

Programowanie i metody numeryczne

Projekt *Doświadczenie z dwiema szczelinami*

Bartłomiej Zglinicki
Bartlomiej.Zglinicki@fuw.edu.pl

1. Wprowadzenie

Doświadczenie z dwiema szczelinami [1], dowodzące, że zarówno światło, jak i materia mogą spełniać jednocześnie na pozór sprzeczne ze sobą klasyczne definicje fali i cząstki, jest doskonałym sposobem prezentowania niedostatków fizyki klasycznej i zarazem podstawowych cech mechaniki kwantowej. Zwykle doświadczenie to polega na skierowaniu wiązki cząstek, np. elektronów lub fotonów, na przegrodę z dwiema szczelinami, a następnie obserwacji ich zachowania po przejściu przez tę przegrodę.

W ramach projektu przyjrzymy się od strony teoretycznej nieco prostszej, choć również pouczającej, odmianie tego eksperymentu: skierujemy na skończoną barierę potencjału z dwiema szczelinami jedną cząstkę i zbadamy, jak – zgodnie z przewidywaniami mechaniki kwantowej – zmienia się w czasie gęstość prawdopodobieństwa znalezienia tej cząstki w różnych punktach przestrzeni (dla prostoty ograniczymy się do przestrzeni dwuwymiarowej). Cel ten zrealizujemy korzystając z dobrodziejstw analizy numerycznej.

2. Sformułowanie problemu i metoda rozwiązania numerycznego

Zacniemy od ścisłego sformułowania badanego zagadnienia na gruncie mechaniki kwantowej. W sekcji 2.1. zapiszemy równanie Schrödingera, które w mechanice kwantowej opisuje ewolucję czasową układu, w postaci odpowiadającej problemowi opisanemu we wprowadzeniu oraz narzucimy odpowiednie warunki na jego rozwiązania. Zawarte tam rozważania są oparte na [1].

Następnie, w sekcji 2.2. zastosujemy odpowiednie narzędzia numeryczne, które pozwolą nam obliczać wartości przybliżonego rozwiązania tego równania. Przedstawione w tej części informacje pochodzą z [2, 3, 4].

2.1. Równanie Schrödingera

Niech $\Psi = \Psi(t, \mathbf{r})$ będzie funkcją falową pewnego układu kwantowego w reprezentacji położeniowej. Funkcja ta zadaje stan układu, a jej zmienność w czasie opisywana jest przez zależne od czasu równanie Schrödingera, które w reprezentacji położeniowej przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{r}) = \hat{H} \Psi(t, \mathbf{r}). \quad (1)$$

\hat{H} jest hamiltonianem układu. Będziemy się zajmowali pojedynczą cząstką o masie m umieszczoną w niezależnym od czasu potencjale $V = V(\mathbf{r})$, zatem

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}), \quad (2)$$

gdzie $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ to operator pędu, zaś $\Delta = \nabla^2$ – laplasjan. Wprowadzimy dla wygody jednostki, w których $m = \frac{1}{2}$ oraz $\hbar = 1$. Równanie Schrödingera (1) z hamiltonianem (2) będzie wówczas postaci

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{r}) = \left(-\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(t, \mathbf{r}). \quad (3)$$

Będziemy posługiwali się współrzędnymi kartezjańskimi i rozważali wyłącznie przypadek dwuwymiarowy – założymy, że funkcja falowa określona jest w $(1+2)$ -wymiarowej czasoprzestrzeni:

$$\Psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \supseteq \Omega \ni (t, x, y) \mapsto \Psi(t, x, y) \in \mathbb{C}. \quad (4)$$

Równanie Schrödingera (3) przyjmie zatem ostatecznie postać

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y) = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(x, y) \right) \Psi(t, x, y). \quad (5)$$

Jest to zespolone równanie różniczkowe cząstkowe drugiego rzędu. Rozwiązując je przy ustalonym potencjale $V(x, y)$ oraz warunkach brzegowych i warunku początkowym wyznaczymy funkcję falową $\Psi(t, x, y)$ na całym obszarze Ω . Znając funkcję falową, będziemy mogli łatwo obliczyć gęstość prawdopodobieństwa $P(t, x, y)$ znalezienia rozważanej cząstki w chwili t w punkcie (x, y) :

$$P(t, x, y) = \left| \Psi(t, x, y) \right|^2. \quad (6)$$

Powyższy wzór jest poprawny tylko wtedy, gdy wektor stanu jest unormowany, czyli gdy $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$. Równanie Schrödingera zachowuje normę wektora stanu, wystarczy więc, że zadamy o jego unormowanie w chwili początkowej. Zajmiemy się tym poniżej, ustalając warunek początkowy.

