

Домашнее задание №5. Эволюция по мнимому времени

Александр Козлов

18 декабря 2022 г.

Формулировка задания

Дан гамильтониан одномерной квантово-механической системы с потенциалом в виде гауссовой ямы

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 e^{-x^2}, \quad (1)$$

где $V_0 < 0$. Требуется с помощью метода эволюции по мнимому времени найти дискретный спектр.

1 Дискретизация задачи

Рассматриваемое уравнение Шрёдингера (УШ) имеет вид

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0 e^{-x^2} \psi = E \psi \quad (2)$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_0 e^{-x^2}) \psi = 0. \quad (3)$$

Стоит заметить, что такое уравнение соответствует обычному одномерному УШ при $\hbar = 1$ и $m = 1/2$.

Прежде всего зададим равномерную сетку

$$x_0 = -R, \ x_1 = x_0 + \delta, \ x_2 = x_0 + 2\delta, \ \dots, \ x_k = x_0 + k\delta, \ \dots, \ x_M = x_0 + M\delta = R \quad (4)$$

с шагом $\delta = 2R/M$, где M — целое положительное число, а R — положительное действительное число. Будем пользоваться численной аппроксимацией второй производной

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\psi(x_{k+1}) - 2\psi(x_k) + \psi(x_{k-1}))}{\delta^2} + O(\delta^2), \quad k = \overline{1, M-1} \quad (5)$$

и сводить уравнение (2) к задаче диагонализации трёхдиагональной матрицы.

Перед тем, как писать явный вид такой матрицы, необходимо поговорить о том, как будут задаваться граничные условия. Ясно, что волновые функции состояний дискретного спектра будут экспоненциально затухать при больших по абсолютному значению x . Это обстоятельство может быть численно учтено различными вариантами, однако, остановимся на варианте, при котором полагается $\psi(x_0) = \psi(x_M) = 0$. Тогда численное приближение УШ для $k = 1$ примет вид

$$-\frac{\psi(x_2) - 2\psi(x_1)}{\delta^2} + V(x_1) \psi(x_1) = E \psi(x_1). \quad (6)$$

Для $k = M - 1$ получаем аналогичное уравнение

$$-\frac{-2\psi(x_{M-1}) + \psi(x_{M-2})}{\delta^2} + V(x_{M-1})\psi(x_{M-1}) = E\psi(x_{M-1}). \quad (7)$$

А для всех остальных k имеем уравнение

$$-\frac{\psi(x_{k+1}) - 2\psi(x_k) + \psi(x_{k-1}))}{\delta^2} + V(x_k)\psi(x_k) = E\psi(x_k). \quad (8)$$

В матричном виде задача записывается так:

$$\begin{pmatrix} 2\delta^{-2} + V(x_1) & -\delta^{-2} & & & \\ -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_2) & -\delta^{-2} & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-2}) & -\delta^{-2} \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_{M-2}) \\ \psi(x_{M-1}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_{M-2}) \\ \psi(x_{M-1}) \end{pmatrix}. \quad (9)$$

2 Применение операторной экспоненты

Можно вместо нахождения собственных значений матрицы \hat{H} перейти к нахождению собственных значений матрицы $\exp(\hat{H}T)$, где $T = \tau N$ — значение мнимого времени, $N \gg 1$, а $\tau < 0$ — достаточно малое значение мнимого времени (τ берётся отрицательным, чтобы наибольшим по модулю собственным значениям новой матрицы отвечали уровни энергии дискретного спектра гамильтониана). Применим к $\exp(\hat{H}\tau)$ формулу расщепления оператора

$$\exp(\hat{H}\tau) = \exp((\hat{T} + \hat{V})\tau) = \exp(\hat{V}\tau/2) \exp(\hat{T}\tau) \exp(\hat{V}\tau/2) + O(\tau^3). \quad (10)$$

Матрица \hat{V} является диагональной, экспонента от такой матрицы тоже будет диагональной. Для экспоненты от матрицы кинетической энергии применим Паде-аппроксимацию

$$\exp(\hat{T}\tau) = (\hat{I} + \hat{T}\tau/2)(\hat{I} - \hat{T}\tau/2)^{-1} + O(\tau^3). \quad (11)$$

Таким образом удаётся аппроксимировать матрицу $\exp(\hat{H}T)$ матрицей $\hat{A}(\tau, N)$

$$\exp(\hat{H}T) \approx \hat{A}(\tau, N) = \left(\exp(\hat{V}\tau/2) (\hat{I} + \hat{T}\tau/2) (\hat{I} - \hat{T}\tau/2)^{-1} \exp(\hat{V}\tau/2) \right)^N. \quad (12)$$

Таким образом, остаётся лишь найти собственные значения матрицы $\hat{A}(\tau, N)$, для чего следует использовать итерации Арнольди.

