

Pagrindinių komponentių išskyrimo metodo taikymas Šredingerio lygčiai

Raimondas Čiegis, Gerda Jankevičiūtė, Teresė Leonavičienė

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fundamentinių mokslų fakultetas

Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

E. paštas: raimondas.ciegis@vgtu.lt, gerda.jankeviciute@vgtu.lt

E. paštas: terese.leonaviciene@vgtu.lt

Santrauka. Straipsnyje nagrinėjamos pagrindinių komponentių išskyrimo metodo (PKIM) taikymo galimybės vienmačiam Šredingerio uždaviniui spręsti. Pradžioje trumpai pateikiamos pagrindinės metodo idėjos, o vėliau dėmesys skiriamas tiesinio Šredingerio uždavinio analizei. Nagrinėjant pavyzdžius aptariami svarbiausi – pagrindinių komponentių išskyrimo, uždavinio dimensijos sumažinimo ir metodo tinkamumo klausimai. Atlikta analizė ir skaitinių skaičiavimų rezultatai iliustruoti grafikais.

Raktiniai žodžiai: vienmatės Šredingerio lygtys, skaitiniai metodai, pagrindinių komponentių išskyrimo metodas.

1 Įvadas

Sparčiai augantis susidomėjimas lazerinėmis technologijomis, skatina tyrinėti kvantinės mechanikos dėsnius. Viena pagrindinių kvantinės mechanikos lygčių – Šredingerio lygtis. Savo struktūra ji primena parabolinio tipo lygtis. Tačiau ji išreiškia judančios dalelės bangines savybes, t. y. dalelės judėjimą apibūdina bangine funkcija.

Sprendiniai tiesinėms ir netiesinėms Šredingerio lygtims yra modeliuojami įvairiais metodais [1, 5]. Taikomi išreikštiniai ir neišreikštiniai skaitiniai metodai, spektrinės analizės metodai ir pan. [5] straipsnyje netiesinės Šredingerio lygties sprendimui taikytas pagrindinių komponentių išskyrimo metodas.

Šiame straipsnyje aptarsime tiesinio Šredingerio uždavinio sprendimo taikant pagrindinių komponentių išskyrimo metodą galimybes. PKIM neprarandant svarbiausios informacijos ir naudojant ortogonaliasias funkcijas sumažinama uždavinio dimensija. Kai randami mažesnės dimensijos uždavinio sprendiniai, naudojant nesudėtingas transformacijas gaunamos pradinio uždavinio sprendinių aproksimacijos. Pagrindinių komponentių išskyrimo metodas plačiau aprašytas [2, 6], o jo taikymo vienmačiam parabolinio tipo uždaviniui spręsti schema aptarta [4].

2 Uždavinio formulavimas ir PKIM metodo taikymas

Nagrinėjame vienmatį tiesinį Šredingerio uždavinį:

$$\begin{cases} i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, x \in R, \\ u(x, t) \rightarrow 0, & |x| \rightarrow \infty, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in R. \end{cases} \quad (1)$$

Pirmiausia vadovaudamiesi PKIM idėjomis [2, 4] nustatome pagrindinius vektorius. Todėl diskretizuojame (1) uždavinį erdvinės koordinatės kitimo intervalą $[x_0, x_N]$ parinkdami taip, kad galėtume tam tikrą laiką T stebėti mus dominantį procesą: $\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$, čia $\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \{x_0, x_N\}$, $\bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{t_0\}$, $h = 1/N$,

$$\omega_h = \{x_i = ih, i = 1, 2, \dots, N-1\}, \quad \omega_\tau = \{t_j = j\tau, j = 1, 2, \dots, K, t_K = T\}.$$

Diskretizuojame lygtyje esančias išvestines:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx AU^j = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2},$$

čia $u_i^j = u(x_i, t_j)$, $u_i^0 = u_0(x_i)$, $u_0^j = 0$, $u_N^j = 0$. Gautąjį uždavinį sprendžiame taikydami Kranko–Nikolsono schemą [3, 4] ir diskretaus uždavinio sprendinį skaičiuojame taip:

$$U^{j+1} = U^j - \frac{\tau}{4i}AU^j - \frac{\tau}{4i}AU^{j+1}, \quad U^0 = u_0(x_i). \quad (2)$$

