Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe

10. naloga pri Matematično-fizikalnem praktikumu

Avtor: Marko Urbanč (28191096)
Predavatelj: prof. dr. Borut Paul Krševan

4.9.2023

Kazalo

1 Uvod **2**

2 Naloga **3**

3 Opis reševanja **3**

4 Rezultati **3**

5 Komentarji in izboljšave **3**

Literatura **4**

1 Uvod

V prejšnji nalogi smo rekli, da obstajata v glavnem dva velika razreda za reševanje parcialnih diferencialnih enačb (PDE). To sta spektralne metode, ki smo jih raziskali v prejšnji nalogi in pa diferencialne metode, ki jih spoznamo tu. Diferencialne metode so v glavnem metode, ki rešujejo PDE tako, da jih diskretizirajo in jih pretvorijo v sistem linearnih enačb. Te metode so v glavnem zelo podobne kot metode za reševanje sistemov navadnih diferencialnih enačb (ODE). V glavnem se razlikujejo v tem, da so PDE lahko tudi nelinearne in moramo posledično uporabiti iterativne metode za reševanje sistemov linearnih enačb. Tu bomo spoznali metodo končnih diferenc (FDM). Ta temleji na Taylorjevem razvoju s katerim lahko aproksimiramo odvod funkcije. To aproksimacijo nato vstavimo v PDE in dobimo sistem linearnih enačb. Ta sistem nato rešimo iterativno in dobimo končno rešitev.

Fizikalni kontekst za to nalogo bo reševanje enodimenzionalne nestacionarne Schrödingerjeve enačbe, ki se glasi

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\psi(x,\, t) = 0\,. \tag{1}$$

Predstavlja osnovno orodje za nerelativistični opis kvantnih sistemov. V enačbi 1 je H Hamiltonian sistema, ki je v splošnem odvisen od časa. V našem primeru bomo obravnavali časovno neodvisen Hamiltonian

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

Z menjavo spremenljivk $H/\hbar \to H$, $x\sqrt{m/\hbar} \to x$ efektivno postavimo $\hbar = m = 1$. V tem primeru je Hamiltonian enak

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\,. \tag{3}$$

Razvoj stanja $\psi(x,\, t)$ v času $\psi(x,\, t+\Delta t)$ je opisan z približkom

$$\psi(x,\, t+\Delta t) = e^{-iH\Delta t}\psi(x,\, t) \approx \frac{1-\frac{1}{2}iH\Delta t}{1+\frac{1}{2}iH\Delta t}\psi(x,\, t)\,. \tag{4}$$

Območje $x \in [a, b]$ diskretiziramo na krajevno mrežo z N točkami $x_j = a + j\Delta x$, kjer je $\Delta x = (b-a)/(N-1)$. Časovni razvoj spremljamo ob časovni mreži z M točkami $t_m = m\Delta t$, kjer je Δt časovni korak. Vrednosti valovne funkcije in potenciala v mrežnih točkah ob času t_m označimo z ψ_j^m in V_j. Krajevni odvod izrazimo z diferenco

$$\Psi''(x) \approx \frac{\psi(x+\Delta x,\, t) - 2\psi(x,\, t) + \psi(x-\Delta x,\, t)}{\Delta x^2} = \frac{\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m}{\Delta x^2}\,. \tag{5}$$

Te približke vstavimo v razvoj stanja 4 in razpišemo Hamiltonov operator, da dobimo sistem enačb

$$\psi_j^{m+1} - i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}\left[\psi_{j+1}^{m+1} - 2\psi_j^{m+1} + \psi_{j-1}^{m+1}\right] + i\frac{\Delta t}{2}V_j\psi_j^{m+1} =$$
$$\psi_j^{m} + i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}\left[\psi_{j+1}^{m} - 2\psi_j^{m} + \psi_{j-1}^{m}\right] - i\frac{\Delta t}{2}V_j\psi_j^{m}\ . \quad (6)$$

v notranjih točkah mreže, medtem ko na robu (pri $j \leq 0$ in $j \geq N$) postavimo $\psi_j^m = 0$. Vrednosti valovne funkcije uredimo v vektor Ψ^m in sistem 6 prepišemo v matrično obliko

$$\mathbf{A}\Psi^{m+1} = \mathbf{A}^*\Psi^m\ , \quad (7)$$

kjer je $\mathbf{A}$ tridiaonalna matrika z elementi

$$b = 1 + i\frac{\Delta t}{2\Delta x^2}\ , \quad a = -\frac{b}{2}\ , \quad d_j = 1 + b + i\frac{\Delta t}{2}V_j\ . \quad (8)$$

Torej je $\mathbf{A}$ oblike

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} d_1 & a & 0 & \cdots & 0 \\ a & d_2 & a & \cdots & 0 \\ 0 & a & d_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{N-1} \end{bmatrix}\ . \quad (9)$$

Kot smo napovedali, je to torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku iterativno.

2 Naloga

3 Opis reševanja

4 Rezultati

5 Komentarji in izboljšave

Literatura