

## Spis treści

<b>1</b>	<b>Unitarność</b>	<b>1</b>
1.1	Postać Cayley'a operatora ewolucji . . . . .	1
<b>2</b>	<b>Metody stabilne, unitarne i jawne</b>	<b>2</b>
2.1	Równanie dyfuzji . . . . .	4
2.2	Więcej wymiarów . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Problemy graficzne</b>	<b>4</b>
3.1	Rzutowanie . . . . .	5
3.2	Poziomice . . . . .	5
3.3	Problem niewidocznych linii . . . . .	7

TEMAT: ZALEŻNE OD CZASU RÓWNANIE SCHRÖDINGERA. RUCH PAKIETÓW FALOWYCH. SCHEMAT JAWNY, STABILNY I UNITARNY.

Podstawa: H.M. Schey. J.L. Schwartz, Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena, *Am. J. Phys.*, **35** (1967) 177

## 1 Unitarność

Pokazany w poprzednim wykładzie schemat iteracyjny rozwiązania równania Schrödingera zależnego od czasu jest schematem jawnym (tzn.  $\psi_{n+1}$  jest wyliczane na podstawie poprzedniego kroku  $\psi_n$ ) lecz nie jest schematem unitarnym. Operator ewolucji  $\exp(\pm i\Delta t\hat{H})$  zastąpiliśmy tam wyrażeniem  $1 \pm i\Delta t\hat{H}$ , które nie zapewnia unitarności funkcji falowej ( $\int |\psi|^2 dx \neq 1$ ). Podobnie jest z prostymi schematami niejawnymi opartymi na tym wyrażeniu. Eliminują one niestabilność numeryczną lecz problem niezachowania unitarności wciąż pozostaje. Przyjrzyjmy się stabilnej metodzie niejawnej. Otrzymamy ją następująco. Funkcja falową  $\psi^{n+1}$  w chwili  $\Delta t$  potraktujemy chwilowo jako daną. Na jej podstawie wyliczymy  $\psi^n$ . Ponieważ  $\psi(\Delta t) = \exp(-i\Delta t H)\psi(0)$ , więc  $\psi(0) = \exp(i\Delta t \hat{H})\psi(\Delta t)$ . Stąd, rozwijając w szereg Taylora, mamy

$$\psi_j^n = \psi_j^{n+1} - (i\Delta t/\Delta x^2)[\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} - \psi_{j-1}^{n+1} - \Delta x^2 V_j \psi_j^{n+1}].$$

Równanie to, chociaż stabilne, daje niejawnie  $\psi^{n+1}$ . Metoda jest, jak to nazywamy, typu *implicit*. Aby wyznaczyć  $\psi^{n+1}$  potrzeba stosować specjalne techniki algebraiczne.

Ważniejszy jest jednak problem unitarności  $\psi$ .

## 1.1 Postać Cayley'a operatora ewolucji

Prostym przybliżeniem operatora ewolucji  $\exp(i\Delta t\hat{H})$  jest jego postać Cayleya

$$(1 - \frac{1}{2}\Delta t\hat{H})/(1 + \frac{1}{2}\Delta t\hat{H}), \quad (1)$$

która dodatkowo zapewnia dokładność do rzędu  $\Delta t^2$ .

Stosując postać Cayleya operatora ewolucji możemy teraz zapisać

$$\psi_j^{n+1} = (1 - \frac{1}{2}\Delta t\hat{H})/(1 + \frac{1}{2}\Delta t\hat{H})\psi_j^n, \quad (2)$$

Po prostych obliczeniach dostaniemy następujący schemat różnicowy

$$\begin{aligned} \psi_{j+1}^{n+1} + (i\frac{2\Delta x^2}{\Delta t} - \Delta t^2 V_j - 2)\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1} = \\ -\psi_{j+1}^n + (i\frac{2\Delta x^2}{\Delta t} + \Delta t^2 V_j + 2)\psi_j^n - \psi_{j-1}^n. \end{aligned} \quad (3)$$

Równanie to jest stabilne, zapewnia unitarność, lecz nie daje jawnie wartości dla  $\psi_{n+1}$ .

