

2. naloga – stacionarni problem Schrödingerjeve enačbe

Jože Zobec

1 Uvod

V tej nalogi iščemo lastne funkcije prejšnje naloge. Problem bi radi reševali v lastni bazi, ker se problem v tem primeru razcepi na časovni del, ki ga znamo rešiti (rešitev je $\exp(-iE_n)$) in na krajevni del, ki je rešitev amplitudne enačbe.

2 Diskretizacija

Lastne baze $\{|\psi_n\rangle\}$ ne poznamo, vendar lahko problem vseeno še vedno rešujemo v neperturbirani bazi $\{|\phi_n\rangle\}$. Vsako funkcijo $|\psi_n\rangle$ lahko potem zapišemo kot

$$|\psi_n\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} v_{nm} |\phi_m\rangle.$$

V nadaljevanju bom upošteval Einsteinovo konvencijo. Prav tako ne bom posvečal posebne pozornosti razliki med npr. matriko A ter njenimi komponentami A_{ij} , upam da bo razvidno iz konteksta. Matrika v_{mn} mora biti unitarna, saj povezuje dve ortonormalni bazi v istem prostoru. To lahko pokažemo tako:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_m \rangle &= \delta_{mn}, \\ \langle \phi_a | v_{an}^* v_{mb} | \phi_b \rangle &= \delta_{nm}. \end{aligned} \tag{1}$$

Za vse primere, razem $m = n$ je naša vsota enaka nič, zato je zadosti, da obravnavamo le $m = n$.

$$\langle \phi_a | (v^\dagger v)_{ab} | \phi_b \rangle = 1. \tag{2}$$

Matriko $(v^\dagger v)_{ab}$ razvijemo po komponentah na diagonalni in izvendiagonalni del:

$$(v^\dagger v)_{ab} = \alpha \delta_{ab} + \beta \underbrace{\langle \phi_i | v_{ia}^* v_{bj} | \phi_j \rangle}_{=\delta_{ab}},$$

po predpostavki (1) vidimo, da v bistvu nimamo izvendiagonalnega člena, zadošča že diagonalni parameter α , kar pomeni $(v^\dagger v)_{ab} = \alpha \delta_{ab}$. To vstavimo v en. (2) in dobimo

$$\langle \phi_a | \alpha \delta_{ab} | \phi_b \rangle = \alpha \langle \phi_a | \phi_b \rangle = 1,$$

vendar pa je baza $|\phi_n\rangle$ spet ortonormirana, od koder sledi $\alpha = 1$ in

$$(v^\dagger v)_{ab} = \delta_{ab}, \tag{3}$$

torej je matrika v unitarna. Odtod tudi sledi, da si matriko v_{nm} mislimo kot lastni vektor \underline{v}_n matrike H_{ij} , saj je $\{\underline{v}_n\}$ spet ortonormalna baza vektorskega prostora, vendar je to tokrat baza prostora, v katerem „živi“ H_{ij} .

$$\underline{v}_i \cdot \underline{v}_j = v_{ik} v_{kj}^* = (v v^\dagger)_{ij} = \delta_{ij}.$$

Matriko v_{mn} lahko dobimo tako: definirajmo projekcijski operator $\mathbf{P} = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$. To je očitno projekcijski operator, saj $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$:

$$\mathbf{P}^2 = |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\phi_j\rangle\langle\phi_j| = |\phi_i\rangle\langle\phi_j|\delta_{ij} = |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \mathbf{P}$$

Bazo $\{|\psi_n\rangle\}$ lahko zdaj proiciramo na $\{|\phi_n\rangle\}$. Ker proiciramo na isti prostor ne bomo izgubili informacije.

$$\mathbf{P}|\psi_m\rangle = |\phi_n\rangle \underbrace{\langle\phi_n|\psi_m\rangle}_{=v_{mn}} = v_{mn}|\phi_n\rangle.$$

