УДК 519.6

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ ОПЕРАТОРА ГАМИЛЬТОНИАНА

Однорожникова С.И.

Студентка

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова

Магнитогорск, Россия

Иванова Е.В.

Студентка

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова

Магнитогорск, Россия

Аннотация.

В данной работе рассмотрены методы А.М. Данилевского и А.Н. Крылова для вычисления задач численного нахождения собственных значений и собственных векторов оператора гамильтониана для квантового двумерного осциллятора. Показаны на численном эксперименте результаты, с помощью которых определяется надёжность и эффективность вычислительного плана для решения поставленных задач.

Ключевые слова: собственные значения, собственные векторы, квантовый осциллятор, оператор гамильтониана, численные методы.

NUMERICAL METHODS OF CALCULATING THE OWN VALUES AND THE OWN VECTORS OF THE OPERATOR HAMILTONIAN

Odnorozhnikova S.I.

Student

Federal State Budgetary Establishment of Higher Professional Education Magnitogorsk State Technical University G.I. Nosova

Russia, Magnitogorsk

Ivanova E.V.

Student

Federal State Budgetary Establishment of Higher Professional Education Magnitogorsk State Technical University G.I. Nosova

Russia, Magnitogorsk

Annotation.

In this paper, the methods of A.M. Danilevsky and A.N. Krylov for calculating the problems of numerically finding the eigenvalues and eigenvectors of the Hamiltonian operator for a quantum two-dimensional anharmonic oscillator. The results are shown on a numerical experiment, with the help of which the reliability and efficiency of the computational plan for solving the set tasks are shown.

Keywords: eigenvalues, eigenvectors, quantum oscillator, Hamiltonian operator, numerical methods.

В настоящее время большое значение уделяется поиску собственных векторов и чисел. Вследствие чего был создан новый численный метод, предназначенный для абстрактных операторов, а именно широкого класса, который поможет найти их собственные характеристики.

Рассматривая вопрос замеченной аналогии между теорией краевых задач, относящихся к математической физике, и алгебраической задачей, которая преобразует квадратичные формы к непосредственно главным осям, возникла теория с собственными значениями, связанная с аналитикой. Именно в 1894 году была разработана эта аналогия на частном примере Паункарем.

Заинтересованность к теории линейных операторов в гильбертовом пространстве начала возникать в период 1910-1930 года. Где спектральная теория является наиболее востребовательной из всей теории. В работе Неймана в 1929г. и в этом же году в работе М.Стоуна, также в книге 1932 года Ф.Рисса была представлена в гильбертовом пространстве теория линейных операторов.

Метод приближенного вычисления собственных чисел оператора Штурма-Лиувилля возник И. М. Гельфандом и Л. А. Диким в 1967г. Основа данного метода заключается в использование теории регуляризованных следов дифференциальных операторов. Но теоретической обоснованности у данного метода не имеется. Всё происходит на примере, где находятся с высокой точностью первые три собственных числа уравнения Матье. Также в статье С. А. Шкарина, которая была написана в 1995г., доказана бесконечным линейным системам определенного вида их не единственность решения. Работы В.А.Садовничего и В.Е. Подольского являются одними из главных продвижений в исходной интерпретации, что касается решений задач поиска 1-ых собственных чисел оператора, после того, как был опровергнут метод Гельфанда-Дикого С.А. Шкариным. Данные работы ввели класс операторов, благодаря чему возможность нахождения собственных чисел была доказана, при условии наличия заранее уже заданной погрешностью для вычисления. Первые формулировки идей нового метода приближённых вычислений были написаны в работах В. А. Садовничего и В. В. Дубровского в 1994г. для первых собственных чисел, которые являются дискретными несамосопряженными операторами (метода РС), основываясь на теориях регуляризованных следов и возмущений. В таких работах как В.А. Садовничего, В.В. Дубровского, С.И. Кадченко, О.А. Торшиной [1; 6] была получена оценка остаточного члена, а также вычислена поправка теории возмущений. Разрабатывая модель вычисления 1-ых собственных чисел краевой задачи Орра-Зоммерфельда, применялся данный метод.

