

1 Вычисление основного состояния системы при помощи простых итераций с экспоненциальным преобразованием оператора

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.

1.2 Вспомогательное вычисление экспоненты через ряд

Вычислялось численное значение выражения $\exp -7$, через ряд Тейлора для разного количества членов суммы, начиная суммирование с начала и с конца.

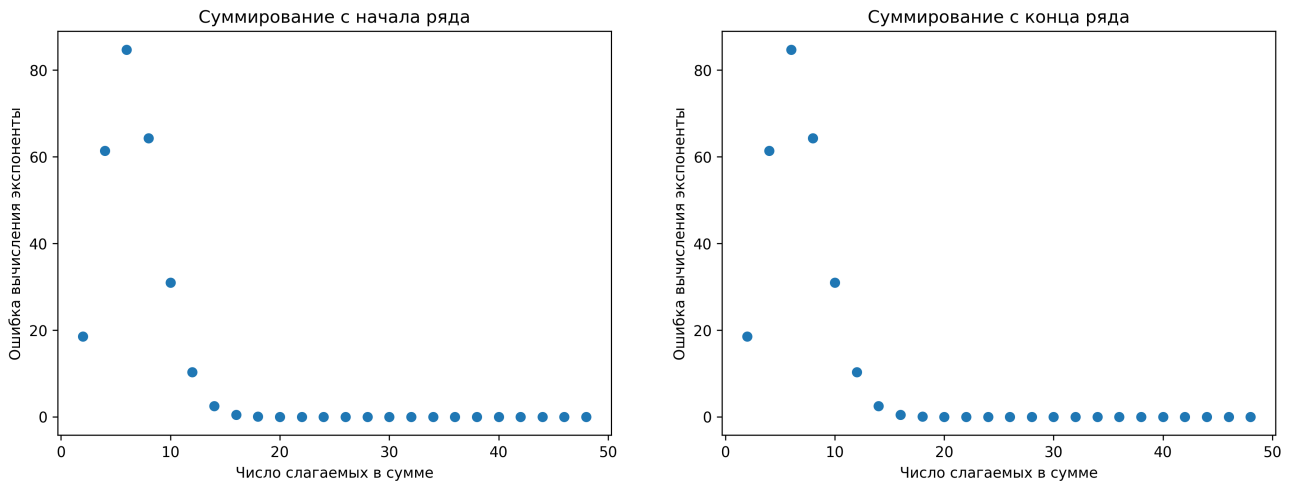


Рис. 1: Зависимость ошибки вычисления от числа членов суммы

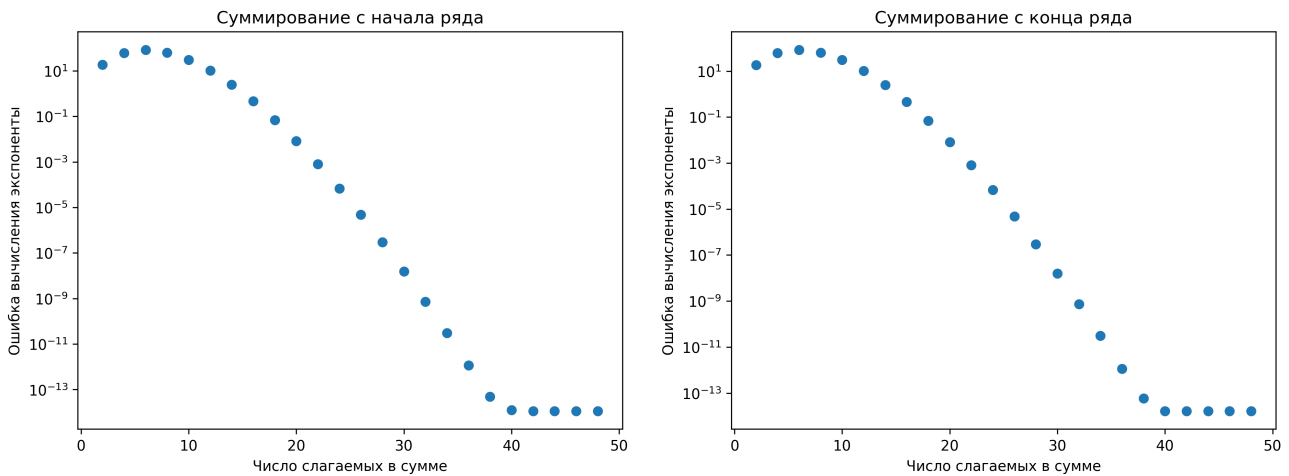


Рис. 2: Зависимость ошибки вычисления от числа членов суммы

1.3 Оценка энергии

Константа связи: 5; Полуширина бокса: 10; Число точек: 1000.

