

Лабораторная работа 5 по курсу «Нелинейная динамика и её приложения».

Отчёт.

Владислав Соврасов
381503м4

1 Оценка качества нахождения Флоке-базиса для уравнения Шрёдингера с периодическим по времени гамильтонианом

Рассматривается уравнение Шрёдингера с периодической правой частью:

$$i\dot{|\psi\rangle} = H(t) |\psi\rangle, H(t) = H_0 + F \sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) H_1, \quad (1)$$

в котором H_0, H_1 — GUE матрицы.

Для нахождения Флоке-базиса в момент времени T используется матрица-пропагатор $U(T)$. Как было выяснено, её собственные векторы являются Флоке-базисом в моменты kT , а собственные значения определяют квазиэнергии системы.

При нахождении каждого из столбцов матрицы $U(T)$ применялось численное интегрирование методом Рунге-Кутты из стандартных базисных ортов евклидова пространства.

Если взять в качестве начального условия один из векторов Флоке-базиса и подействовать на него пропагатором, то $|\psi(T)\rangle = U(T) |\varphi(0)\rangle = \mu |\varphi(0)\rangle$. Сравнивая это с теоремой Флоке ($|\psi(T)\rangle = e^{i\Xi T} |\varphi(T)\rangle$), получим что, $\mu = e^{i\Xi T}$; откуда следует, что в качестве оценки ошибки нахождения собственных чисел $U(T)$ можно рассматривать величину $\varepsilon_\mu = \max_{k=\overline{1,N}} ||\mu_k| - 1|$.

На рис. 1 показан график зависимости ε_μ от шага интегрирования для системы размерности 100 при $F = 0.1, T = 1$. Как видно из графика, ошибка при уменьшении шага убывает с четвёртым порядком.

В качестве оценки ошибки нахождения собственных векторов использовалась величина $\varepsilon_\varphi = \max_{k=\overline{1,N}} \|U_{\frac{h}{2}}(T) |\varphi_{k,h}\rangle - \mu_{k,h} |\varphi_{k,h}\rangle\|$, где h — шаг интегрирования, с которым получены пропагатор и соответствующие векторы и собственные числа. Фактически, эта запись эквивалентна численному интегрированию системы с половинным шагом из начальных условий $|\varphi_{k,h}\rangle$ и последующему сравнению с результатом пропагации $U_h(T) |\varphi_{k,h}\rangle = \mu_{k,h} |\varphi_{k,h}\rangle$, полученным с одинарным шагом. На рис. 2 показана зависимость ε_φ от шага интегрирования для той же системы размерности 100, что рассматривалась ранее. Величина ε_φ , как и ε_μ , при уменьшении шага убывает с четвёртым порядком.

