
1.2 Stacionaren problem in spektralne metode

MIHA SRDINŠEK

I. UVOD

Pri tej nalogi sem se predvsem ukvarjal s pridobivanjem spektra kvantnega Hamiltonskega sistema, ki mu dodamo motnjo. Program sem spisal v programskem jeziku *Python*. Za to sem uporabil dve metodi, ki smo jih spoznali pri predavanjih. To sta:

II. METODI

- Pri prvi metodi, sem si mislil, da so tudi stanja novega sistema, ki je močnejše sklopljen, v nekem približku zgolj linearna kombinacija lastnih stanj osnovnega hamiltonjana. Tako sem potem, kot sm argumentirali tudi na predavanjih, zgolj Zapisal hamiltonjan

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \quad (1)$$

v bazi lastnih stanj hamiltonjana \hat{H}_0 , ki pa je eksaktno rešljiv in torej v tej bazi diagonalne oblike. Skonstruiral sem torej matriko

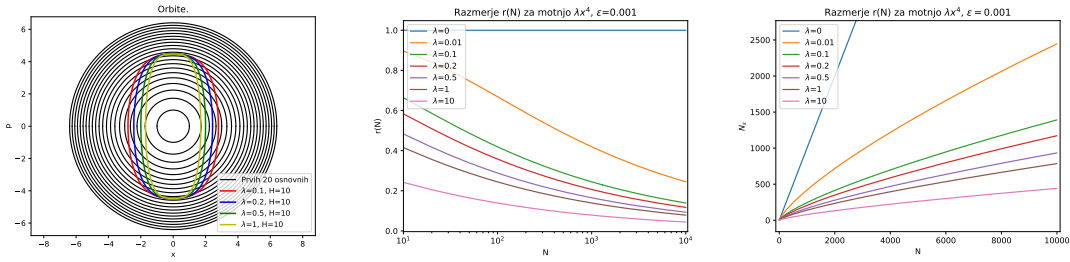
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 + \lambda \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \lambda \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle & \dots & \lambda \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_N \rangle \\ \lambda \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & E_2^0 + \lambda \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle & \dots & \lambda \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda \langle \psi_N | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \lambda \langle \psi_N | \hat{H}' | \psi_2 \rangle & \dots & E_N^0 + \lambda \langle \psi_N | \hat{H}' | \psi_N \rangle \end{pmatrix}, \quad (2)$$

kjer so $|\psi_n\rangle$ lastna stanja \hat{H}_0 . V resnici je taka matrika neskončna, a v približku, ki ga bom kasneje ocenil z metodo, ki smo jo spoznali pri predavanjih, tudi s končno lahko dobimo uporabne rezultate. Ideja je, da sedaj v tej bazi to matriko diagonaliziramo in v primeru, da prispevki višjih stanj (stanj z višjim N) na stanja z nižjo energijo ne vplivajo močno, potem za določen N , dobimo dober približek za energije novega sistema do nekega n . Dodatni razmisliki o implementaciji metode so v kodi.

- Druga metoda je Lanczosev algoritme. Ki ga še pišem, zato ga bom opisal kasneje.

III. NATANČNOST

Najprej bi rad ocenil natančnost metode, pri kateri operiram s končnim številom stanj. To namreč pomeni, klasično, da lahko rezultate najdem zgolj na omejenem delu faznega prostora. Kot smo to že razmislili na predavanjih - samo če se trajektorija novega hamiltonjana nahaja znotraj območja, ki ga zamejuje orbita integrabilnega hamiltonjana, lahko diagonaliziramo novi hamiltonjan v bazi lastnih stanj integrabilnega hamiltonjana, katerih trajektorije so tudi znotraj tega območja. To sem napisal precej grdo, a ravno zaradi tega je profesor v skripti teorijo razložil lepše. Se mi pa zdi, da je tak moj povzetek meni bolj pomagal. Pogledjmo si kako izgleda fazni prostor za naš primer na sliki1.