## 2 Metody stabilne, unitarne i jawne

Podstawa: Richardson, John L., Visualizing quantum scattering on the CM-2 supercomputer, *Computer Physics Communications* **63** (1991) pp 84-94 Dyskutowane poprzednio metody były oparte na przybliżeniu dla operatora ewolucji funkcji falowej, który jest formalnym rozwiązaniem równania Schrödingera. Równanie ewolucji jest postaci

$$\psi(x, t) = \exp(-i\frac{t-t_0}{\hbar}\hat{H})\psi(x, t_0). \quad (4)$$

Najprostsza metoda (niestabilna) była oparta na przybliżeniu

$$\exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{H}) = 1 - i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{H} + \mathcal{O}([\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{H}]^2). \quad (5)$$

Prowadziło to do rozbieżności metody.

Drugie przybliżenie było oparte na postaci Cayleya operatora ewolucji (patrz 1). Ta metoda była wprawdzie stabilna numerycznie lecz niejawna i kosztowna numerycznie gdyż wymagała złożonych obliczeń prowadzących do rozwikłania niejawnego schematu ewolucji.

Metoda, którą podaje Richardson, jest również oparta na przybliżeniu operatora ewolucji, lecz jest to metoda zarówno jawna, jak i unitarna, i stabilna numerycznie.

Operator ewolucji zapisywany jest najpierw w postaci sumy operatora energii kinetycznej  $\hat{T}$  i potencjalnej  $\hat{V}$ . Dalej  $\hat{T}$  rozkłada się na sumę  $M$  części  $\hat{T} = \sum_{l=1}^M \hat{T}_l$ , dla których łatwo jest policzyć  $\exp \hat{T}_l$ . Następnie korzystamy z tzw. przybliżenia iloczynowego Trottera:

$$\exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{H}) = \left( \prod_{j=1}^M \exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{T}_j) \right) \exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{V}) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (6)$$

Błąd jaki tutaj popełniamy zależy od wartości komutatorów  $[T_l, T_l']$ ,  $[T_l, V]$  i od wielkości kroku czasowego  $\Delta t$ .

W przypadku jednego wymiaru przestrzennego podział operatora  $\hat{T}$  można określić z formuły różnicowej dla Laplasjanu:

$$(\hat{T}\psi)_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}[2\psi_n - \psi_{n-1} - \psi_{n+1}].$$

Macierz  $T$  jest postaci

$$[T] = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & & & & & \\ 0 & \dots & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Macierz ta daje się zapisać jako suma następujących macierzy

$$[T_e] = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \begin{pmatrix} M & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & M & 0 & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & \dots & 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & M \end{pmatrix} \quad (8)$$

oraz

$$[T_o] = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ 0 & M & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & \dots & 0 & M & 0 \\ -1 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

gdzie  $M$  jest macierzą kwadratową  $2 \times 2$

$$M = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Macierze  $[T_e]$  i  $[T_o]$  są sumami prostymi macierzy  $M$ . Łatwo jest obliczyć exponentę macierzy  $M$ . Mamy mianowicie

$$\begin{aligned} \exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}M) &= 1 + [\exp(-i\epsilon) - 1] \frac{ma^2}{\hbar^2} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \exp(-i\epsilon) & 1 - \exp(-i\epsilon) \\ 1 - \exp(-i\epsilon) & 1 + \exp(-i\epsilon) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11)$$

gdzie  $\epsilon = \Delta t \hbar / ma^2$ , a  $\alpha = 1 + \exp(-i\epsilon)/2$  i  $\beta = 1 - \exp(-i\epsilon)/2$ . Macierz  $\exp(-i\frac{\Delta t}{\hbar}M)$  jest unitarna i posiada wartości własne  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = \exp(-i\epsilon)$ .

**Z a d a n i e 1.**

Proszę sprawdzić słuszność ostatniej formuły. Obliczyć wartości własne  $M$  i  $\exp(-i\epsilon M)$ .