Взятие экспоненты от матрицы оператора позволяет преобразовать спектр таким образом, чтобы наиболее интересное минимальное собственное число стало максимальным по модулю,

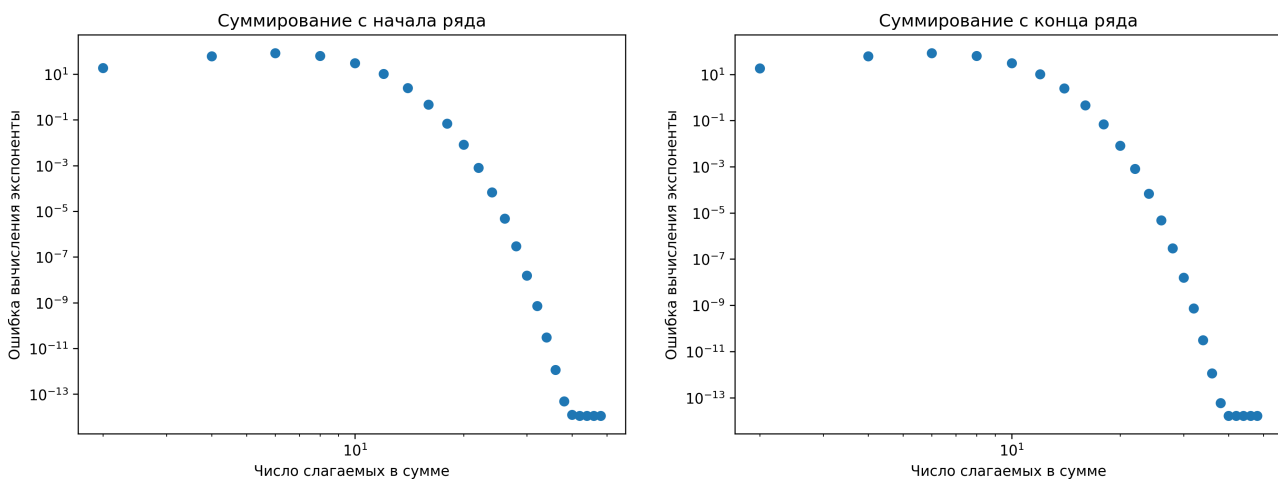


Рис. 3: Зависимость ошибки вычисления от числа членов суммы

причем далеко отстоящее от предыдущего, что позволяет легко его оценивать методом прямых итераций.

Экспонента от матрицы $-\tau H$ вычислялась при помощи следующих двух формул, экспонента суммы:

$$\exp(A + B)\tau = \exp\frac{A}{2}\tau \exp B\tau \exp\frac{A}{2}\tau + O(\tau^3)$$

и матричная экспонента:

$$\exp D\tau = (I + \frac{\tau}{2}D)(I - \frac{\tau}{2}D)^{-1} + O(\tau^3)$$

В нашем случае мы разделяем гамильтониан на операторы кинетической и потенциальной энергии $H = H_0 + V$, а зависимость от τ исследуем. Но τ следует брать малой по модулю.

