

УДК 519.6

Численное решение уравнения Шредингера: метод диагонализации и спектральный метод

В. А. Черкасский

*Институт теоретической физики имени А. И. Ахиезера НИЦ ХФТИ,
Украина*

Проведен сравнительный анализ достоинств и недостатков метода диагонализации и спектрального метода в применении к численному решению уравнения Шредингера. Получены количественные оценки эффективности обоих методов при вычислении длинных спектральных серий и предложены пути улучшения их производительности.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, численное решение, спектральный метод.

Проведений порівняльний аналіз переваг та недоліків метода діагоналізації і спектрального метода в застосуванні до чисельного розв'язання рівняння Шредингера. Отримані кількісні оцінки ефективності обох методів при обчисленні довгих спектральних серий та запропоновані шляхи поліпшення їхньої продуктивності.

Ключові слова: рівняння Шредингера, чисельний розв'язок, спектральний метод.

A comparative analysis of advantages and disadvantages is performed for the matrix diagonalization technique and the spectral method in application to numerical solution of the Schrödinger equation. Quantitative estimates are made for efficiency of the both methods and directions of further improvements of their performance are presented.

Key words: Schrödinger equation, numerical solution, spectral method.

1. Решение уравнения Шредингера методом диагонализации

Уравнение Шредингера для квантовой системы, обладающей дискретным спектром энергий, можно представить в виде

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n, n \in N \quad (1.1)$$

где E_n — собственные уровни энергии, а собственные волновые функции Ψ_n задаются в виде разложения

$$\Psi_n = \sum_{k \in K} a_k^{(n)} \varphi_k, a_k^{(n)} = \langle \varphi_k | \Psi_n \rangle \quad (1.2)$$

а базисные функции φ_k , являющиеся решениями некоторого другого уравнения Шредингера

$$h\varphi_k = e_k\varphi_k, k \in K, \quad (1.3)$$

заданы аналитически либо находятся численно независимым путем. Здесь N и K — счетные множества.

Процедура численного решения уравнения Шредингера методом диагонализации фактически означает следующее:

1. счетное множество K разбивается на прямую сумму конечного подмножества \bar{K} и счетного подмножества K' .

2. оператор Гамильтона исходной задачи (1.1) представляется в виде

$$H = \bar{H} + H', \quad (1.4)$$

где по определению

$$\langle \varphi_{k'} | \bar{H} | \varphi_{k''} \rangle = \langle \varphi_{k'} | H | \varphi_{k''} \rangle, k', k'' \in \bar{K}, \quad (1.5)$$

а все остальные матричные элементы \bar{H} равны нулю.

3. одним из стандартных численных методов (например, методом Гаусса) находится решение задачи на собственные значения конечной системы

$$\bar{H}\bar{\Psi}_n = \bar{E}_n \bar{\Psi}_n, n \in \bar{K}, \quad (1.6)$$

где

$$\bar{\Psi}_n = \sum_{k \in \bar{K}} \bar{a}_k^{(n)} \varphi_k, \bar{a}_k^{(n)} = \langle \varphi_k | \bar{\Psi}_n \rangle, \langle \Psi_{n'} | \Psi_{n''} \rangle = \delta_{n'n''}. \quad (1.7)$$

Погрешность вычисления уровней энергии имеет следующий вид [1]

$$E'_n \equiv E_n - \bar{E}_n = \frac{\langle \bar{\Psi}_n | H' | \Psi_n' \rangle}{|\bar{\Psi}_n|^2 + \langle \bar{\Psi}_n | \Psi_n' \rangle} = \frac{\sum_{k' \in \bar{K}, k'' \in K'} \bar{a}_{k'}^{(n)} a_{k''}^{(n)} H'_{k'k''}}{\sum_{k' \in \bar{K}} \bar{a}_{k'}^{(n)} a_{k'}^{(n)}}. \quad (1.8)$$

Отсюда видно, что достаточным условием малой погрешности E'_n является малость коэффициентов $a_k^{(n)} = \langle \varphi_k | \Psi_n \rangle$ для $k \in K'$, величину которых можно найти с помощью выражения

$$\langle \varphi_k | \Psi_n \rangle^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int dpdq \varphi_k^{(W)}(p, q) \Psi_n^{(W)}(p, q), \quad (1.9)$$

где D – размерность конфигурационного пространства исследуемой квантовой системы, $\Psi_n^{(W)}(p, q)$ и $\varphi_k^{(W)}(p, q)$ – искомые и базисные волновые функции в представлении Вигнера [2], а интеграл вычисляется по всему фазовому пространству соответствующей классической системы.

