

Домашнее задание №3. Метод простых итерация со сдвигом

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 вычислить основное состояние с помощью метода простых итераций со сдвигом при значении постоянной связи V_0 , которое поддерживает два состояния дискретного спектра. Исследовать зависимость вычислительных затрат от числа точек сетки.

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:

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

Таким образом надо диагонализировать симметричную трёхдиагональную матрицу размера $(M-1) \times (M-1)$. Но мы вместо того, чтобы диагонализировать матрицу

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2\delta^{-2} + V(x_1) & -\delta^{-2} & & & \\ -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_2) & -\delta^{-2} & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-2}) \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-1}) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

будем решать задачу более сложным путём — методом последовательных итераций со сдвигом. Для этого, сперва найдём методом простых итераций наибольшее по абсолютному значению собственное значение матрицы \hat{H} E_{\max} . Затем сдвинем спектр матрицы \hat{H} на $E_{\max}/2$, то есть перейдём к рассмотрению матрицы $\hat{H}_* = \hat{H} - E_{\max}/2 \hat{I}$. Найдём методом простых итераций наибольшее по модулю собственное значение новой матрицы.

2 Результаты

Метод простых итераций со сдвигом был применён для определения энергии основного состояния при фиксированных параметрах $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при числе итераций, равном 1000, число точек сетки M менялось, что дало зависимость времени вычисления от числа точек сетки, изображённую на Рис. 1.

Кроме того, удалось установить, что увеличение числа точек сетки при неизменной ширине сетки R негативно сказывается на точности решения, что видно на Рис. 2. У этого есть две основные причины. Во-первых, погрешность увеличивается применением такой операции, как вычисление разности двух больших чисел, которую применяем при переходе от максимального по модулю собственного значения матрицы $\hat{H}_* = \hat{H} - E_{\max}/2 \hat{I}$ к значения энергии основного состояния исходного гамильтониана \hat{H} . Во-вторых, при увеличении числа точек сетки неизменно уменьшается шаг сетки $\delta = 2R/M$, следовательно, увеличивается значение максимально большого значения энергии, которое мы можем оценить как

$$E_{\max} \sim 1/\delta^2 \propto M^2$$

(напомним, что при постановке нулевых граничных условий гамильтониан фактически переходит к гамильтониану с бесконечными стенками, сильно возбужденные состояния которого будут зависеть от номера состояния пропорционально n^2), это приводит к чудовещному падению скорости сходимости. Поясним почему. Метод простых итераций со сдвигом даёт оценку на точность получаемого в результате k итераций значения максимальной по модулю энергии, как

$$O\left(\left(\frac{E_{n-1}}{E_n}\right)^{k+1}\right). \quad (11)$$

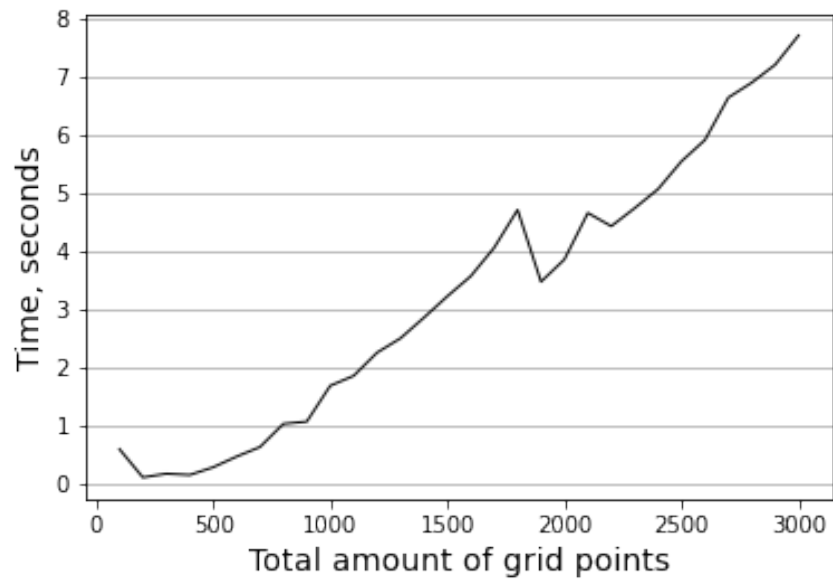


Рис. 1: Зависимость времени работы программы в секундах от числа точек сетки при фиксированных $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при 1000 итераций.

