Домашнее задание №2. Метод ортогональных коллокаций

Александр Козлов

25 октября 2022 г.

Формулировка задания

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

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0\, e^{-x^2}, \tag{1}$$

где $V_0 < 0$. Требуется сделать следующее.

1. Найти константы связи V_0, при которых в системе возникает одно, два и три связанных состояния.
2. Исследовать зависимость вычислительных затрат от размера сетки.
3. Исследовать зависимость погрешности энергий состояний от размера сетки и границ бокса.

Задания следует выполнять методом коллокации с разложением по набору функций в пространстве кубических сплайнов $S_{3,2}$.

1 Дискретизация задачи и численное решение

Рассматриваемое уравнение Шрёдингера (УШ) имеет вид

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V_0\, e^{-x^2}\, \psi = E\, \psi \tag{2}$$

или

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

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

Прежде всего зададим равномерную сетку

$$x_0 = -R,\ x_1 = x_0 + \delta,\ x_2 = x_0 + 2\delta,\ \ldots,\ x_k = x_0 + k\delta,\ \ldots,\ x_M = x_0 + M\delta = R \tag{4}$$

с шагом $\delta = 2R/M$, где M — целое положительное число, а R — положительное действительное число.

Решать уравнение будем методом, основанным на разложении волновой функции по некоторому набору функций $S_l(x)$

$$\psi(x) = \sum_l f_l S_l(x). \tag{5}$$

1.1 Набор функций

Для каждой k-ой точки сетки определена пара функций Φ_k и Ψ_k, каждая из которых в свою очередь определяется как кусочно заданная функция на интервале $x \in (x_{k-1},\ x_{k+1})$ следующим образом:

$$\Phi_k(x) = \begin{cases} -\dfrac{2}{\delta^3}(x-x_k)^3 - \dfrac{3}{\delta^2}(x-x_k)^2 + 1, & x \le x_k \\ \\ \dfrac{2}{\delta^3}(x-x_k)^3 - \dfrac{3}{\delta^2}(x-x_k)^2 + 1, & x > x_k \end{cases},$$

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\delta^2}(x-x_k)^3 + \dfrac{2}{\delta}(x-x_k)^2 + (x-x_k), & x \le x_k \\ \\ \dfrac{1}{\delta^2}(x-x_k)^3 - \dfrac{2}{\delta}(x-x_k)^2 + (x-x_k), & x > x_k \end{cases}. \tag{6}$$

Полезны выражения для вторых производных этих функций, поэтому выпишем их

$$\Phi_k''(x) = \begin{cases} -\dfrac{12}{\delta^3}(x-x_k) - \dfrac{6}{\delta^2}, & x \le x_k \\ \\ \dfrac{12}{\delta^3}(x-x_k) - \dfrac{6}{\delta^2}, & x > x_k \end{cases},$$

$$\Psi_k''(x) = \begin{cases} \dfrac{6}{\delta^2}(x-x_k) + \dfrac{4}{\delta}, & x \le x_k \\ \\ \dfrac{6}{\delta^2}(x-x_k) - \dfrac{4}{\delta}, & x > x_k \end{cases}. \tag{7}$$

Из функций Ψ и Φ нужно собирать набор, по которому будем раскладывать нашу волновую функцию. Набор функций можно ввести следующим образом:

$$S_l(x) = \begin{cases} \alpha_1\Psi_0(x) + \alpha_2\Phi_0(x), & l = 1; \\ \beta_1\Psi_M(x) + \beta_2\Phi_M(x), & l = 2M; \\ \Phi_{(l-1)/2}(x), & l \bmod 2 = 1 \text{ и } l \ne 1; \\ \Psi_{l/2}(x), & l \bmod 2 = 0 \text{ и } l \ne 2M \end{cases}, \quad l = \overline{1, 2M}. \tag{8}$$