Согласно принципу квазиклассической локализации функций Вигнера [3,4], для достаточно больших значений n и k функции $\Psi_n^{(W)}(p, q)$ и $\varphi_k^{(W)}(p, q)$ локализованы на энергетических поверхностях $H(p, q) = E_n$ и $h(p, q) = e_k$ соответственно. Поэтому коэффициенты $a_k^{(n)} = \langle \varphi_k | \Psi_n \rangle$ можно считать пренебрежимо малыми в том случае, когда соответствующие энергетические поверхности не имеют общих точек. Таким образом, анализ геометрии классического фазового пространства исследуемой системы позволяет оценить точность собственных значений уровней энергии, полученных в данном базисе, а также помогает выбрать оптимальный базис, дающий наилучшую точность при заданном объеме вычислений.

В качестве простого примера рассмотрим одномерный осциллятор четвертой степени

$$H(p, q) = p^2 + q^4, \quad (1.10)$$

спектр энергий которого дается асимптотическим выражением [5] (с точностью до 15 верных знаков при $n > 10$)

$$E_n = \pi^2 \left(\frac{3\sqrt{2}(n+1/2)\hbar}{\Gamma(1/4)} \right)^{4/3} \left\{ 1 + \sum_{k=1}^3 \frac{(-1)^{k+1} c_k}{[9\pi(n+1/2)^2]^k} + O\left(\frac{1}{[9\pi n^2]^4} \right) \right\}, \quad (1.11)$$

$$\text{где } c_1 = 1, c_2 = \frac{5}{8} + \frac{11}{6} \left(\frac{\Gamma(1/4)^2}{4\pi} \right)^4 \approx 2.8201, c_3 = \frac{11}{12} - \frac{341}{10} \left(\frac{\Gamma(1/4)^2}{4\pi} \right)^4 \approx 39.9118.$$

Наиболее традиционный набор базисных функций

$$\varphi_k(x; \omega) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{H_k(\xi)}{\sqrt{2^k k!}} e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x, \quad (1.12)$$

где $H_k(\xi)$ – полиномы Чебышева-Эрмита, представляет собой собственные волновые функции одномерного гармонического осциллятора $h(p, q; \omega) = p^2/2 + \omega^2 q^2/2$, соответствующие собственным значениям $e_k = \hbar\omega(k+1/2)$. В вигнеровском представлении они имеют вид

$$\varphi_k^{(W)}(p, q) \equiv \int dx e^{-ipx/\hbar} \varphi_k^*(q-x/2) \varphi_k(q+x/2) = (-1)^k 2e^{-2\rho^2} L_k(4\rho^2), \quad (1.13)$$

где $\rho^2 = h(p, q; \omega)/(\hbar\omega)$, а $L_k(x)$ – полиномы Лягерра. Нетрудно убедиться, что функции (1.13) действительно имеют максимум вблизи точек $\rho^2 = k+1/2$.

Совместный анализ классического фазового пространства гармонического и четвертичного осцилляторов показывает, что при заданной размерности базиса k_{\max} погрешность будет мала для уровней энергии, удовлетворяющих условию

$$E_n < \max \left\{ \frac{4\hbar^2}{\omega^2} \left(k_{\max} + \frac{1}{2} \right)^2, 2\hbar\omega \left(k_{\max} + \frac{1}{2} \right) - \frac{\omega^4}{4} \right\}, \quad (1.14)$$

поскольку для этих энергий отсутствуют точки пересечения областей локализации искомым волновых функций и базисных функций с $k > k_{\max}$. Условие (1.14) определяет область стабильности вычислений — область параметров, где численные результаты не зависят от параметров базиса и совпадают с искомыми значениями, что подтверждается непосредственно результатами вычислений, представленными на Рис.1.1. Как видно, в пределах области стабильности абсолютная погрешность не превышает ошибки округления для чисел с двойной точностью (не очень убедительное согласие для $n < 10$ связано с недостаточной точностью асимптотической формулы (1.11) для малых n).