Operator \mathbf{P} je po definiciji Fouriejeva transformacija¹, ki nam pomaga rotirati baze v Hilbertovem prostoru. Ta operator je v bazi $|\phi_n\rangle$ kar identiteta, saj vektorjem $|\phi_n\rangle$ nič ne naredi. Sedaj lahko lažje razumemo, zakaj je v unitarna matrika:

$$\begin{aligned} (v^\dagger v)_{ab} &= \langle\phi_a|\psi_j\rangle^\dagger \langle\phi_b|\psi_j\rangle, \\ &= \langle\psi_j|\phi_a\rangle \langle\phi_b|\psi_j\rangle, \\ &= \langle\phi_b|\underbrace{\psi_j\rangle\langle\psi_j|}_{=1}|\phi_a\rangle \\ &= \langle\phi_a|\phi_b\rangle = \delta_{ab}. \end{aligned}$$

Pokažimo, da je \underline{v}_n res spet lastni vektor matrike H_{ij} . Tokrat bom delal razložek: H_{ij} je komponenta matrike \mathbf{H} . Kot sem povedal prej, bomo predpostavili, da je so $|\psi_n\rangle$ lastna baza za \mathbf{H} . Po komponentah se ga v harmonski bazi zapiše kot

$$H_{ij} = \langle\phi_i|\hat{H}|\phi_j\rangle,$$

v tej bazi ni diagonalna. Za lastni vektor \underline{v}_n matrike \mathbf{H} velja (brez Einsteinovega načela)

$$\mathbf{H}\underline{v}_n = \sum_{i,j} H_{ij} v_{nj} = E_n \sum_i v_{ni} = E_n \underline{v}_n.$$

Preverimo:

¹Vendar ne trigonometrična.

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} H_{ij} v_{nj} &= \sum_i \langle \phi_i | \hat{H} \overbrace{\sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|}^{=1} \psi_n \rangle \\
&= \sum_i \langle \phi_i | \hat{H} | \psi_n \rangle = \sum_i \langle \phi_i | E_n | \psi_n \rangle = E_n \sum_i \langle \phi_i | \psi_n \rangle \\
&= E_n \sum_i v_{ni} = E_n \underline{v}_n.
\end{aligned} \tag{4}$$

Vidimo, da je je vektor \underline{v}_n res lastni vektor matrike \mathbf{H} , oz. vrstice matrike v_{ij} so lastni vektorji.

Kako poiskati matriko v_{ij} ? Matriko H_{ij} znamo zapisati v bazi $\{|x_n\rangle\}$ iz prejšnje naloge. Matrika v_{ij} je pač matrika, ki ta hamiltonian diagonalizira:

$$\langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle = \langle \phi_a | \hat{v}^\dagger \hat{H} \hat{v} | \phi_b \rangle,$$

oz.

$$H_{ij}^{(\psi)} = v_{ia}^* H_{ab}^{(\phi)} v_{bj} = E_i \delta_{ij}.$$

Za hamiltonian lahko vzamemo matriko iz diferenčne sheme iz prejšnje naloge. V prejšnji nalogi smo videli, da tridiagonalna diferenčna shema ni dovolj dobra, zaradi česar se bomo poslužili višjih shem, vendar pa zahtevnost za diagonalizacijo takih matrik raste! K sreči imamo na voljo Lanczosev algoritem, s katerim lahko vsako Hermitsko matriko pretvorimo v tridiagonalno Hermitsko matriko. Algoritmi za polne matrike dimenzije N zahtevajo $\mathcal{O}(N^3)$ operacij, za tridiagonalne matrike pa le $\mathcal{O}(N^2)$ – Lanczosov algoritem se izplača, ima pa isto zahtevnost.