Zapiszmy wyniki w postaci operatorowej

$$(\hat{T}_e\psi)_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left( \psi_n - \frac{1}{2}(1 - (-1)^n)\psi_{n-1} - \frac{1}{2}(1 + (-1)^n)\psi_{n+1} \right), \quad (12)$$

$$(\hat{T}_o\psi)_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left( \psi_n - \frac{1}{2}(1 + (-1)^n)\psi_{n-1} - \frac{1}{2}(1 - (-1)^n)\psi_{n+1} \right). \quad (13)$$

Exponenta tych wyrażeń jest postaci

$$\left\{ \exp(-i\Delta t/\hbar\hat{T}_e\psi) \right\}_n = \left( \alpha\psi_n - \frac{\beta}{2}(1 - (-1)^n)\psi_{n-1} - \frac{\beta}{2}(1 + (-1)^n)\psi_{n+1} \right), \quad (14)$$

$$\left\{ \exp(-i\Delta t/\hbar\hat{T}_o\psi) \right\}_n = \left( \alpha\psi_n - \frac{\beta}{2}(1 + (-1)^n)\psi_{n-1} - \frac{\beta}{2}(1 - (-1)^n)\psi_{n+1} \right). \quad (15)$$

## 2.1 Równanie dyfuzji

Wyniki dotyczące stabilności, dyskutowane tutaj dla przypadku równania Schrödingera, są również słuszne dla równania dyfuzji. Podstawienie  $t \rightarrow -it$  i  $V = 0$  przekształca wszystkie wzory otrzymane dla równania Schrödingera w klasyczne równanie dyfuzji. Operatory unitarne zamieniane są rzeczywistymi operatorami o wartościach własnych mniejszych niż jeden i stabilność metody jest zapewniona.

## 2.2 Więcej wymiarów

W przypadku większej liczby wymiarów wyrażenia są niewiele bardziej skomplikowane.

**Z a d a n i e 2.**

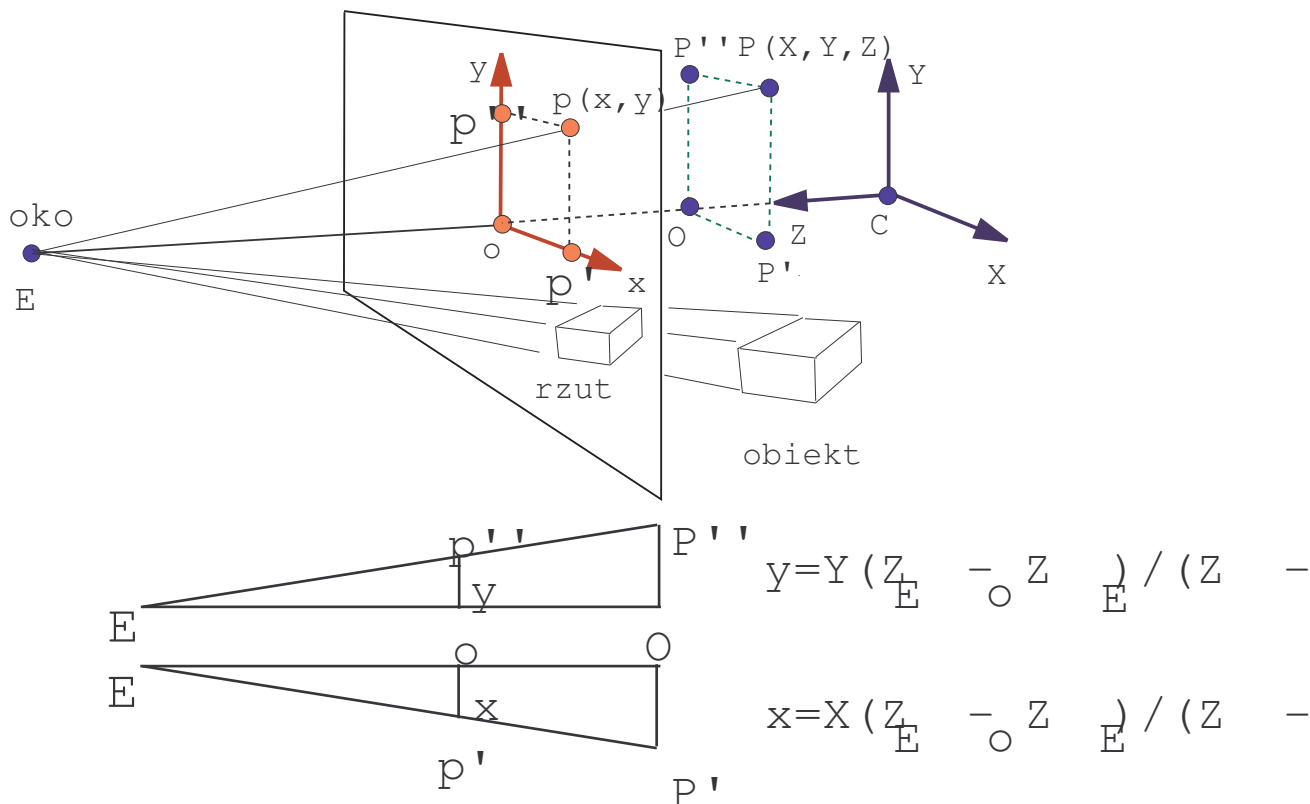
Otrzymać wzory różnicowe dyskutowanej metody dla przypadku  $n$ -wymiarowego równania Schrödingera lub równania dyfuzji.

