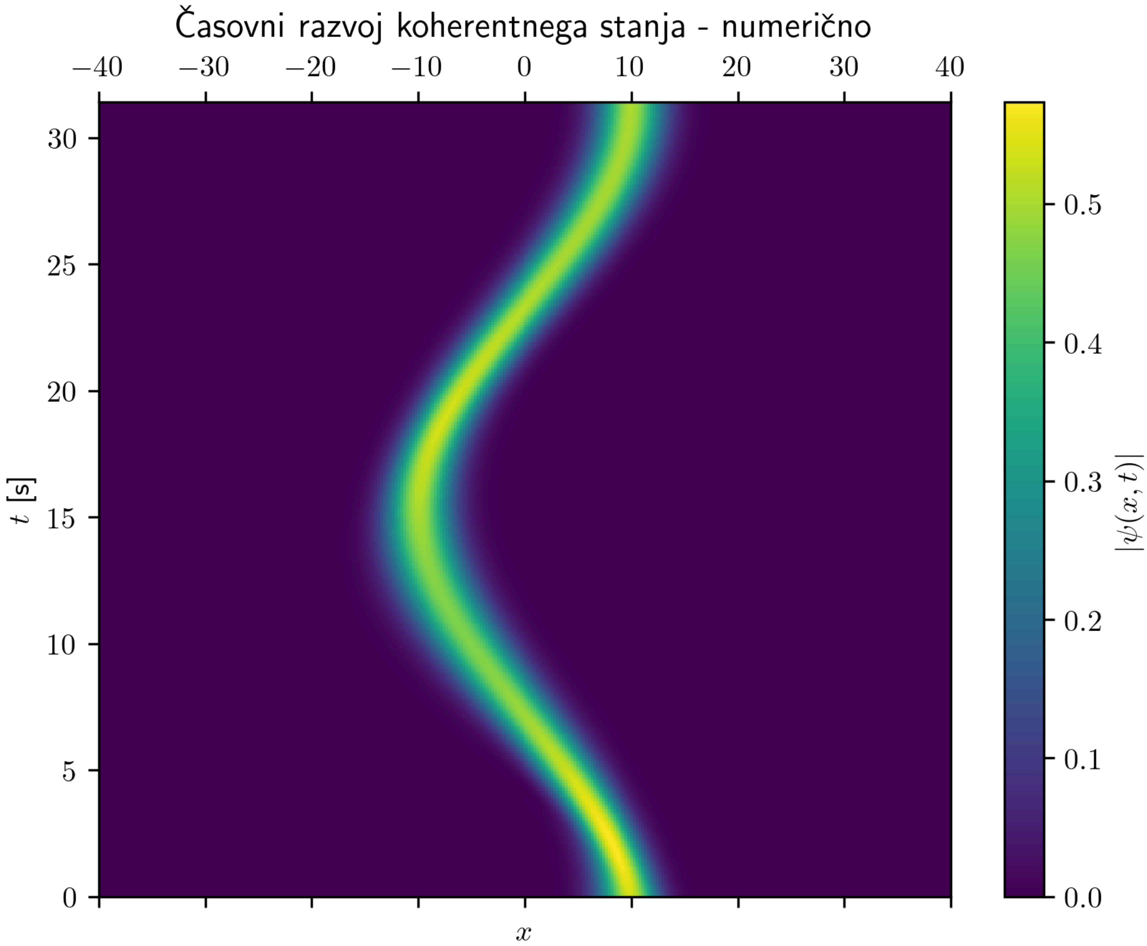
v prostoru brez potenciala. Postavi $\sigma_0 = 1/20$, $k_0 = 50\pi$, $\lambda = 0.25$ in območje $[a,b] = [-0.5, 1.5]$ ter $\Delta t = 2\Delta x^2$. Časovni razvoj spremljaj, dokler težišče paketa ne pride do $x \approx 0.75$. Analitična rešitev je

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

Dodatek: 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.