Параметры α и β выбираются на основе поставленного граничного условия. Для определённости поставим нулевое граничное условие

$$\psi(x_0) = \psi(x_M) = 0, \tag{9}$$

тогда параметры α и β можно выбрать такими:

$$\alpha_2 = \beta_2 = 0, \quad \alpha_1 = \beta_1 = 1. \tag{10}$$

В итоге получим

$$S_l(x) = \begin{cases} \Psi_0(x), & l = 1; \\ \Psi_M(x), & l = 2M; \\ \Phi_{(l-1)/2}(x), & l \bmod 2 = 1 \text{ и } l \ne 1; \\ \Psi_{l/2}(x), & l \bmod 2 = 0 \text{ и } l \ne 2M \end{cases}, \quad l = \overline{1, 2M}. \tag{11}$$

1.2 Точки коллокации

В качестве точек коллокации будут использованы нули второго полинома Лежанра на отрезке $[-1,\ 1]$, отображённые с этого отрезка на отрезки сетки $[x_{k-1},\ x_k]$, $k = \overline{1, M}$. Кратко точки коллокации определить можно следующим образом:

$$x_t^{(c)} = \begin{cases} x_{(t-1)/2} + \dfrac{\delta}{2}\left(1 - \dfrac{1}{\sqrt{3}}\right), & t \bmod 2 = 1; \\ x_{t/2} - \dfrac{\delta}{2}\left(1 - \dfrac{1}{\sqrt{3}}\right), & t \bmod 2 = 0 \end{cases}, \quad t = \overline{1, 2M}. \tag{12}$$

1.3 Проекция уравнения Шрёдингера на дельта-функции

Подставляем разложение волновой функции по кубическим сплайнам (5) в уравнения Шрёдингера (2) и проецируем полученное уравнение на дельта-функции $\delta(x - x_t^{(c)})$, приходим к соотношению

$$\sum_{l=1}^{2M} f_l \left\langle \delta(x - x_t^{(c)}) \middle| H - E \middle| S_l(x) \right\rangle = 0, \quad t = \overline{1, 2M}. \tag{13}$$

Функции $S_l(x)$ мы выбрали локализованными, это позволяет заметно сократить число слагаемых в уравнении, так как дельта-функция с центром в точке $x^{(c)} \in [x_{k-1},\, x_k]$ даёт ненулевые интегралы лишь для тех $S_l(x)$, которые отличны от нуля на интервале $[x_{k-1},\, x_k]$. Однако, для записи этого вывода требуется учитывать чётность t. Нетрудно получить, что для нечетного индекса t выживают слагаемые с индексом $l = t-1,\ t,\ t+1,\ t+2$, а для четного t выживают слагаемые с индексом $l = t-2,\ t-1,\ t,\ t+1$.

Задача сводится к обобщённой задаче на собственные значения/собственные вектора, которую можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \left(\hat{A} - E\hat{B}\right)\mathbf{f} &= 0, \\ \mathbf{f} &= (f_1,\, \ldots,\, f_{2M})^{\mathrm{T}}, \\ A_{l,t} &= \left\langle \delta(x - x_t^{(c)}) \middle| H \middle| S_l(x) \right\rangle, \\ B_{l,t} &= \left\langle \delta(x - x_t^{(c)}) \middle| S_l(x) \right\rangle. \end{aligned} \tag{14}$$

Если матрица $\hat{B}$ обратима, то можно смести задачу к стандартной задче на собственные значения/собственные вектора, домножив слева на матрицу $\hat{B}^{-1}$, тогда получаем уравнение

$$\left(\hat{B}^{-1}\hat{A} - E\hat{I}\right)\mathbf{f} = 0. \tag{15}$$

2 Количество связанных состояний в зависимости от константы связи

При размере сетки $M = 300$ и ширине бокса $R = 20$ была получена зависимость числа связанных состояний от параметра связи, показанная на Рис. 1. Для оценки правильности полученных результатов обратимся к работе [1], где рассматривается уравнение, похожее на нашее за исключением того, что v_0 в статье соответсует $-V_0/2$ у нас. Если учесть разницу в обозначениях, то можно вынести из данной работы, что одно связанное состояние существует при $0 < |V_0| < 2.684$, два связанных состояния — при $2.684 < |V_0| < 8.650$, три состояния — при $8.650 < |V_0| < 17.796$. Видно, что значения константы связи, при которых происходят скачки числа связанных состояний, примерно совпадают.