Slika 1: Slika levo prikazuje kako izgledajo orbite H_0 pri različnih n in kako orbite H , pri različnih λ , ampak pri isti energiji. Slika na sredi nam v logaritemski skali prikazuje razmerje med površino v faznem prostoru na kateri se nahaja moteni sistem in površino na kateri se nahaja sistem pri $\lambda = 0$. Slika desno nam prikazuje število stanj, ki jih bomo pri izbranem λ lahko natančno opisali z metodo, ki operira s prvimi N najnižjimi lastnimi stanji osnovnega Hamiltonjana.

Tako hitro postane jasno o čem govorim. Če želimo opisati stanje z neko energijo, moramo pri tem upoštevati vsa stanja integrabilnega dela H , ki imajo nižjo ali enako energijo. Iz predavanj pa vemo, da lahko to bolj natančno zapišemo kot

$$N_\epsilon \approx \frac{\mu(E_N^\lambda)}{2\pi} \quad \text{in} \quad r(N) = \frac{N_\epsilon}{N} = \frac{\mu(E_N^\lambda)}{\mu(E_N^0)}, \quad (3)$$

kjer N_ϵ predstavlja število stanj pertrubiranega hamiltonjana, ki se nahajajo pri energijah pod neko energijo E_N . Pri tem μ predstavlja mero na tem prostoru, zame je bila to navadna površina, torej površino, ki jo zamejuje trajektorija z energijo E_N pertrubiranega hamiltonjana oziroma z energijo E_N^0 integrabilnega dela. Površino sem poračunal z integralom

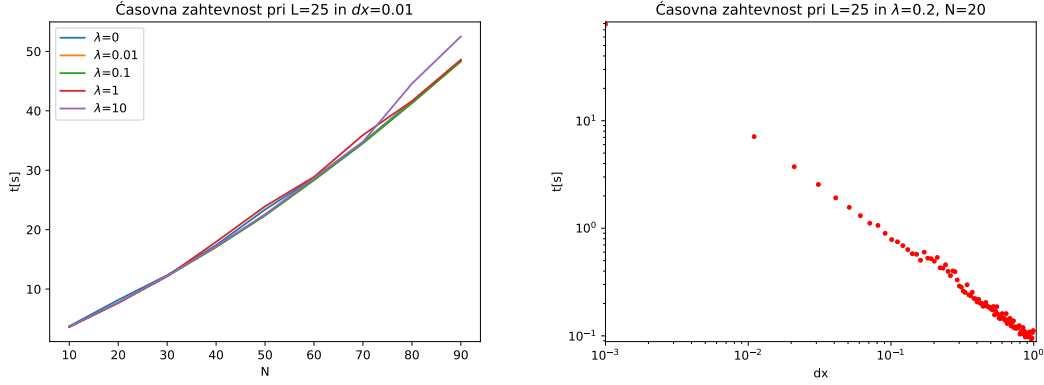
$$\mu(E) = 2 \int_{-max}^{max} \sqrt{2(E - 0.5x^2 - \lambda x^4)} dx, \quad (4)$$

pri čemer sem robove integrala določil sproti numerično. Ta metoda se je obnesla še posebej dobro, ker ima p maksimum pri $x = 0$, tako da sem moral samo zahtevati, da je $E = E_N = E_N^0 - \epsilon$, saj imata prosti in moteni hamiltonjan isto najvišjo energijo. Seveda ploščine za integrabilni del nisem računal, saj ga opiše krožnica in iz geometrije vidimo, da je površina $\mu(E_N^0) = 2\pi E_N^0$.

Kar nam preostane je torej pogledati, kaj nam to pove o našem primeru. Rezultate tega lahko vidimo na slikah1 na sredi in na desni. Za lepo število vrednosti bi torej potrebovali precej velik N . Kar pa je s prvo metodo že težko dosegljivo.

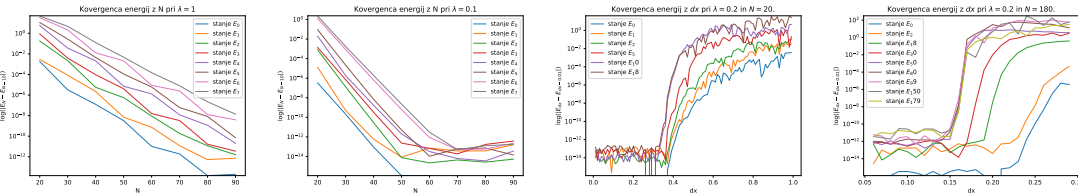
IV. ANALIZA METOD

Čisto tako za lastne potrebe, da sem lažje ocenil časovno zahtevnost metode, sem si izrisal par digramov za prvo metodo, ki jih vidimo na slikah. TO sem izrisal zato, da vem koliko časa lahko pričakujem da bo izračun trajal, če povečam katerega od parametrov.