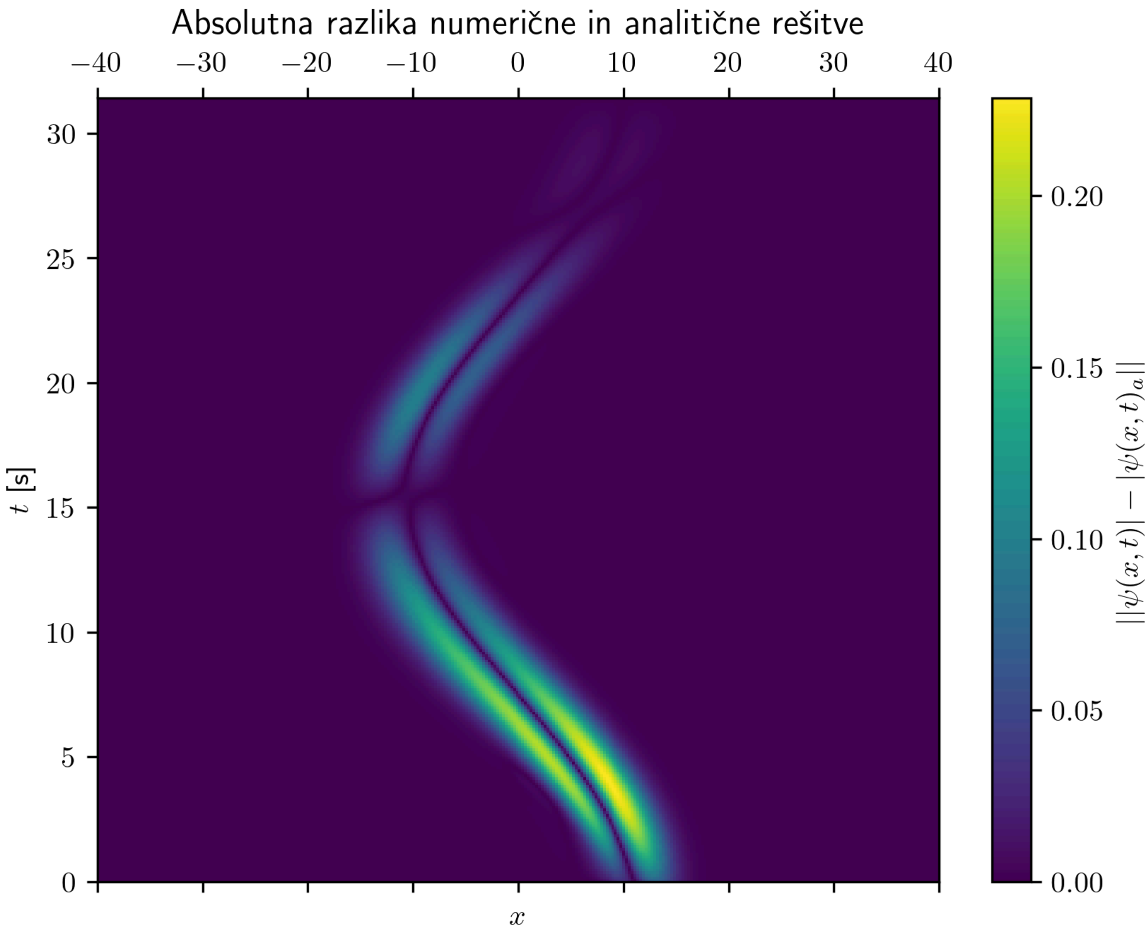
3. Razvoj koherentnega stanja

Sistem rešimo numerično za N = 300 x 300. Pri tem je $\Delta t = T_0/300$. Opazimo, da se valovna funkcija giblje kot delec v harmonskem potencialu. Na animaciji opazimo, da se amplituda valovanja spreminja, kar je posledica numeričnih napak.