Naša diagonalizacija poteka torej prek dveh korakov. Naš hamiltonian je realna simetrična matrika, torej pojem unitarnosti postane ortogonalnost. Kvadratno formo naše matrike zapišemo kot

$$x^T A x = x^T \underbrace{L^T L}_{=1} A \underbrace{L^T L}_{=1} x,$$

kjer je L matrika Lanczosove transformacije – rotira spet v ortonormalno bazo istega prostora, torej mora biti ortogonalna, kot zgornji izraz tudi predpostavki. Ker je ta matrika ortogonalna pomeni da ohranja spekter matrike A . V tej bazi je matrika A tridiagonalna. Izvesti moramo še diagonalizacijo z matriko V

$$\begin{aligned}
x^T L^T L A L^T L x &= x^T L^T V^T V L A L^T V^T V L x \\
&= \underbrace{(V L x)^T}_{y^T} \overbrace{(V L)^T A (V L)^T}^D \underbrace{(V L x)}_y \\
&= y^T D y,
\end{aligned}$$

kjer je matrika D diagonalna, pretvorniška matrika pa je $v_{ij} = V_{ik}L_{kj}$. Matriki V^T in L^T vsebujeta bazne vektorje po stolpcih, oz. matrika v vsebuje lastne vektorje po vrsticah, kar sem demonstriral malo prej v enačbi (4).

Namesto, da bi diagonalizirali hamiltonian, lahko numerično rešujemo amplitudno enačbo ter dako dobimo lastne pare prek sekantne metode.

Matrika iz prejšnje naloge NI v bazi $\{|\phi_n\rangle\}$, ampak v $\{|x_n\rangle\}$, tako da

$$\langle \phi_n | x_m \rangle = \phi_{n,m} = \phi_n(x_m) = \phi_n(m \cdot h), \quad m \in \mathbb{Z}, \quad h \in \mathbb{R}.$$

Spet lahko definiramo

$$\underline{\phi}_n = \sum_m \phi_n(x_m) = \sum_m \phi_{n,m}.$$

Ta baza je zelo prikladna, saj lahko opazujemo propagacijo kakršnega valovnega paketa. Lahko spet naredimo tudi koherentno stanje in preverimo delovanje hamiltoniana. Prav tako lahko matriko ϕ_{nm} uporabimo za rotacijo iz prostora baze $\{|x_n\rangle\}$ v bazo $\{|\phi_n\rangle\}$. To matriko poznamo, to so kar lastne funkcije harmonskega oscilatorja.

Vendar pa ta baza ni dobra iz dveh razlogov:

1. Hermitovi polinomi so ortogonalni v zveznem prostoru – ortogonalnost se z diskretizacijo močno pokvari za polinome visokih redov. Potem sploh ni važno, če računamo z diferenčno shemo $\mathcal{O}(h^8)$, če je ena izmed rotacijskih matrik slabo ortogonalna. Torej moramo za pridobitev te matrike še enkrat prej izvesti diagonalizacijo za dobro ortogonalnost, kar pa je potrata časa.
2. Če pričnemo v taki bazi ne vemo kako zapisati koherentno stanje. Seveda, lahko ga zapišemo v bazi $\{|x_n\rangle\}$, in ga potem transformiramo v $\{|\phi_n\rangle\}$, vendar je to potrata časa.

Če iz baze x_n rotiramo v ϕ_n , nato odtod v Lanczosovo bazo in na koncu v lastno bazo ψ_n se naša matrika ψ_{ij} , ki povezuje $\{|x_n\rangle\}$ in $\{|\psi_n\rangle\}$ zapiše kot

$$\psi_{ij} = v_{ik}\phi_{kj} = V_{il}L_{lk}\phi_{kj},$$

tako dobimo $\psi_{n,m} = \psi_n(x_m)$ in pa lastne vektorje $\underline{\psi}_n$.

3 Računske metode

Simetrične tridiagonalne matrike lahko diagonaliziramo z metodo MRRR², ki za diagonalizacijo k lastnih vrednosti matrike ranga N potrebuje le $\mathcal{O}(kN)$ operacij, kar pomeni da ima ta hip najmanj slabo časovno zahtevnost. V primeru, ko želimo izračunati vse lastne vrednosti ima zahtevnost $\mathcal{O}(N^2)$ za matrike ranga N . Uporabil sem rutino `DSTEMR` iz knjižnice LAPACK, ki skuša avtomatsko doseči preciznost na osem decimalnih mest. Metoda je hitra in matriko 2000×2000 diagonalizira v slabi sekuni.