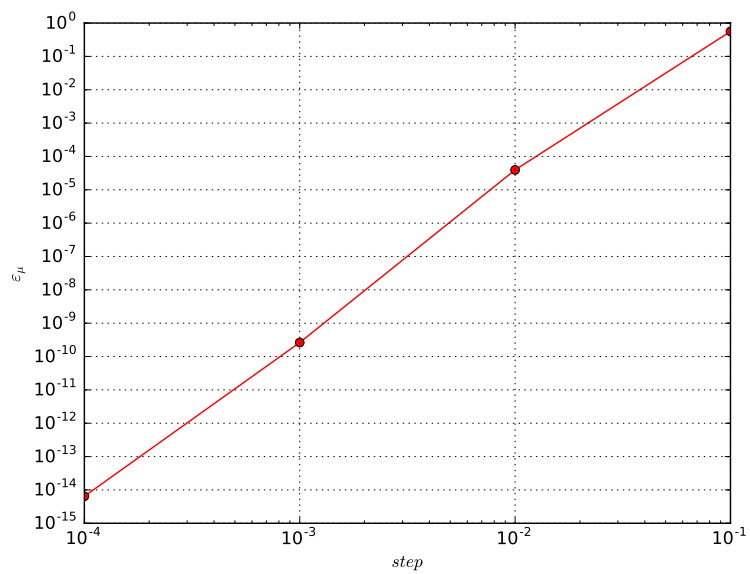


Рис. 1: Отклонение модуля собственных чисел матрицы-пропaгатора от 1

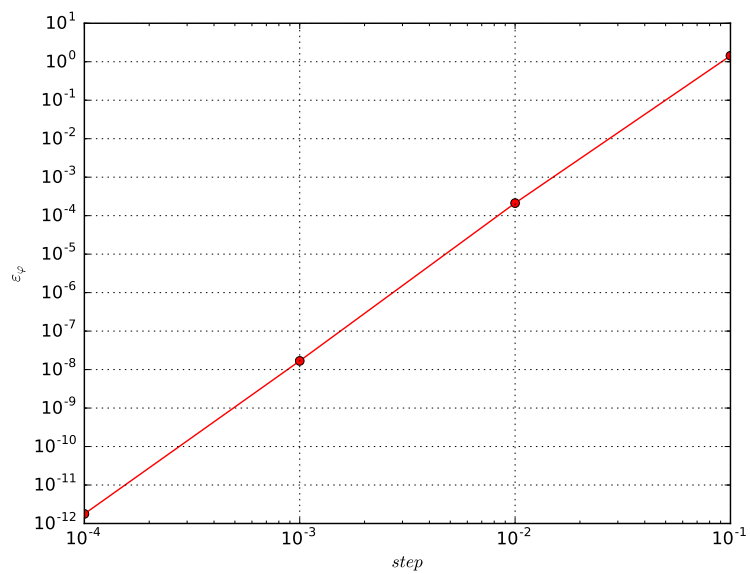


Рис. 2: Оценка ошибки нахождения собственных векторов матрицы-пропaгатора

2 Количественные характеристики решений уравнения Шрёдингера с периодическим по времени гамильтонианом

Для периодического по времени гамильтониана из (1) можно ввести аналог энергии стационарной системы: $E_\alpha(t) = \langle \varphi_\alpha(t) | H(t) | \varphi_\alpha(t) \rangle$, где α — индекс Флоке-вектора. Будем рассматривать величину $E_\alpha(0)$, тогда $\varphi_\alpha(0)$ является собственным вектором пропагатора $U(T)$.

Для изучения распределения величины $E_\alpha(0)$ (квазиэнергии нестационарной системы) при значениях $F \in \{0.01, 0.1, 1\}$ были сгенерированы 120 реализаций пар матриц (H_0, H_1) из (1) размерности 100. Перед построением нормированных гистограмм, как и в случае стационарной системы, квазиэнергии были умножены на коэффициент $\frac{1}{\sqrt{N}}$, чтобы их спектр не зависел от размерности системы.

На рис. 3, 4, 5 можно увидеть, что с ростом F спектр начинает сосредотачиваться в окрестности 0 (то есть при нарастании отличия гамильтониана от стационарного): при $F = 0.01$ спектр квазиэнергий почти не отличается от спектра энергий стационарной системы, а при $F = 1$ имеется явный пик распределения вблизи 0.

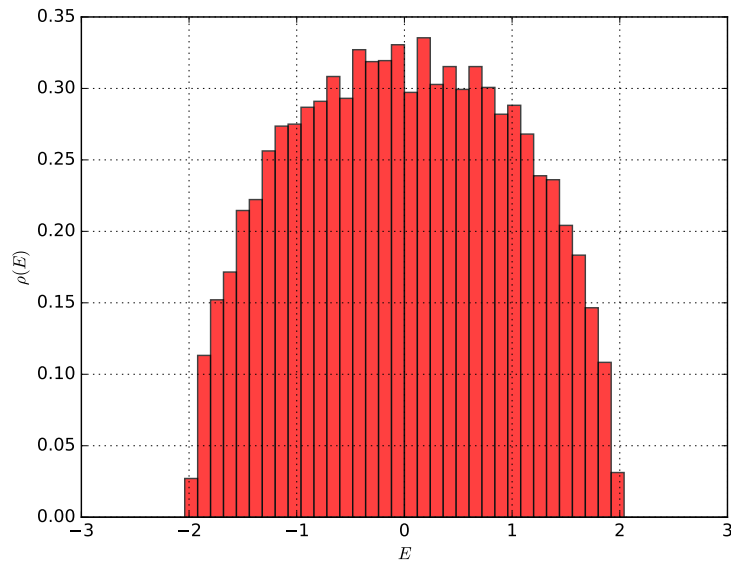


Рис. 3: Распределение энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 0.01$