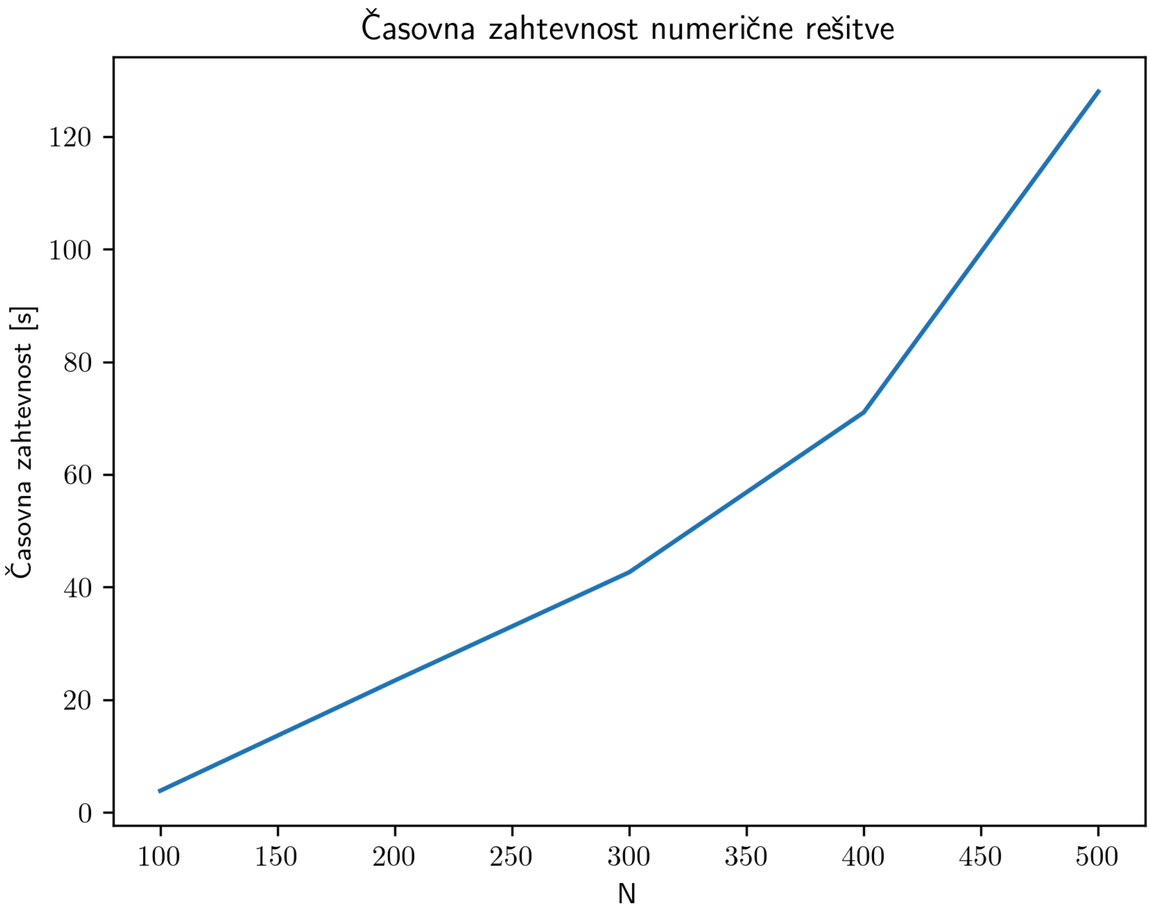
Časovni razvoj koherentnega stanja - animirano

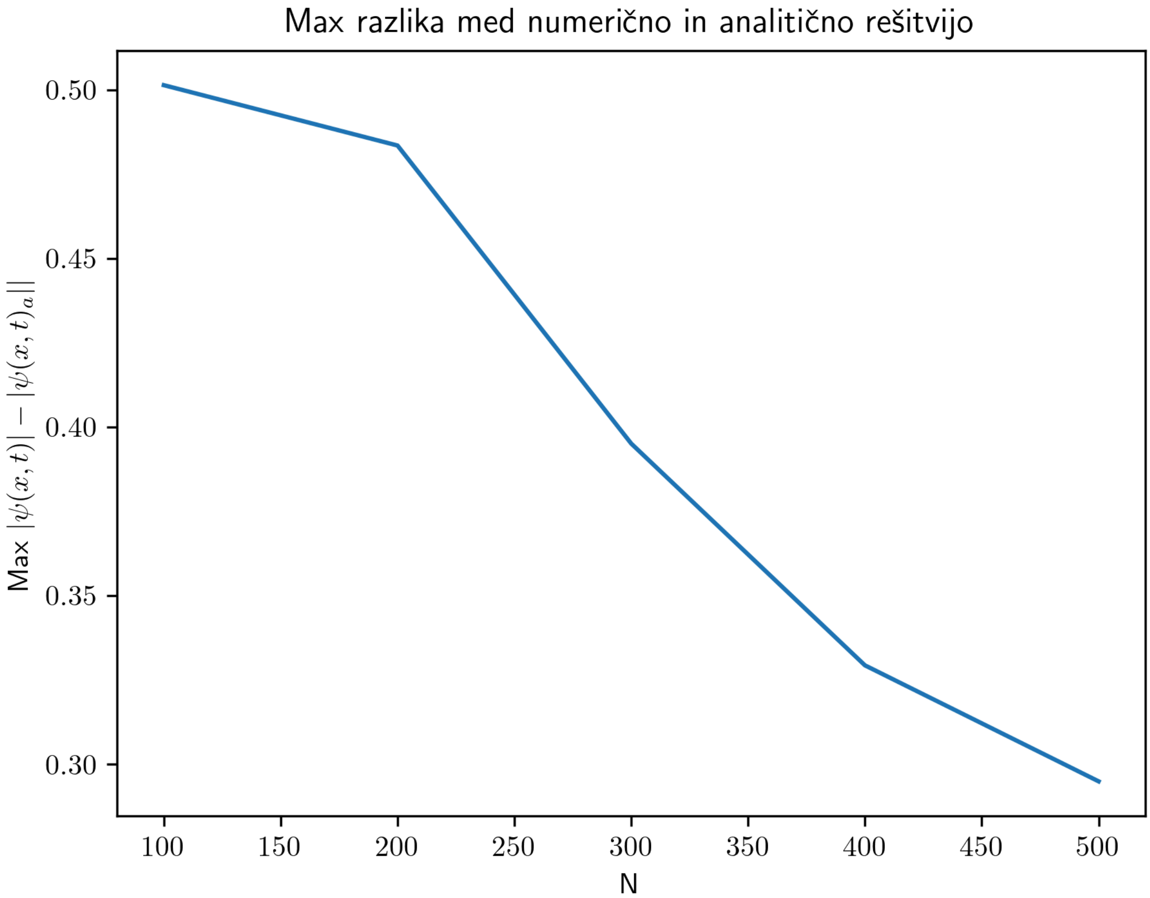
V primerjavi z analitično rešitvijo vidimo, da se napake sistematsko večajo z naraščanjem t.

