

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

高階 CESE 方法模擬

The Simulation of High Order Conservation Element and Solution Element Method

研究生:黃閔琨
指導教授:江進福 教授

西元 二零一二年七月

高階 CESE 方法模擬

The Simulation of High Order Conservation Element and Solution Element Method

研究生:黃閔琨

指導教授:江進福 教授

Student: Min-Kun, Huang

Advisor: Tsing-Fu, Jiang

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

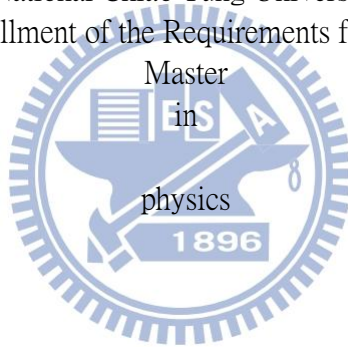
A Thesis Submitted to the
National Chiao Tung University
in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of

Master

in

physics

1896



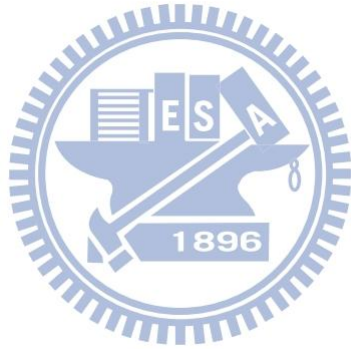
July 2012

Hsinchu, Taiwan

中華民國 101 年七月

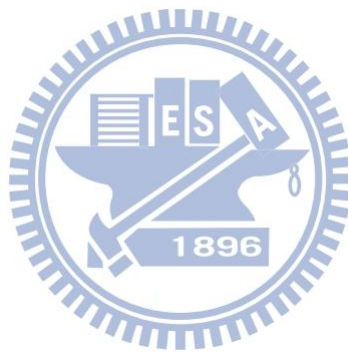
摘要

本論文主要的研究目的是利用高階時空守恆法模擬各種已知精確解的一維微分方程式(例如:波動方程式，量子力學問題)最後應用在高次諧波的情況。



Abstract

The purpose of this thesis is to calculate the High-Order space-time conservation element and solution element method, and to simulate known exact solutions of one-dimensional differential equations (for example: the wave equation, quantum mechanics problem), the last application in the High-order Harmonic Generation



致謝

碩士生活即將進入尾聲，就在這說不上長也說不上短的兩年時間。首先感謝在這一年多來不斷指引我方向的江進福教授，讓我可以接觸這麼有趣的題目以及在我方向錯誤時指導我到正確觀念，也感謝吳天鳴教授以及柯宜謀教授百忙之中來擔任我的口試委員，還有在口試中的建議及修正。感謝李漢傑學長還有鄭世達學長，在這段時間給予許多的意見及解惑。感謝這段時間不斷支持我的家人們，儘管對於我的未來抱持著疑問，但還是讓我選擇我要走的路，讓我在各種情況下能讓我專心的走這一條路。感謝同級的各位，尤其是 319 的那群，在各個方面都給了我相當大的幫忙，不管是在學業、研究、休閒上都是，能跟你們做同學真是太好了。感謝我最愛的怡昀，在這段時間中不斷的給予我往前的動力跟夢想，牽手向著未來前行。能走到這邊要感謝的人還是太多太多了，我不會忘記曾經的幫忙，感恩。



目錄

摘要.....	ii
Abstract	iii
致謝.....	iv
目錄.....	v
圖目錄.....	vi
一、導論.....	1
二、CESE 理論及推導.....	2
2-1 CESE 原理.....	2
2-2 a-scheme.....	4
2-3 a-4 scheme.....	8
三、結果與討論.....	11
3-1 序論.....	11
3-2 波動方程式.....	11
3-3 自由粒子.....	13
3-4 簡諧振子.....	16
3-5 在外加場下的簡諧振子.....	18
3-6 高次諧波(High-order Harmonic Generation).....	20
四、結論與建議.....	22
4-1 結論.....	22
4-2 建議及未來展望.....	22
參考文獻.....	23
附錄 A.....	24
附錄 B.....	25

圖目錄

圖 2. 1 二維 EUCLIDEA SPACE	2
圖 2. 2 時間(T)和空間(X)的網格點	3
圖 2. 3 (A)守恆元(CCE) (B)守恆基元 CE-(BCE) (C) 守恆基元 CE+(BCE).....	3
圖 2. 4 解元(SE)	4
圖 3. 1 波動方程式數值解與精確解在 T=9 的比較圖.....	11
圖 3. 2 波動方程式數值解與精確解在 T=45 的比較圖	12
圖 3. 3 波動方程式數值解與精確解在 T=90 的比較圖	12
圖 3. 4 高斯波示意圖	13
圖 3. 5 自由粒子數值解與精確解在 T=1 的比較圖	14
圖 3. 6 自由粒子數值解與精確解在 T=5 的比較圖	14
圖 3. 7 自由粒子數值解與精確解在 T=10 的比較圖	15
圖 3. 8 自由粒子數值解在 T=1, T=5, T=10 的機率分布圖	15
圖 3. 9 簡諧振子數值解與精確解在 T=10 的比較圖	16
圖 3. 10 簡諧振子數值解與精確解在 T=20 的比較圖	17
圖 3. 11 簡諧振子數值解與精確解在 T=50 的比較圖	17
圖 3. 12 粒子在 $f_0 = 3$ 從基態要遷到各個激發態機率	18
圖 3. 13 粒子在 $f_0 = 5$ 從基態要遷到各個激發態機率	19
圖 3. 14 粒子在 $f_0 = 7$ 從基態要遷到各個激發態機率	19
圖 3. 15 粒子在 $I = 10^{13}$ 的光譜圖	20
圖 3. 16 粒子在 $I = 4 * 10^{15}$ 的光譜圖	21

一、導論

時空守恆法 (Space-time conservation element and solution element method) 是一種利用物理量在時間和空間同時滿足守恆定律的數值方法，將時間與空間切割成許多不重疊的網格，在物理特性上，利用守恆定律，使每個網格內的通量保持守恆。且守恆元及解元由局部的守恆造成計算區域的守恆 不需要外加任何的函數或技巧，而此方法廣泛計算流體力學、電磁學等 PDE 問題中。

在本文研究中，則是繼續在討論實空間的 CESE method，保有原 a scheme 精神的 a-4 scheme。而 a-4 scheme 在解元的處理上比 a scheme 有更高的精確度，也不會失去在我們需的數值，但相對所需的條件會比 a scheme 還要多個一倍。這裡我們則隊則是利用 a scheme 來補足不族的條件，我們將最後的結果去計算各種一維 PDE，如波動方程式，還有量子力學中的各種問題。



二、CESE 理論及推導

2-1 CESE 原理

首先定義一個 2 維的 Euclidean space E_2 ; 其中 X_1 表示為空間 x , X_2 表示為時間 t 。再考慮一個守恆定律:

$$\nabla \cdot \vec{h} = Vu \quad (2.1)$$

在利用高斯散度定理(Gauss divergence theorem)可以得出:

$$\oint_{S(A)} \vec{h} \cdot d\vec{s} = \int_A (\nabla \cdot \vec{h}) da = \int_A Vu ds \quad (2.2)$$

上式 $S(A)$ 表示在 E_2 中由 A 所包圍的任意邊界, 且 $d\vec{s} = ds \cdot \vec{n}$, 其中 ds 表示面積, \vec{n} 表示垂直邊界方向向外的單為向量[圖 2.1] $\vec{h} \cdot \vec{s}$ 表示 h 流出區域 A 邊界的空間及時間的流量

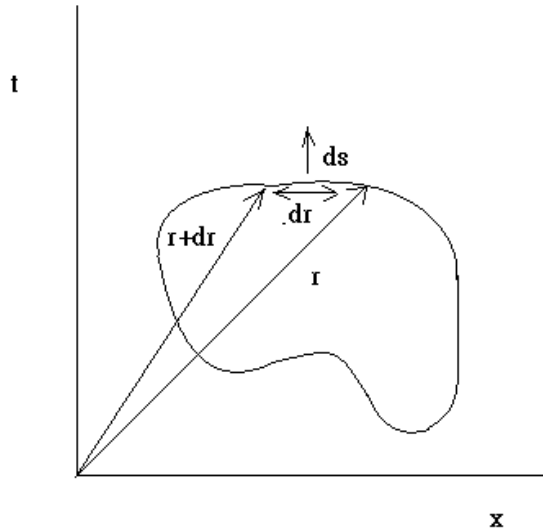


圖 2. 1 二維 Euclidean space

接著定義一個一維二階的 PDE:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial u}{\partial x} = Vu \quad (2.3)$$

上式中 a b 為常數; 將(2.3)式改寫

$$\nabla \cdot \vec{h} = \frac{\partial}{\partial x} (au_x + bu) + \frac{\partial}{\partial t} u = Vu \quad (2.4)$$

可得知 $h \equiv (au_x + bu, u)$, $n \equiv (dt, -dx)$, 從式(2.4)

$$\int_{S(A)} \vec{h} \cdot \vec{n} ds = \int (au_x + bu) dt - \int u dx = \int (Vu) da \quad (2.5)$$

在二維空間 E_2 (圖 2.2) 由守恆元和解元所組成, 對任意任一個守恆基元 (Compounded Conservation element, CCE) 可以分成兩個守恆基元 (Basic Conservation element, BCE) [圖 2.3] CE_+ 和 CE_- 而對任一解元 (solution element) 則是利用泰勒級數對空間 (x) 及時間 (t) 展開 [圖 2.4]。