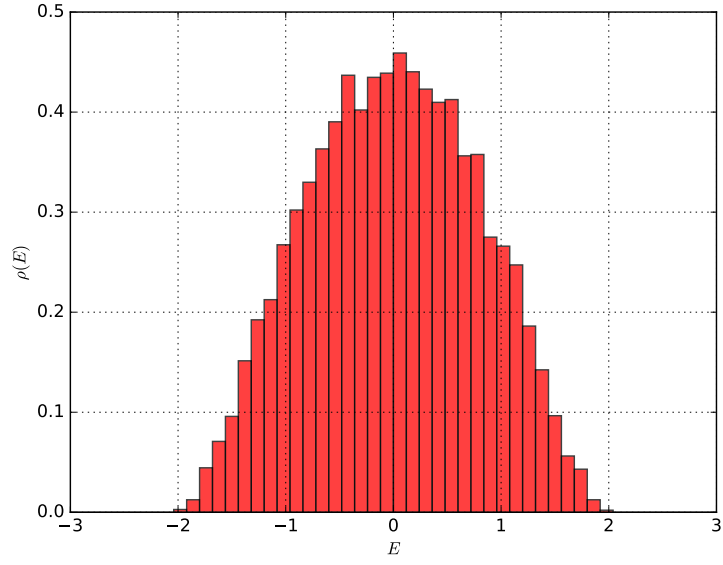


Рис. 4: Распределение энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 0.1$

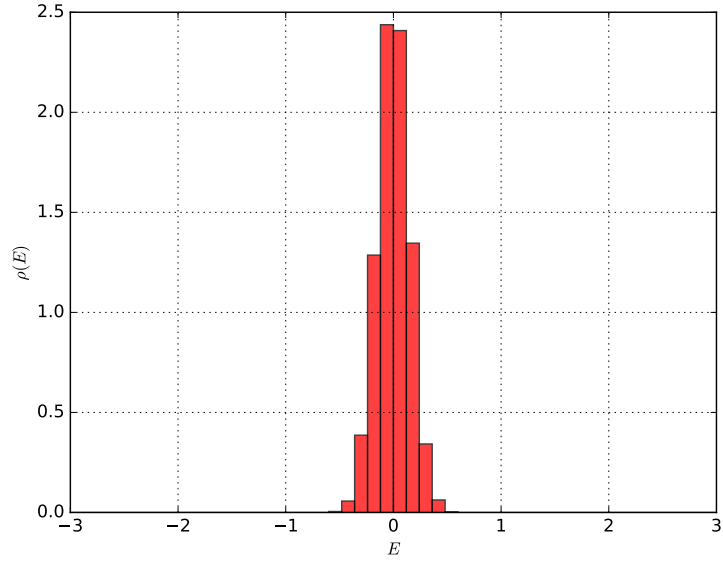


Рис. 5: Распределение энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 1$

Как и в стационарном случае, наряду с самими квазиэнергиями рассматривается и их расщепление, определяемое по формуле: $s_\alpha = E(0)_{\alpha+1} - E(0)_\alpha, i = \overline{1, N-1}$. По полученным ранее реализациям были построены гистограммы нормированных расщеплений: $\bar{s}_\alpha = \frac{s_\alpha}{\langle s_\alpha \rangle}$,

где $\langle s_\alpha \rangle$ — средняя величина расщепления по всем реализациям. Из рис. 6, 7, 8 видно, что для гамильтониана, близкого к стационарному, распределения имеет удалённый от нуля пик, но при увеличении F этот пик смещается влево, что говорит о росте плотности спектра квазиэнергий.