Šios schemos aproksimacijos paklaida yra $\mathcal{O}(\tau^2 + h^2)$ eilės [3]. Kranko–Nikolsono schema apskaičiuojame diskrečiuosius uždavinio sprendinius M laiko sluoksniuose ir sudarome matricą $U = [U^1; U^2; \dots; U^M]^T$, kurios eilė yra $(M \times N)$. Randame matricos U SVD skaidinį:

$$U = SD\bar{V}^T,$$

čia D – įstrižaininė $(M \times N)$ eilės matrica (jos įstrižainėje yra matricos U ypatingosios reikšmės), o matricų S ir \bar{V}^T eilės atitinkamai yra $(M \times M)$ ir $(N \times N)$. Pagrindinių komponentių, išskiriamų iš matricos V , turi būti tiek, kad būtų išsaugoma apie 99% pradinės informacijos. Mažesnės dimensijos diskretusis uždavinys gaunamas diskretųjį sprendinį užrašant tiesiniu pagrindinių komponentių dėstiniu (Φ – pagrindinių komponentių $(N \times s)$ matrica):

$$U^j = \Phi Y^j, \quad (3)$$

t. y. sprendinio naujame laiko sluoksnyje ieškome taip:

$$Y^{j+1} = Y^j - \frac{\tau}{4i}\bar{\Phi}^T A \Phi Y^j - \frac{\tau}{4i}\bar{\Phi}^T A \Phi Y^{j+1}, \quad Y^0 = \bar{\Phi}^T U^0, \quad (4)$$

čia Φ ir $\bar{\Phi}^T$ – atitinkamai yra pagrindinių komponentių ir jos jungtinė transponuoti matricos, o $U^0 = (u_0^0, u_1^0, \dots, u_N^0)^T$. Išsprendę mažesnės dimensijos uždavinį, pradinio uždavinio diskretųjį sprendinį surandame pagal (3) išraišką. Pasitelkdami PKIM tiesinei Šredingerio lygčiai siekėme išsiaiškinti:

1. Ar pagrindinių komponentių išskyrimo metodas galėtų būti taikomas sprendžiant tiesinį Šredingerio uždavinį?
2. Kokios pagrindinės komponentės išskiriamos? Koks jų skaičius?
3. Kaip gerai jos atkuria sprendinius? Ar tinka tolesnei sprendinio elgsenos prognozei?

3 PKIM taikymas stovinčiai Gauso bangai

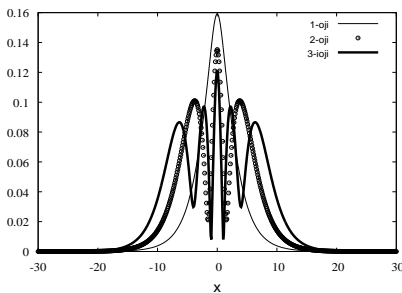
Nagrinėkime antrajame skyriuje suformuluotą tiesinį Šredingerio uždavinį (1) imdami $u(x, 0) = e^{-x^2}$, o diskrečiajam uždaviniui erdvinės koordinatės kitimo intervalą pasirinkime $[-30, 30]$. Žinomas šio uždavinio tikslusis sprendinys – $u(x, t) = \sqrt{\frac{i}{-2t+i}} e^{\frac{ix^2}{2t-i}}$. Turėdami tikslųjį sprendinį mes nesprendėme (2) diskrečiojo uždavinio, o sprendinių rinkinius, reikalingus pagrindinėms komponentėms išskirti, generavome iš tiksliojo sprendinio. Toks pasirinkimas grindžiamas tuo, kad mus domina PKIM savybės ir tikslumas. Tiksliojo sprendinio žinojimas leidžia mums PKIM gautas paklaidas vertinti L_∞ normoje taip:

$$\varepsilon^j = \max_{0 \leq i \leq N} |U_i^j - u(x_i, t_j)|, \quad j = 0, 1, \dots, K. \quad (5)$$

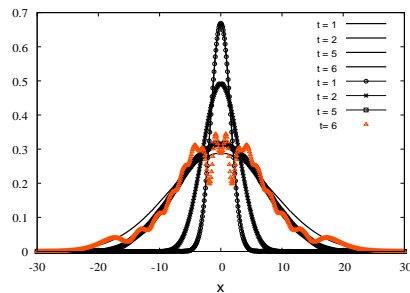
Pasirenkame erdvinės ir laiko koordinatės žingsnius $h = \tau = 0, 1$. Naudodamiesi tiksliojo sprendinio išraiška, sugeneruojame sprendinius laiko intervale $[0, 5]$ (50 sprendinių). Šiuos sprendinius naudojame pagrindinėms komponentėms išskirti. Nedidelį sprendinių skaičių pasirenkame tikėdamiesi, kad svarbių komponentių skaičius bus mažesnis nei nustatėme Furjė analizės metu (pakankamai gerus sprendinius gauname imdami 70 skleidinio narių). Išskyrę pagrindines komponentes (10 bazinių vektorių), pradinio uždavinio dimensiją, kuri kiekviename laiko sluoksnyje buvo $(N \times N)$, sumažiname iki (10×10) ir sprendinius skaičiuojame pagal (4), (3) formules. 1 pav. pavaizduoti pirmųjų trijų pagrindinių komponentių moduliai. Matome, kad gautos pagrindinės komponentės nėra Furjė modos.