Оптимальный базис соответствует $\omega_0^3 = 2\hbar(k_{\max} + 1/2)$, при этом возможно вычислить уровни энергии вплоть до $E_{\max} = 3/4 [2\hbar(k_{\max} + 1/2)]^{4/3}$, что соответствует доле верных уровней энергии среди всех полученных, равной

$$\kappa \approx \frac{\Gamma(1/4)^2}{2\pi^{3/2} 3^{1/4}} \approx 90\%. \quad (1.15)$$

Надо заметить, что такая высокая эффективность метода диагонализации обычно недостижима для квантовых систем более высокой размерности.

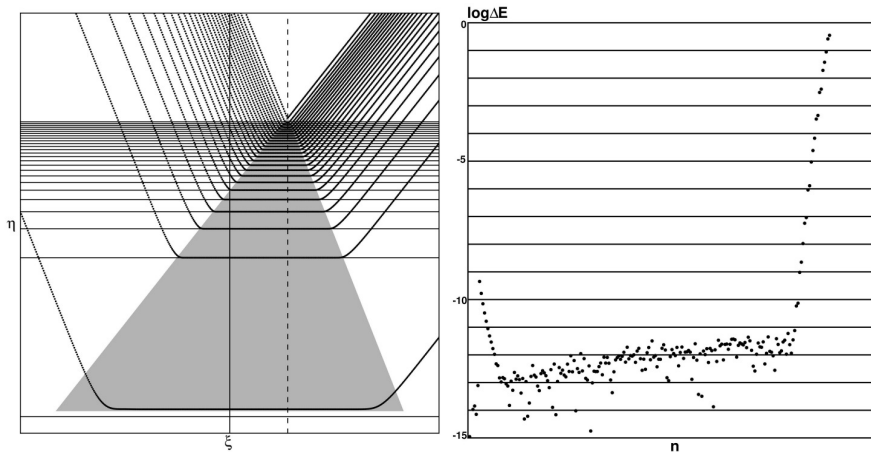


Рис.1.1. Вычисление уровней энергии четвертичного осциллятора в базисе собственных функций гармонического осциллятора с $k_{\max} = 250$ и $\hbar = 1$. Слева: зависимость численно найденных уровней энергии от частоты базиса в переменных $\eta = \ln E$ и $\xi = \ln \omega$. Точки изображают численные значения, горизонтальные линии – результат асимптотической формулы (1.11), серым цветом закрашена область стабильности. Сплошная вертикальная линия соответствует $\omega = 1$, а пунктирная – оптимальному базису $\omega_0 \approx 7.94$. Справа: зависимость погрешности вычисления уровней энергии от номера n для оптимального базиса

2. Спектральный метод решения уравнения Шредингера

Спектральный метод решения уравнения Шредингера был впервые описан в работе [6] в применении к одномерным и двумерным потенциальным системам, однако его нетрудно обобщить для решения стационарного уравнения Шредингера произвольной размерности D [7]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \Delta_D + U(x_1, \dots, x_D) \right] \psi_n(x_1, \dots, x_D) = E_n \psi_n(x_1, \dots, x_D), \Delta_D = \sum_{k=1}^D \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}, \quad (2.1)$$

где потенциал $U(x_1, \dots, x_D)$ допускает лишь финитное движение для всех энергий. Рассмотрим зависящее от времени решение $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ соответствующего нестационарного уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \Delta_D + U(x_1, \dots, x_D) \right] \psi(x_1, \dots, x_D; t) = i\hbar \partial_t \psi(x_1, \dots, x_D; t) \quad (2.2)$$

с произвольным начальным условием

$$\psi(x_1, \dots, x_D; t = 0) \equiv \psi_0(x_1, \dots, x_D) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D). \quad (2.3)$$

Разложение нестационарного решения по искомым $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$ имеет вид

$$\psi(x_1, \dots, x_D; t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (2.4)$$

Для нахождения спектра энергий E_n достаточно вычислить величину

$$P(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} P(t) = \hbar \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \delta(E - E_n), \quad (2.5)$$

которая представляет собой Фурье-образ корреляционной функции вида

$$P(t) = \int dx_1 \dots dx_D \psi_0^*(x_1, \dots, x_D) \psi(x_1, \dots, x_D; t) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (2.6)$$

На практике величина $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ и корреляционная функция $P(t)$ вычисляются на конечном множестве точек $t_k = k\Delta t$, $k = -M, \dots, M$, поэтому вместо (2.5) применяется взвешенное преобразование Фурье вида:

$$P_w(E) = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} P(t) w(t) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \delta_w(E - E_n), \quad (2.7)$$