Število točnih lastnih vrednosti ni odvisno le od N , pač pa tudi od h , oz. bolje, h v resnici ni neodvisen parameter, pač pa je odvisen od N .

²Multiple Relatively Robust Representations

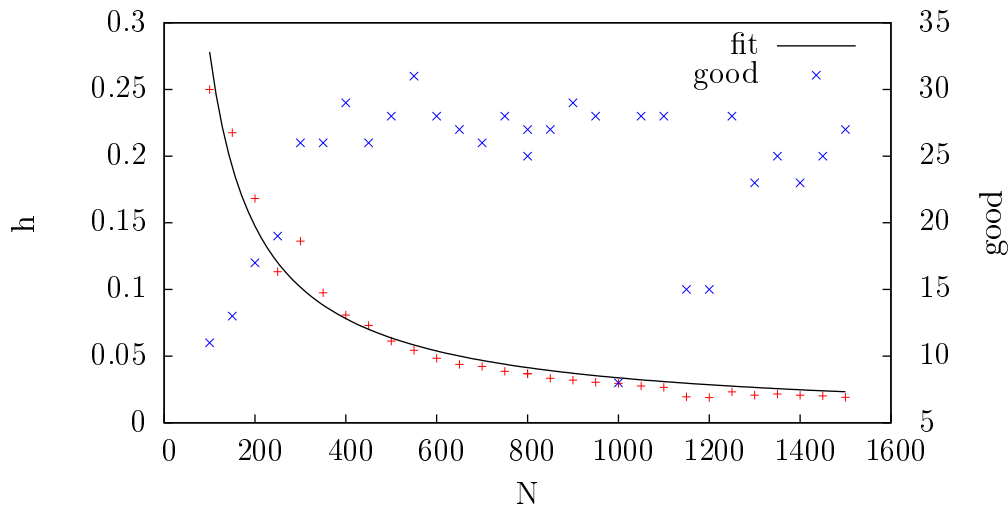
S tem, ko smo naš problem diskretizirali in zaprli v neko škatlo, smo neskončno kvantnih stanj stlačili v nek končen prostor. Če je h prevelik bomo dobili podvajanje lastnih vrednosti (energij), ker naš diskretni prostor ne bo imel dovolj prostostnih stopenj. Izkaže se, da h prav tako ne sme biti premajhen. Potem se naša fina skala ne pozna, zadušijo jo visoke energije, ki pa so izračunane z veliko preciznostjo.

Za vsak N torej obstaja nek optimalni h , ki najbolje opiše naš problem. Dobimo ga prek minimizacije – za nek N mora biti razmerje slabih lastnih vrednosti proti dobrim lastnim vrednostim najmanjše. Sicer lahko to s poskušanjem bolj ali manj uganemo, vendar to traja kar veliko časa. To lahko za nas stori tudi računalnik.

Parameter h ima skrito odvisnost od N zaradi tega, ker z njim omogočamo optimalno ortogonalnost Lanczosove matrike. Funkcijo $h(N)$ sem določil z minimizacijo – za nek N sem vzel tisti h , pri katerem je največ lastnih vrednosti harmonskega oscilatorja pravih. S „fitanjem“ sem določil funkcijo $h(N)$. h ima sicer tudi odvisnost od λ , vendar sem jo zanemaril ter $h(N)$ za anharmonski oscilator aproksimiral z isto funkcijo.

4 Rezultati

Najprej je bilo treba določiti $h(N)$ za kalibracijo.