Slika 2: Na obeh slikah se preverja časovno učinkovitost celotnega prvega algoritma, vključno z diagonalizacijo. Slika levo raziskuje, če je časovna zahtevnost slučajno pogojena z izbiro λ in kako je nasploh časovna odvisnost pogojena z velikostjo baze. Na sliki levo pa opazujemo kako se časovna zahtevnost metode spremeni z natančnostjo integriranja.

Kar bi bilo še bolj zanimivo, je ugotoviti kako sprememba parametrov vpliva na spekter. To pa vidimo na slikah 3 spodaj. Sliki levo in an sredi sta precej predvidljivi, vse kar je na njih zanimivega je naklon in oblika konvergence. Zares zanimiva pa je slika desno.

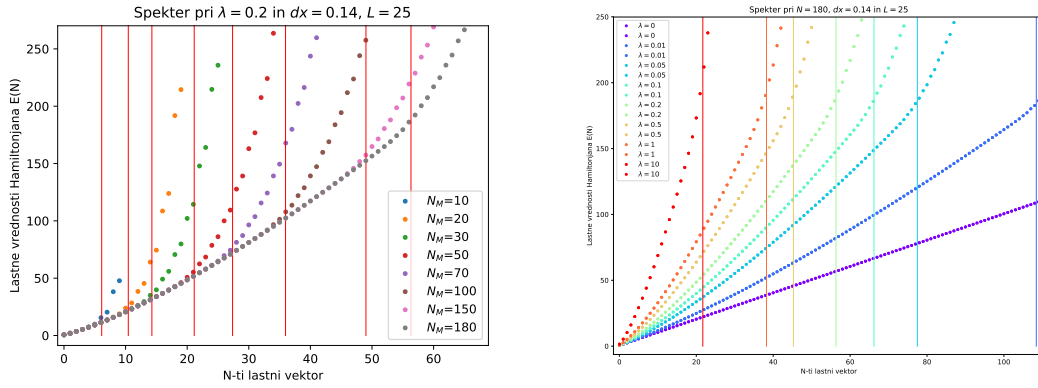


Slika 3: Sliki levo prikazujeta kako hitro energije v spektru pri prvi metodi konvergirajo k neki konstantni vrednosti v odvisnosti od velikosti baze. Pri tem je skala logaritemska! Na slikah desno pa vidimo, kako pri neki izbrani velikosti baze izbira dx vpliva na natančnost metode. Pri $dx < 0.3$ je očitno metoda integriranja dovolj dobra za mali N da ne vpliva na končni spekter, pri višjem N pa je najbolje vzeti $dx \approx 0.14$.

Na sliki desno namreč vidimo kako natančen je integrator. To da sem izrisal ta graf je na nek način neumno, saj bi lahko samo preveril konvergenco tipičnega integrala prisotnega pri tej metodi. Vseeno, sem bil še bolj neumen in sem se vprašal kako bi izgledala taka odvisnost za velike N , kjer območja funkcij že močno narastejo in predvsem njihova gostota (vse več vijugic na nekem območju). Izkaže se, da je to vprašanje precej irelevantno, saj dobimo rezultat prikazan na sliki???. Tu mislim da ni več vprašanj, je pa zanimiva opazka, da očitno osnovno nizka stanja še vedno konvergirajo.