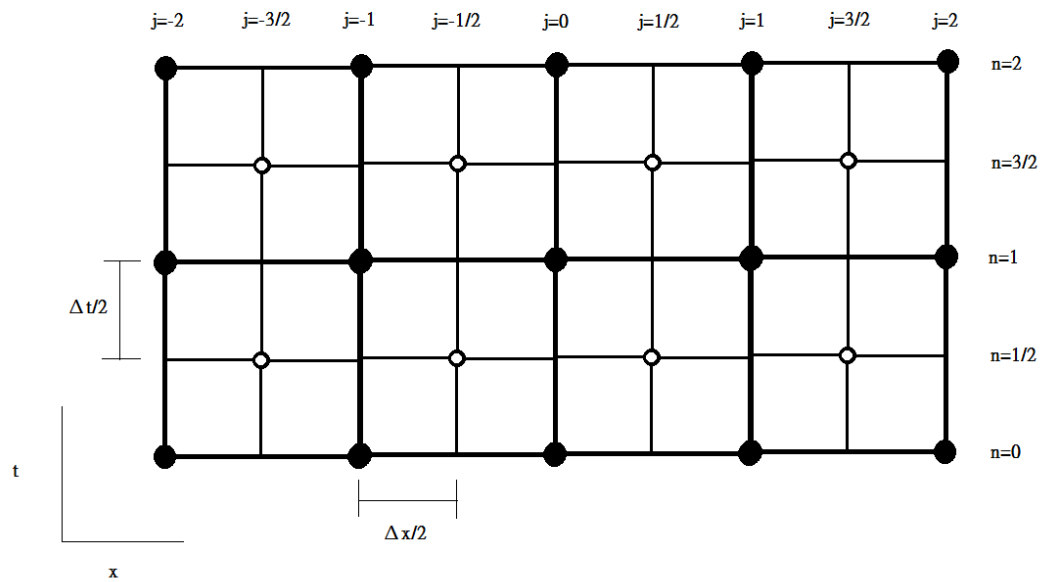


圖 2. 2 時間(t)和空間(x)的網格點

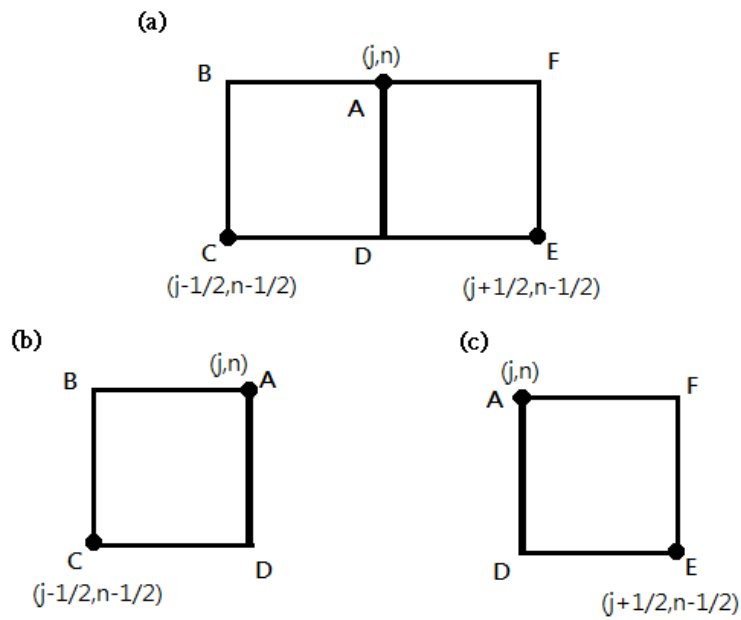


圖 2. 3 (a)守恆元(CCE) (b)守恆基元 CE^- (BCE) (c) 守恆基元 CE^+ (BCE)

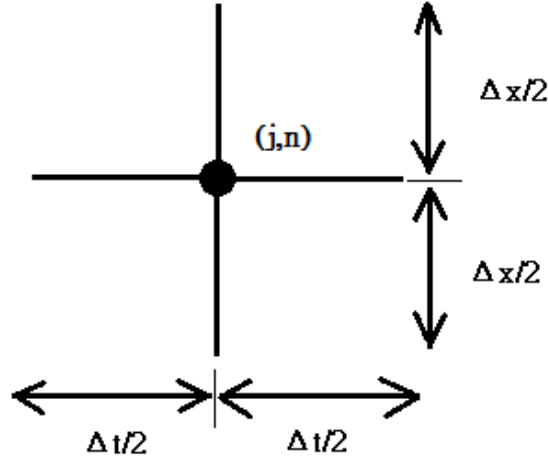


圖 2. 4 解元(SE)

2-2 a-scheme

對任何滿足 (x, t) 符合 $x, t \in SE(j, n)$ 條件下的 (x, t) 皆可以 (x_j, t^n) 作為基點做一階泰勒展開式(1st order of Taylor's expansion):

$$u^*(x, t; j, n) \equiv u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j) + (u_t)_j^n (t - t^n) \quad (2.6)$$

式(2.6)中，每一個 $SE(j, n)$ 中的 $u_j^n, (u_x)_j^n, (u_t)_j^n$ 皆為常數，在由式可得到

$$(u_t)_j^n = -b(u_x)_j^n + Vu_j^n \quad (2.7)$$

帶回(2.6)可以得到

$$u^*(x, t; j, n) \equiv (1 + V)u_j^n + [(x - x_j) - b(t - t^n)](u_x)_j^n \quad (2.8)$$

對於每個格點，其未知數為 u_j^n 以及 $(u_x)_j^n$ 我們可以利用 CE_+ 以及 CE_- 的條件來求得。在此定義

$$\vec{h}^*(x, t; j, n) \equiv (au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n), u^*(x, t; j, n)) \quad (2.9)$$

由圖 2.2 在 $CE_-(j, n)$ 中 從解元以及守恆元的關係 \overline{AB} 和 \overline{DA} 是由 $A(j, n)$ 展開，而 \overline{BC} 和 \overline{CD} 則是由 $C(j-1/2, n-1/2)$ 展開。同理 $CE_+(n, j)$ 中， \overline{AD} 和 \overline{FA} 是由 $A(j, n)$ 展開，而 \overline{DE} 和 \overline{EF} 則是由 $E(j+1/2, n-1/2)$ 展開，利用(2.5)可以得

$$\oint_{S(CE_-(j,n))} \vec{h}^* \cdot d\vec{s} = \oint_{S(CE_-(j,n))} \vec{h}^* \cdot \vec{n} ds = \int_A (Vu^*) da \quad (2.10)$$

將(2.9)帶入(2.10)由 $CE_-(j, n)$ 可得

$$\begin{aligned} \oint_{S(CE_-(j,n))} \vec{h}^* \cdot \vec{n} ds &= - \int_{AB} [u^*(x, t; j, n)] dx \\ &+ \int_{BC} [au_x^*(x, t; j - 1/2, n - 1/2) + bu^*(x, t; j - 1/2, n - 1/2)] dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{CD} [u^*(x, t; j - \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2})] dx \\
& + \int_{DA} [au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n)] dt
\end{aligned} \tag{2.11}$$

同理，由 $CE_+(j, n)$ 可得

$$\begin{aligned}
\oint_{S(CE_+(j,n))} \vec{h}^* \vec{n} ds &= \int_{AD} [au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n)] dt \\
& - \int_{DE} [u^*(x, t; j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2})] dx \\
& + \int_{EF} [au_x^*(x, t; j + 1/2, n - 1/2) + bu^*(x, t; j + 1/2, n - 1/2)] dt \\
& - \int_{FA} [u^*(x, t; j, n)] dx
\end{aligned} \tag{2.12}$$

式(2.11), (2.12)中，分別對 (j, n) 、 $(j-1/2, n-1/2)$ 、 $(j+1/2, n-1/2)$ 展開個別去計算。在時間和空間的區域中、 $\overline{AB} \overline{CD} \overline{DE} \overline{FA}$ 沒有時間(t)的分量、而 $\overline{BC} \overline{DA} \overline{AD} \overline{EF}$ 則沒有空間(x)的分量

$$\begin{aligned}
- \int_{AB} [u^*(x, t; j, n)] dx &= - \int_A^B [u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j)] dx \\
&= - \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} [u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j)] d(x - x_j) \\
&= \frac{\Delta x}{2} u_j^n - \frac{\Delta x^2}{8} (u_x)_j^n
\end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{BC} [au_x^*(x, t; j - 1/2, n - 1/2) + bu^*(x, t; j - 1/2, n - 1/2)] dx \\
&= \int_B^C \left[bu_{j-1/2}^{n-1/2} + (u_x)_{j-1/2}^{n-1/2} \left(a - b^2 \left(t - t^{n-1/2} \right) \right) \right] dt \\
&= \int_{\frac{\Delta t}{2}}^0 \left[bu_{j-1/2}^{n-1/2} + (u_x)_{j-1/2}^{n-1/2} \left(a - b^2 \left(t - t^{n-1/2} \right) \right) \right] d \left(t - t^{n-1/2} \right) \\
&= \frac{-b\Delta t}{2} u_{j-1/2}^{n-1/2} + \frac{b^2\Delta t^2}{8} (u_x)_{j-1/2}^{n-1/2} - \frac{a\Delta t}{2} (u_x)_{j-1/2}^{n-1/2}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{CD} \left[u^* \left(x, t; j - \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2} \right) \right] dx = - \int_C^D \left[u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(x - x_{j-\frac{1}{2}} \right) \right] dx \\
& = - \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \left[u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(x - x_{j-\frac{1}{2}} \right) \right] d \left(x - x_{j-\frac{1}{2}} \right) \\
& = - \frac{\Delta x}{2} u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta x^2}{8} (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{DA} [au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n)] dx = \int_D^A [bu_j^n + (u_x)_j^n (a - b^2(t - t^n))] dt \\
& = \int_{-\frac{\Delta t}{2}}^0 [bu_j^n + (u_x)_j^n (a - b^2(t - t^n))] d(t - t^n) \\
& = \frac{b\Delta t}{2} u_j^n + \frac{b^2\Delta t^2}{8} (u_x)_j^n + \frac{a\Delta t}{2} (u_x)_j^n
\end{aligned} \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{AD} [au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n)] dx = - \int_{DA} [au_x^*(x, t; j, n) + bu^*(x, t; j, n)] dx \\
& = - \frac{b\Delta t}{2} u_j^n - \frac{b^2\Delta t^2}{8} (u_x)_j^n - \frac{a\Delta t}{2} (u_x)_j^n
\end{aligned} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{DE} \left[u^* \left(x, t; j + \frac{1}{2}, n - \frac{1}{2} \right) \right] dx = - \int_D^E \left[u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(x - x_{j+\frac{1}{2}} \right) \right] dx \\
& = - \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^0 \left[u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(x - x_{j+\frac{1}{2}} \right) \right] d \left(x - x_{j+\frac{1}{2}} \right) \\
& = - \frac{\Delta x}{2} u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x^2}{8} (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{EF} [au_x^*(x, t; j + 1/2, n - 1/2) + bu^*(x, t; j + 1/2, n - 1/2)] dx \\
& = \int_B^F \left[bu_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(a - b^2 \left(t - t^{n-\frac{1}{2}} \right) \right) \right] dt \\
& = \int_0^{\frac{\Delta t}{2}} \left[bu_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \left(a - b^2 \left(t - t^{n-\frac{1}{2}} \right) \right) \right] d \left(t - t^{n-\frac{1}{2}} \right) \\
& = \frac{b\Delta t}{2} u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{b^2\Delta t^2}{8} (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{a\Delta t}{2} (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.19}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{FA} [u^*(x, t; j, n)] dx = - \int_F^A [u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j)] dx \\
& = - \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} [u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j)] d(x - x_j) \\
& = \frac{\Delta x}{2} u_j^n + \frac{\Delta x^2}{8} (u_x)_j^n
\end{aligned} \tag{2.20}$$

