

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM

**10. naloga: Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe**

Žiga Šinigoj, 28191058

Ljubljana, januar 2022

# 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 prepisemo v matrično obliko

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

kjer 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  $\Psi^n$  dobimo stanje  $\Psi^{n+1}$ . Matrika  $A$  in vektor  $\Psi$  imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki<sup>1</sup>.

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

## 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  $\Delta t$  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

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

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

$$\text{FD}[\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{s}] := \text{CoefficientList}[\text{Normal}[\text{Series}[x^{\mathbf{s}} \text{Log}[x]^{\mathbf{m}}, \{\mathbf{x}, 1, \mathbf{n}\}]/h^{\mathbf{m}}, \mathbf{x}];$$

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

Tudi korakanje v času je mogoče izboljšati z uporabo Padéjeve aproksimacije za eksponentno funkcijo.

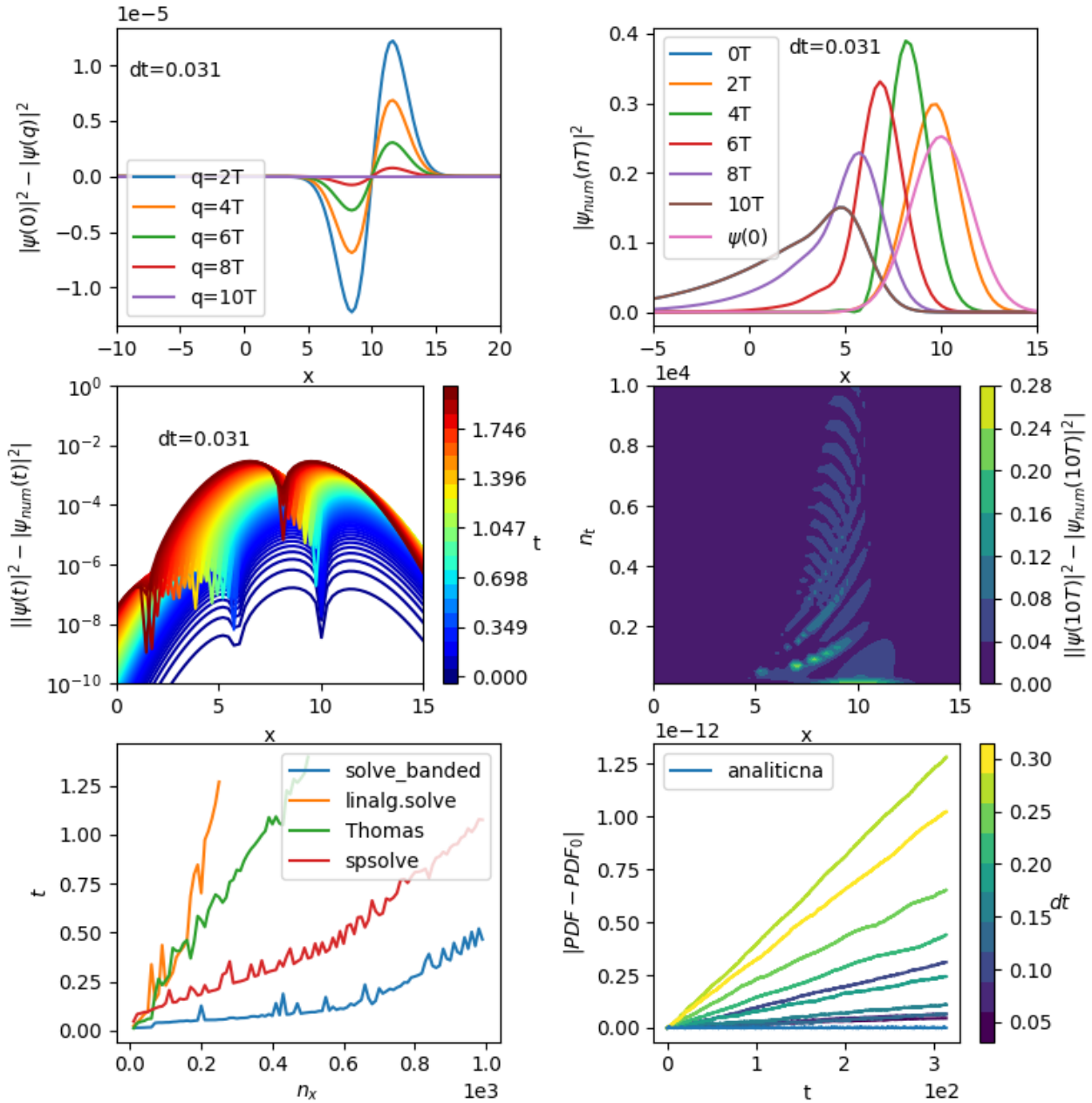
## 3 Rezultati

Če Schödingerjevo enačbo zapišemo s končnimi deferencami po Cranck-Nicolsonovi metodi se problem prevede na reševanje matrična sistema. Reševanje se razlikuje od reševanja difuzijske enačbe po tem, da imamo kompleksne spremenljivke. Matrika  $A$  je v najnižjem redu tridiagonalna. Za reševanje sistema sem uporabil metodo *solvebanded* iz paketa SciPy. Pri časovni zahtevnosti sem primerjal še naslednje metode: Thomasov algoritem, *spsolve* iz paketa SciPy in *linalg.solve* iz paketa NumPy. Slike bom označeval kot matrične elemente (1,0),...