Полученные графики для метода прямых итераций (Красным пунктиром отмечено вычисленное значение библиотечным методом, погрешность оценивалась как невязка): Рис 4 и Рис 5

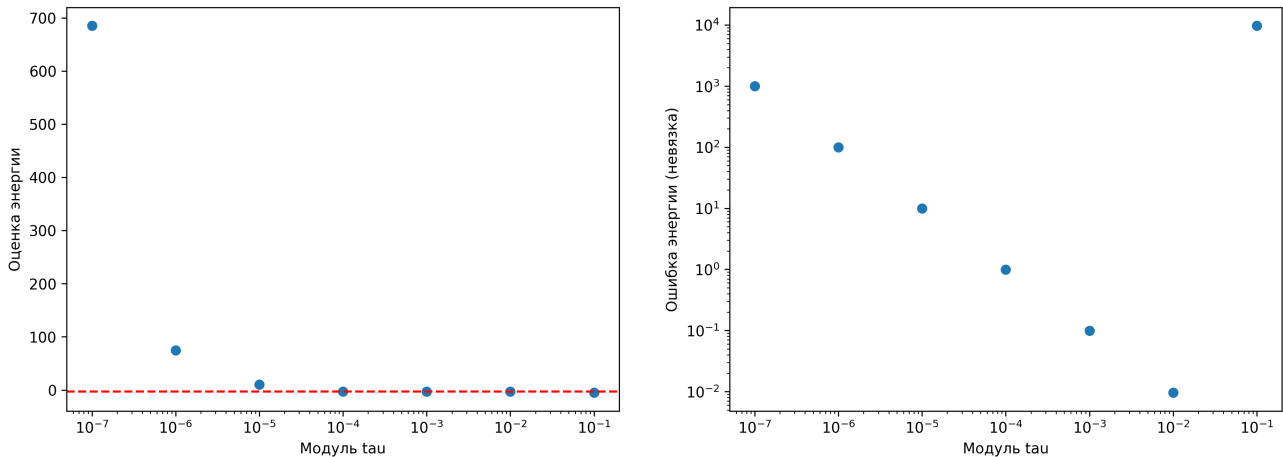


Рис. 4: Зависимость энергии и невязки от множителя тау

Полученные графики для метода `scipy.linalg.eig()`:Рис 6 и Рис 7

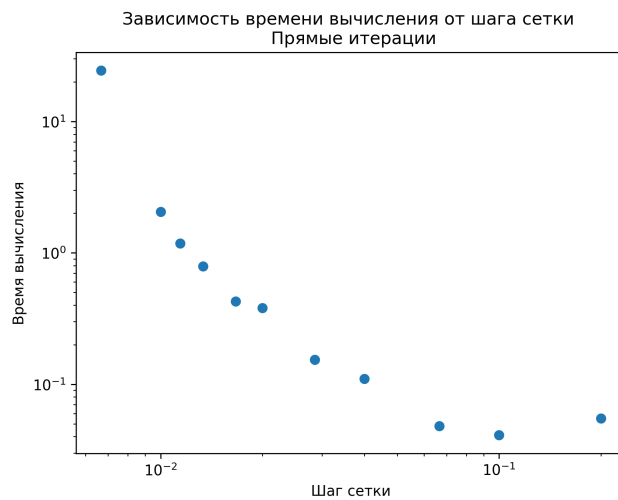
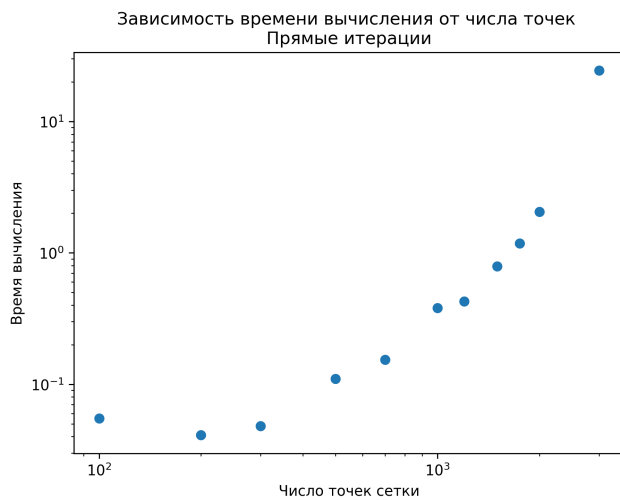