對於源項的處理，從[圖 2.3]，可以利用平均值定理，個別從 CE^- 和 CE^+ 分別可以得到

$$\int_{CE^-} (Vu^*) da = \frac{\Delta x \Delta t}{8} [(Vu)_j^n + (Vu)_{j-1/2}^{n-1/2}] \tag{2.21}$$

及

$$\int_{CE^+} (Vu^*) da = \frac{\Delta x \Delta t}{8} [(Vu)_j^n + (Vu)_{j+1/2}^{n-1/2}] \tag{2.22}$$

將式(2.13)到式(2.22)帶回式，經過整理後可以得到

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_j^n - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_j^n + a \left(\frac{\Delta t}{2}\right) (u_x)_j^n + b \left(\frac{\Delta t}{2}\right) u_j^n + \frac{b^2}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 (u_x)_j^n - \frac{bV}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 u_j^n \\
& - \frac{\Delta x \Delta t}{8} Vu_j^n = S_{[1]}^-
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_j^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_j^n - a \left(\frac{\Delta t}{2}\right) (u_x)_j^n - b \left(\frac{\Delta t}{2}\right) u_j^n - \frac{b^2}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 (u_x)_j^n + \frac{bV}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 u_j^n \\
& - \frac{\Delta x \Delta t}{8} Vu_j^n = S_{[1]}^+
\end{aligned} \tag{2.24}$$

其中

$$\begin{aligned}
S_{[1]}^- &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + a \left(\frac{\Delta t}{2}\right) (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + b \left(\frac{\Delta t}{2}\right) u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \\
& - \frac{b^2}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{bV}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x \Delta t}{8} Vu_{j-1/2}^{n-1/2}
\end{aligned} \tag{2.25}$$

$$\begin{aligned}
S_{[1]}^+ &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - a \left(\frac{\Delta t}{2}\right) (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - b \left(\frac{\Delta t}{2}\right) u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{b^2}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \\
& - \frac{bV}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x \Delta t}{8} Vu_{j+1/2}^{n-1/2}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

由(2.23)和(2.24)可以解得 $u_j^n (u_x)_j^n$

$$u_j^n = \frac{S_{[1]}^+ + S_{[1]}^-}{\Delta x - \frac{\Delta x \Delta t}{4} V} \tag{2.27}$$

$$(u_x)_j^n = \frac{S_{[1]}^+ - S_{[1]}^- - [2b\left(\frac{\Delta t}{2}\right) + bV\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2] u_j^n}{\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 - b^2 \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 - a \Delta t} \tag{2.28}$$

2-3 a-4 scheme

a-4 scheme 沿用 a scheme 的概念，在數值上為了更精確的計算。我們令 $u(x, t)$ 做三階泰勒展開式(3rd order of Taylor's expansion):

$$\begin{aligned}
 u^*(x, t; j, n) &\equiv u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j) + (u_t)_j^n (t - t^n) + (u_{xt})_j^n (x - x_j)(t - t^n) \\
 &+ \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n (x - x_j)^2 + \frac{1}{2} (u_{tt})_j^n (t - t^n)^2 + \frac{1}{6} (u_{ttt})_j^n (t - t^n)^3 \\
 &+ \frac{1}{6} (u_{xxx})_j^n (x - x_j)^3 + \frac{1}{2} (u_{xtt})_j^n (x - x_j)(t - t^n)^2 \\
 &+ \frac{1}{2} (u_{xxt})_j^n (x - x_j)^2 (t - t^n)
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

其中的 $u_j^n, (u_x)_j^n, (u_t)_j^n, (u_{xx})_j^n, (u_{tt})_j^n, (u_{xt})_j^n, (u_{xxx})_j^n, (u_{xxt})_j^n, (u_{ttt})_j^n, (u_{xxt})_j^n$ 皆為常數將式(2.29)帶入式(2.3)可得到

$$\begin{aligned}
 (u_t)_j^n &= -a(u_{xx})_j^n - b(u_x)_j^n + Vu_j^n \\
 (u_{xt})_j^n &= -a(u_{xxx})_j^n - b(u_{xx})_j^n + V(u_x)_j^n \\
 (u_{xxt})_j^n &= -b(u_{xxx})_j^n + V(u_{xx})_j^n \\
 (u_{tt})_j^n &= 2ab(u_{xxx})_j^n + (b^2 - 2aV)(u_{xx})_j^n - 2bV(u_x)_j^n + V^2u_j^n \\
 (u_{ttt})_j^n &= (3ab - b^3)(u_{xxx})_j^n + (3b^2V - 2aV)(u_{xx})_j^n - 3bV^2(u_x)_j^n + V^3u_j^n \\
 (u_{xtt})_j^n &= (b^2 - aV)(u_{xxx})_j^n - 2bV(u_{xx})_j^n + V^2(u_x)_j^n
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

將(2.29)改寫成

$$\begin{aligned}
 u^*(x, t; j, n) &\equiv u_j^n + (u_x)_j^n (x - x_j) + [-a(u_{xx})_j^n - b(u_x)_j^n + Vu_j^n](t - t^n) \\
 &+ [-a(u_{xxx})_j^n - b(u_{xx})_j^n + V(u_x)_j^n](x - x_j)(t - t^n) \\
 &+ \frac{1}{2} [2ab(u_{xxx})_j^n + (b^2 - 2aV)(u_{xx})_j^n - 2bV(u_x)_j^n + V^2u_j^n](t - t^n)^2 \\
 &+ \frac{1}{6} [(3ab - b^3)(u_{xxx})_j^n + (3b^2V - 2aV)(u_{xx})_j^n - 3bV^2(u_x)_j^n + V^3u_j^n](t - t^n)^3 \\
 &+ \frac{1}{2} (u_{xx})_j^n (x - x_j)^2 + \frac{1}{6} (u_{xxx})_j^n (x - x_j)^3 + \frac{1}{2} [-b(u_{xxx})_j^n + V(u_{xx})_j^n](x - x_j)^2 (t - t^n) \\
 &+ \frac{1}{2} [(b^2 - aV)(u_{xxx})_j^n - 2bV(u_{xx})_j^n + V^2(u_x)_j^n](x - x_j)(t - t^n)^2
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

將(2.13)到(2.22)修正過得到

$$\begin{aligned}
 \oint_{CE^-} \vec{h}^* \cdot \vec{n} \, ds &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_j^n - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_j^n + \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 (u_{xx})_j^n - \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^4 (u_{xxx})_j^n - \frac{\Delta x \Delta t}{8} Vu_j^n \\
 &+ \left(\frac{\Delta t}{2}\right) (bu_j^n + a(u_x)_j^n) \\
 &- \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 [-a^2(u_{xxx})_j^n - 2ab(u_{xx})_j^n + (-b^2 + aV)(u_x)_j^n + V^2u_j^n] \\
 &+ \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 [(3ab^2 - a^2V)(u_{xxx})_j^n + (b^3 - 4abV)(u_{xx})_j^n + (aV^2 - 2b^2V)(u_x)_j^n + bV^2u_j^n] \\
 &- \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 [(3ab^2V - b^4)(u_{xxx})_j^n + (3b^3V - 2abV)(u_{xx})_j^n - 3b^2V^2(u_x)_j^n + bV^3u_j^n] = S_{[2]}^-
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned}
\oint_{CE^+} \vec{h}^* \vec{n} ds &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_j^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_j^n + \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 (u_{xx})_j^n + \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^4 (u_{xxx})_j^n - \frac{\Delta x \Delta t}{8} V u_j^n \\
&- \left(\frac{\Delta t}{2}\right) [b u_j^n + a (u_x)_j^n] \\
&+ \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 [-a^2 (u_{xxx})_j^n - 2ab (u_{xx})_j^n + (-b^2 + aV) (u_x)_j^n + V^2 u_j^n] \\
&- \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 [(3ab^2 - a^2V) (u_{xxx})_j^n + (b^3 - 4abV) (u_{xx})_j^n + (aV^2 - 2b^2V) (u_x)_j^n + bV^2 u_j^n] \\
&+ \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 [(3ab^2V - b^4) (u_{xxx})_j^n + (3b^3V - 2abV) (u_{xx})_j^n - 3b^2V^2 (u_x)_j^n + bV^3 u_j^n] = S_{[2]}^+
\end{aligned} \tag{2.33}$$