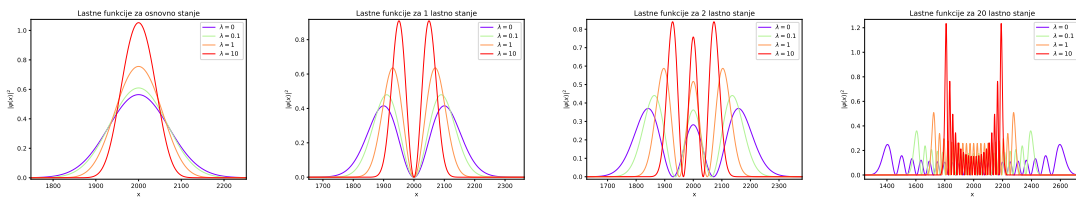
V. SPEKTER

Zdaj sem se lotil izračuna spektra, kar je steklo zelo hitro. Izbral sem si primeren korak in primeren N in izračunal spekter. Pri tem sem naprej preveril našo teorijo o tem, koliko stanj konvergira. To sme prikazal na sliki 4. Na sliki se lepo vidi, da teorija glede $r(N)$ zelo natančno napove koliko stanj bo konvergiralo pri neki izbrani velikosti matrike H . Žal sme omejen s številom okoli $N = 200$, ker v *Pythonu* funkcije za izračun hermitovih polinomov divergirajo pri $x > 20$ za velike n . Stvar sem regulariziral tako da sem operacije prevedel v *Decimal()*, da sem lažje operiral z velikimi števili, vendar bi moral spremeniti celotno funkcijo za izračun polinomov, če bi želel iti dlje, saj rutina za izračun ne sprejme števil tipa *decimal*.



Slika 4: Slika levo prikazuje izračunani spekter novega Hamiltonjana v odvisnosti od tega, koliko lastnih vektorjev integrabilnega hamiltonjana (z najnižjimi energijami) upoštevamo (N_M). Pri tem nam rdeče navpične črte predstavljajo z metodo iz poglavja III izračunano število lastnih energij, ki bi jih morali točno izračunati pri danem N_M . Iz slike ocenjujem, da je ocena zelo natančna. Na sliki desno potem pogledamo spektre pri različnih λ , pri čemer navpična črta spet predstavlja oceno natančnosti.

Poračual sem tudi spektre za različne λ pri $N_M = 180$. S temi spektri se potem nisem več ukvarjal. Bodo pa zelo uporabni pri časovnem razvoju. Algoritem jih izračuna izjemno hitro, tako da jih niti ne shranjujem, ker nima smisla. Na sliki 5 spodaj pa si lahko pogledamo še, kako izgledajo nove lastne vrednosti v bazi $|x\rangle$.



Slika 5: Slike prikazujejo lastne funkcije izračunane s tem algoritmom pri določenem λ .

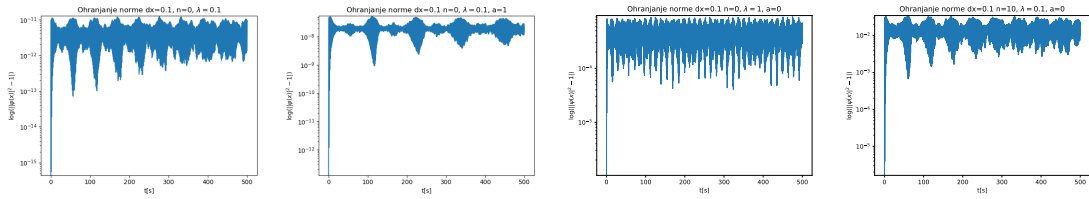
Kasneje sem ugotovil, da tako matriko še lažje zapišemo, če pozabimo na valovne funkcije, mapak se preselimo v fockov prostor, kjer matrične elemente ocenimo z $x = \sqrt{\frac{1}{2}}(a^\dagger + a)$. Tiste spektre sem vam potem poslal ločeno po mailu. Dodaten opis je na koncu poročila.