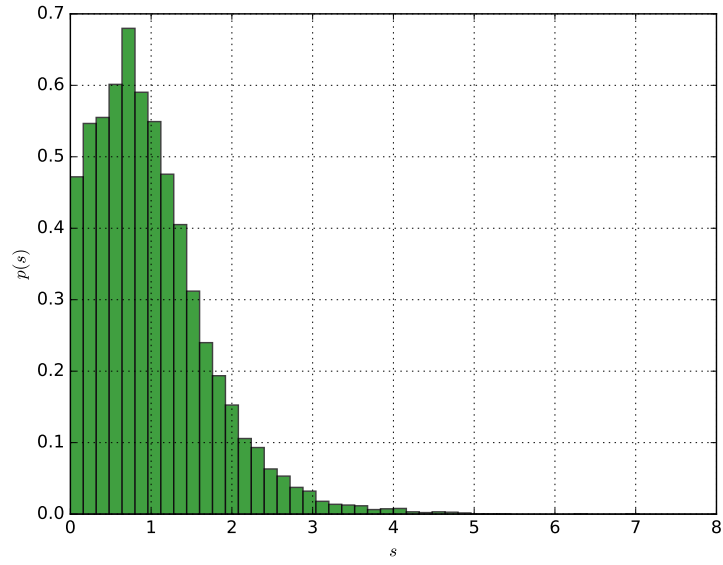


Рис. 6: Распределение расщепления энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 0.01$

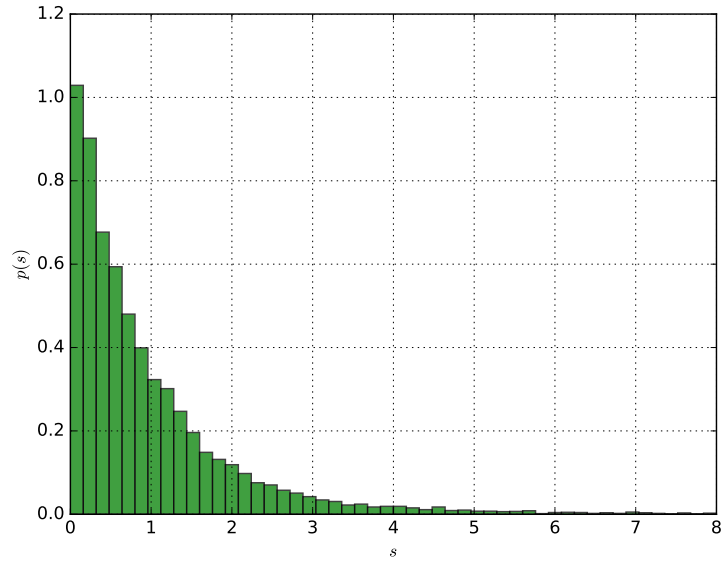


Рис. 7: Распределение расщепления энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 0.1$

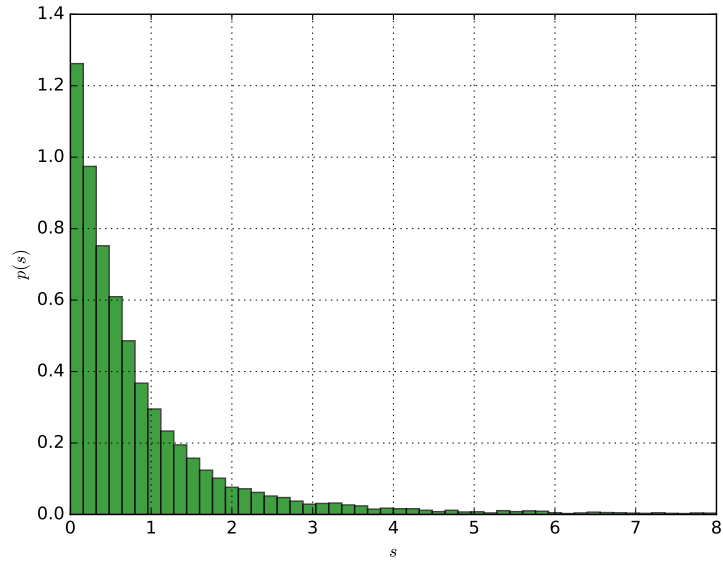


Рис. 8: Распределение расщепления энергий Флоке-векторов гамильтониана при $F = 1$