2.1.1. Potencjał

Przyjmijmy w równaniu (5) potencjał w postaci

$$V(x, y) = \begin{cases} \infty, & \text{gdy } x < 0 \text{ lub } x > L_x \text{ lub } y < 0 \text{ lub } y > L_y, \\ V_0, & \text{gdy } x_1 \leq x \leq x_2 \text{ oraz } 0 \leq y \leq y_1, \\ V_0, & \text{gdy } x_1 \leq x \leq x_2 \text{ oraz } y_2 \leq y \leq y_3, \\ V_0, & \text{gdy } x_1 \leq x \leq x_2 \text{ oraz } y_4 \leq y \leq L_y, \\ 0, & \text{w pozostałych przypadkach,} \end{cases} \quad (7)$$

gdzie $V_0, L_x, L_y, x_1, x_2, y_1, y_2, y_3$ i y_4 są pewnymi dodatnimi liczbami rzeczywistymi oraz $x_1 < x_2 < L_x$ i $y_1 < y_2 < y_3 < y_4 < L_y$. Potencjał ten odpowiada nieskończonej studni w kształcie prostokąta o bokach L_x i L_y , wewnątrz której przebiega prostopadle do osi Ox bariera o wysokości V_0 i szerokości $(x_2 - x_1)$ z dwiema szczelinami o szerokościach $(y_2 - y_1)$ i $(y_4 - y_3)$, oddalonymi od siebie o $(y_3 - y_2)$.

2.1.2. Warunki brzegowe i warunek początkowy

Będziemy śledzić ewolucję cząstki od chwili $t = 0$ do chwili $t = T > 0$. Z (7) wynika, że $\Psi(t, x, y) \equiv 0$ poza prostokątem opisanym nierównościami $0 \leq x \leq L_x$ oraz $0 \leq y \leq L_y$. Możemy się zatem ograniczyć do badania funkcji falowej (4) na obszarze

$$\Omega = [0, T] \times [0, L_x] \times [0, L_y], \quad (8)$$

przyjmując warunki brzegowe

$$\Psi(t, x = 0, y) = \Psi(t, x = L_x, y) = \Psi(t, x, y = 0) = \Psi(t, x, y = L_y) = 0. \quad (9)$$

Założymy, że w chwili początkowej $t = 0$ funkcja falowa ma postać unormowanej paczki gaussowskiej (pamiętajmy, że $\hbar = 1$):

$$\Psi(t = 0, x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_x\sigma_y}} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(x-x_0)^2 - \frac{1}{2\sigma_y^2}(y-y_0)^2} e^{ip_0(x-x_0)}, \quad (10)$$

gdzie $0 < x_0 \ll x_1, 0 < y_0 < L_y$ oraz $\sigma_x, \sigma_y, p_0 > 0$. Wartości oczekiwane położenia i pędu w tym stanie to:

$$\langle \hat{x} \rangle = x_0, \quad \langle \hat{y} \rangle = y_0, \quad \langle \hat{p}_x \rangle = p_0, \quad \langle \hat{p}_y \rangle = 0. \quad (11)$$

Paczka ta odpowiada więc cząstce znajdującej się w dużej odległości od bariery ze szczelinami i poruszającej się w kierunku tej bariery, prostopadle do niej.

2.2. Rozwiązanie numeryczne metodą różnic skończonych

Problem sformułowany w poprzedniej sekcji nie daje się rozwiązać analitycznie, z pomocą przychodzi nam jednak analiza numeryczna. Posłużymy się metodą różnic skończonych: zastąpimy ciągłą czasoprzestrzeń dyskretną siatką punktów, a różniczkowe równanie Schrödingera (5) – odpowiadającym mu równaniem różnicowym określonym na tej siatce. Pozwoli nam to obliczać wartości funkcji falowej w kolejnych chwilach, wyznaczonych przez czasowe współrzędne punktów siatki.