其中

$$\begin{aligned}
S_{[2]}^- &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 (u_{xx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^4 (u_{xxx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x \Delta t}{8} V u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \\
&+ \left(\frac{\Delta t}{2}\right) \left[b u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + a (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \left[-a^2 (u_{xxx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - 2ab (u_{xx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (-b^2 + aV) (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + V^2 u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] \\
&+ \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \left[(3ab^2 - a^2V) (u_{xxx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (b^3 - 4abV) (u_{xx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (aV^2 - 2b^2V) (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + bV^2 u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] \\
&+ \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 \left[(3ab^2V - b^4) (u_{xxx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (3b^3V - 2abV) (u_{xx})_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - 3b^2V^2 (u_x)_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + bV^3 u_{j-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right]
\end{aligned} \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}
S_{[2]}^+ &= \left(\frac{\Delta x}{2}\right) u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 (u_{xx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^4 (u_{xxx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \\
&- \left(\frac{\Delta t}{2}\right) \left[b u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + a (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] + \frac{\Delta x \Delta t}{8} V u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \\
&- \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \left[-a^2 (u_{xxx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - 2ab (u_{xx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (-b^2 + aV) (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + V^2 u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] \\
&- \frac{1}{6} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \left[(3ab^2 - a^2V) (u_{xxx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (b^3 - 4abV) (u_{xx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (aV^2 - 2b^2V) (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + bV^2 u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right] \\
&- \frac{1}{24} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 \left[(3ab^2V - b^4) (u_{xxx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + (3b^3V - 2abV) (u_{xx})_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - 3b^2V^2 (u_x)_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} + bV^3 u_{j+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right]
\end{aligned} \tag{2.35}$$

這裡要解出 u_j^n , $(u_x)_j^n$, $(u_{xx})_j^n$, $(u_{xxx})_j^n$ 需要使用到四個方程式，所以在這裡我們在定義一個滿足 $x, t \in SE(j, n)$ 條件下的 $u(x, t)$ ；而 $u(x, t)$ 與 $u(x, t)$ 之間的關係為：

$$w(x, t; j, n) = \frac{d^2}{dx^2} u(x, t; j, n) \tag{2.36}$$

這樣可以直接使用 a scheme 的結果 將(2.36)代入(2.27), (2.28)運算後得到

$$(u_{xx})_j^n = \frac{S_{[1]}^+ + S_{[1]}^-}{\Delta x - \frac{\Delta x \Delta t}{4} V} \quad (2.37)$$

$$(u_{xxx})_j^n = \frac{S_{[1]}^+ - S_{[1]}^- - [2b(\frac{\Delta t}{2}) + bV(\frac{\Delta t}{2})^2](u_{xx})_j^n}{(\frac{\Delta x}{2})^2 - b^2(\frac{\Delta t}{2})^2 - a\Delta t} \quad (2.38)$$

$$u_j^n = \frac{S_{[2]}^+ + S_{[2]}^- - \frac{1}{3}(\frac{\Delta x}{2})^3 (u_{xx})_j^n}{\Delta x - \frac{\Delta x \Delta t}{4} V} \quad (2.39)$$

$$(u_x)_j^n = \frac{S_{[2]}^+ - S_{[2]}^- - A_0 u_j^n - A_1 (u_{xx})_j^n - A_2 (u_{xxx})_j^n}{(\frac{\Delta x}{2})^2 - 2a\Delta t + (\frac{\Delta t}{2})^2 (aV - b^2) - \frac{1}{3}(\frac{\Delta t}{2})^3 (3ab^2 - aV^2) + \frac{1}{12}(\frac{\Delta t}{2})^4 (-3b^2V^2)} \quad (2.40)$$

其中

$$A_0 = -b\Delta t + \left(\frac{V\Delta t}{2}\right)^2 - \frac{bV^2}{3}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 + \frac{bV^3}{12}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 \quad (2.41)$$

$$A_1 = -2ab\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 - \frac{1}{3}(b^3 - 4abV)\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 + \frac{1}{12}(3b^3V - 2abV)\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 \quad (2.42)$$

$$A_2 = \frac{1}{12}\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^4 - a^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 - \frac{1}{3}(3ab^2 - a^2V)\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 + \frac{1}{12}(3ab^2V - b^4)\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^4 \quad (2.43)$$



三、結果與討論

3-1 序論

此章節將運用上個章節運算結果來驗證波動方程式(Wave Equation)和量子力學中的例子:自由粒子(Free Partical)，簡諧振子(Simple Harmonic Oscillator)在外加場下的簡諧振子;在使用 CESE method 數值模擬，我們需要對邊界做一些設定，這邊對邊界修正的處理所使用的是開放性邊界(Non-Reflecting Boundary conditions)來處理。

3-2 波動方程式

我們令一維波動方程式的表示式為

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

令初始條件為

$$u(x, 0) = \sin(x)$$

其對應的解析解為

$$u(x, t) = \sin(x - t)$$

將(3.1)及(2.3)式對應 令 $a=v=0, b=1$ 帶回(2.37)-(2.40)可以得到波動方程式在 a-4scheme 下的表示式;接著數值取 $\Delta x = 10^{-2}, \Delta t = 9 * 10^{-2}$ 計算 $t=9, t=45, t=90$ 的函數分布

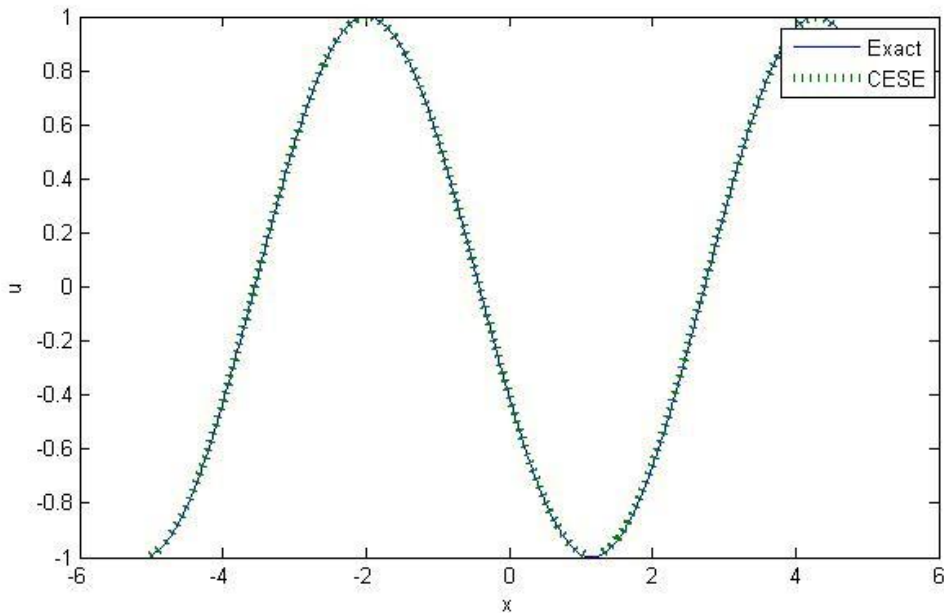


圖 3. 1 波動方程式數值解與精確解在 $t=9$ 的比較圖

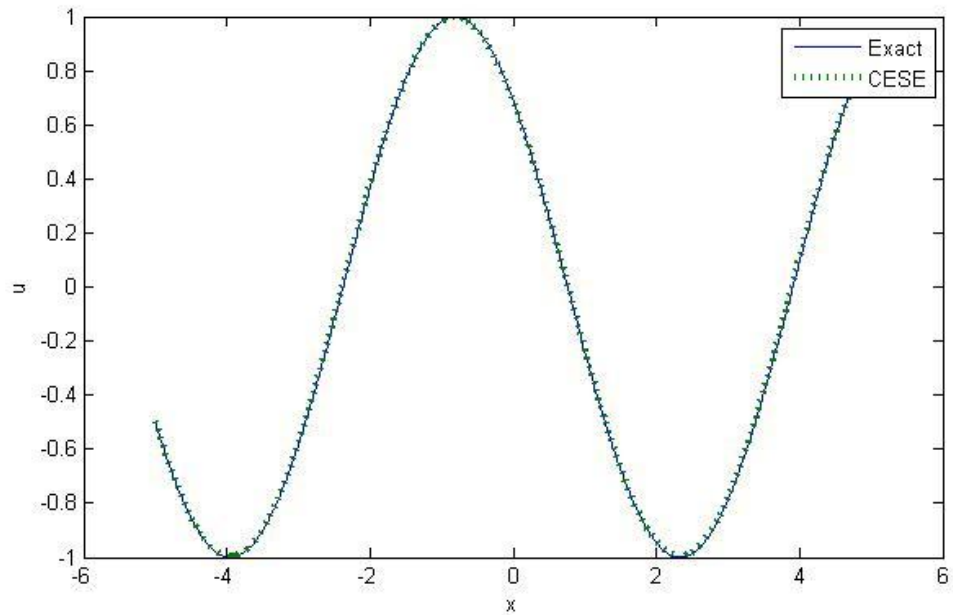


圖 3. 2 波動方程式數值解與精確解在 $t=45$ 的比較圖

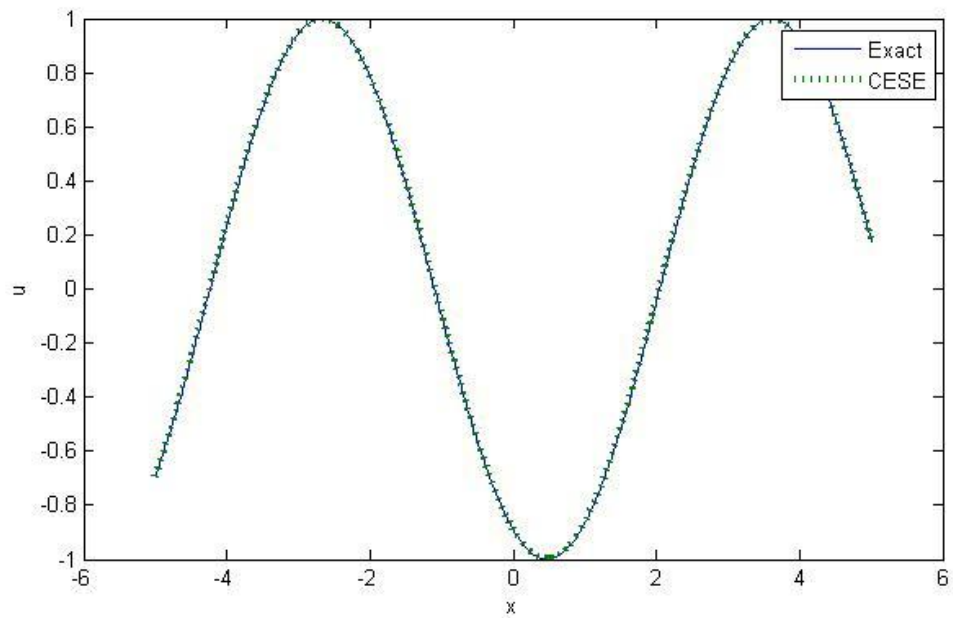


圖 3. 3 波動方程式數值解與精確解在 $t=90$ 的比較圖

3-3 自由粒子

一般表示薛汀格方程式為:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (3.2)$$

我們之後使用原子單位(atomic uni)($m_e = \hbar = 1$)，

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -iV\Psi \quad (3.3)$$

這裡我們討論自由粒子的情況 即 $V=0$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0 \quad (3.4)$$