3 Исходный код

```

1  #!/usr/bin/env python
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3
4  import numpy as np
5  import matplotlib.pyplot as plt
6  from lab4 import getGUE
7  from lab3 import rungeKuttaMethod
8
9  def getPropagator(f, T, size, step):
10     U = [[]]*size
11
12     for i in range(size):
13         psi0 = np.zeros((size, 1))
14         psi0[i] = 1.
15         uCol = rungeKuttaMethod(f, 0., T, psi0, step)[1][-1]
16         U[i] = uCol
17
18     return np.matrix(np.array(U).reshape(size, size)).getT()
19
20 def plotError(steps, errValues, yLabel, outputName):
21     colors = ['r', 'g', 'b', 'c']
22
23     plt.xlabel('$step$')
24     plt.ylabel(yLabel)
25     plt.yscale('log')
26     plt.xscale('log')
27
28     plt.plot(steps, errValues, colors[0] + '-o')
29
30     plt.grid()
31     plt.savefig(outputName, format = 'pdf')
32     plt.clf()
33
34 def plotHist(data, xLabel, yLabel, fileName, color, valRange):
35     colors = ['blue', 'green', 'red']
36     plt.xlabel(xLabel)
37     plt.ylabel(yLabel)
38
39     plt.hist(data, 50, normed = True,
40             facecolor = color, alpha = 0.75, range = valRange)
41
42     plt.grid()
43     plt.savefig(fileName, format = 'pdf')
44     plt.clf()
45
46 def main():
47
48     np.random.seed(10)
49

```

```

50     size = 100
51     H0 = getGUE(size)
52     H1 = getGUE(size)
53     f = lambda x, t: -(H0 + 0.1*np.sin(2.*np.pi*t)*H1)*x * 1j
54
55     epsPhi = []
56     epsMu = []
57
58     steps = np.logspace(-4, -1, 4, endpoint=True)
59     for step in steps:
60         U = getPropagator(f, 1., size, step)
61         U2 = getPropagator(f, 1., size, step / 2.)
62
63         values, vectors = np.linalg.eig(U)
64
65         epsPhi.append(0.)
66         for i in range(len(values)):
67             phi2 = U2*vectors[:,i]
68             epsPhi[-1] = max(epsPhi[-1], \
69                 np.linalg.norm(phi2 - np.matrix(vectors[:,i])*values[i]))
70
71         epsMu.append( \
72             np.linalg.norm(np.abs(values) - np.ones(len(values)), np.inf))
73     plotError(steps, epsMu, \
74         r'$\varepsilon_{\mu}$', '../pictures/lab5_eigvals_error.pdf')
75     plotError(steps, epsPhi, \
76         r'$\varepsilon_{\varphi}$', '../pictures/lab5_eigvecs_error.pdf')
77
78     size = 100
79     nImpls = 120
80     fValues = [0.01, 0.1, 1]
81
82     for F in fValues:
83         allEnergies = []
84         allSplits = []
85         for i in range(nImpls):
86             H0 = getGUE(size)
87             H1 = getGUE(size)
88             f = lambda x, t: -(H0 + H1*F*np.sin(2.*np.pi*t))*x * 1j
89
90             U = getPropagator(f, 1., size, 0.005)
91             _, vectors = np.linalg.eig(U)
92             energysSet = []
93             for j in range(len(vectors)):
94                 vector = np.matrix(vectors[:,j])
95                 energysSet.append(\
96                     float(np.real(np.conj(vector.getT())*H0*vector)))
97
98             energysSet = sorted(energysSet)

```



```

99         allEnergies.append(energysSet)
100         allSplits.append( \
101             [energysSet[k+1] - energysSet[k] \
102              for k in range(len(energysSet) - 1)])
103
104         print('f={},_#impl:{}_'.format(F, i))
105
106     allEnergies = np.array(allEnergies).reshape(nImpls*len(allEnergies[0]))
107     allSplits = np.array(allSplits).reshape(nImpls*len(allSplits[0]))
108     allSplits /= np.mean(allSplits)
109     allEnergies /= np.sqrt(size)
110
111     energySetsToPlot.append(allEnergies)
112     spacingSetsToPlot.append(allSplits)
113
114     plotHist(allEnergies, r'$E$', r'$\rho(E)$',
115             '../pictures/lab5_eigens_hist' + 'F=' +
116             str(F) + '.pdf', 'red', (-3, 3))
117
118     plotHist(allSplits, r'$s$', r'$p(s)$',
119             '../pictures/lab5_eigens_spacings_hist' + 'F=' + str(F) + '.pdf', \
120             'green', (0, 8))
121
122 if __name__ == '__main__':
123     main()

```