3 Реализация и результаты

Рассмотрим случай $|V_0| = 5.0$ и посмотрим как быстро считаются собственные значения гамильтониана предложенной схемой. На Рис. 1 показана зависимость времени работы алгоритма при различных значениях размера бокса. Зависимость времени расчета от числа точек сетки получилась $O(M^3)$

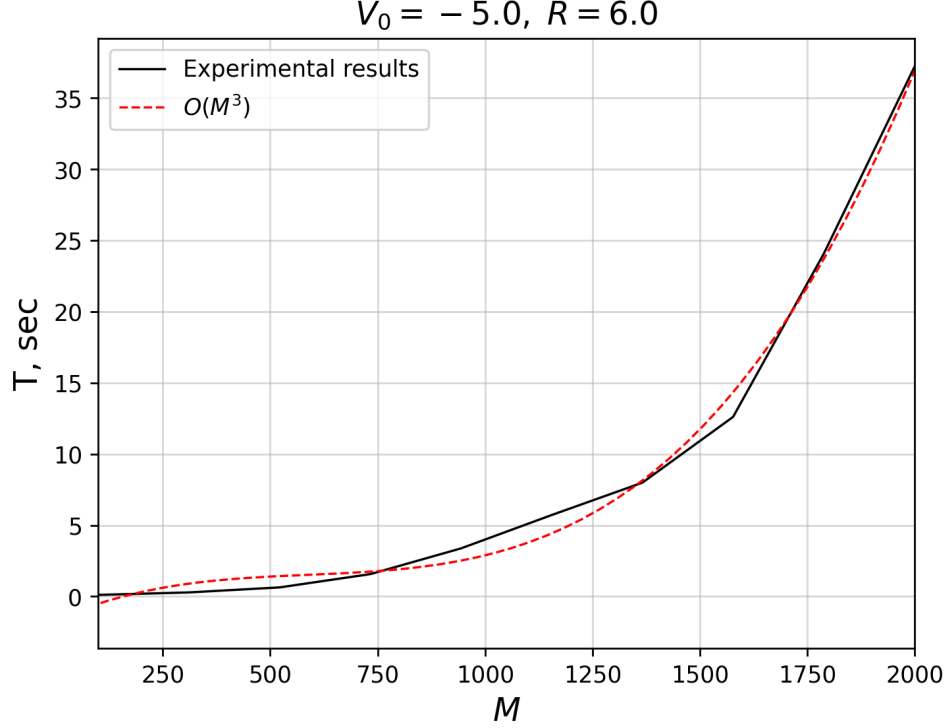


Рис. 1: Время работы алгоритма нахождения уровней энергии дискретного спектра гамильтониана методом операторной экспоненты при различных размерах сетки M в случае $R = 6.0$ и $|V_0| = 5.0$, также приведена аппроксимация экспериментально полученной зависимости кубической параболой (красный пунктир).

из-за того, что сложность решения СЛАУ с квадратными матрицами размера $(M - 1) \times (M - 1)$ составляет $O(M^3)$.

Кроме того, было интересно посмотреть на зависимость невязки

$$R = \left| (\hat{A} - \lambda_i \hat{I}) \tilde{\phi}_i \right|, \quad (13)$$

где λ_i — i -ое собственное значение оператора \hat{A} , а $\tilde{\phi}_i$ — соответствующая ему собственная функция, от параметра $|\tau|$. Для этого кладем $N = 10$, $M = 1000$, $R = 6.0$ и $|V_0| = 5.0$ и считаем невязку. Для основного состояния имеем зависимость, показанную на правой части Рис. 2. Для первого возбуждённого состояния имеем схожую картину (см. Рис. 3). Видно, что присутствует два конкурирующих эффекта, приводящих к увеличению невязки при слишком маленьких и при слишком больших значениях $abs\tau$: при слишком большом значении $|\tau|$ плохо работают приближенные формулы, а при слишком малом $|\tau|$ дискретный спектр экспоненты от гамильтониана становится слишком слабо отделенным от непрерывного спектра ($\sim |e^{-E_k \tau} - 1|$).