初始條件為高斯函數(Gaussian wave function)

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{4W^2} + ip_0 x\right]$$

上式 W 為波峰的寬度， x_0 為波峰的位置 p_0 則為動量。圖 3.4 為高斯函數示意圖
其邊界條件為

$$\Psi(\pm\infty, t) = 0$$

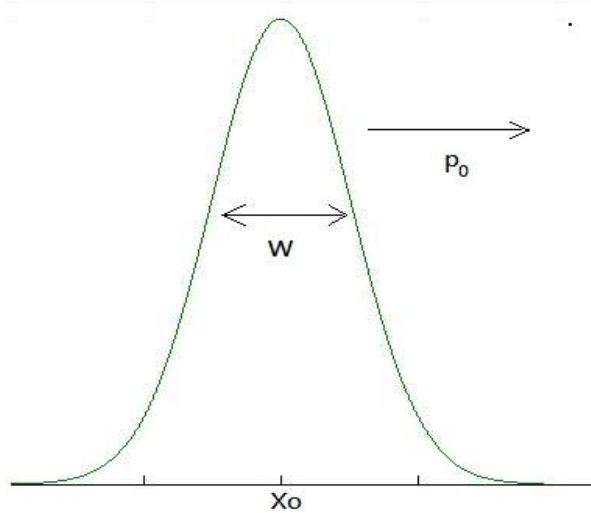


圖 3. 4 高斯波示意圖

對應的解析解

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi W^2 + \frac{\pi}{2} \left(\frac{t}{W}\right)^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_0 - p_0 t)^2}{4W^2 + \left(\frac{t}{W}\right)^2} + ip_0 x\right]$$

將(3.4)及(2.3)式對應 令 $b=v=0, a=-\frac{i}{2}$ 帶回(2.37)-(2.40)可以得到 a-4scheme 下的表示式;
在量子力學中 Ψ 所代表的是波函數而 $|\Psi|^2$ 代表的是機率密度;
取 $\Delta x = 10^{-2}, \Delta t = 5 * 10^{-5}, W=1, x_0 = 0, p_0 = 1$ 計算 $t=5, t=10, t=15$ 的機率分布