3 Зависимость времени работы программы от размера сетки

Определим, как долго работает программа при различных значениях параметра M — размера сетки. Для определённости фиксируем прочие параметры задачи, например, положим их следующими: $V_0 = -1.0$ и $R = 20$. Результаты продемонстрированы на Рис. 2.

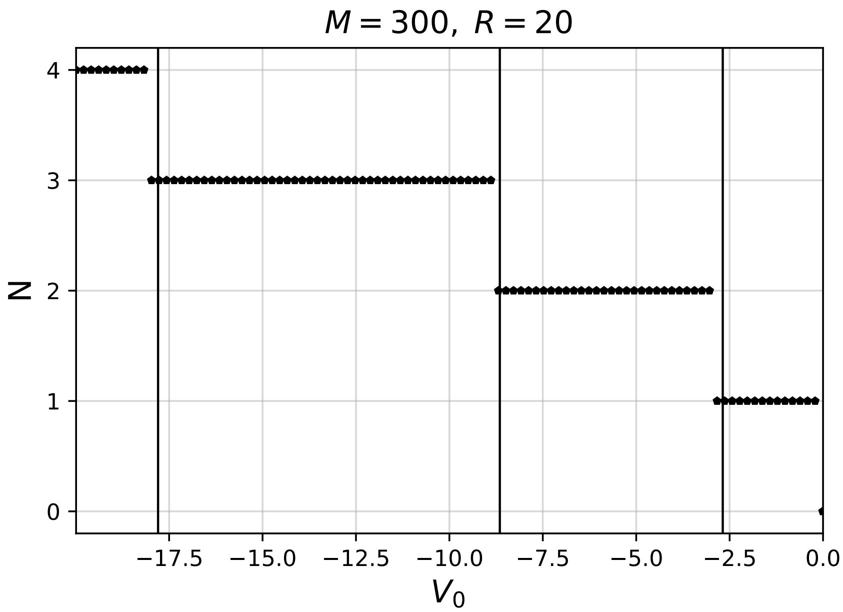

Рис. 1: Количество связанных состояний N в зависимости от константы связи V_0 при размере сетки $M = 300$ и ширине бокса $R = 20$. Вертикальными линиями отмечены границы, адаптированные из работы [1].

