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

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.

2 Naloga

3 Opis reševanja

4 Rezultati

5 Komentarji in izboljšave

Literatura