Большое количество работ по спектральной теории стало возникать для дифференциальных операторов [3; 4] из-за рассмотренных ныне задач в квантовой механике. Благодаря исследованию новых разделов в спектральной теории линейных операторов и построению теории спектров, не имеющих ограничений самосопряженных операторов, была изложена в математической форме квантовая механика. Актуальность касающихся проблем численного нахождения собственных чисел сингулярных операторов [2; 5] возросла из-за развития квантовой механики. Для немногих модельных задач вычисляются собственные значения аналитически. К сожалению, есть задачи, которые не решаются точно, вследствие чего появляется необходимость в разработке численных методов [7].

А.Н. Крылов представил метод для поиска собственных значений, а также и векторов матриц в начале 30-х г. нашего столетия. Решая СЛАУ относительно коэффициентов характеристического полинома, можно определить собственные вектора матрицы. Исходя из большого цикла работ, работа А.Н. Крылова является первой, которая посвящена преобразованию векового уравнения к виду полинома.

Похожий метод как у А.Н. Крылова выдвинул Самуэльсон, где вычисляя коэффициенты характеристического полинома, необходимо составить прямоугольную матрицу, для которой нужно $n * (n-1)^2$ раз умножений.

Также А.М. Данилевский в конце 30-х г. этого столетия предложил метод для вычисления, как собственных значений, так и собственных векторов. Более экономичным является этот метод, исходя из других методов для построения собственного многочлена матрицы. Основное в этом методе является умение преобразовывать вековой определитель в нормальный вид Фробениуса.

В 1881 году Леверье предложил один из 1-ых методов в коммутативном кольце для вычисления характеристического полинома. Было видоизменение этого метода Д.К. Фадеевым в 1943 году, которое позволило также вычислять ещё и матрицу присоединённую. Метод Леверье является весьма трудным для вычисления, так как он основывается на формулах Ньютона, подходящий для сумм степеней корней алгебраического уравнения. Вследствие чего необходимо посчитывать степени высокого порядка для исходной матрицы.

Для использования метода нужно будет вычислить p_i , где $p_i -$ коэффициенты характеристического полинома. Также p_i это сумма миноров определителя матрицы А, у которого порядок равен i, опирающихся на главную диагональ. Чтобы найти все коэффициенты p_i, потребуется затратить много времени для вычисления большого порядка операций. Если же использовать разные методы, это касается и самих методов Данилевского и Крылова, то можно будет обойтись без этих громоздких вычислений.

Решая прикладные задачи, возникают нелинейные уравнения, примерами которых служат: задача, для которой применятся внутренняя баллистика для ракетных двигателей, используя твёрдое топливо, решение вопроса по утилизации ракетных двигателя, также используя твёрдое топливо. К ним могут относиться и задачи электростатики, и иммунологии, и вирусологии математического плана.

Повысить эффективность итерационного метода для поиска решений, касающихся нелинейных уравнений, являться важной задачей. Для того чтобы это сделать, можно прибегнуть к ускорению сходимости для итерационных методов, при этом не вычислять дополнительные функции, не находить производные, не использовать матрицы, такие как Якоби, и разделение разностей.

Нелинейные уравнения имеют особенность в отсутствие прямых методов для решения уравнений, по сравнению с системами линейного происхождения. Бывают случаи, когда можно решить систему непосредственно. Таким примером может послужить сведения задачи к одному нелинейному уравнению и решить относительно одного неизвестного. Это может произойти, если иметься система, состоящая из двух уравнений, тем самым выразить одно неизвестное через другое. То есть итерационный метод для данной системы приобретает актуальность.

Решение берётся исходя из локализации решения, то есть отделения корней [8]. Тоже делается и для одного уравнения. Одним из подходов является графическое изображение. Для примера используем систему из двух уравнений, имеющих две неизвестные:

$$\begin{cases} x_1^3 + x_2^3 = 8x_1x_2 \\ x_1 \ln x_2 = x_2 \ln x_1 \end{cases}.$$

Для решения изобразим каждое уравнение на плоскости (рис. 1). Где а) – график для первого уравнения; б) – для второго; в) - совместное их решение.