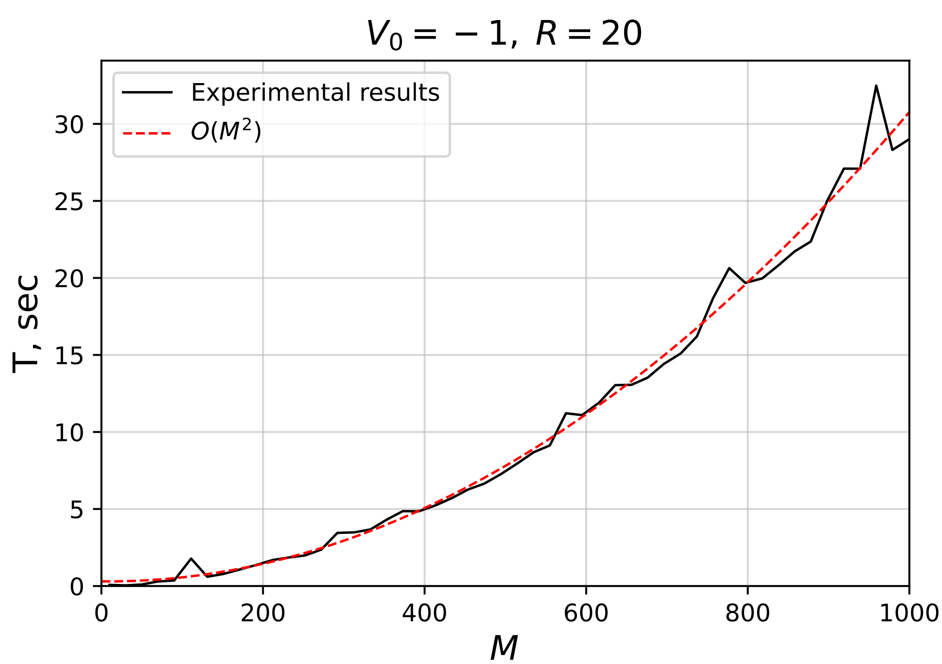

Рис. 2: Время работы программы в секундах в зависимости от размера сетки M при $V_0 = -1.0$ и $R = 20$ (черная линия) и аппроксимация такой зависимости параболой (красная пунктирная линия).

4 Зависимость ошибки определения уровней энергии от размера сетки и размера бокса

Рассмотрим случай $|V_0| = 1$. Для такого случая вариационный метод даёт оценку $E_1 = -0.335$. В качестве наиболее точного значения энергии взято эталонное значение энергии основного состояния из первого домашнего задания $E_0 = -0.3539907385825565$. На Рис. 3 представлены результаты расчётов.

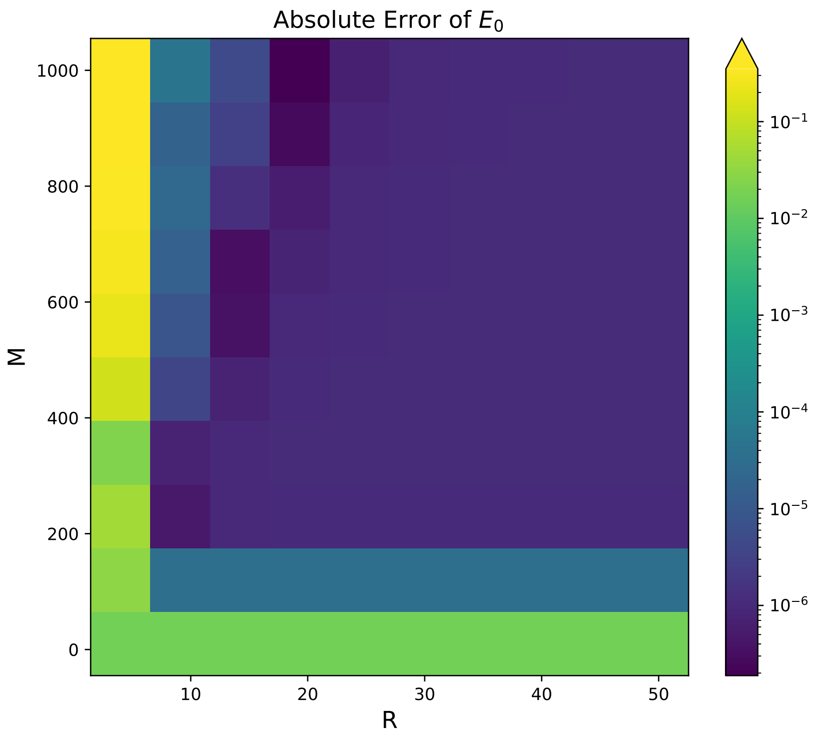

Рис. 3: Абсолютная ошибка вычисления энергии основного состояния при различных размерах сетки M и бокса R для случая $|V_0| = 1$.

Список литературы

[1] Fernández, Francisco. Quantum Gaussian wells and barriers. *Amer. J. Phys.*, 79:752–754, 2011.