

1 Вычисление основного состояния системы при помощи простых итераций со сдвигом

1.1 Постановка задачи

В качестве модели задачи исследовалась частица в потенциале гауссовой формы. Гамильтониан системы, и стационарное уравнение Шредингера выглядят следующим образом:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 \exp(-x^2); \quad H\Psi = E\Psi$$

Поставленные задачи:

- Найти энергию основного состояния, при условии выбора V_0 так, чтобы поддерживалось два связанных состояния.
- Исследовать зависимость вычислительных затрат от размера сетки

1.2 Оценка энергии

Константа связи: 5; Полуширина бокса: 10.

Метод прямых итераций сходится к наибольшему по модулю собственному числу. Поэтому вычисления проводились в два этапа. Первый - грубая оценка максимального по модулю собственного числа. Второй - сдвиг, так, чтобы сделать нужное нам собственное число максимальным по модулю, и его более точная оценка.

В качестве критерия останова алгоритма исследовалась невязка решения на n -ной итерации:

$$r_n(x) = ||H\Psi_n - E_n\Psi_n||$$

Итерации продолжались пока невязка была больше, чем 10^{-4} . Пример сходимости невязки, и приближения к точному решению, представлен на Рис. 4

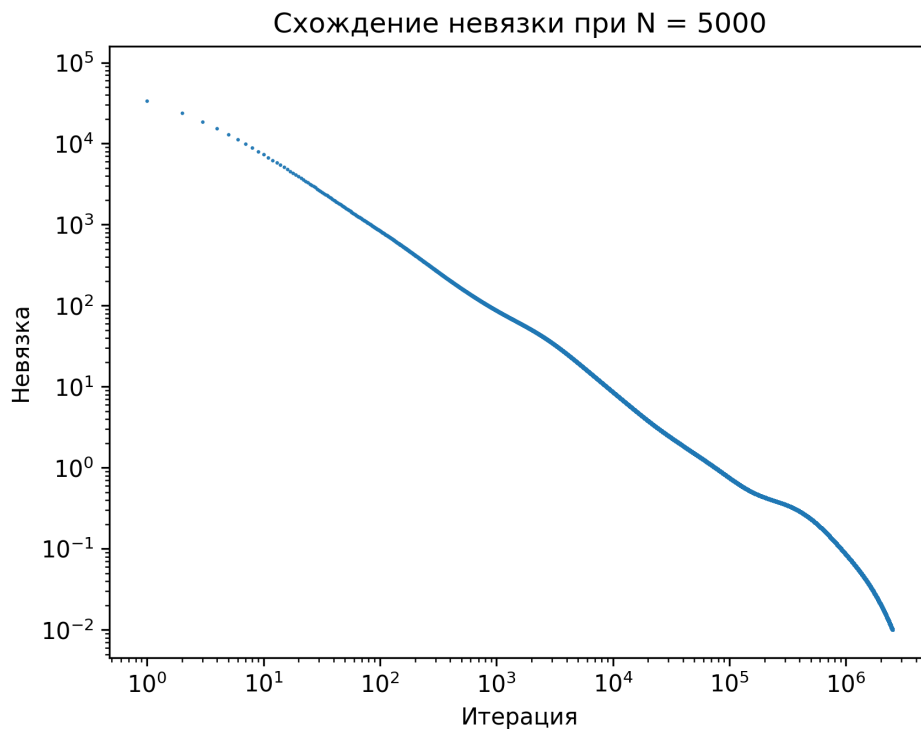


Рис. 1: Зависимость невязки от номера итерации

1.3 Вычислительные затраты от размера сетки

Измерение времени при помощи модуля time.

Итоговая зависимость от размера сетки - Квадратичная.