### 3.1 Valovni paket v harmonskem potencialu

Z danim začetnim pogojem lahko dobim časovni razvoj tako, da vsakič rešim matrični sistem in tako dobim rešitev ob naslednjem času. Verjetnostna gostota je merljiva količina, zato sem jo risal raje kot valovne funkcije. V harmonskem potencialu gostota ohranja obliko (slika 1). Na sliki izgleda kot da se zelo počasi spreminja, a mislim da je to zaradi tega ker nisem nujno zadel periode, saj je časovni interval diskreten. Če bi vzel več točk, bi se napaka zmanjšala. Numerična rešitev je precej nestabilna, že približno po 1/200 periode se razlikuje od analitične rešitve že na 2 decimaliki. Prr numerični metodi je sedaj pomembno število

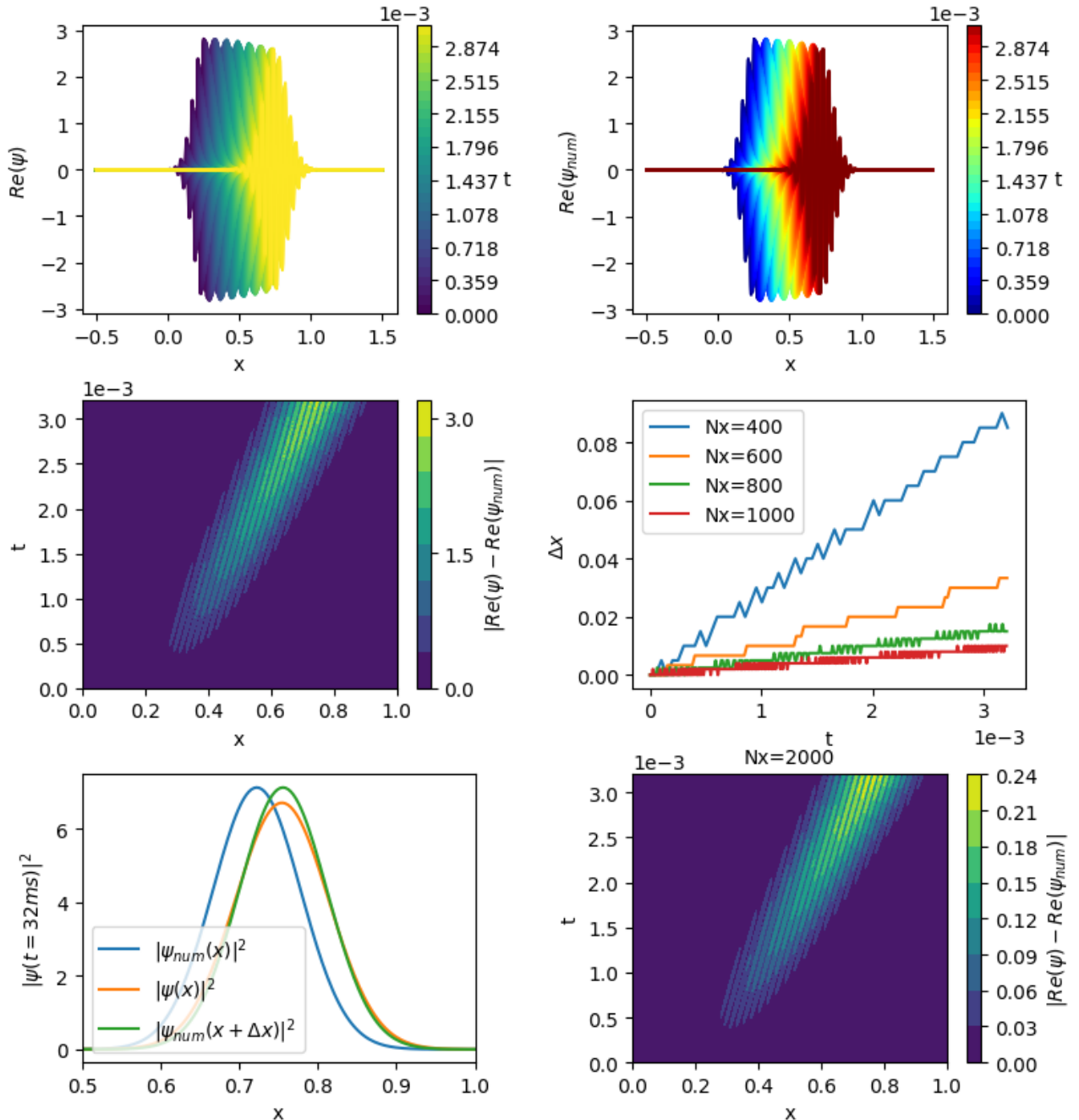
korakov v času in kraju. Večje število točk v obeh dimenzijah pomeni boljšo aproksimacijo (slika 1:(1,1)). Da so rezultati lepši, sem opazoval funkcije ob periodah, saj bi takrat teoretično morale biti enake kot začetni pogoj. Ob drugih časih funkcije oscilirajo, kar se pokaže pri računanju ohranitve ploščine (PDF), saj ima funkcija z manjšim časovnim korakom manjše odstopanje od prave ploščine (zgornji 2 krivulji), kar mislim da je posledica velikega osciliranja. Efektivno pa izgleda, da večji korak povzroči disipacijo verjetnostne gostote. Pri časovni zahtevnosti je pričakovano najpočasnejša metoda `linalg.solve`, saj je narejena za polno matriko A. Precej dobra je tudi metoda `spsolve` za razpršene matrike in je presenetljivo hitrejša od Thomasovega algoritma, ki je narejen za trikotne sisteme.