VI. ČASOVNI RAZVOJ

Tako kot sem to počel že pri prejšnji nalogi, sem se tudi zdaj lotil časovnega razvoja osnovnih stanj nepertrubiranega hamiltonjana. Samo da sem tokrat to stanje razvil v bazi osnovnih stanj novega, motenega hamiltonjana, saj velja

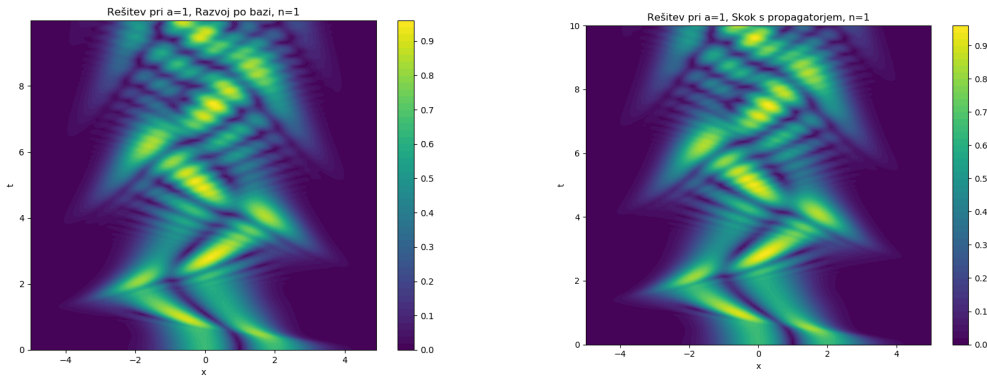
$$|\phi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle\psi_n|\phi(0)\rangle e^{-iE_n t}, \quad (5)$$

kjer E_n predstavlja lasnte energije lastnih stanj $|\psi_n\rangle$ motenega hamiltonjana. Kar je posebna prednost tega načina časovnega razvoja je to, da ne rabimo jemati kratkih časovnih korakov, saj tako najdemo točno rešitev ob poljubnem času t v enem koraku iz začetnega stanja. Najprej sem samo preveril, če ta metoda ohranja normo $|\psi(x)|^2$, da jo lahko primerjam z metodami spoznanimi pri prejšnji nalogi. To vidimo prikazano na slikah 6, kjer opazimo, da načeloma zviševanje energije poslabša unitarnost. Kljub temu se vedno zgodi, da norma ni več 1, se pa od takrat dalje ohranja, kar je pravzaprav kar si želimo.

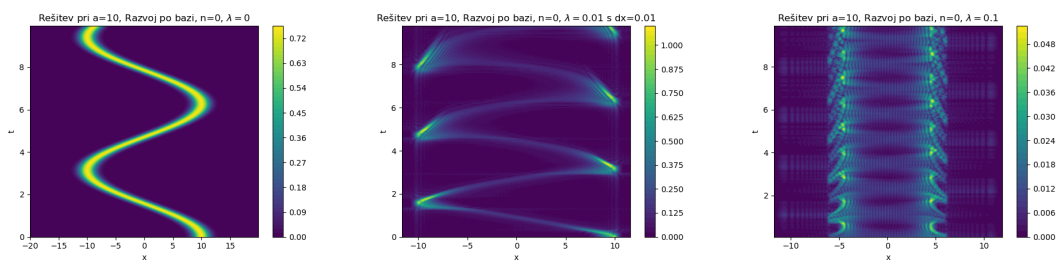


Slika 6: Slike prikazujejo kako ralične izbire pogojev vplivajo na ohranjanje norme.

Od tu dalje, si pogledamo nekaj časovnih razvojev, ki bi jih radi od prejšnjič preverili, ali pa jih prej nismo morali izračunati, ker metoda ni bila dovolj dobra. En tak primer vidimo na slikah 7. Kjer sem samo na oko primerjal dva rezultata. Potem na slikah 8 pa si lahko pogledamo razvoje osnovnega stanja za $a = 10$, kar sem s prejšnjo metodo dobil precej čudno. Tu me razvoj prepriča, vseeno bi moral preveriti, če slučajno energija teh stanj presega našo natančnost. Poleg tega si do sedaj nisem mogel pogledati stanj z visoko energijo, ne da bi metoda postala prepočasna. Pri prejšnji metodi bi namreč za to moral povečati območje in natančnost, tu pa je to povsem nebitveno. Kar je največja prednost te metode je namreč to, da dejansko nima robnih pogojev je zato glede tega zelo natančna. Taka stanja z visokim n sem si zato pogledal na slikah 9.