2.2.1. Dyskretyzacja czasoprzestrzeni i pochodnych przestrzennych

Zacniemy od dyskretyzacji czasoprzestrzeni: pokryjemy obszar Ω prostokątną siatką punktów, które będziemy nazywać węzłami, o współrzędnych

$$\begin{cases} t = k \Delta t, \\ x = i \Delta x, \\ y = j \Delta y, \end{cases} \quad k, i, j \in \mathbb{Z}, \quad (12)$$

gdzie Δt , Δx i Δy są ustalonymi interwałami. Dla wygody, zamiast posługiwać się bezpośrednio wartościami tych interwałów, wprowadzimy trzy liczby naturalne K , N_x i N_y takie, że $K + 1$, $N_x + 1$ i $N_y + 1$ będą liczbami węzłów w kierunku osi, odpowiednio, Ot , Ox i Oy , oraz przyjmiemy

$$\Delta t = \frac{T}{K}, \quad \Delta x = \frac{L_x}{N_x}, \quad \Delta y = \frac{L_y}{N_y}. \quad (13)$$

Wówczas

$$k \in \{0, 1, \dots, K\}, \quad i \in \{0, 1, \dots, N_x\}, \quad j \in \{0, 1, \dots, N_y\}. \quad (14)$$

Od tej pory będziemy rozważali wartości funkcji określonych na Ω wyłącznie w węzłach. W równaniu (5) dokonamy więc podstawień

$$\Psi(t, x, y) \longrightarrow \Psi(k\Delta t, i\Delta x, j\Delta y) \equiv \Psi_{i,j}^k, \quad (15)$$

$$V(x, y) \longrightarrow V(i\Delta x, j\Delta y) \equiv V_{i,j}. \quad (16)$$

Gęstość prawdopodobieństwa (6) również podlega dyskretyzacji:

$$P(t, x, y) \longrightarrow P(k\Delta t, i\Delta x, j\Delta y) \equiv P_{i,j}^k, \quad \text{przy czym oczywiście} \quad P_{i,j}^k = \left| \Psi_{i,j}^k \right|^2. \quad (17)$$

Warunki brzegowe (9) i warunek początkowy (10) przyjmą po dyskretyzacji postać

$$\Psi_{0,j}^k = \Psi_{N_x,j}^k = \Psi_{i,0}^k = \Psi_{i,N_y}^k = 0, \quad (18)$$

$$\Psi_{i,j}^0 = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma_x\sigma_y}} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(i\Delta x - x_0)^2 - \frac{1}{2\sigma_y^2}(j\Delta y - y_0)^2} e^{ip_0(i\Delta x - x_0)}. \quad (19)$$

W celu dyskretyzacji występujących po prawej stronie równania (5) drugich pochodnych posłużymy się standardowymi wzorami:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x, y) \longrightarrow \frac{\Psi_{i+1,j}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i-1,j}^k}{\Delta x^2}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(t, x, y) \longrightarrow \frac{\Psi_{i,j+1}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i,j-1}^k}{\Delta y^2}. \quad (21)$$

2.2.2. Dyskretyzacja pochodnej czasowej – schemat Cranka–Nicolson

Zajmiemy się teraz lewą stroną równania Schrödingera (5), zawierającą wyłącznie pierwszą pochodną funkcji falowej po czasie. Zauważmy na początku, że wykorzystując podstawienia (15), (16), (20) i (21) możemy już zapisać prawą stronę tego równania w postaci dyskretniej – oznaczmy ją symbolem $F_{i,j}^k$:

$$F_{i,j}^k \equiv -\frac{\Psi_{i+1,j}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} - \frac{\Psi_{i,j+1}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} + V_{i,j}\Psi_{i,j}^k. \quad (22)$$

Równanie Schrödingera (5) po dyskretyzacji przyjmie zatem postać

$$i \left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y) \right]_{i,j}^k = F_{i,j}^k, \quad (23)$$

gdzie symbolem $\left[\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y) \right]_{i,j}^k$ oznaczyliśmy dyskretną formę pochodnej czasowej funkcji falowej. Wyznamy ją teraz.