Slika 1:  $\psi$  brez indeksa predstavlja analitično rešitev,  $n_t = 10000$  (če ni drugače označeno na grafu). Od leve proti desni: Razlike med analitično rešitvijo ob različnih časih, numerična verjetnostna amplituda ob periodah, absolutna razlika med numerično in analitično vrednostjo ob danih časih, razlika med analitično in numerično funkcijo ob 10 periodi v odvisnosti od velikosti koraka v času, časovna zahtevnost algoritmov, ploščina v odvisnosti časa pri različnih velikostih koraka.

### 3.2 Gaussov valovni paket

Po teoriji se Gaussov valovni paket v prostoru brez potenciala "razleze", amplituda se mu s časom zmanjšuje, širina pa povečuje, da se verjetnostna gostota ohranja (slika 2:(1,0)). Numerična rešitev izgleda na prvi pogled precej podobna, a je napaka (slika 2:(1,0)) zelo velika. Pogledal sem posamezne funkcije, zdi se, da se s časom premaknejo v kraju oz. se zamikajo od prave vrednosti.

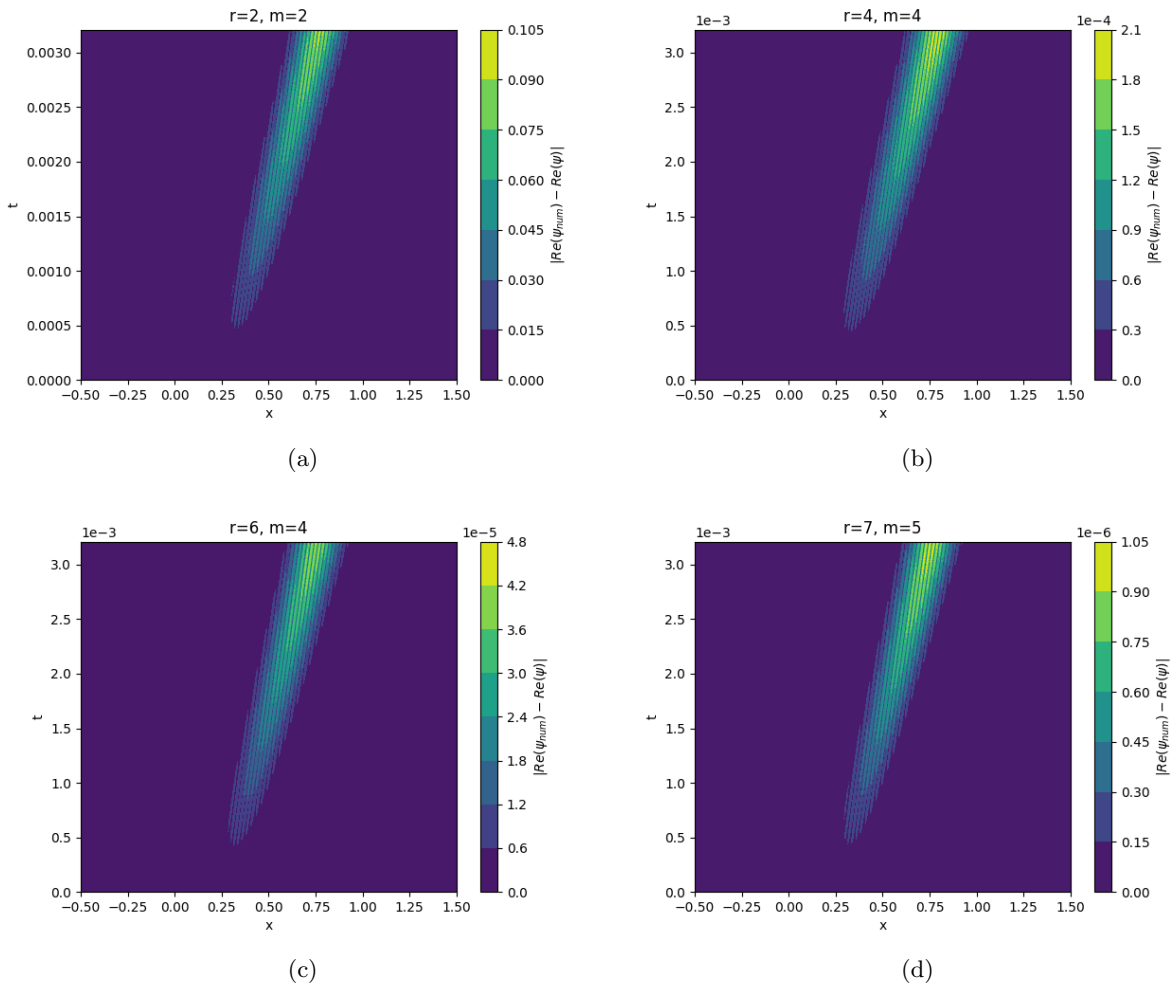


Slika 2:  $\psi$  brez indeksa predstavlja analitično rešitev,  $n_x = 600$  (če ni drugače označeno na grafu). Od leve proti desni: analitična rešitev ob različnih časih, numerična rešitev ob različnih časih, absolutna razlika med numerično in analitično vrednostjo ob danih časih, razlika v položaju med analitičnim in numeričnim vrhom v odvisnosti od časa pri različni gosti mreži, primerjava analitične in numerično premaknjene verjetnostne gostote pri danem času, absolutna razlika med numerično in analitično vrednostjo ob danih časih.