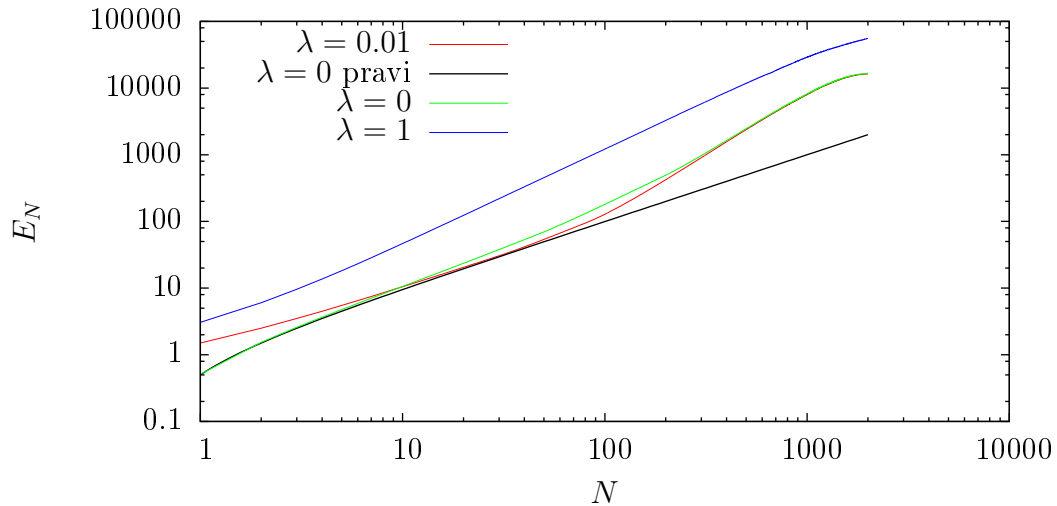


Slika 1: h pada z N , kar je smiselno. Fital sem z $h(N) = a/N^b$. S to funkcijo sem potem kalibriral svoje nadaljne podvige. Desna ordinatna os prikazuje število lastnih Energij, ki je točnih na 3 decimalna mesta.

Za vsak N sem z minimizacijo določil optimalen h . Uporabil sem funkcijo `gsl_min_fminimizer_brent` iz knjižnice `GSL`, ki je Brentov minimizacijski algoritem. Z regresijskimi minimizatorji iz orodja `gnuplot` sem določil $h(N)$:

$$h \approx 18.90610N^{-0.916111},$$

Pokažimo energijski spekter:



Slika 2: Na tej sliki vidimo spekter prvih nekaj lastnih energij in primerjavo s točnimi vrednostmi harmonskega oscilatorja.

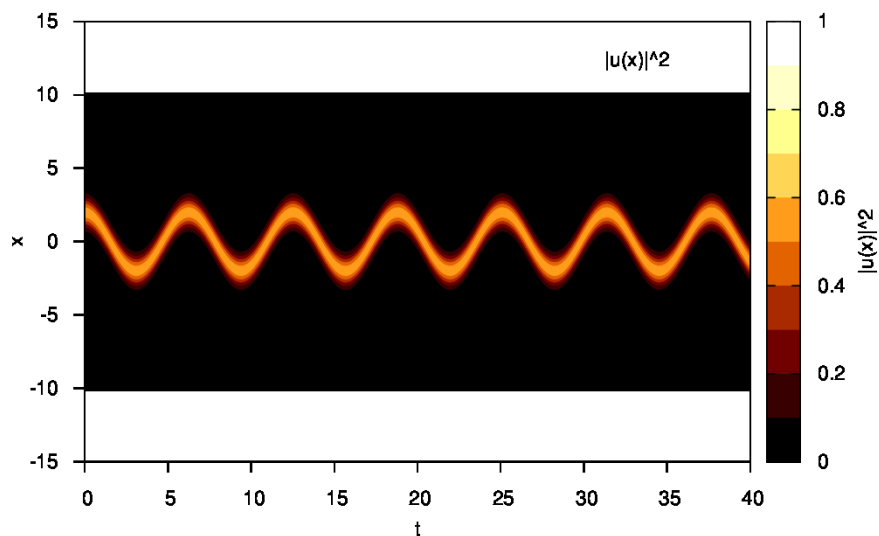
Prvih sto se relativno dobro ujema, potem pa se pozna razcep. Z višanjem λ se nam spremeni cel spekter. Razklop se pozna že pri prvi lastni vrednosti.