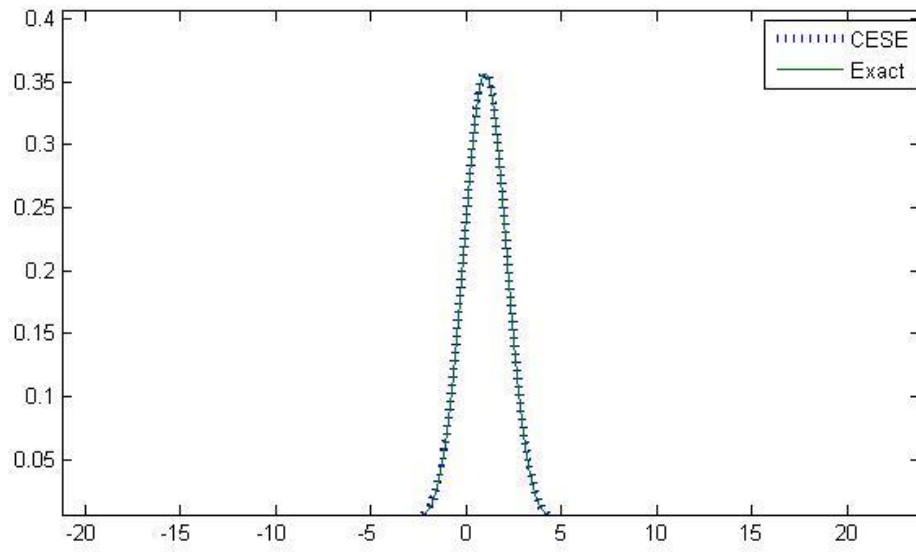


圖 3. 5 自由粒子數值解與精確解在 $t=1$ 的比較圖

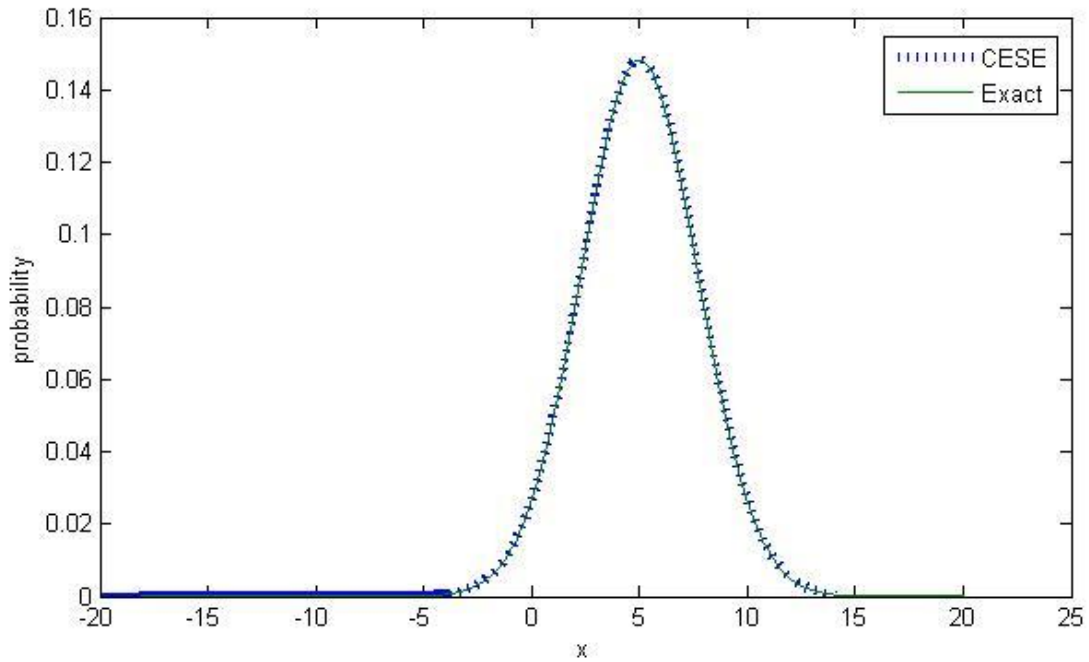


圖 3. 6 自由粒子數值解與精確解在 $t=5$ 的比較圖

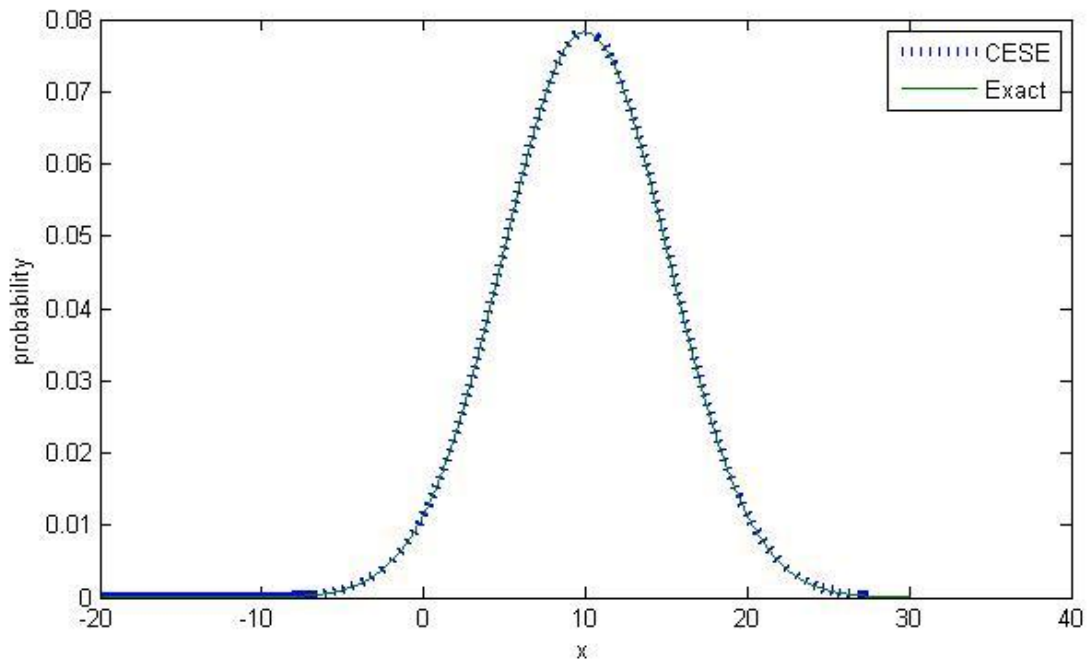


圖 3. 7 自由粒子數值解與精確解在 $t=10$ 的比較圖

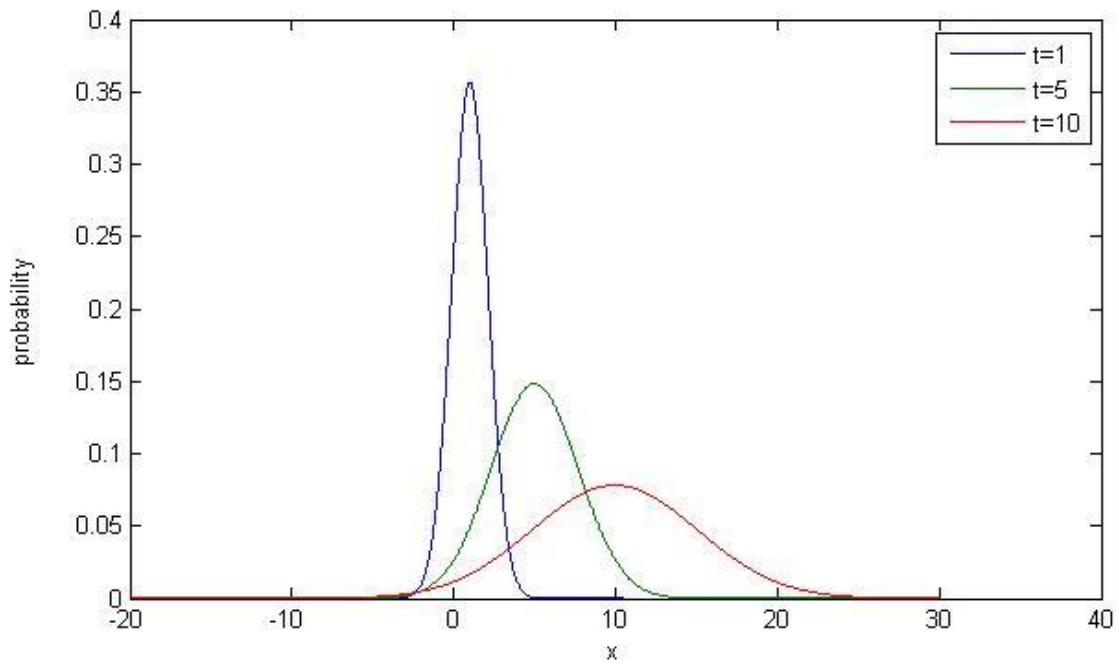


圖 3. 8 自由粒子數值解在 $t=1, t=5, t=10$ 的機率分布圖

3-4 簡諧振子

在一維諧振子問題中，粒子受到一位勢 $V = \frac{1}{2}w^2x^2$ 帶入式(3.3)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{i}{2} w^2 x^2 \Psi \quad (3.5)$$

從量子力學的推算我們可以得到精確解(附錄)。我們令初始條件為：

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{w}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{wx^2}{2}\right)$$

且邊界條件為：

$$\Psi(\pm\infty, t) = 0$$

其對應的精確解為：

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{w}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{wx^2}{2} - \frac{i}{2} wt\right)$$

將(3.5)及(2.3)式對應 令 $b=0, V = -\frac{i}{2} w^2 x^2, a = -\frac{i}{2}$ 帶回(2.37)-(2.40)可以得到 a-4scheme 下的表示式;我們取取 $\Delta x = 10^{-2}, \Delta t = 5 * 10^{-5}, w=1$ 計算 $t=10, t=20, t=50$ 的機率分布。

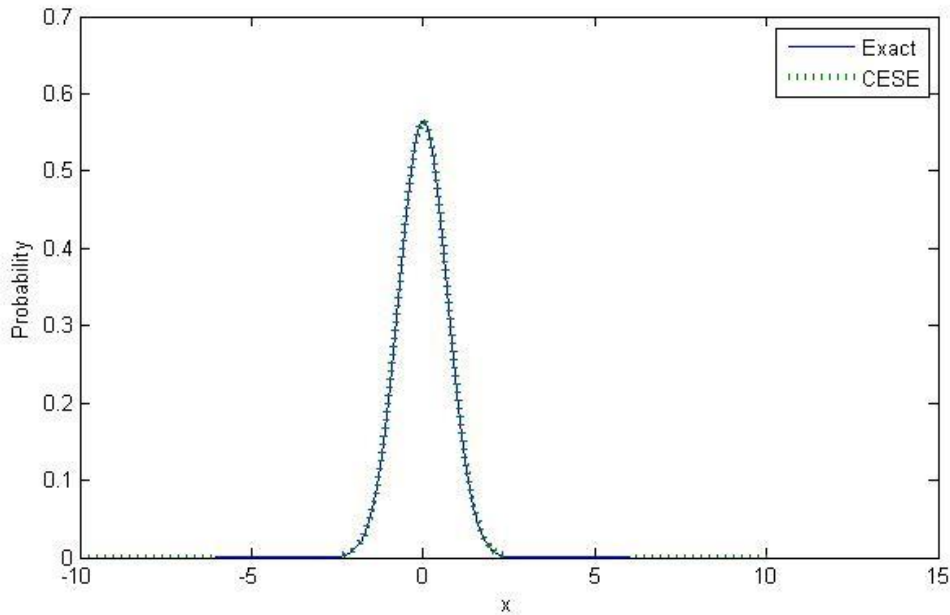


圖 3. 9 簡諧振子數值解與精確解在 $t=10$ 的比較圖

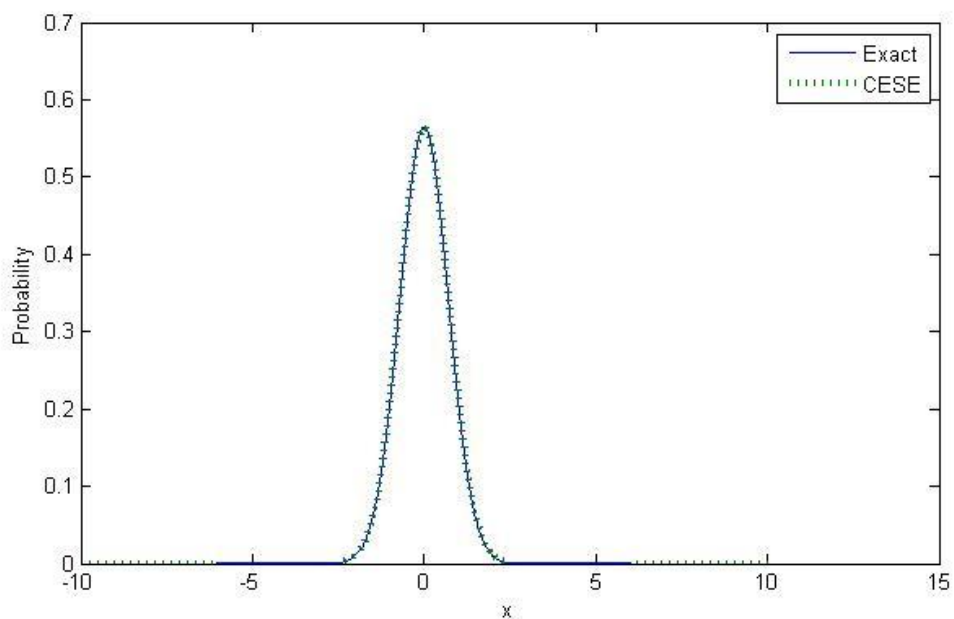


圖 3. 10 簡諧振子數值解與精確解在 $t=20$ 的比較圖

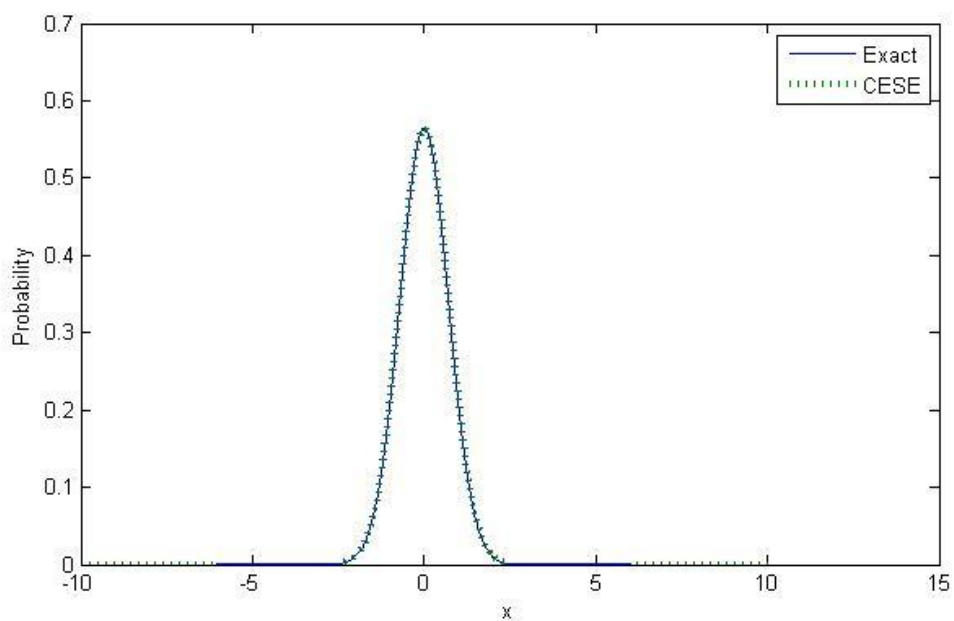


圖 3. 11 簡諧振子數值解與精確解在 $t=50$ 的比較圖

3-5 在外加場下的簡諧振子

在本章的粒子中，粒子受到一位勢 $V = \frac{1}{2}w^2x^2 - f(t)x$ ；其中

$$f(t) = f_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$$

帶入式(3.3)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -i \left(\frac{1}{2} w^2 x^2 - f_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) x \right) \Psi \quad (3.6)$$