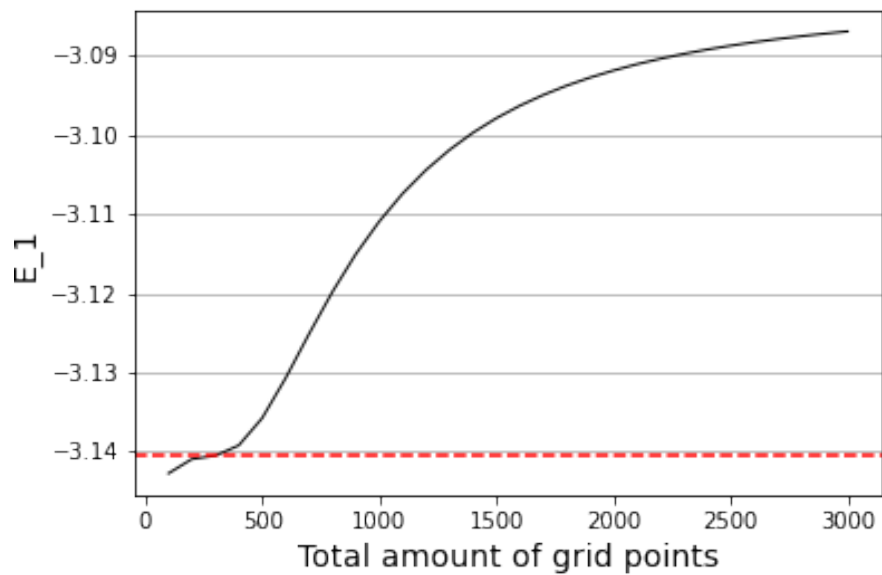


Рис. 2: Зависимость энергии основного состояния от числа точек сетки при фиксированных $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при 1000 итераций. Чёрной линией отмечена полученная зависимость, красным пунктиром показано эталонное значение энергии основного состояния, взятое из первого домашнего задания.

Отсюда следует, что для матрицы со сдвинутыми собственными значениями оценка точности будет иметь вид

$$O\left(\left(\frac{E_0 - E_{\max}/2}{E_{\max}/2}\right)^{k+1}\right) = O\left(\left(1 - \frac{1}{M^2}\right)^{k+1}\right). \quad (12)$$

Видно, что при увеличении M точность падает.

2.1 Более детальное доказательство того, что метод плох

Из Рис. 2 может показаться, что с увеличением числа точек сетки результат куда-то сходится. Покажем, что это в корне не верно. Для этого введём в рассмотрение невязку

$$R = \left\| \hat{H}\varphi_k - E_k\varphi_k \right\|,$$

где E_k и φ_k — полученное за k итераций значение энергии и соответствующий ему собственный вектор. На Рис. 3 показана зависимость такой невязки от числа точек сетки. Видно, что при малом числе точек сетки, алгоритм работает очень даже хорошо, но с увеличением числа точек сетки происходит стремительный рост невязки.

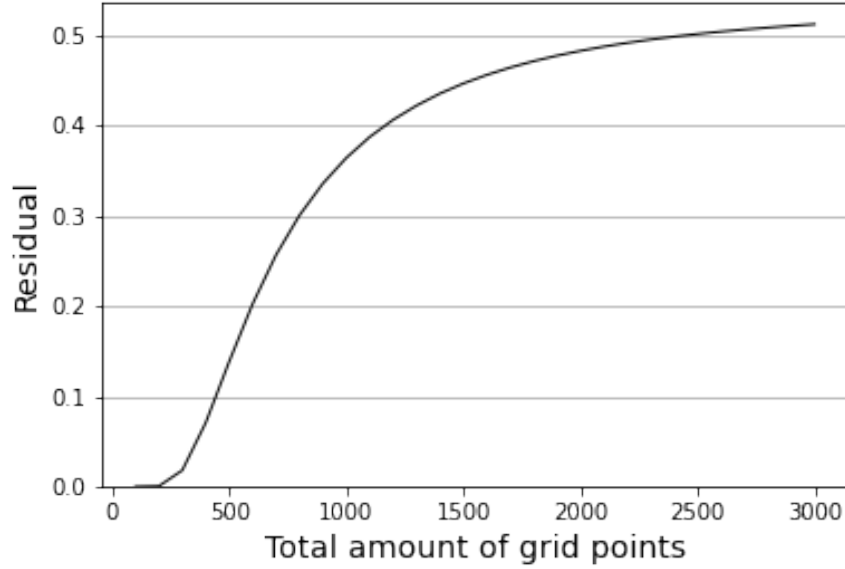


Рис. 3: Зависимость невязки $R = \left\| \hat{H}\varphi_k - E_k\varphi_k \right\|$ от числа точек сетки при фиксированных $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при 1000 итераций.