Če funkcije poravnam (izničim napako v časovnem korakanju), se precej dobro prilegajo (ostane samo napaka zaradi difference v kraju)(slika 2:(2,0)). Krajevne zamike sem dobil tako, da sem pogledal krajevni interval med vrhoma analitične in numerične funkcije. Krajevni zamik, ki je posledica diferenčne sheme v časovnem intervalu prikazuje slika 2:(1,1). Za število točk na mreži sem vzel 600 v krajevni smeri. Število točk v časovni mreži je povezano s številom v krajevni smeri. Časovni interval sem omejil na vrednost, ko pride vrh Gaussove krivulje na  $x \approx 0.75$ . 600 točk v krajevni smeri ustreza 124 točkam v časovni. Z zvečanjem točk v krajevni in posledično v časovni smeri (slika 2:(2,1)) lahko pridem do bolj natančnih izračunov.

### 3.3 Dodatna naloga: Metode višjih redov

Metode višjih redov sem uporabil na Gaussovem paket, saj je malce lažje zapisati matriko. Za število točk sem vzel  $Nx = 600$ , sistem sem reševal z metodo *solve banded* saj je najhitrejša. Pri metodah višjih redov je opaziti občutno razliko v natančnosti, kar tudi prikazujejo spodnje slike.



Slika 3: Razlika med analitično in numerično valovno funkcijo po absolutni vrednosti v odvisnosti od časa,  $r$  predstavlja red odvoda v kraju,  $m$  pa red Padejevih polinomov.

## 4 Zaključek

Z diferenčnimi metodami lahko relativno enostavno pridemo do rešitve problema. Morebitne težave povzročajo nižji redi aproksimacij odvodov, ki so numerično nestabilni. Če uporabimo višje rede za računanje, je metoda zelo dobra. Z uporabo višjih redov se povečuje tudi časovna zahtevnost.