Рис. 5: Зависимость времени вычислений от размера сетки

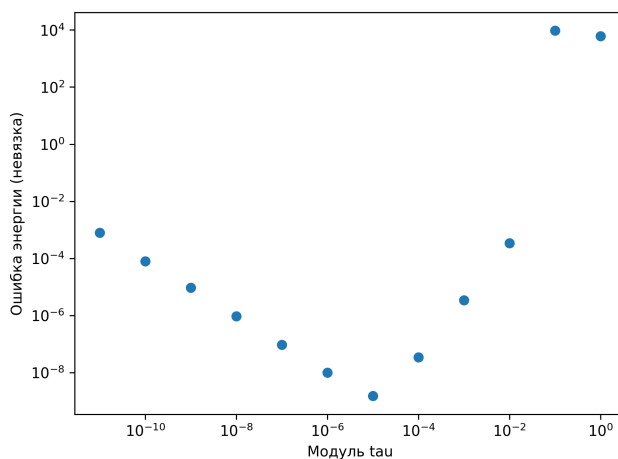
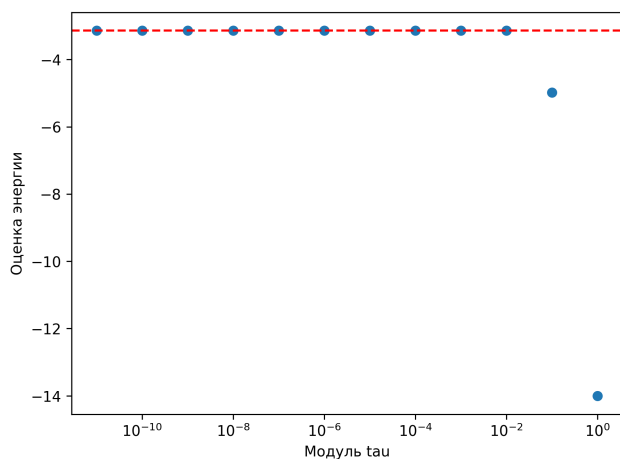


Рис. 6: Зависимость энергии и невязки от множителя тау

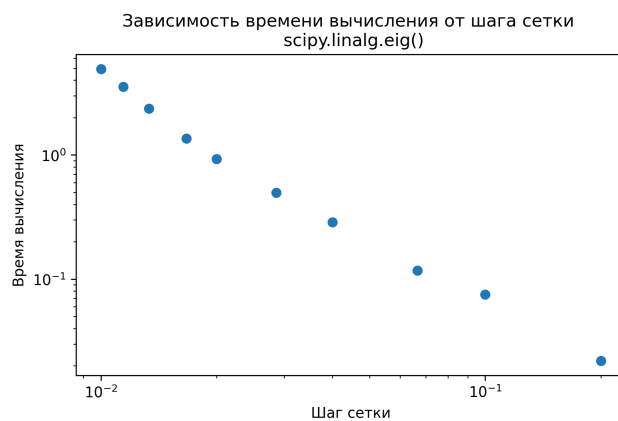
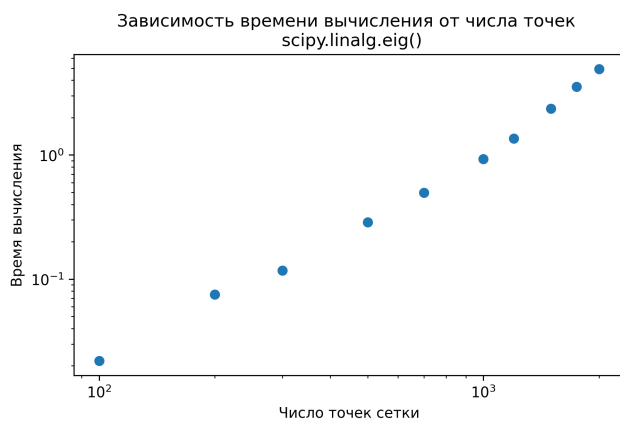


Рис. 7: Зависимость времени вычислений от размера сетки