

# Домашнее задание №2. Метод ортогональных коллокаций

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 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

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

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.

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

$$\psi(x) = \sum_l f_l S_l(x). \quad (5)$$

## 1.1 Набор функций

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

$$\Phi_k(x) = \begin{cases} -\frac{2}{\delta^3}(x-x_k)^3 - \frac{3}{\delta^2}(x-x_k)^2 + 1, & x \leq x_k \\ \frac{2}{\delta^3}(x-x_k)^3 - \frac{3}{\delta^2}(x-x_k)^2 + 1, & x > x_k \end{cases}, \quad (6)$$

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

Полезны выражения для вторых производных этих функций, поэтому выпишем их

$$\Phi_k''(x) = \begin{cases} -\frac{12}{\delta^3}(x-x_k) - \frac{6}{\delta^2}, & x \leq x_k \\ \frac{12}{\delta^3}(x-x_k) - \frac{6}{\delta^2}, & x > x_k \end{cases}, \quad (7)$$

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

Из функций  $\Psi$  и  $\Phi$  нужно собирать набор, по которому будем раскладывать нашу волновую функцию. Набор функций можно ввести следующим образом:

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

Параметры  $\alpha$  и  $\beta$  выбираются на основе поставленного граничного условия. Для определённости поставим нулевое граничное условие

$$\psi(x_0) = \psi(x_M) = 0, \quad (9)$$

тогда параметры  $\alpha$  и  $\beta$  можно выбрать такими:

$$\alpha_2 = \beta_2 = 0, \quad \alpha_1 = \beta_1 = 1. \quad (10)$$

В итоге получим

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

## 1.2 Точки коллокации

В качестве точек коллокации будут использованы нули второго полинома Лежандра 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:

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

### 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

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

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 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:

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

Такая обобщенная задача на собственные значения решается с помощью функции `scipy.linalg.eigvals` (есть более продвинутая функция `scipy.sparse.linalg.eigs`, которая использует для решения обобщенной задачи на собственные значения метод Арнольди с перезапуском, что позволяет значительно ускорить расчеты, однако результат работы `scipy.sparse.linalg.eigs` часто получается неверным, поэтому от ее использования пришлось отказаться).

## 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 наше за исключением того, что  $v_0$  в статье соответствует  $-V_0/2$  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.

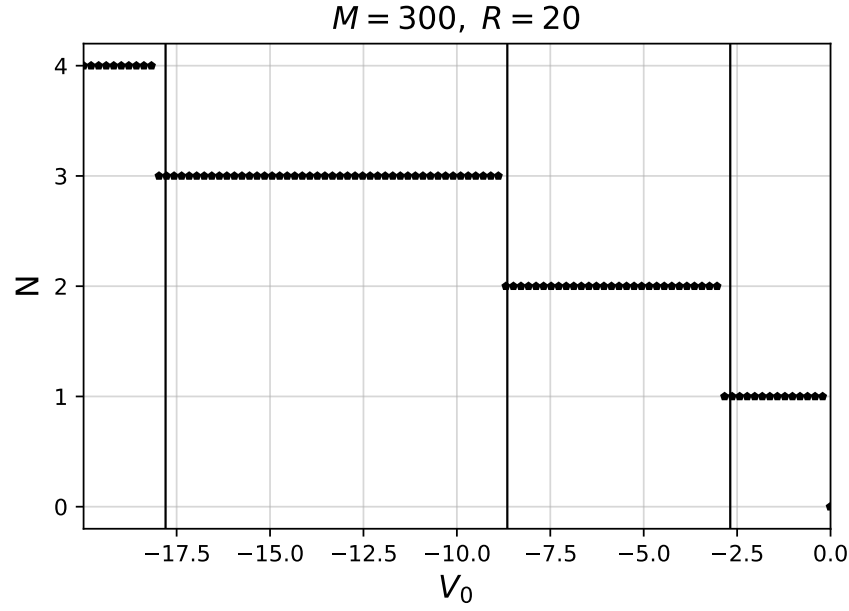


Рис. 1: Количество связанных состояний  $N$  в зависимости от константы связи  $V_0$  при размере сетки  $M = 300$  и ширине бокса  $R = 20$ . Вертикальными линиями отмечены границы, адаптированные из работы [1].