我們令初始態為簡諧陣子的基態，經由計算後(附錄)粒子躍遷至每個激發態的機率分布是為 Poisson 分佈。

$$W_{n0} = e^{-v} \frac{v^n}{n!}$$

且

$$v = \frac{1}{2w} \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{iwt} \right|^2 = \frac{\pi f_0^2 \tau^2}{2w} \exp\left(-\frac{1}{2} w^2 \tau^2\right)$$

W_{n0} 表示粒子從基態躍遷的第 n 個激發態的機率。

將(3.6)及(2.3)式對應，令 $b=0, V = -\frac{i}{2} w^2 x^2 - f(t)x, a = -\frac{i}{2}$ ，帶回(2.37)-(2.40)可以得到 a-4scheme 下的表示式；我們取 $\Delta x = 10^{-2}, \Delta t = 10^{-5}, w=1, \tau = 1$ ，分別測試 $f_0 = 3, f_0 = 5, f_0 = 7$ 的躍遷機率。

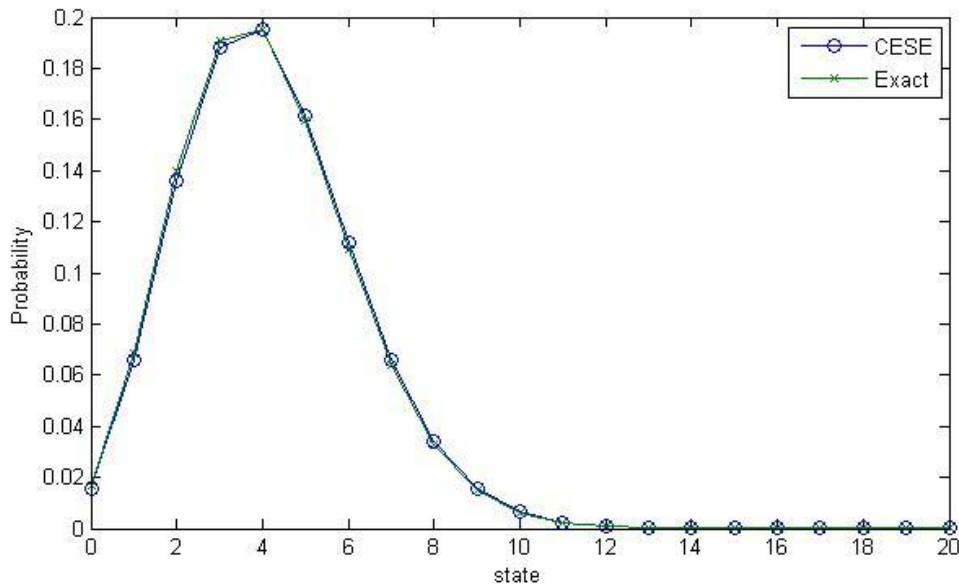


圖 3. 12 粒子在 $f_0 = 3$ 從基態要遷到各個激發態機率

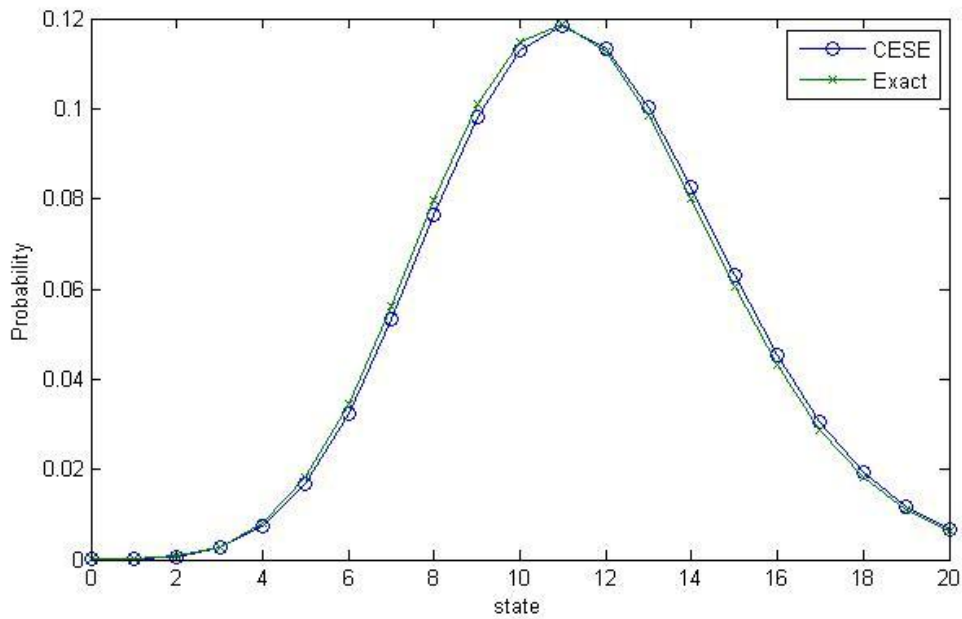


圖 3. 13 粒子在 $f_0 = 5$ 從基態要遷到各個激發態機率

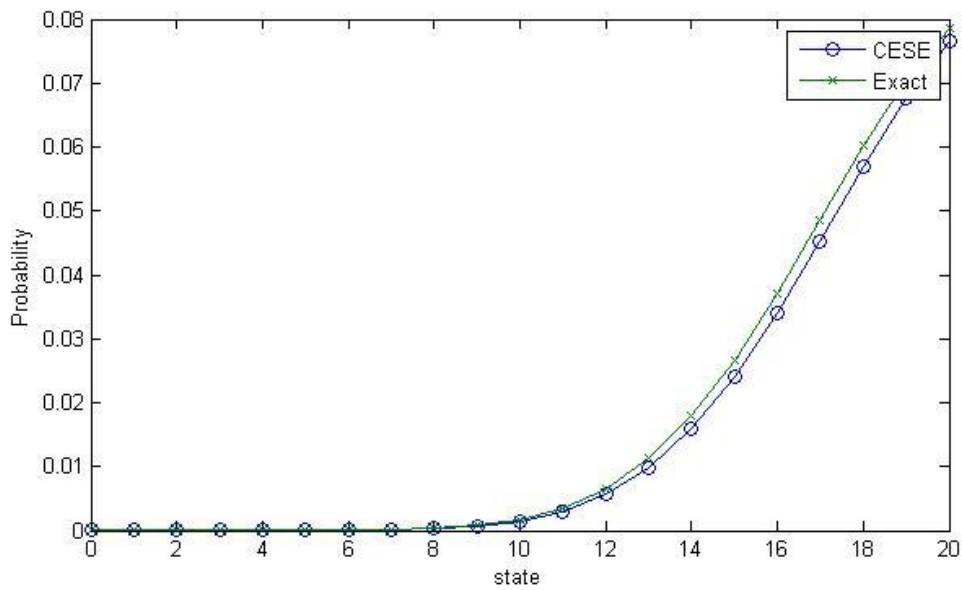


圖 3. 14 粒子在 $f_0 = 7$ 從基態要遷到各個激發態機率

3-6 高次諧波(High-order Harmonic Generation)

原子分子在雷射作用下，可以發射出輻射電磁波，輻射波頻率是入射激光的整數倍，此現象為高次諧波。

由文獻[3]，我們令粒子受到一位勢 $V = \frac{-2}{\sqrt{0.5+x^2}} - xE(t)$ ，其中

$$E(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin(\omega t)$$

帶入式(3.3)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -i \left(\frac{-2}{\sqrt{0.5+x^2}} - E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \sin(\omega t)x \right) \Psi \quad (3.7)$$

我們令初始條件為：

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g\rangle + |e\rangle)$$

$|g\rangle$ 表示粒子在位勢 $V = \frac{-2}{\sqrt{0.5+x^2}}$ 下的基態，而 $|e\rangle$ 表示粒子在位勢 $V = \frac{-2}{\sqrt{0.5+x^2}}$ 下的第一激發態，其各自對應的能量為-2 a.u.及-0.56 a.u.。

將(3.7)及(2.3)式對應，令 $V = \frac{-2}{\sqrt{0.5+x^2}} - E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \sin(\omega t)x$, $a = -\frac{i}{2}$, $b = 0$ ，帶回(2.37)-(2.40)可以得到 a-4scheme 下的表示式；我們取 $\Delta x = 10^{-2}$, $\Delta t = 10^{-5}$, $\omega = 0.056$, $\tau = 2\text{fs}$ ，各自模擬 $I = 10^{13}$ 與 $I = 4 * 10^{15}$ 到 $T = 85\text{a.u.}$ 時的光譜