Mamy do dyspozycji kilka sposobów różnicowego przybliżenia pierwszej pochodnej. Możemy na przykład posłużyć się podstawieniem określanym niekiedy jako schemat Eulera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y) \longrightarrow \frac{\Psi_{i,j}^{k+1} - \Psi_{i,j}^k}{\Delta t}. \quad (24)$$

Równanie (23) przyjmie wówczas postać

$$i \frac{\Psi_{i,j}^{k+1} - \Psi_{i,j}^k}{\Delta t} = F_{i,j}^k. \quad (25)$$

Inny sposób to wsteczny schemat Eulera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x, y) \longrightarrow \frac{\Psi_{i,j}^k - \Psi_{i,j}^{k-1}}{\Delta t}, \quad (26)$$

prowadzący do równania (23) w postaci

$$i \frac{\Psi_{i,j}^k - \Psi_{i,j}^{k-1}}{\Delta t} = F_{i,j}^k \quad (27)$$

lub, po przenumеровaniu $k \rightarrow k+1$,

$$i \frac{\Psi_{i,j}^{k+1} - \Psi_{i,j}^k}{\Delta t} = F_{i,j}^{k+1}. \quad (28)$$

Istnieją jeszcze inne wzory tego typu, nie wykorzystamy jednak bezpośrednio żadnego z nich. Zamiast tego posłużymy się nieco zaskakującą metodą określaną jako schemat Cranka–Nicolson: dodamy do siebie stronami równania (25) i (28), a następnie podzielimy otrzymane w ten sposób równanie stronami przez 2. W wyniku otrzymamy dyskretnie równanie Schrödingera w postaci

$$i \frac{\Psi_{i,j}^{k+1} - \Psi_{i,j}^k}{\Delta t} = \frac{1}{2} (F_{i,j}^{k+1} + F_{i,j}^k). \quad (29)$$

Po prawej stronie tego równania, oprócz wielkości z indeksem czasowym k występują też wielkości z indeksem czasowym $(k+1)$, schemat Cranka–Nicolson jest zatem schematem niejawnym – oznacza to, że nie doprowadzi on nas do jawnego wzoru na wartość funkcji falowej w danym węźle w kolejnym kroku czasowym $(k+1)$, lecz do układu równań zawierających wartości funkcji falowej w kolejnym kroku czasowym w różnych węzłach. Jest przez to bardziej złożony obliczeniowo niż prostsze, jawne schematy, na przykład (25), ma jednak kluczowe zalety: można wykazać, że jest bezwarunkowo numerycznie stabilny oraz że zachowuje normę wektora stanu, czyli że wielkość $\langle \Psi^k | \Psi^k \rangle$ nie zmienia się wraz ze zmianą k – jest to w przypadku równania Schrödingera niezbędne.

2.2.3. Równanie Schrödingera w postaci dyskretnej

Podstawiając (22) do (29) otrzymamy ostatecznie różnicową postać równania Schrödingera (5):

$$\begin{aligned} i \frac{\Psi_{i,j}^{k+1} - \Psi_{i,j}^k}{\Delta t} = & -\frac{1}{2\Delta x^2} \left(\Psi_{i+1,j}^{k+1} - 2\Psi_{i,j}^{k+1} + \Psi_{i-1,j}^{k+1} + \Psi_{i+1,j}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i-1,j}^k \right) \\ & -\frac{1}{2\Delta y^2} \left(\Psi_{i,j+1}^{k+1} - 2\Psi_{i,j}^{k+1} + \Psi_{i,j-1}^{k+1} + \Psi_{i,j+1}^k - 2\Psi_{i,j}^k + \Psi_{i,j-1}^k \right) \\ & + \frac{1}{2} (V_{i,j} \Psi_{i,j}^{k+1} + V_{i,j} \Psi_{i,j}^k). \end{aligned} \quad (30)$$

Pomnożymy teraz obie strony tego równania przez $(-i\Delta t)$, przeniesiemy wszystkie wyrazy ze wskaźnikiem czasowym $(k+1)$ na lewą stronę, zaś wszystkie wyrazy ze wskaźnikiem czasowym k – na prawą stronę oraz wprowadzimy oznaczenia

$$r_x = -\frac{i\Delta t}{2\Delta x^2}, \quad r_y = -\frac{i\Delta t}{2\Delta y^2}, \quad (31)$$

$$a_{ij} = \left(1 - 2r_x - 2r_y + i\frac{\Delta t}{2}V_{i,j} \right), \quad b_{ij} = \left(1 + 2r_x + 2r_y - i\frac{\Delta t}{2}V_{i,j} \right). \quad (32)$$