Mažesnės dimensijos uždavinį sprendėme laiko intervale $[0, 6]$. 2 pav. matome tiksliojo sprendinio (ištinė linija) ir redukuotojo uždavinio sprendinio (taškeliai) grafikus laiko momentais $t = 1, t = 2, t = 5$ ir $t = 6$. 3 pav. pavaizduota paklaidų, įvertintų pagal (5) formulę, dinamika.

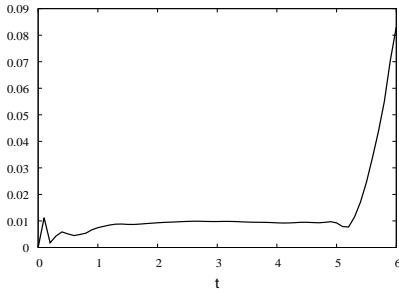
Pastebime, kad pagrindinių komponentių metodas gana tiksliai skaičiuoja sprendinius tame laiko intervale, kuris buvo naudojamas generuojant pradinę informaciją apie uždavinį. Vėlesniais laiko momentais (2 paveikslėlyje matome, kaip osciliuoja PKIM gautas sprendinys) paklaidos auga (žr. 3 pav.), t. y. baziniai vektoriai neturi informacijos apie tolesnę sprendinių elgseną.



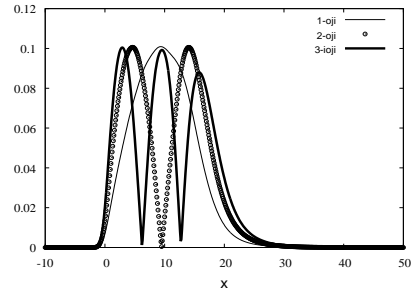
1 pav. Stovinti Gauso banga: pirmųjų trijų pagrindinių komponentių moduliai.



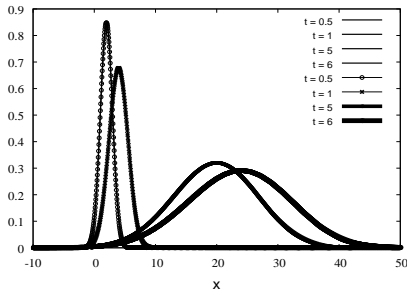
2 pav. Stovinti Gauso banga: tiksliojo sprendinio ir PKIM gauto sprendinio grafikai įvairiais laiko momentais.



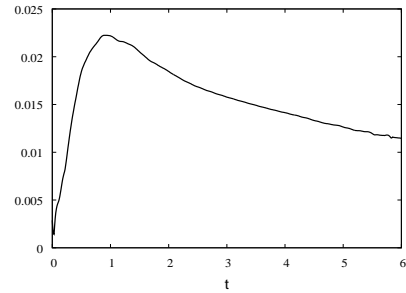
3 pav. Stovinti Gauso banga: paklaidų kitimo grafikas.



4 pav. Judanti Gauso banga: pirmųjų trijų pagrindinių komponentių moduliai.



5 pav. Judanti Gauso banga: tiksliojo sprendinio ir PKIM gauto sprendinio grafikai įvairiais laiko momentais.



6 pav. Judanti Gauso banga: paklaidų kitimo grafikas.

4 PKIM taikymas judančiai Gauso bangai

Šiame pavyzdyje nagrinėkime (1) Šredingerio uždavinį, aprašantį judančią Gauso bangą, kai $u(x, 0) = e^{-x^2+4xi}$. Diskrečiajam uždaviniui erdvinės koordinatės kitimo intervalą pasirinkime $[-10, 50]$. Šio uždavinio tikslusis sprendinys taip pat yra žinomas – $u(x, t) = \sqrt{\frac{i}{-2t+i}} e^{\frac{ix^2+4x-8t}{2t-i}}$. Pasirenkame erdvinės ir laiko koordinatės žingsnius $h = 0,05$, $\tau = 0,01$ ir naudodamiesi tiksliojo sprendinio išraiška laiko intervale $[0, 5]$ sugeneruojame sprendinius, kuriuos naudojame pagrindinėms komponentėms išskirti. 4 pav. pateiktas pirmųjų trijų pagrindinių komponentių modulių grafikas. Sprendžiant šį uždavinį Furjė metodu reikia maždaug 150 modų, kad gautume gerus rezultatus.