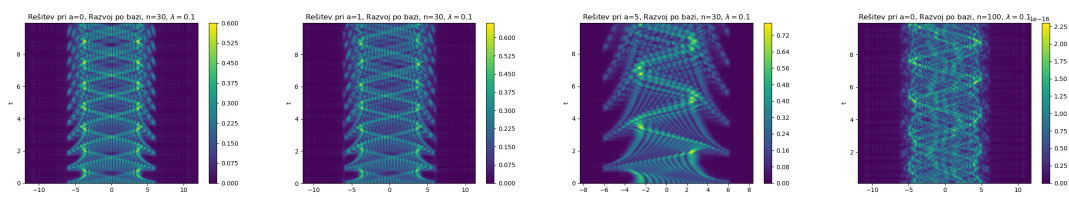


Slika 7: Slike prikazujeta časovni razvoj osnovnega stana, ki ga napove naša nova metoda in ena izmed naših starih metod pri $a = 1$ in $\lambda = 0.1$.



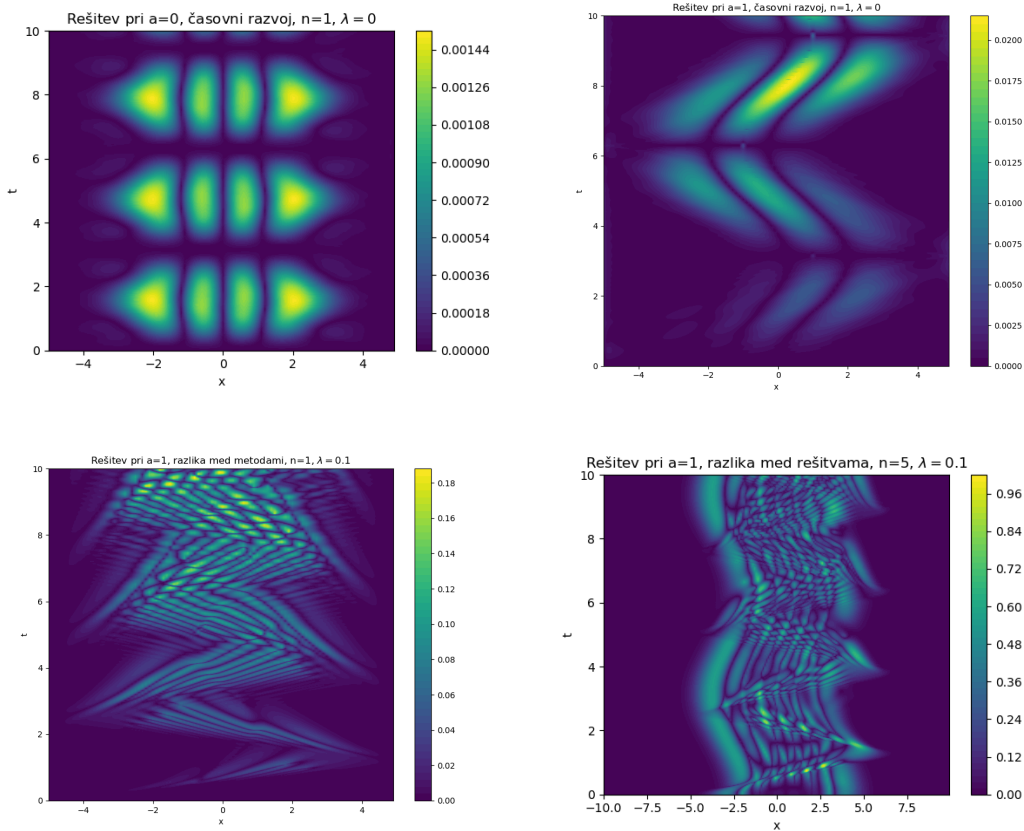
Slika 8: Slike prikazujejo kako ta nova metoda napove rešitve pri $a = 10$, ki so se mi prejšnjič zdele nenavadne.

Pri tem mormamo spet paziti, da ne razvijamo stanj s previsoko energijo. Tako sklepam da je razvoj za stoto lastno stanje nepravilen.



Slika 9: Slike prikazujejo kako ta nova metoda napove rešitve pri velikih n , ki so bile s prejšnjimi metodami že nedosegljive. Kljub temu seveda ta metoda še vedno ne deluje za $n > N_e$, ker vidimo na skrajno desni sliki.

