C. Lasser, F. Marquardt, D. Sattlegger 20. Dezember 2011

Aufgabe 11 (Split-Step Fourier Methode)

Zur Lösung von **Aufgabe 8** haben Sie einen Algorithmus geschrieben, der eine Ortsraumdiskretisierung mittels Fourierkollokation durchführt.

(a.) Erweitern Sie diesen Algorithmus (sofern nicht schon geschehen) so, dass er auf beliebigen Intervallen $[a, b] \subset \mathbb{R}$ arbeitet, nicht nur auf $[-\pi, \pi]$.

Die Zeitevolution wurde bisher entweder durch numerische Lösung der entstandenen gewöhnlichen Differentialgleichung oder Approximation der Matrixexponentialfunktion gelöst.

(b.) Implementieren Sie nun zur Zeitpropagation eine Split-Step Methode, wie sie in Pseudocode in [L], **Algorithm 3.1** beschrieben ist.

Aufgabe 12 (Erhaltungsgrößen)

Betrachten Sie

1. die Galerkin-Methode mit Matrixexponentialfunktion `expm` als Zeitpropagation,
2. Fourier-Kollokation, wobei die Zeitpropagation mittels Chebyshev Methode[1] durchgeführt wird und
3. die oben beschriebene Split-Step Fourier Methode[2].

Testen Sie die von Ihnen implementierten Algorithmen auf die nachfolgenden Erhaltungseigenschaften. Für Ihre Experimente können Sie ein Quantensystem Ihrer Wahl verwenden, z.B. jenes aus **Aufgabe 8**.

(a.) **Energieerwartungswert:** Der Erwartungswert für die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems, gegeben durch

$$\langle \psi_t, H\psi_t \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi(x,t)} \left(-\tfrac{1}{2\mu} \Delta + V(x) \right) \psi(x,t)\, \mathrm{d}x,$$

ist zeitlich konstant. Untersuchen Sie, ob die durch ihre Algorithmen berechneten numerischen Erwartungswerte diese Eigenschaft ebenfalls besitzen.

(b.) **Unitarität:** Überprüfen Sie, ob ihre Algorithmen die Norm der Wellenfunktion zeitlich unverändert lassen.

(c.) **Zeitreversibilität:** Propagieren Sie Ihr Anfangsdatum ψ_0 vorwärts in der Zeit von $t = 0$ bis $t = T$. Verwenden Sie danach ψ_T als Anfangswert und propagieren Sie rückwärts in der Zeit bis $t = 0$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihrem ursprünglichen Anfangsdatum ψ_0.

[1] siehe **Aufgabe 9** (b.)
[2] siehe **Aufgabe 11** (b.)