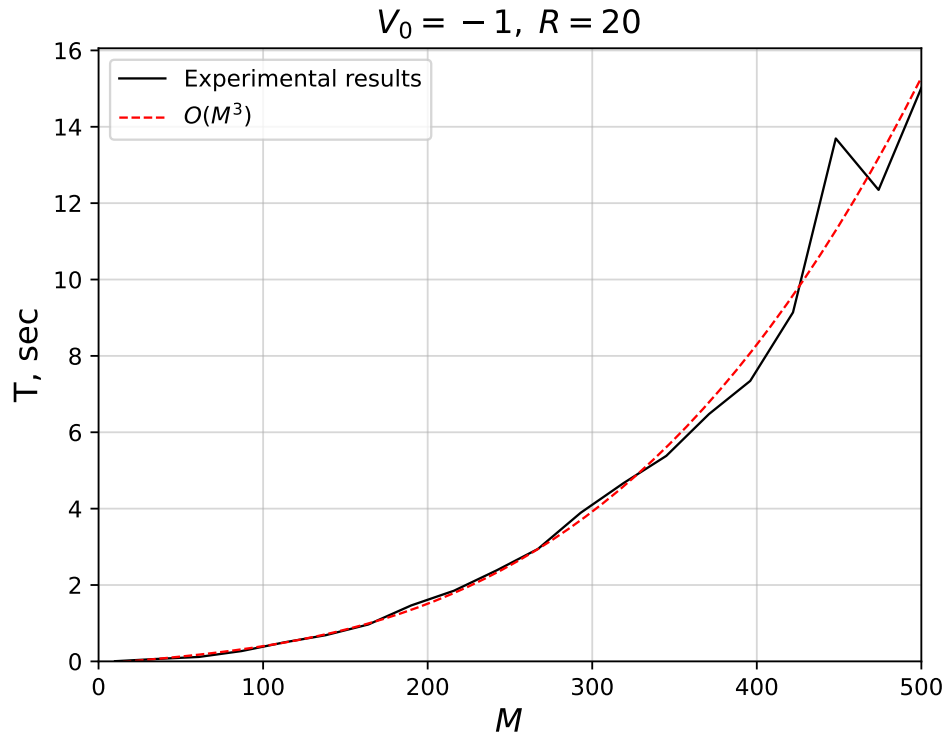


Рис. 2: Время работы программы в секундах в зависимости от размера сетки  $M$  при  $V_0 = -1.0$  и  $R = 20$  (черная линия) и аппроксимация такой зависимости параболой (красная пунктирная линия).

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

Рассмотрим случай  $|V_0| = 1$ . Для такого случая вариационный метод даёт оценку  $E_1 0 = -0.335$ . В качестве наиболее точного значения энергии основного состояния при данном  $R$  возьмем значение, получаемое в пределе  $M \rightarrow \infty$ , для чего аппроксимируем параболой зависимость уровня энергии от  $1/M$  для каждого значения  $R$ . На Рис. 4 представлены абсолютные значения ошибки получаемого значения энергии при различных  $R$  и  $\delta$ . На Рис. 4 представлены результаты расчётов.

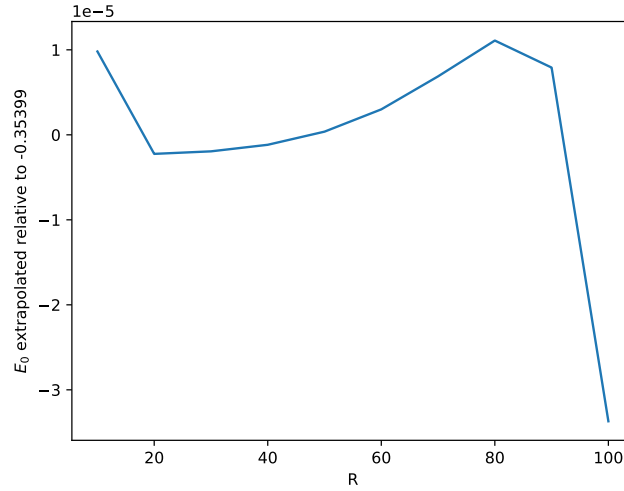


Рис. 3: Экстраполированные значения энергий дискретного спектра при различных размерах бокса  $R$  для случая  $|V_0| = 1$ .

## Список литературы

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

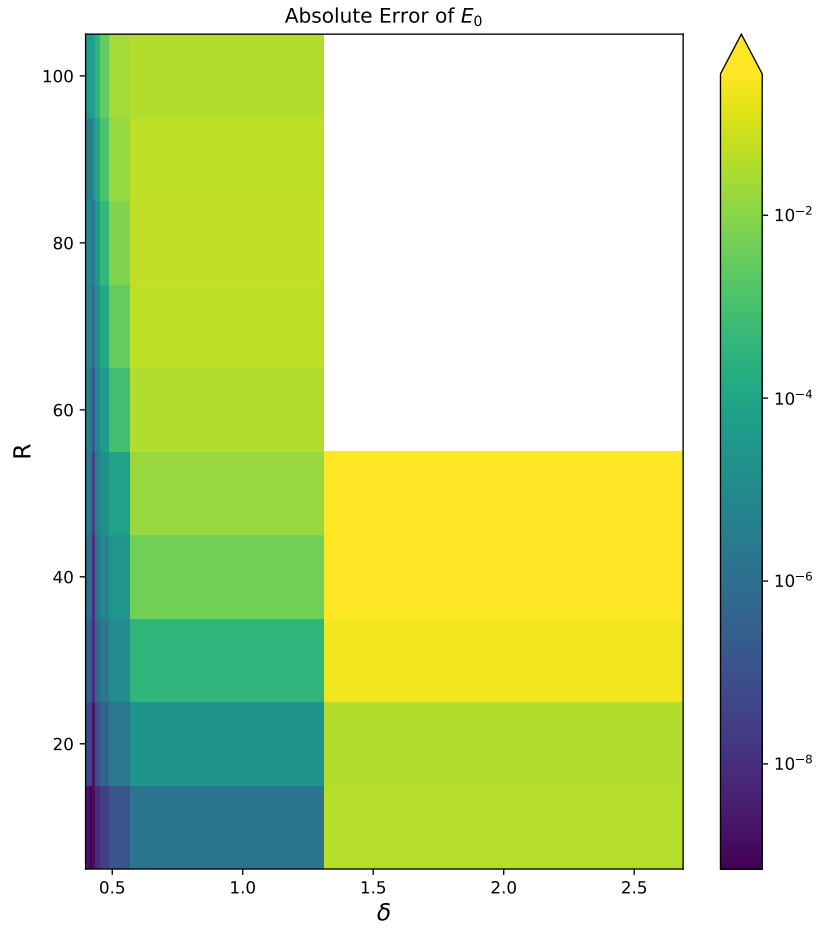


Рис. 4: Абсолютная ошибка вычисления энергии основного состояния при различных размерах сетки  $M$  и бокса  $R$  для случая  $|V_0| = 1$ .