Šio uždavinio sprendinius pakankamai tiksliai galima atkurti naudojant 30 pagrindinių komponentių rinkinį. PKIM gautos pagrindinės komponentės turi panašumų lyginant jas su Furjė modomis. Tačiau baziniai vektoriai lyginant su Gauso stovinčios bangos atveju yra visiškai kitokie. Taip atsitinka todėl, kad baziniai vektoriai perima sprendinių savybes.

Bėgančios bangos atveju, pagrindinių komponentių išskyrimo metodas tampa dar labiau komplikotas, nes šiuo atveju banga ne tik keičia savo formą, bet ir juda. 5 pav. matome tiksliojo sprendinio (ištinė linija) ir redukuotojo uždavinio sprendinio (taškeliai) grafikus laiko momentais $t = 0,5$, $t = 1$, $t = 5$ ir $t = 6$. Paklaidų

dinamikos grafikas pateiktas 6 pav. Kaip ir stovinčios bangos atveju, generuodami įvairius sprendinių rinkinius, pastebime, kad pagrindinės komponentės prisitaiko prie gaunamos informacijos ir jų dėka gali būti atkurta informacija tik tame laiko intervale, kuris buvo naudojamas pagrindinėms komponentėms išskirti.

5 Rezultatų aptarimas ir išvados

Apibendrinami pateiktus skaičiavimų rezultatus galime atsakyti į straipsnio pradžioje suformuluotus klausimus ir daryti tokias išvadas:

1. PKIM leidžia ženkliai sumažinti pradinio uždavinio dimensiją ir gali būti taikomas Šredingerio lygtims tais atvejais, kai informacija bus atkurama tame laiko intervale, iš kurio jau turime dalį informacijos.
2. PKIM bazinius vektorius išskiria toje srityje, kur sprendinių nurašymo momentais buvo sprendiniai. Jei banga juda, tai baziniai vektoriai informacijos apie judėjimą gauna nepakankamai.
3. Sprendžiant uždavinius PKIM paklaidos kinta kartu su sprendiniu, t. y. jeigu banga išplinta, tai didžiausios paklaidos yra srityje galuose, jeigu banga juda, tai ir paklaidos slenka kartu su sprendiniu.

Literatūra

- [1] R. Becerril, F.S. Guzman, A. Rendon Romero and S. Valdez-Alvarado. Solving the time-dependent Schrödinger equation using finite difference methods. *Rev. Mex. Fis.*, (54):120–132, 2008.
- [2] G. Berkooz, P. Holmes and J.L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, (25):539–575, 1993.
- [3] R. Čiegis. *Diferencialinių lygčių skaitiniai sprendimo metodai*. Technika, Vilnius, 2003.
- [4] G. Jankevičiūtė, T. Leonavičienė ir R. Čiegis. Pagrindiniu komponentių išskyrimo metodo taikymas kai kuriems parabolinio tipo uždaviniams. *Liet. mat. rink.: LMD darbai, ser. B*, **53**:7–12, 2012.
- [5] E. Shlizerman, E. Ding, M.O. Williams and J. Nathan Kutz. The proper orthogonal decomposition for dimensionality reduction in mode-locked lasers and optical systems. *Int. J. Optics*, **2012**:18, 2012. Doi:10.1155/2012/831604.
- [6] P. Sun, Z. Luo and Y. Zhou. Some reduced finite difference schemes based on a proper orthogonal decomposition technique for parabolic equations. *Appl. Numer. Math.*, (60):154–164, 2010.

SUMMARY

Proper orthogonal decomposition method for Schrödinger equation

R. Čiegis, G. Jankevičiūtė, T. Leonavičienė

In this paper we consider the proper orthogonal decomposition (POD) method for one-dimensional Schrödinger equation. We begin of the review of basic ideas of POD. Later this method is applied to study the linear Schrödinger equation. The generation of optimal basis using POD and model reduction questions are discussed. Also the errors between the POD approximate solutions and the exact problems solutions are calculated. The results of two numerical examples for standing and travelling Gaussian wave are presented and analyzed.

Keywords: one-dimensional Schrödinger equation, numerical methods, proper orthogonal decomposition method.