## 3 Problemy graficzne

Ponieważ dyskutowane wyżej problemy można przedstawić graficznie zajmiemy się przez chwilę sposobami reprezentacji danych na ekranie. Dyskusja będzie dotyczyć trzech spraw. Pierwsza to proste rzutowanie figur 3 wymiarowych, druga to rysowanie poziomicy (konturów), a trzecia to problem niewidocznych linii na rysowanych rzutach.

### 3.1 Rzutowanie

#### RZUTOWANIE



Rzutowanie figur na ekran. (Patrz tekst)

Łatwo sprawdzić słuszność następujących równości

$$x = |OP'| \cdot |EO|/|EQ| = X(Z_E - Z_O)/(Z_E - Z) \quad (16)$$

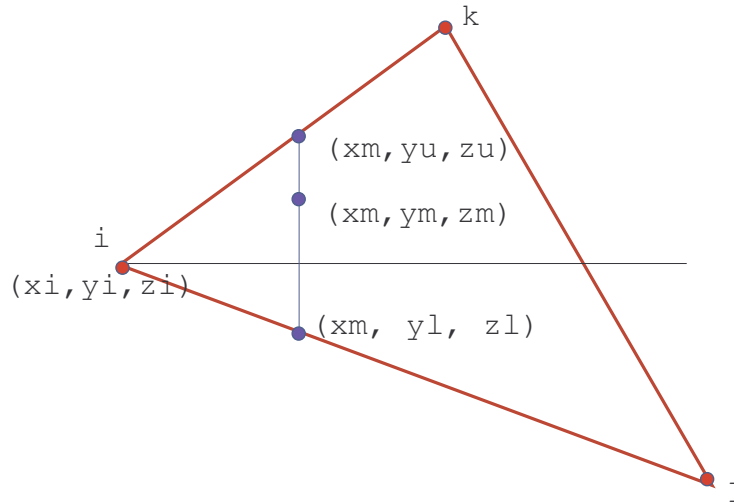
$$y = Y(Z_E - Z_O)/(Z_E - Z) \quad (17)$$

Zadanie 3.

Napisz program w Java<sup>TM</sup> (klasa), który rzutuje figurę o zadanych wierzchołkach  $(x_i, y_i, z_i)$  na ekran. Zastosuj do kilku wybranych figur przestrzennych.

### 3.2 Poziomice

Poziomice są liniami jednakowej wartości funkcji  $z = f(x, y)$ , a więc określone są równaniem  $z = const$ . Najwygodniej jest podzielić obszar określoności funkcji  $f$  na trójkątne podobszary. Interpolacja wielkości  $z$  w takim elementarnym obszarze trójkąta przebiega następująco (patrz rysunek).



Interpolacja  $z$  w punkcie wewnętrznym  $(x_m, y_m)$  trójkąta  $(i-j-k)$ .

Najpierw znajdujemy najdalej wysunięte punkty w  $x$ :

$$x_{min} = \min(x_i, x_j, x_k), \quad x_{max} = \max(x_i, x_j, x_k).$$

W celu zbadania całego obszaru trójkąta przesuwamy linię  $x = x_m$  od  $x_{min}$  do  $x_{max}$ . Dla każdej wartości  $x_m$  znajdujemy granice zmienności  $y$ . Nazwiemy je  $y_l$  oraz  $y_u$ . Są one ograniczone dwoma bokami trójkąta  $i-j-k$ . Trzeci bok nie jest ważny i wykluczamy go z rozważań. Aby sprawdzić, który to bok sprawdzamy czy  $x_m$  leży poza przedziałem  $(x_p, x_q)$ , gdzie  $p, q = i, j, k$ . Jeśli np.  $x_m$  leży poza przedziałem  $(x_k, x_j)$  (patrz rysunek), to bok  $ij$  wykluczamy z procedury znajdowania  $y_u$  i  $y_l$  dla  $x = x_m$ . Jeśli  $x_m$  przekroczy  $x_k$  to znajdzie się na zewnątrz  $(x_i, x_k)$  i w konsekwencji wykluczamy bok  $ik$ . Jeśli będziemy wyznaczać  $x_u$  i  $x_l$  z równań boków  $ik$  oraz  $ij$ , jak na rysunku, to dostaniemy