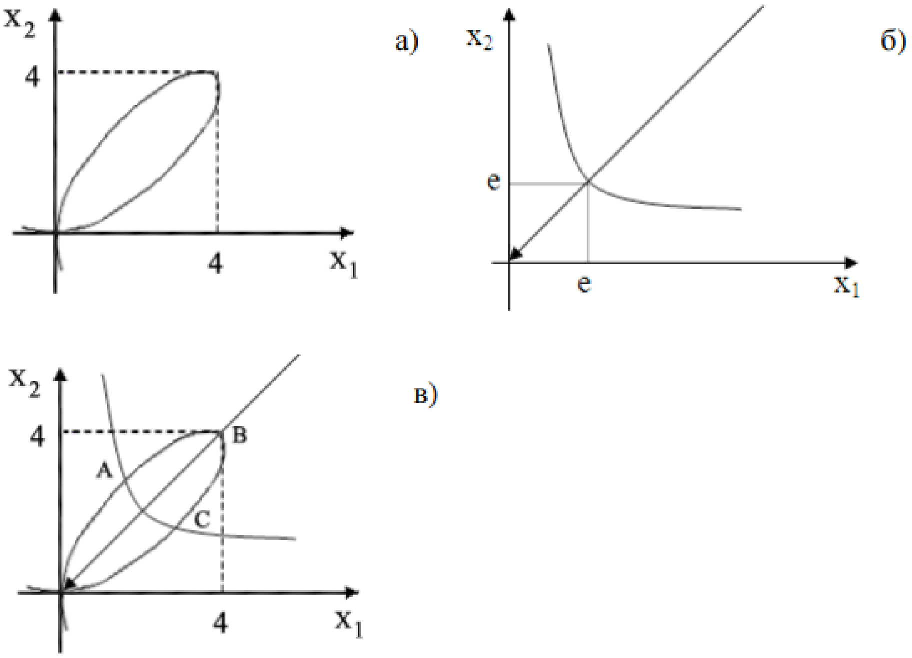

Рис. 1 – Графики уравнений системы

Определим границы для координат пересекающихся графиков. Решением будет данной системы – это координаты A, B, C точек.

Для B: $x_1 = x_2 = 4$.

Для C: x_1 больше 3.5, но меньше 4; и x_2 больше 1.5, но меньше 2.5.

Так как точки A и C симметричны относительно прямой : $x_1 = x_2$, то у точке C координаты будут приближенно равны : $x_1 \approx 3.8,\ x_2 \approx 2.$

Для одномерного случая нахождение корня приводит к необходимости определения интервала неопределённости: $(\mathrm{x}^* - \delta, \mathrm{x}^* + \delta)$. Исходя из того, что значение у функции в большинстве случаях находится на ЭВМ, прибегая к методам приближенного вычисления, в окрестности корня может и не быть, что относительная погрешность станет малой, так как погрешность у корня нерегулярна или может стать уже в 1-ом приближение случайной величиной.

При использовании метода простых итераций, систему приводим в виде векторной формы. Задаётся некоторое начальное приближение и подставляется в саму систему. Данное действие осуществляется до тех пор, пока не получится некая последовательность точек. Вследствие чего осуществляется приближение к искомому решению x. Условием для сходимости разберём на конкретном примере. Используем пример, рассмотренный ранее.