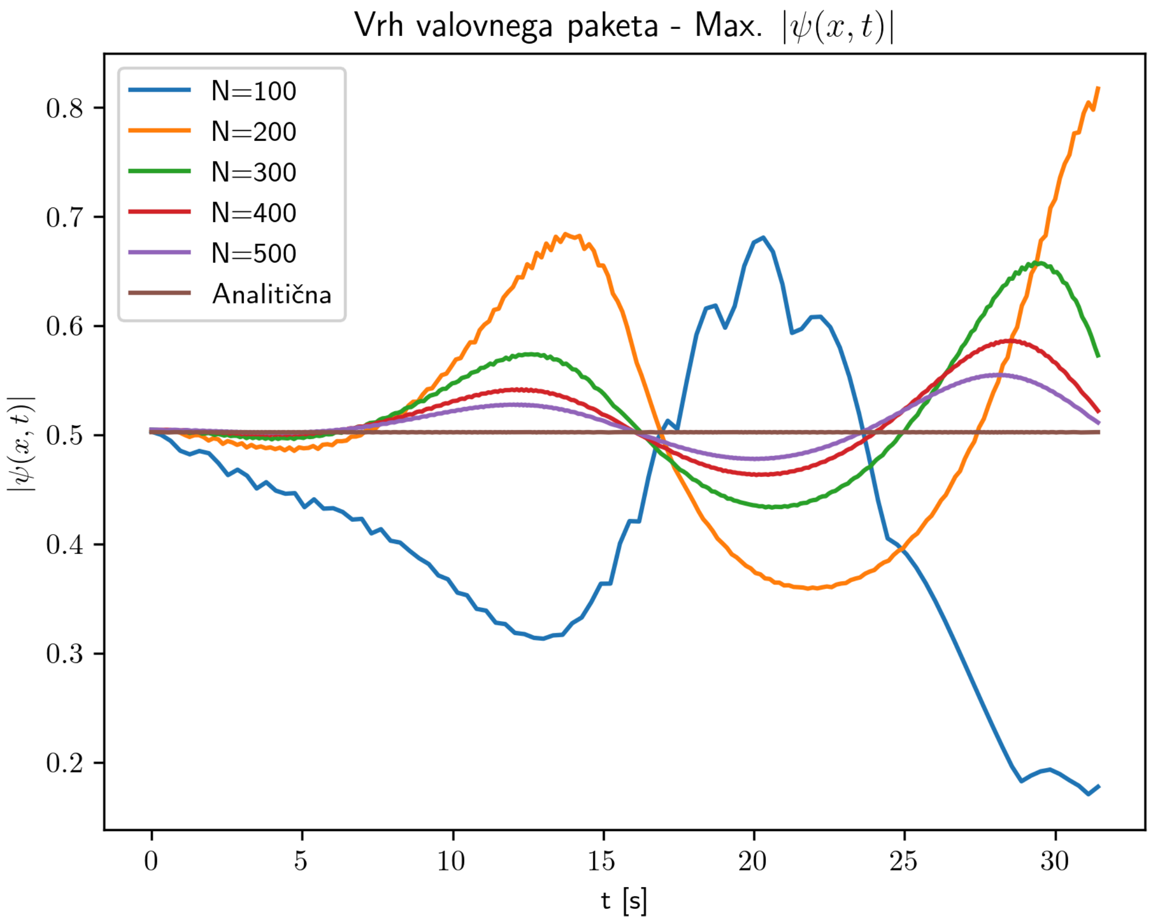


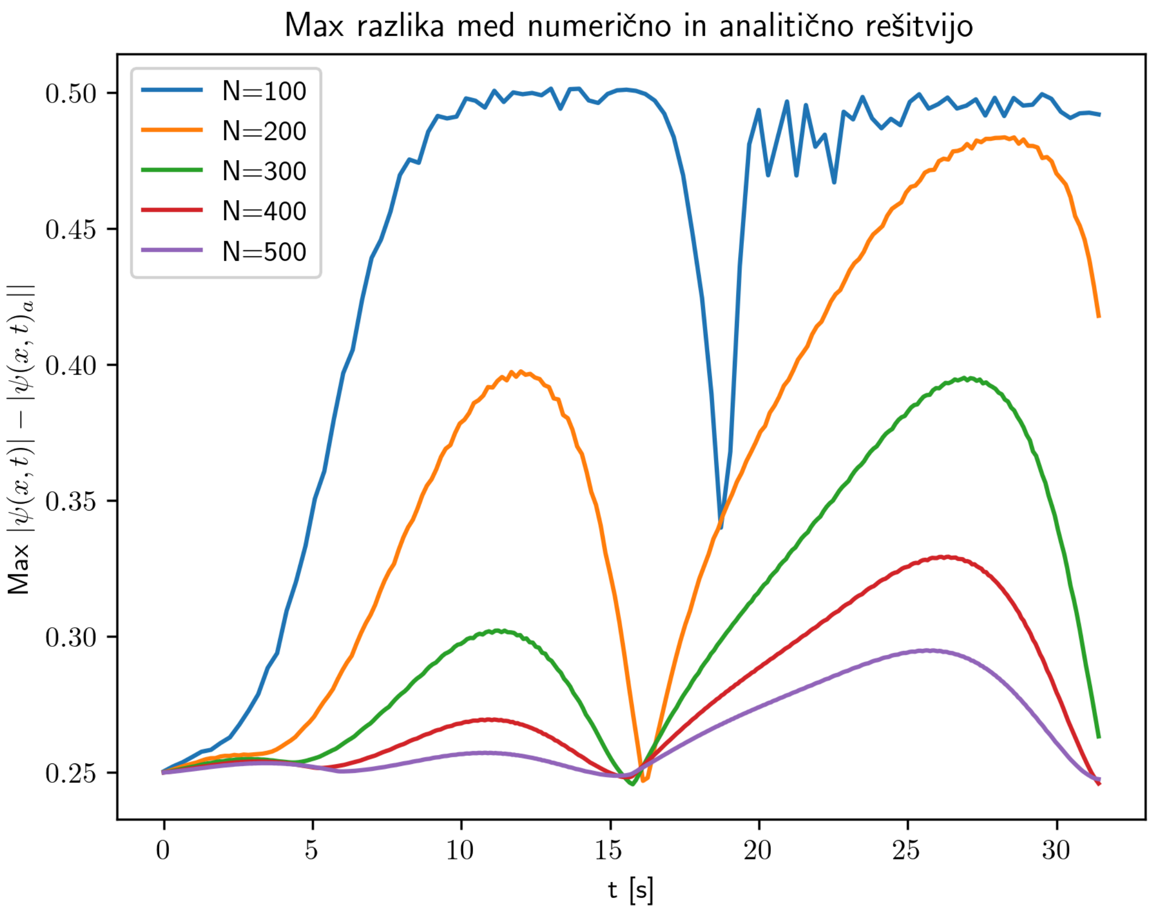
3.1. Analiza metode

Analiziramo še časovno zahtevnost in si po bližje poglejmo napake. V nadaljevanju smo iterirali gostoto mreže N x N za $\Delta t = N$.