$$y_u = y_i + (y_k - y_i)(x_m - x_i)/(x_k - x_i),$$

$$y_l = y_i + (y_j - y_i)(x_m - x_i)/(x_j - x_i).$$

Jeżeli  $x_k = x_i$  lub  $x_j = x_i$  to  $y_u$  i  $y_l$  są równe maksymalnej i minimalnej wartości  $y$ . Podobne formuły interpolacyjne stosujemy dla  $z$  otrzymując  $z_u$  i  $z_l$  w punktach  $(x_m, y_u)$  i  $(x_m, y_l)$  (wystarczy zamienić  $y$ -ki przez  $z$ -ty w równaniach). Znajomość granic  $z_l$  i  $z_u$  na linii  $x_m$  pozwala znaleźć wartość  $z$  w punkcie  $y_m$  przez interpolację

$$z(x_m, y_m) = z_m = z_l + (y_m - y_l)(z_u - z_l)/(y_u - y_l).$$

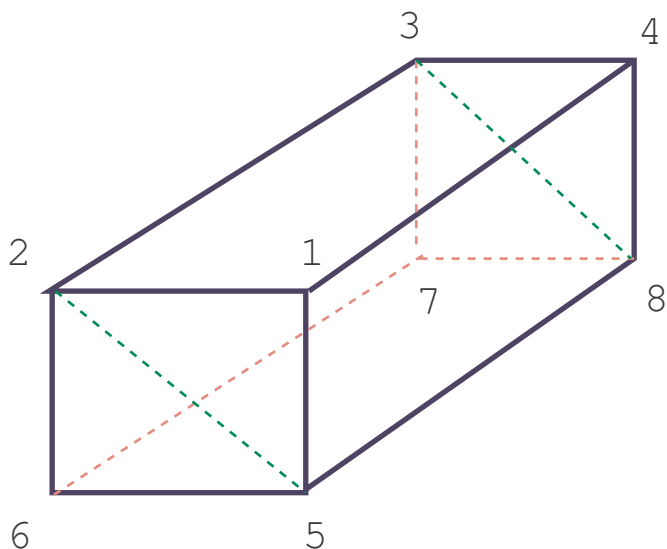
Zmieniając  $x_m$  w granicach  $(x_{min}, x_{max})$  i  $y_m$  oraz  $y_m$  w granicach  $(y_l, y_u)$  możemy znaleźć  $z$  we wszystkich interesujących nas punktach trójkąta  $i-j-k$ . Należy przy tym dobrać wielkość przyrostów  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  tak by otrzymać w miarę gładkie krzywe.

**Z a d a n i e 4.**

(Dla zainteresowanych) Napisz program dokonujący triangulacji dziedziny  $z = f(x, y)$  i znajdujący poziomice  $z = const$ .

### 3.3 Problem niewidocznych linii

Które linie rysowanej na ekranie figury są widoczne, a które nie? Jak je odróżnić? Problem ten prosto opisał H.N. Lerman (Software Age, July, 1970). Aby zrozumieć na czym to polega spójrzmy na rysunek prostopadłościanu.



Prostopadłościan.

Zewnętrzne wierzchołki prostopadłościanu wraz z łączącymi je krawędziami są zawsze widoczne. Wewnętrzne wierzchołki mogą być albo widoczne albo niewidoczne. Zależy to od tego, z której strony kartki papieru znajdują one się znajduje, a więc zależy to od wartości współrzędnej  $z$  wierzchołka. Np., jeśli kartka papieru (ekran) ustawimy tak by przechodził przez  $z = 0$  to wierzchołki o  $z < 0$  (i punkty linii o  $z < 0$ ) nie powinny pojawić się na rysunku.

**Z a d a n i e 5.**

(Dla zainteresowanych) Napisz program który rysuje powierzchnię  $z = f(x, y)$  bez linii niewidzialnych.