Za primerjavo naše nove metode z našo staro metodo pa lahko uporabimo način 'odštej in poglej', pri katerem izračunamo časovni razvoj z obema metodama, potem pa pri vsakem času rešitvi med seboj odštejemo in pogledamo kakšna je razlika. Sicer ne bomo ugotovili katera metode je boljša in tudi ne izmerili napake, bomo pa s tem spoznali kako se metodi razlikujeta. Take manifestacije tega načina vidimo na slikah



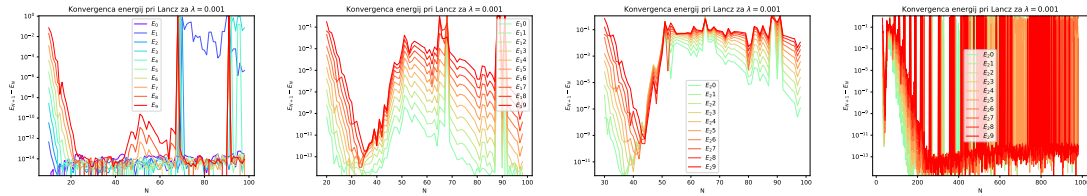
Slika 10: Slike prikazujejo kako ta nova metoda napove rešitve pri velikih n , ki so bile s prejšnjimi metodami že nedosegljive. Kljub temu seveda ta metoda še vedno ne deluje za $n > N_\epsilon$, ker vidimo na skrajno desni sliki.

VII. LANCZOV ALGORITEM

Ta algoritem sem napisal na tri načine, od katerih bom predstavil le dva načina. Najprej sem ga zapisal v bazi $|x\rangle$. V tem primeru je algoritem izvrjel povsem napačne lastne vrednosti, so pa bili lastni vektorji povsem ortogonalni. Dokaz tega vidimo na sliki ???. To sem poskušal izboljšati ampak ni in ni šlo, tudi tako pridobljene lastne vrednosti so bile izredno grde in so mi zato vzbujale nezaupanje. Nato sem algoritem spremenil tako, da se je nahajal v bazi lastnih stanj hamiltonjana. Ker me ni bilo na predavanjih in ker nisem bil dovolj domiselen, se najprej nisem spomnil, da velja $x = \sqrt{\frac{1}{2}}(a^\dagger + a)$. Tako da sem algoritem potem izvajal s H , ki sem ga izračunal tako kot v prejšnjih poglavjih. Ko sem izvedel za ta trik od kolegov, sem zapisal še algoritem s pomočjo takega hamiltonjana in tako je deloval nekoliko bolje. Na koncu sem ugotovil, da ej tudi tisti s prejšnjim hamiltonjanom deloval v redu, žal je slabost tih dveh pristopov, da pri nekem N odpovesta. Lastni vektorji niso več ortogonalni in tudi lastne vrednosti začnejo odstopati. Tako da pri danem λ ne moreš preko nekega N . Edina svoboda, ki nam preostane je izbira začetnega stanja. Brez resnih argumentov sem opazil, da se še najbolj obnese, če naredim suporepozicijo vseh stanj.

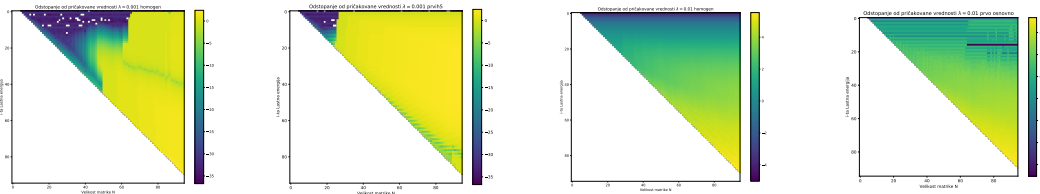
Potem me je zanimala konvergenca stanj v odvisnosti od N . TU nastopi problem v tem kaj mislimo s pojmom konvergenca. Metoda nedvomno lepo deluje in takšno kot smo jo predstavili

sme implementiral. Razne alternative sem tudi iskal po spletu pa se ni nič spremenilo. V glavnem lastne vrednosti ne konvergirajo nujno k previm vrednostim. Kjer pa se pojavi problem. Če mi ne vemo katere vrednosti so prave, kako potem sploh ugotovimo če konvergira k pravim vrednostim? Če zaupamo metodi lahko samo preverimo kako konvergirajo lastne vrednosti izračunane s to metodo. To lahko vidimo na slikah spodaj.