4.1 Časovni razvoj

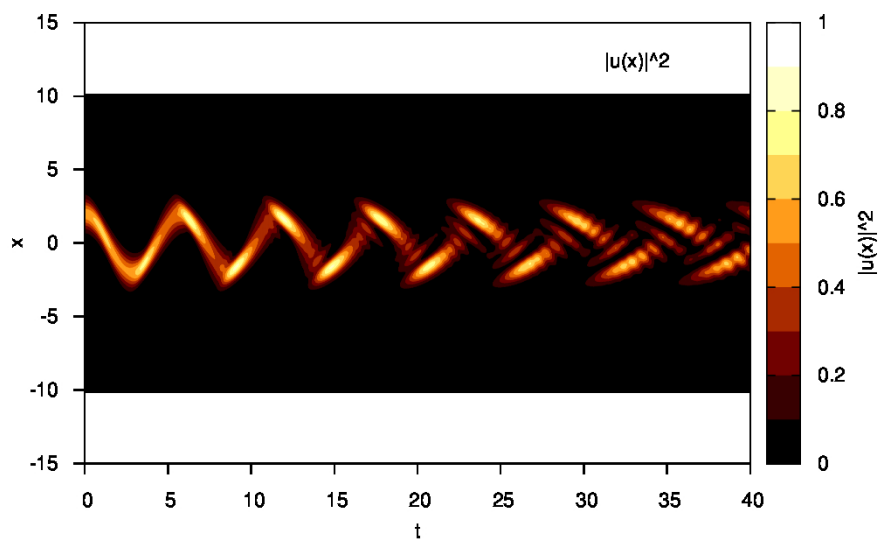
Časovni razvoj je natančnejši, kot je bil prej. Tu sem delal s sedem-diagonalno matriko, ker je devet-diagonalna dajala preveč šuma in je bila animacija videti kot naravnost iz osciloskopa.

Čeprav je metoda natančnejša, ima žal višjo računsko zahtevnost. Vseeno ni nič zato. Matriko lahko zelo hitro diagonaliziramo in vektor samo množimo z matriko.

Graf 4 pride še posebej lep. Metoda iz prejšnje naloge je v prisotnosti anharmonskega člena zahtevala ogromno natančnost za kratke čase, dala pa ni nič kaj posebnega. Tule temu ni tako in metoda ostane stabilna.



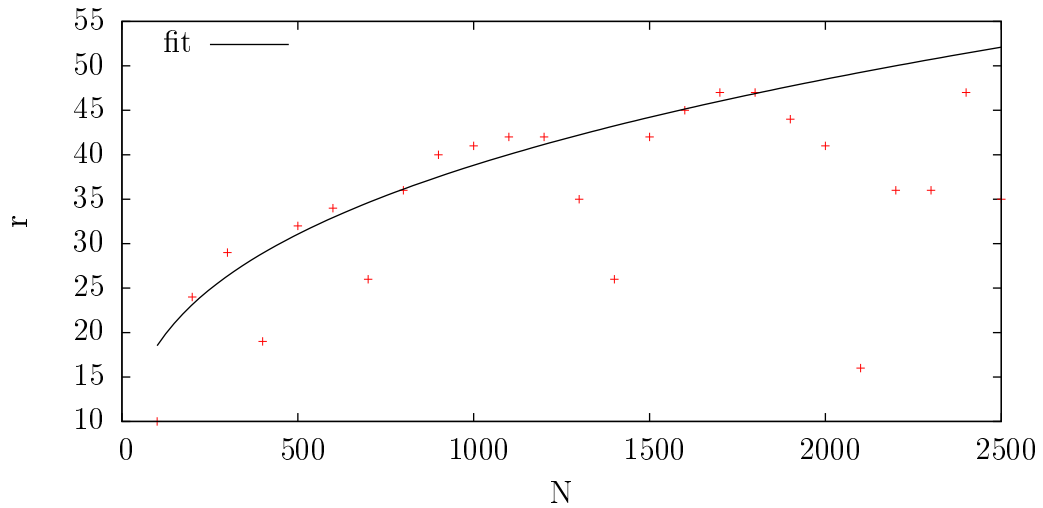
Slika 3: Časovni razvoj, ki je natančnejši od tistega prej. To je primer za $\lambda = 0$. $N = 2000$. K poročilu prikladam še animacijo – datoteka `nal-N2000-L0-a2.avi`.