Otrzymamy wówczas

$$\begin{aligned} r_x \Psi_{i+1,j}^{k+1} + r_x \Psi_{i-1,j}^{k+1} + a_{i,j} \Psi_{i,j}^{k+1} + r_y \Psi_{i,j+1}^{k+1} + r_y \Psi_{i,j-1}^{k+1} \\ = -r_x \Psi_{i+1,j}^k - r_x \Psi_{i-1,j}^k + b_{i,j} \Psi_{i,j}^k - r_y \Psi_{i,j+1}^k - r_y \Psi_{i,j-1}^k. \end{aligned} \quad (33)$$

Właśnie z takiej dyskretnej postaci równania Schrödingera będziemy korzystać.

Jak posługiwać się równaniem (33)? Musimy zapisać nie jedno, ale układ takich równań dla *ustalonego* $k \in \{0, 1, \dots, K-1\}$ oraz dla *wszystkich* $i \in \{1, \dots, N_x-1\}$, $j \in \{1, \dots, N_y-1\}$; nie bierzemy tu pod uwagę $i=0$, $i=N_x$, $j=0$ ani $j=N_y$, ponieważ warunki brzegowe (18) zmuszają nas do traktowania wartości $\Psi_{i,j}^k$ o takich wskaźnikach jako stałych; nie rozważamy także $k=K$, bo wówczas wskaźnik $(k+1)$ byłby poza zakresem. Znając wartości $\Psi_{i,j}^k$ funkcji falowej dla wszystkich par (i, j) w chwili odpowiadającej wskaźnikowi czasowemu k , z tego układu równań wyznaczymy wartości $\Psi_{i,j}^{k+1}$ funkcji falowej dla wszystkich par (i, j) w chwili następnej, odpowiadającej wskaźnikowi czasowemu $(k+1)$. Warunek początkowy (19) zadaje wartości funkcji falowej dla $k=0$, zatem zaczynając od $k=0$ możemy krok po kroku wyznaczać funkcję falową w kolejnych chwilach, a wraz z nią gęstość prawdopodobieństwa (17).

2.2.4. Formalizm macierzowy i algorytm rozwiązania

Najprostszym sposobem na poradzenie sobie z układem równań typu (33) będzie zapisanie go w postaci macierzowej:

$$\mathbf{G}\Psi^{k+1} = \mathbf{H}\Psi^k, \quad (34)$$

gdzie

$$\Psi^{k+1} = \begin{bmatrix} \Psi_{1,1}^{k+1} \\ \Psi_{1,2}^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_{i,j}^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_{N_x-1,N_y-1}^{k+1} \end{bmatrix} \quad \text{oraz} \quad \Psi^k = \begin{bmatrix} \Psi_{1,1}^k \\ \Psi_{1,2}^k \\ \vdots \\ \Psi_{i,j}^k \\ \vdots \\ \Psi_{N_x-1,N_y-1}^k \end{bmatrix}, \quad (35)$$

zaś \mathbf{G} i \mathbf{H} są macierzami, których elementy macierzowe łatwo odczytać z (33). Macierze te będą miały dosyć regularną postać, wiele spośród ich elementów macierzowych będzie równych 0, ponieważ równanie (33) wiąże ze sobą tylko trzy sąsiednie składowe wektorów Ψ^{k+1} i Ψ^k . Warto podkreślić, że macierze \mathbf{G} i \mathbf{H} nie zależą od k – należy je więc wyznaczyć tylko raz i stosować w tej samej postaci dla wszystkich k .