Приводя систему к более удобному виду для итерации, получим:

$$x_1 = \sqrt[3]{8x_1x_2 - x_2^3},$$
$$x_2 = x_2 + \frac{x_2}{\ln x_2} - \frac{x_1}{\ln x_1}.$$

Чтобы проверить условие сходимости относительно окрестности точки С, приведём вычисления для матрицы Якоби:

$$\varphi'(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{8x_2}{3(8x_1x_2 - x_2^3)^{2/3}} & \frac{8x_1 - 3x_2^3}{3(8x_1x_2 - x_2^3)^{2/3}} \\ \frac{1}{\ln^2 x_1} - \frac{1}{\ln x_1} & 1 + \frac{1}{\ln x_2} - \frac{1}{\ln^2 x_2} \end{pmatrix}.$$

Исходя из того, что $x_1 \approx 3.8$, $x_2 \approx 2$, будет найдена норма матрицы $\varphi'(x)$:

$$\|\varphi'(x)\| \approx \|\varphi'(3{,}8; 2)\| \approx 0{,}815$$

Следовательно, итерационная процедура:

$$x_1^{(к+1)} = \sqrt[3]{8x_1^{(к)}x_2^{(к)} - (x_2^{(к)})^3},$$
$$x_2^{(к+1)} = x_2^{(к)} + \frac{x_2^{(к)}}{\ln x_2^{(к)}} - \frac{x_1^{(к)}}{\ln x_1^{(к)}}.$$

Вывод: данный итерационный метод сходится в ыиде геометрической прогрессии, где знаменатель $q \approx 0{,}815$. Данные вычисления занесём в таблицу 1.

Таблица 1 – Решение системы нелинейных уравнений

k	**0**	**1**	**…**	**8**	**9**
$x_1^{(к)}$	3.80000	3.75155	…	3.77440	x_1=3.77418
$x_2^{(к)}$	2.00000	2.03895	…	2.07732	x_2=2.07712

$k = 9$ –является критерием для окончания счета выполнения при $\varepsilon = 10^{-3}$ и можно положить x_1=3.77418 и x_2=2.07712 с погрешностью ±0,001.

Также для рассмотрения воспользуемся квантовым двумерным ангармоническим осциллятором с оператором гамильтониана. Оператор гамильтониана для двумерного ангармонического осциллятора можно представить в виде:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}x^2 + \hat{p}y^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2} + a(x^4 + y^4) + b(x^6 + y^6) + cxy,$$

где у нас:

m – является массой осциллятора,

ω – является угловой частотой,

и $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

Для определения одно частичного потенциала воспользуемся формулой:

$$V(\zeta) = \frac{m\omega^2}{2}\zeta^2 + a\zeta^4 + b\zeta^6,$$

Исходя из этого, полным потенциалом будет:

$$V(x, y) = V(x) + V(y) + cxy,$$

Для расчётов возьмём m= ω=a=1, b=0,5, c=5 и $\psi_0 = e^{-2x^2}$; $\psi(x, y) = \psi_0(x)\psi_0(y)$, - начальное приближение волновой функции основного состояния гармонического осциллятора.

Оператор гамильтониана будет представлять в матричной форме, чтобы определить собственные значения и собственные вектора, используя методы Данилевского и Крылова. В итоге у нас получиться матрица вида размерностью $[5 \times 5]$:

$$\begin{bmatrix} 2.341797 & 1.577077 & 0 & 0 & 0 \\ 1.577077 & 7.799269 & 3.898666 & 0 & 0 \\ 0 & 3.898666 & 14.921037 & 11.039537 & 0 \\ 0 & 0 & 11.039537 & 79.169258 & 59.757082 \\ 0 & 0 & 0 & 59.757082 & 173.91037 \end{bmatrix}$$

Далее будем находить собственные значения этой матрицы и вписывать полученные данные в таблицу №2. Для обозначения собственных найденных значений введём $\widetilde{\lambda_\iota}$, и $\hat{\lambda}_i$, где $\widetilde{\lambda_\iota}$ – это собственное значение мо методу Данилевского, а $\hat{\lambda}_i$, - по методу Крылова. У каждого собственного числа ставится в соответствие 1 собственный вектор. В таблицу №3 будем вписывать найденные собственные вектора после нормирования. В каждом 3-ем столбце таблиц будем анализировать результаты отклонения друг от друга в рассмотренных методах. Также найдём вектора $\tilde{x}$, $\hat{x}$, которые являются векторами по методу Данилевского и Крылова соответственно.