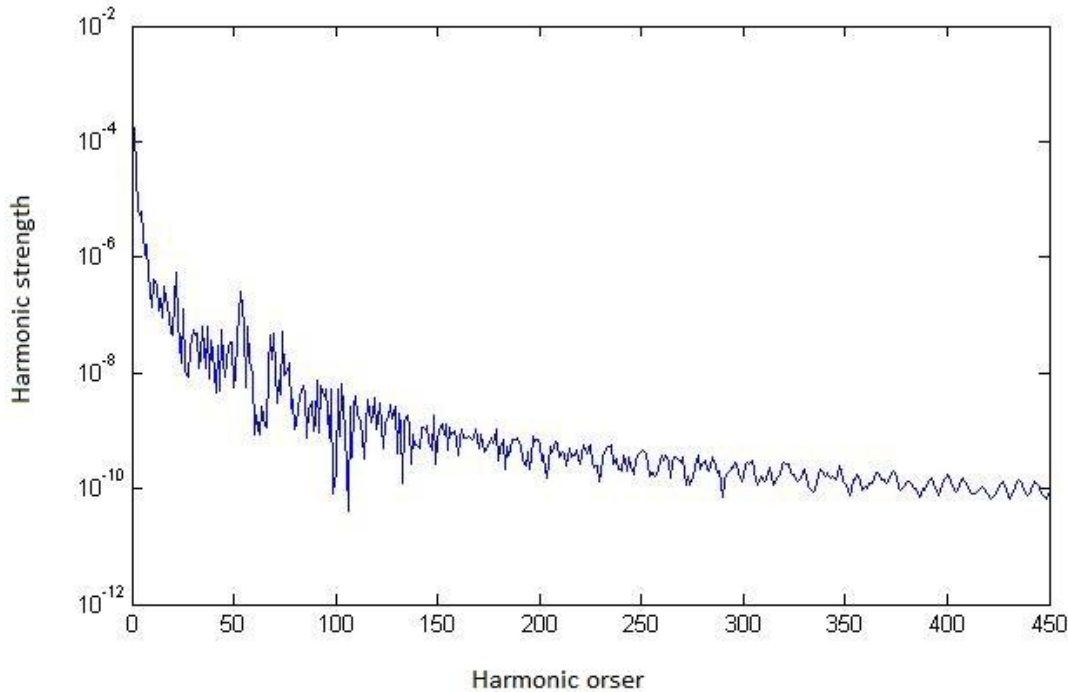


圖 3. 15 粒子在 $I = 10^{13}$ 的光譜圖

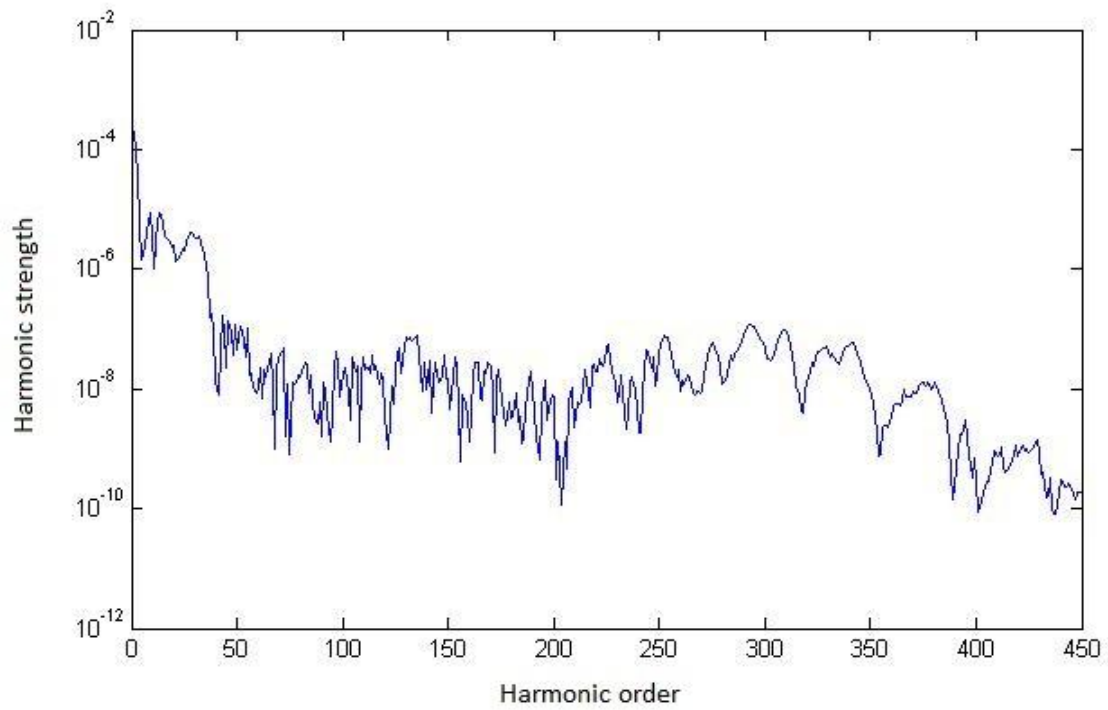


圖 3.16 粒子在 $I = 4 * 10^{15}$ 的光譜圖



四、結論與建議

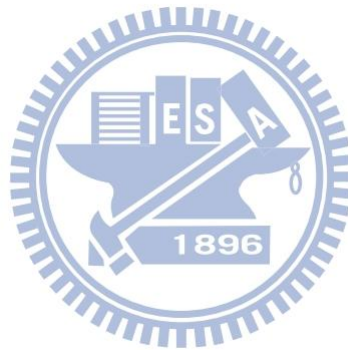
4-1 結論

本文研究中，利用 a-4 scheme 各自模擬不同情況的一維 PDE。在一維波動方程式、自由粒子、諧振子以及在外加場下的諧振子這些已知精確解下的量子力學問題，我們利用 a-4 scheme 獲得相當準確的數值解，在應用在 HHG 的例子，我們可以獲得合理的現象。

在量子力學問題中，從馮諾依曼穩定性分析 (Von Neumann stability analysis) [文獻 9]，我們可以得到設定網格的條件，但網格的條件設定在電腦運算上是沒有效率的，但如果不滿足此條件時，在數值解中會產生震盪、發散。

4-2 建議及未來展望

若效率問題可以有效解決的話，就可以進而從一維 PDE 進展至多維 PDE，在原子、分子或固態物理的例子進行計算。對於提升效率及數值精確度，可以從 c scheme、w- α scheme 或者是適應性網格方法來優化。



參考文獻

- [1] Sin-Chung Chang, "A New Approach For Constructing Highly Stable High Order CESE Schemes" AIAA-2010-543 48th AIAA Aerospace Science Meeting, Orlando, FL 4-7 Jan 2010
- [2] B.H Bransden, C.J. Joachain, physics of Atoms and Molecules, second edition, Prentice-Hall, 2003, ISBN-9780582356924
- [3] Bingbing Wang, Taiwang Cheng, Xiaofeng Li, and Panming Fu "Pulse-duration of high-order harmonic generation with coherent superposition state" *physical Rev A* 72 063412, 2005.
- [4] Polyanin A.D, Handbook of nonlinear partial differential equation, Chapman & Hall, 2003, ISBN-1584883553.
- [5] S.-C. Chang, A. Himansu, C.-Y. Loh, X.-Y. Wang and S.-T.J. Yu, "Robust and Simple Non-Reflecting Boundary Conditions for the Euler Equations, A New Approach Based on the Space-Time CE/SE Method," NASA/TMX2003-212495/REV1, 2003.
- [6] Peter W. Milonni, Joseph H. Eberly, LASER, Wiley & Sons, 1988, ISBN-0471627313.
- [7] XAVIER ANTOINE, CHRISTOPHE BESSE, AND VINCENT MOUYSSET "Number Schemes For The Simulation Of The Two-dimensional Schrodinger Equationsing Non-Reflecting Boundary Conditions" *MATHEMATICS OF COMPUTATION* Volume 73, Number 248, Pages 1779-1799
- [8] Zhen-Ting Huang, "Momentum space conservation element and solution element method and some applications" National Chiao Tung University, Master, 2009
- [9] Rodolfo R. Rosales, "Stability of Numerical Schemes for PDE's." MIT, Friday February 12, 1999.

附錄 A

一維薛丁格方程式受到一位勢 $V = \frac{1}{2}w^2x^2$ ，則此粒子的哈密頓算符為

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}w^2x^2$$

其中 x 為位置算符， p 為動量算符 ($p = -i\frac{d}{dx}$)。接著我們去解定態薛丁格方程式

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

利用冪級數法，我們可以得到

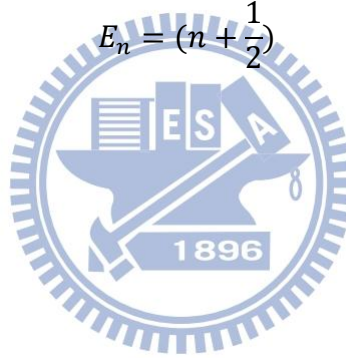
$$\langle x|\psi_n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{w}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot \exp\left(-\frac{wx^2}{2}\right) \cdot H_n \cdot \sqrt{w}x$$

H_n 為厄米多項式 (Hermite polynomials)

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

而相對應的能階 E_n 為

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)$$



附錄 B

由附錄 A 我們定義兩個算符 a, a^\dagger

$$a = \sqrt{\frac{1}{2}}(x + ip)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}}(x - ip)$$

而其中

$$[a, a^\dagger] = 1$$

雷射脈衝下的簡諧振子其哈密頓算符為

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}w^2x^2 - f(t)x$$

我們令

$$H = H_0 + H_1,$$

其中

$$H_0 = w \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), H_1 = -f(t) \sqrt{\frac{1}{2w}} (a + a^\dagger)$$

接著開始解其薛丁格方程式

$$\Psi(t) = \exp(-iH_0 t) \phi(t)$$

而

$$i\dot{\phi} = H_1(t)\phi$$

我們可以解出

$$\phi(t) = \exp\left\{-i\left[\int_{-\infty}^t f(t') \sqrt{\frac{1}{2w}} a \cdot \exp(-iwt') dt' + \int_{-\infty}^t f(t') \sqrt{\frac{1}{2w}} a^\dagger \exp(iwt') dt'\right]\right\} \phi(-\infty)$$

當 $t \rightarrow \infty$

$$\phi(\infty) = \exp[iC(a + a^\dagger)] \phi(-\infty)$$

其中

$$C = \sqrt{\frac{1}{2w}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \exp(iwt') dt'$$

我們將上式修正

$$\phi(\infty) = \exp\left(-\frac{1}{2}C^2\right) \exp(iCa^\dagger) \exp(iCa) \phi(-\infty)$$

又

$$(a^\dagger)^n \psi_0 = \sqrt{n!} \psi_n, a\psi_0 = 0$$

令 $t \rightarrow -\infty$ 時處於基態, $\psi(-\infty) = \psi_0$

我們可以得出

$$\psi(\infty) = \exp\left(-\frac{1}{2}C^2\right) \sum_n \frac{(iC)^n}{\sqrt{n!}} \psi_n$$

而其躍遷機率為一個 poisson distribution

$$W_{n0} = e^{-v} \frac{v^n}{n!}$$

其中

$$v = \frac{1}{2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t') e^{i\omega t} dt \right|^2$$

若 $f(t) = f_0 \exp(-t^2/\tau^2)$ ，則

$$v = \frac{\pi f_0^2 \tau^2}{2w} \exp\left(-\frac{1}{2} w^2 \tau^2\right)$$

其中 f_0 為常數。