Časovna zahtevnost numerične rešitve
Časovna zahtevnost [s]
0
20
40
60
80
100
120
100
150
200
250
300
350
400
450
500
N


Max razlika med numerično in analitično rešitvijo
Max $|\psi(x,t)| - |\psi(x,t)_a||$
0.30
0.35
0.40
0.45
0.50
100
150
200
250
300
350
400
450
500
N

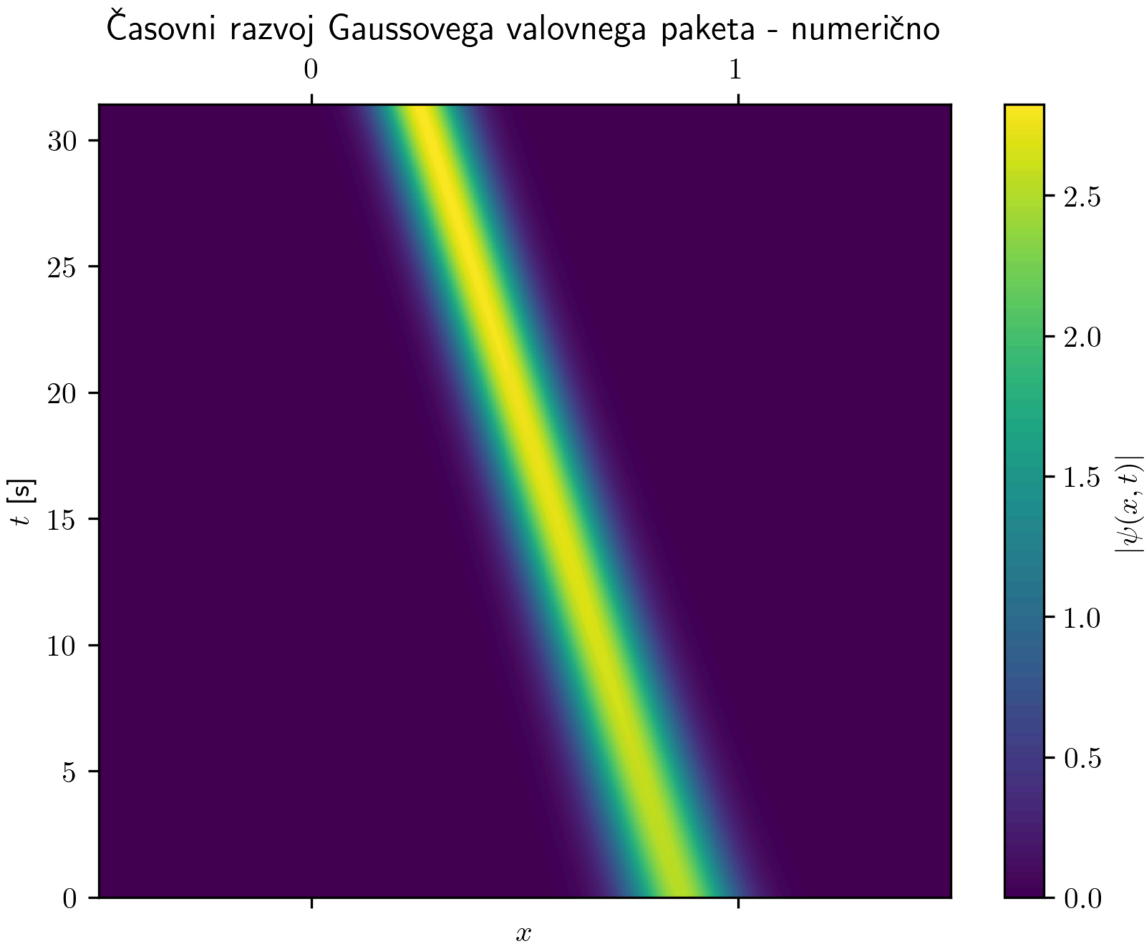




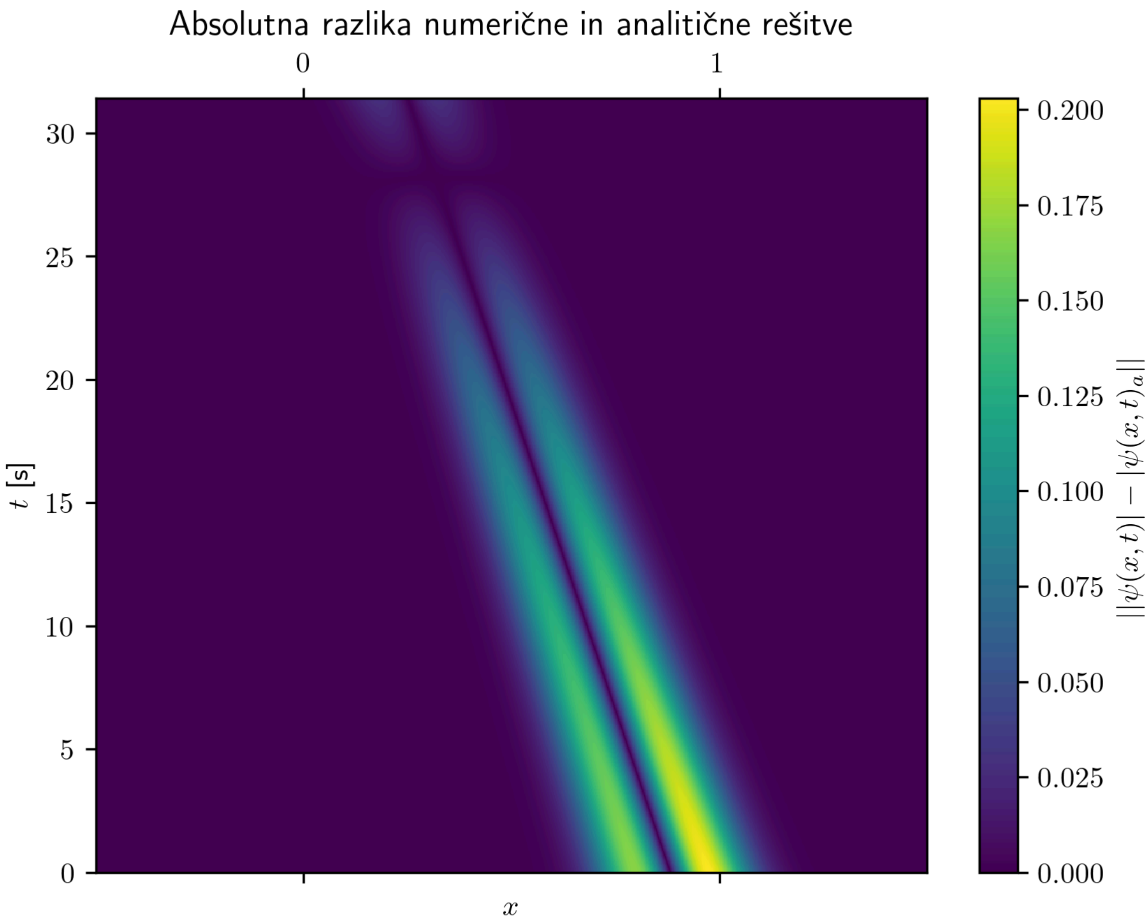
Opazimo, da se napake sistematsko večajo, pri čemer bolj gosta mreža producira manjšo napako. Vendar z večanjem N tudi časovna zahtevnost bistveno narašča, kar kliče po izboljšavi metode kot take.

4. Gaussov valovni paket

V drugem delu si poglejmo še Gaussov valovni paket izven potenciala. Na animaciji opazimo pričakovano premikanje in "širjenje" valovnega paketa. Vendar nas v nadaljevanju preseneti velikost napake v primerjavi z analitično rešitvijo. Le-ta je skoraj reda velikosti amplitude valovnega paketa. Kar nam močno sugerira, da bi za nadaljno analizo potrebovali metode višjega reda.



Časovni razvoj koherentnega stanja - animirano



5. Zaključek

V tej nalogi smo z diferencnimi metodami preučili časovni razvoj kvantnih stanj pri enorazsežni Schrödingerjevi enačbi. Simulacije harmonskega potenciala in prostega Gaussovega valovnega paketa so pokazale pričakovano vedenje, vendar tudi veliko kopičenje napak, predvsem pri daljših časovnih intervalih. Iz rezultatov je razvidna očitna potreba po metodah višjega reda, katerih implementacijo pa prepuščam navdušencem z malo več časa.

Luka Skeledžija, Github source 🔗 , 2024