где $T = M\Delta t$,

$$\delta_w(E) = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} w(t) \quad (2.8)$$

– конечный аналог δ -функции, а весовая функция $w(t)$ удовлетворяет условию

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt w(t) = 1. \quad (2.9)$$

Если в качестве весовой функции взять одну из обобщенных функций Ханна

$$w(t) = w_n\left(\frac{\pi t}{T}\right), w_n(\tau) = \frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} (1 + \cos \tau)^n \equiv 1 + 2 \sum_{k=1}^n \frac{\cos k\tau}{(n+k)!(n-k)!}, \quad (2.10)$$

то конечный аналог δ -функции примет вид

$$\delta_w(E) = \delta_n\left(\frac{ET}{\pi\hbar}\right), \delta_n(\varepsilon) = \frac{\sin \pi\varepsilon}{\pi\varepsilon} \frac{1}{\prod_{k=1}^n \left[1 - \left(\frac{\varepsilon}{k}\right)^2\right]}. \quad (2.11)$$

Как видно из рисунка 2.1, типичная функция $P_w(E)$ представляет собой набор острых пиков, расположенных в точках $E = E_n$. Анализ численно полученной $P_w(E)$ позволяет определить сами собственные значения E_n . Необходимость введения весовой функции $w(t)$ вызвана тем, что кроме истинных пиков, соответствующих искомому уровню энергии, на графике $P_w(E)$ могут присутствовать и фиктивные максимумы, возникающие из-за осциллирующего характера функций $\delta_w(E)$. Применение весовых функций позволяет значительно уменьшить амплитуду таких фиктивных пиков. Так, применение обобщенной функции Ханна 21-го порядка уменьшает величину фиктивных пиков на 15 порядков по сравнению с истинными.

Для вычисления $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ применяется пошаговый метод факторизованных операторов:

$$\psi(x_1, \dots, x_D; t + \Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t \Delta_D}{2}} e^{-i\Delta t U(x_1, \dots, x_D)} e^{-i\frac{\Delta t \Delta_D}{2}} \psi(x_1, \dots, x_D; t) + O(\Delta t^3), \quad (2.12)$$

где действие дифференциального оператора Δ_D находится с помощью дискретного преобразования Фурье. Будучи реализован с применением алгоритма быстрого преобразования Фурье, спектральный метод превращается в эффективную вычислительную процедуру.

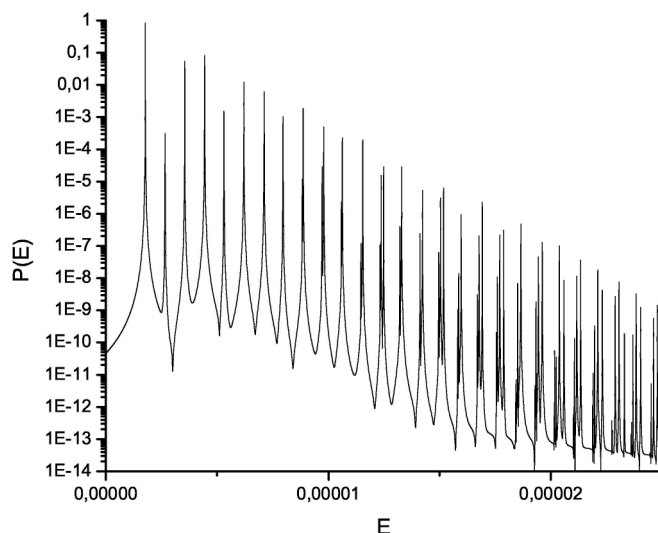


Рис.2.1. Типичный вид функции $P_w(E)$

3. Сравнительный анализ эффективности метода диагонализации и спектрального метода при вычислении длинных серий уровней энергии в уравнении Шредингера

Количественной мерой эффективности вычислительного метода является степень увеличения вычислительных затрат — времени вычислений и объема используемой оперативной памяти — с ростом объема получаемых результатов. Полезно сравнить эффективность спектрального метода и метода диагонализации при вычислении n уровней энергии системы с заданной точностью, которую разумно определить как максимальное отношение абсолютной погрешности вычисленных уровней энергии к среднему расстоянию между этими уровнями:

$$\varepsilon = \frac{\delta E}{\Delta E} \equiv \rho(E) \delta E. \quad (3.1)$$

Для большинства систем плотность состояний $\rho(E)$ достаточно быстро растет с энергией:

$$\rho(E) \propto E^{\lambda D - 1}, \quad (3.2)$$

где D — размерность системы, а λ — величина, близкая к единице ($\lambda = 1$ для D -мерного гармонического осциллятора). Поэтому условие достижения

требуемой точности будет наиболее критично для уровней с наибольшей энергией, а низшие уровни будут получены с завышенной точностью.