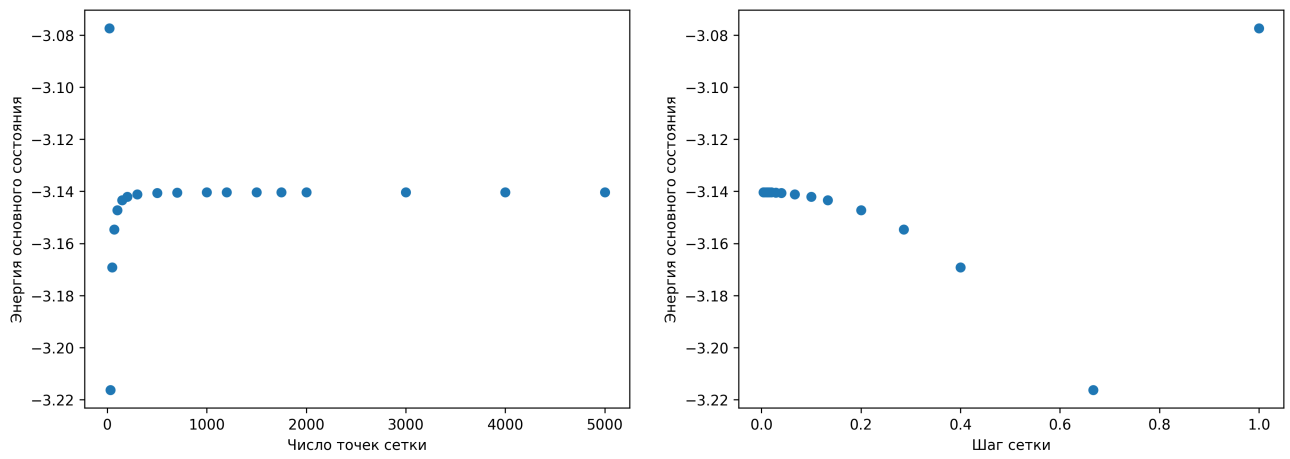


Рис. 2: Зависимость вычисленной энергии от размера сетки

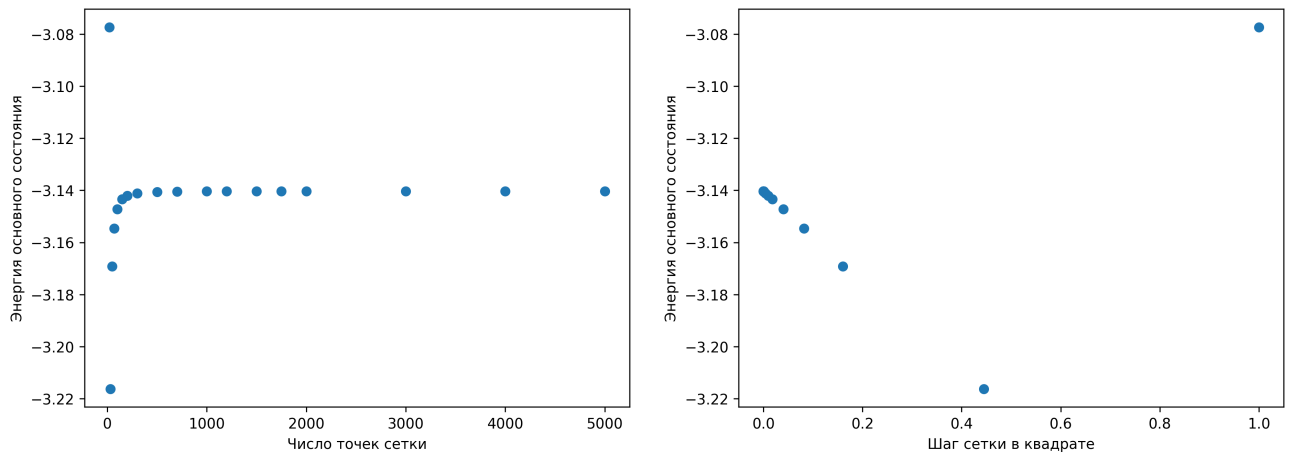


Рис. 3: Зависимость вычисленной энергии от размера сетки (квадрат шага)

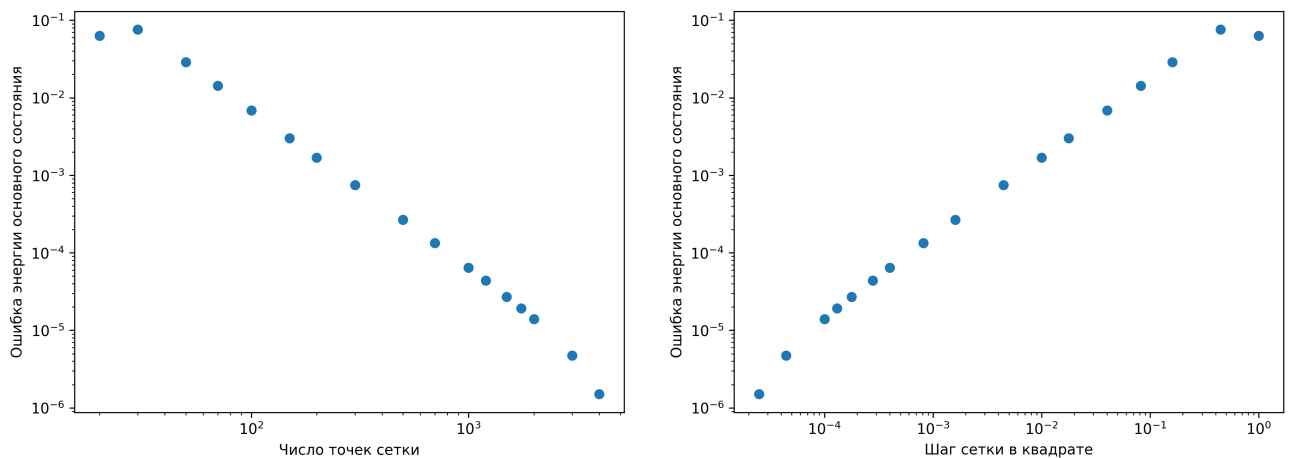


Рис. 4: Зависимость погрешности вычисленной энергии от размера сетки (квадрат шага). За точное значение взято вычисление при $N = 5000$