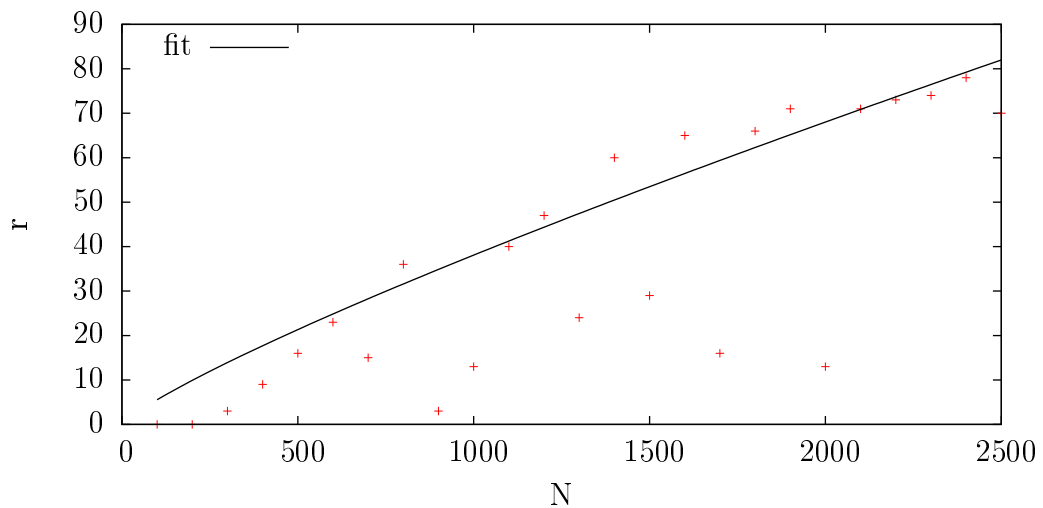
Slika 4: Časovni razvoj, ki je natančnejši od tistega prej. To je primer za $\lambda = 0.01$. $N = 2000$. K poročilu prikladam še animacijo – datoteka `nal-N2000-L1-a.avi`, ki pove več kot slika.

4.2 Konvergenca lastnih vrednosti

Zadnja naloga pravi, da naj spremljamo še konvergenco lastnih vrednosti v odvisnosti od dimenzije Hamiltoniana. Tu pride $h(N)$ še posebej prav, saj $h(N)$ relativno dobro aproksimira optimalne h -je.



Slika 5: Graf prikazuje število lastnih energij, ki se med dvema zaporednima korakoma niso premaknile za več kot $\epsilon = 0.001$. To je primer za harmonski oscilator. V fit nisem vključil točk, ki ležijo zunaj – so namreč posledica nepopolnosti algoritma ter kalibracijske napake.



Slika 6: Isto, kot sl. 5, le da je to primer za anharmonski oscilator, $\lambda = 0.01$. Tako kot prej sem zanemaril ti „outlierje“.

Sliki 5 in 6 sta taki, kot bi nekako pričakovali: strm začetek, nato pa začetna evforija poneha in graf se nadaljuje bolj položno.