Slika 11: Slike prikazujejo koliko se i -ti najnižji lastni energiji razlikujeta s tem ko matriko povečamo za 1. To bi lahko bil kriterij za ugotavljanje, če metoda konvergira.

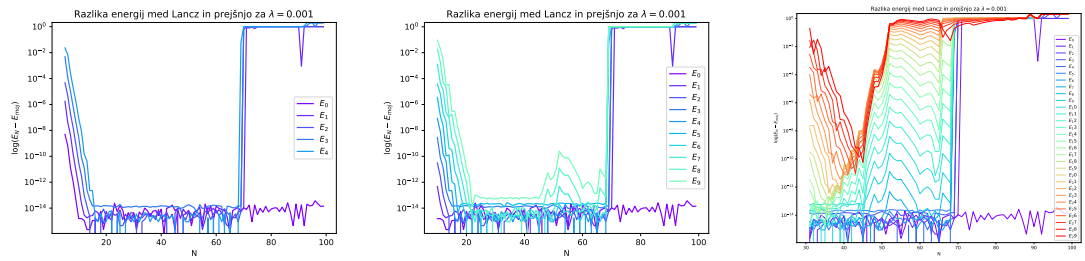
Kar pa je druga možnost je zelo razveseljujoče. Tekom tega raziskovanja smo deojali, da lahko \hat{H}' zapišemo v fockovi bazi in torej ne rabimo konstruirati matrike z nekimi integrali in lastnimi funkcijami razvitimi po $|x\rangle$ bazi. S tem pridobimo veliko hitrosti in spektra. Na tak način lahko torej z hudo natančnostjo izračunamo prvih 100 ali nekaj 100 lastnih vrednosti. Če lastne vrednosti izračunamo tako, lahko dosti lažje določimo natančnost naše metode. Sprašujemo se namreč koliko energij lahko z natančnostjo 10^{-3} opišemo pri izbrani velikosti baze N z Lanczevo metodo. V ta namen sem izračunal spekter pri vsakem N od $N = 5$ do $N = 100$ in in potem lastne energije odštel od izračunanih lastnih energij z navadno diagonalizacijo. To sem potem predstavil na 2×2 mreži kjer vsak kvadrant predstavlja vrednost razlike med metodama v logaritemski skali pri izbranem N za izbrano lastno energijo. To vidimo na slikah 12. S tem lahko točno preštejemo za vsak izbran N koliko lastnih energij bomo zadeli pri izbrani natančnosti z Lanczevo metodo.



Slika 12: Slike prikazujejo odstopanje energij od pričakovanih pri izbranem N in lastni energiji i v logaritemski skali. Pri tem hom pomeni, da je bilo začetno stanje oblike $[1, 1, \dots, 1]$, prvih5, da je bilo začetno stanje od nič različno in enako zgolj v prvih dveh stanjih, osnovno stanje pa pomeni, da je bilo začetno stanje prvo osnovno stanje.

Če pa si želimo to predstavljati bolj zvezno in manj abstraktno, sem si izrisal še nekaj podobnih grafov kot smo jih videli na slikah 11, vendar tokrat nisem gledal ali konvergirajo lastne vrednosti, ampak če konvergirajo k vrednosti, ki je pravilna. Brelec naj rezultate primerja sam.

Na tem mestu sem potem tudi poračunal lastne energije pri različnih λ in sem jih poslal v priponki. Pri vsaki lambdi sem poračunal 5000 lastnih vrednosti in potem shranil in zapisal zgolj tiste, ki jih z mojo funkcijo $r(N, \lambda)$ ocenjujem kot točne (10 manj).



Slika 13: *Slike prikazujejo odstopanje energij od pričakovanih pri izbranem N .*