Для метода диагонализации в базисе размерности N абсолютная погрешность монотонно растет с номером вычисленного уровня

$$\delta_E \propto \left(\frac{n}{\kappa^D N} \right)^\alpha, \quad (3.3)$$

где, как правило, $\alpha \gg 1$, $\kappa \approx 0.7 \div 0.9$, так что минимальная размерность базиса.

$$N_{\min} = \frac{n^{1-\frac{1}{\alpha\lambda}}}{\kappa^D \varepsilon^{1/\alpha}} \approx \frac{n}{\kappa^D}. \quad (3.4)$$

быстро растет с размерностью системы D .

В общем случае время вычислений в методе диагонализации растет как $T \propto N^3$, а занимаемый объем памяти — как $M \propto N^2$. Однако во многих важных частных случаях, применение метода диагонализации приводит к ленточным матрицам, в этом случае $T \propto N^2$, а $M \propto N$.

В спектральном методе точность вычислений определяется размером вычислительной сетки по времени:

$$\delta_E \approx \frac{1}{T}, \quad (3.5)$$

а шаг вычислений Δt определяет ширину полосы спектра, в которой удается найти уровни энергии:

$$E_{\max} \approx \frac{1}{\Delta t}, \quad (3.6)$$

поэтому требуемое число шагов по времени

$$N_T \equiv \frac{T}{\Delta t} \approx \frac{n}{\varepsilon}, \quad (3.7)$$

а требуемое число узлов по координатам определяется свойствами дискретного преобразования Фурье

$$N = n^{\frac{1}{2\lambda D}}. \quad (3.8)$$

При этом время счета

$$T \propto N_T N^D \ln D \approx n^{1+\frac{1}{2\lambda}} \ln \frac{n}{\varepsilon}, \quad (3.9)$$

а расход оперативной памяти $M \propto N^D \propto n^{\frac{1}{2\lambda}}$. Таким образом, по сравнению с методом диагонализации, спектральный метод является более экономичным с точки зрения затрат оперативной памяти и более производительным с точки зрения скорости вычислений.

К достоинствам спектрального метода следует отнести также и то обстоятельство, что численное моделирование временной динамики волновых пакетов входит в алгоритм метода как вспомогательная процедура. В некоторых важных приложениях такое моделирование является основной задачей, тогда

как нахождение самих уровней энергии и собственных волновых функций не требуется. В таких случаях важным преимуществом спектрального метода является возможность достичь конечной цели кратчайшим путем, тогда как получение тех же результатов методом диагонализации потребовало бы несравнимо больше усилий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Berezovoj V.P., Bolotin Yu.L., Cherkaskiy V.A., Ivashkevych G.I. Regular and Chaotic Classical and Quantum Dynamics in Multi-Well Potentials. – Cambridge: CSP, 2009. – 175p.
2. Wigner E.P. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium // Phys. Rev. – 1932. – V.40(5) – P.749-759.
3. Berry M.V. Semi-classical mechanics in phase space: a study of Wigner's function // Phil. Trans. Roy. Soc. A. – 1977. – V.287. – P.237-271.
4. Robnik M. Topics in Quantum Chaos in Generic Systems // Nonlinear Phenomena in Complex Systems – 1998. – V.1. – P.1-22.
5. Bohigas O., Tomsovic S., Ulmo D. Manifestations of classical phase space structures in quantum mechanics // Phys. Rep. – 1993. – V.223. – P.43-133.
6. Feit M.D., Fleck J.A., Steiger Jr. and A. Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method. // J. Comput. Phys. – 1982. - V. 47. - P. 412-433.
7. Черкасский В.А. Комбинированное применение численных и аналитических методов при исследовании квантового хаоса в гладких потенциалах сложной геометрии. // Вестник ХНУ. – 2005. – № 710. – С. 47-64.