Składowe wektora są zwykle numerowane pojedynczym wskaźnikiem, a nie dwoma, jak (i, j) w (35). Możemy więc dla wygody stosować dla składowych wektora Ψ^k zamiast oznaczeń $\Psi_{i,j}^k$ oznaczenia Ψ_m^k ; analogicznie dla wektora Ψ^{k+1} . Wskaźnik $m \in \{1, 2, \dots, (N_x - 1)(N_y - 1)\}$ będzie wtedy powiązany ze wskaźnikami (i, j) zależnością

$$m = (i - 1)(N_y - 1) + j. \quad (36)$$

Rozwiązaniem równania (34) jest wektor

$$\Psi^{k+1} = \mathbf{U}\Psi^k, \quad \text{gdzie „macierz ewolucji”} \quad \mathbf{U} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}. \quad (37)$$

Formalizm macierzowy daje nam zatem prosty algorytm numerycznego rozwiązania naszego problemu:

- 1) wyznaczamy macierze \mathbf{G} i \mathbf{H} z (34) na podstawie (33) i (35), a następnie obliczamy macierz $\mathbf{U} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{H}$,
- 2) dla kolejnych $k = 0, 1, \dots, K - 1$ obliczamy wektor Ψ^{k+1} posługując się wzorem (37) i interpretujemy jego składowe jako $\Psi_{i,j}^{k+1}$; w pierwszym kroku ($k = 0$) po prawej stronie (37) pojawi się wektor Ψ^0 , którego składowe dane są wzorem (19).

Znając wielkości $\Psi_{i,j}^{k+1}$ możemy łatwo obliczyć wartości gęstości prawdopodobieństwa (17).

3. Opis projektu

Celem projektu jest przygotowanie programu komputerowego, który posługując się metodą różnic skończonych w sposób omówiony w sekcji 2.2. rozwiąże problem postawiony w sekcji 2.1. Wynikiem działania programu powinno być K wykresów gęstości prawdopodobieństwa (6) w ustalonej chwili jako funkcji współrzędnych przestrzennych x i y , przygotowanych na podstawie numerycznej zależności (17). Każdy z wykresów ma odpowiadać innej chwili, czyli innej wartości wskaźnika k . Alternatywnie program może wygenerować animację, której kolejne klatki będą takimi wykresami, uporządkowanymi tak, by wartość wskaźnika k rosła z klatki na klatkę.

Projekt może zostać wykonany przy użyciu wybranego przez Ciebie narzędzia: któregoś z pakietów obliczeń naukowych (np. *Wolfram Mathematica*) lub dowolnego języka programowania. Wedle uznania możesz nawet wykorzystać więcej takich narzędzi (np. jedno do wykonania obliczeń, drugie do wizualizacji wyników). Możesz także swobodnie korzystać ze specjalistycznego oprogramowania do analizy numerycznej, zarówno wbudowanego w narzędzie, które wybrałeś do wykonania projektu, jak i rozpowszechnianego w postaci zewnętrznych bibliotek.

Użytkownik programu powinien mieć możliwość określenia wartości wszystkich parametrów (K , N_x , N_y , T , parametrów potencjału i stanu początkowego etc.). Jeśli przygotujesz projekt w formie, która zakłada pracę bezpośrednią z kodem źródłowym (np. jako notatnik *Wolfram Mathematica* lub *Jupyter Notebook*), parametry te muszą być reprezentowane przez zmienne zdefiniowane w pobliżu początku kodu. Gdy zaś projekt zostanie wykonany w postaci skryptu (np. w języku Python) lub kodu przeznaczonego do kompilacji (np. w języku C++), parametry powinny być pobierane ze standardowego wejścia, z pliku lub jako argumenty wywołania.

Gotowy projekt ma zawierać wyłącznie pliki z kodem źródłowym – w przypadku programu przeznaczonego do kompilacji nie trzeba dołączać już skompilowanych plików wykonywalnych. W bardziej skomplikowanych przypadkach należy dołączyć do projektu krótką informację (np. w postaci zwykłego pliku tekstowego) o tym, jak uruchomić lub skompilować projekt i jakie zewnętrzne zależności (np. biblioteki do analizy numerycznej) są do tego potrzebne oraz w jaki sposób przekazać programowi wartości parametrów.

Powodzenia!

Literatura

- [1] Shankar R., *Mechanika kwantowa*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2020.
- [2] *Programowanie i metody numeryczne – Wykład 12. Równania różniczkowe cząstkowe.*
- [3] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery, B.P., *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Third Edition, Cambridge University Press 2007.
- [4] Boudreau J.F., Swanson E.S., *Applied Computational Physics*, Oxford University Press 2018.