$V_0 = -5.0$, $R = 6.0$, $N = 100$, $M = 1000$, optimal $E_0 = -3.14036$

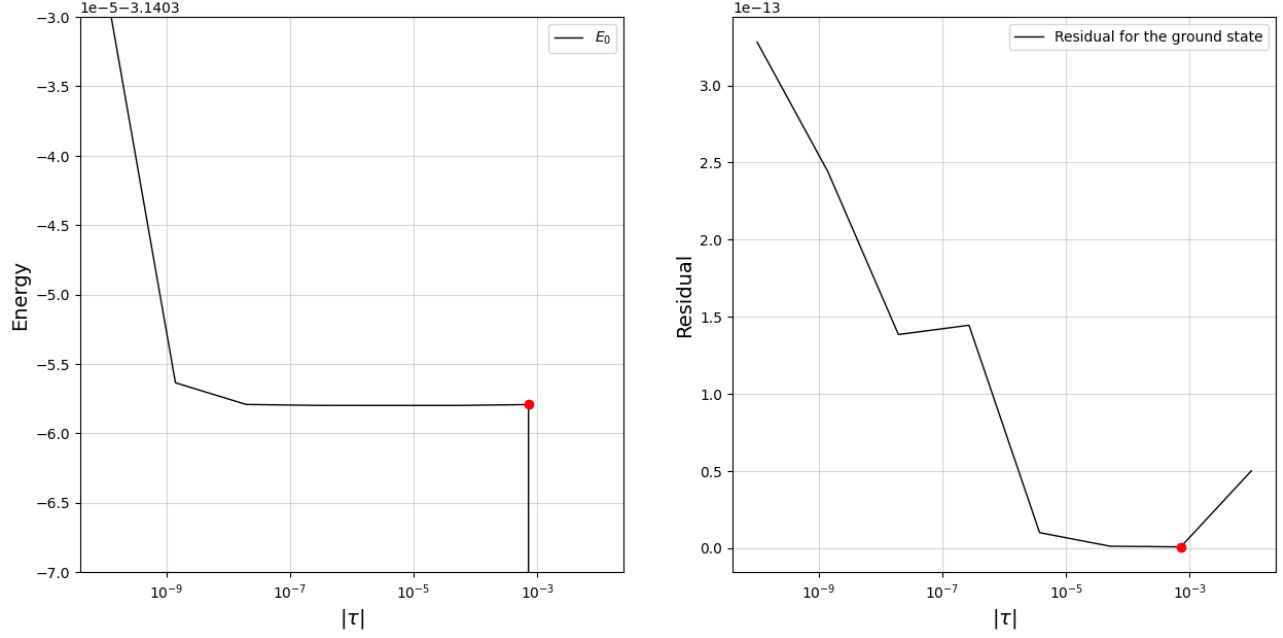


Рис. 2: На левой панели показана зависимость вычисляемого уровня энергии основного состояния от $|\tau|$ при $N = 10$, $M = 1000$, $R = 6.0$ и $|V_0| = 5.0$; на правой панели показана зависимость невязки (13) от $|\tau|$ для основного состояния. Красной точкой отмечены оптимальные параметры.

$V_0 = -5.0$, $R = 6.0$, $N = 100$, $M = 1000$, optimal $E_1 = -0.40420$

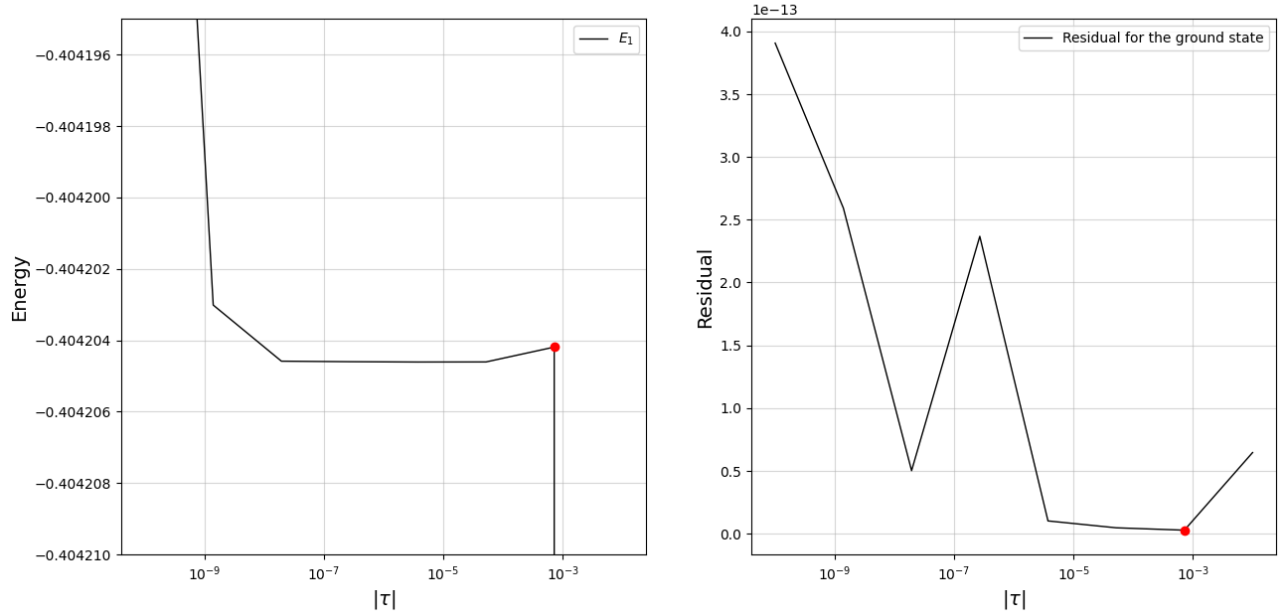


Рис. 3: На левой панели показана зависимость вычисляемого уровня энергии первого возбуждённого состояния от $|\tau|$ при $N = 10$, $M = 1000$, $R = 6.0$ и $|V_0| = 5.0$; на правой панели показана зависимость невязки (13) от $|\tau|$ для первого возбужденного состояния. Красной точкой отмечены оптимальные параметры.