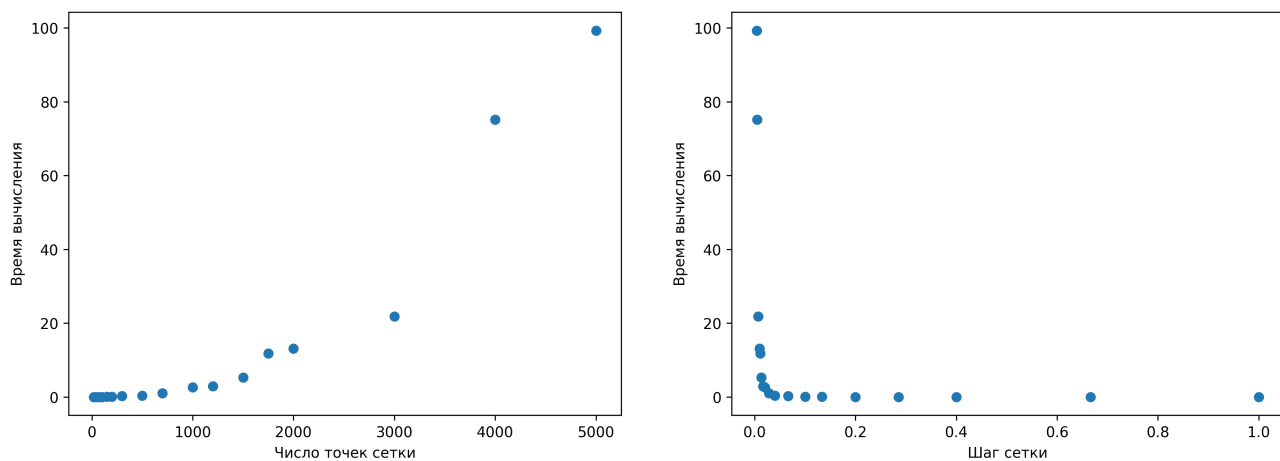


Рис. 5: Временные затраты в зависимости от размера сетки ($O(N^2)$)

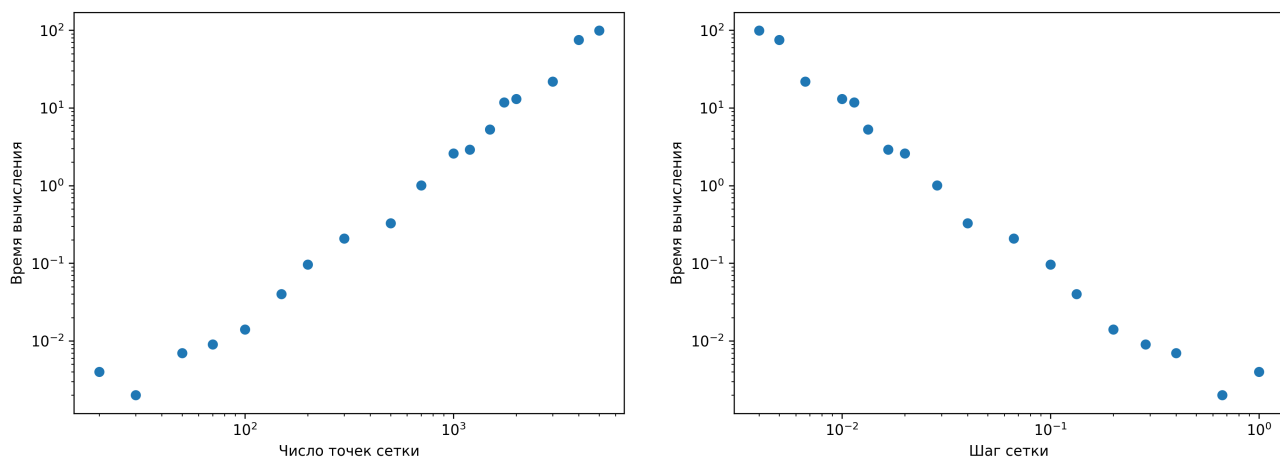


Рис. 6: Временные затраты в зависимости от размера сетки ($O(N^2)$)