Таблица 2 - Собственные значения матрицы по методам Данилевского и Крылова

$\boldsymbol{i}$	$\widetilde{\boldsymbol{\lambda_\iota}}$,	$\hat{\boldsymbol{\lambda}}_{\boldsymbol{i}}$	$\lvert\widetilde{\boldsymbol{\lambda_\iota}} - \hat{\boldsymbol{\lambda}}_{\boldsymbol{i}}\rvert$
1	1.802373	1.802380	0.000007
2	6,107164	6,107097	0.000067
3	14,415397	14,415492	0.000095
4	52,898533	52,898411	0,000122
5	202,91838	202,91839	0,00001

Таблица 3 - Собственные нормированные векторы по методам Данилевского и Крылова

$\boldsymbol{\lambda_i}$	$\widetilde{\boldsymbol{x}}$	$\widehat{\boldsymbol{x}}$	$\lvert\widetilde{\boldsymbol{x}} - \widehat{\boldsymbol{x}}\rvert$
λ_1	0,939722	0,939721	0,000001
	-0,321418	-0,321418	0
	0,114269	0,114270	0,000001
	-0,022280	-0,022280	0
	0,007736	0,007736	0
λ_2	-0,335532	-0,335532	0
	-0,801075	-0,801088	0,000013
	0,483430	0,483433	0,000003
	-0,103064	-0,103064	0
	0,036702	0,036703	0,000001
λ_3	0,065892	0,065891	0,000001
	0,504431	0,504444	0,000013
	0,829429	0.829412	0,000017

	-0,216132	-0,216129	0,000003
	0,080977	0,080976	0,000001
λ_4	-0,000688	-0,000686	0,000002
	-0,022042	-0,022008	0.000034
	-0,254270	-0,254268	0,000002
	-0,866938	-0,866941	0,000003
	0,428105	0,428107	0,000002
λ_5	0,0000609	0,0000612	0.000003
	0,000550	0,000531	0,000019
	0,025644	0,025646	0,000002
	0,436552	0,436555	0,000003
	0,899301	0,899309	0,000008

Проанализировав данные в таблице, мы увидим, что полученные вычисления по методам А.М.Данилевского и А.Н. Крылова хорошо согласуются между собой. Также видно, что метод А.М.Данилевского занимает значительно меньше количество арифметических операций для вычисления по сравнению с методом А.Н. Крылова.

Биографический список:

1. Березин И.С. Методы вычислений /И.С. Березин, Н.П. Жидков –М., 2015.- 620 с.
2. Долгополов Д.В. Методы нахождения собственных значений и собственных векторов матриц /Д.В. Долгополов - Санкт-Петербург, 2015 - 220 с.
3. Козин Р.Г. Алгоритмы численных методов линейной алгебры и их программная реализация / Р.Г. Козин. - Москва. - 2012. - 124 с.
4. Михеев С. Е. Многомерная аппроксимация и интерполяция / С.Е. Михеев. - С.-Петерб. - 2012. - 59 с.
5. Михеев С.Е. Численные методы / С.Е. Михеев.- СПб.: СПбГУ. - 2013. - 93 с.
6. Тарасов В.Н, Бахарева Н.Ф. Численные методы. Теория. Алгоритмы. Программы. – Оренбург: ИПК ОГУ, 2008.- Т.19. - №2 – С – 36-43.

7. Тарасов В.Н, Бахарева Н.Ф. Численные методы. Теория. Алгоритмы. Программы. – Оренбург: ИПК ОГУ, 2008.- Т.19. - №2 – С – 36-43.
8. Торшина О.А. О следе дифференциального оператора с потенциалом на проективной плоскости / О.А. Торшина // Челябинский физико-математический журнал. - 2003. - Т. 3. - № 3 (9). - С. 178-191.
9. Торшина О.А. Формула первого регуляризованного следа оператора Лапласа – Бельтрами с негладким потенциалом на проективной плоскости / О.А. Торшина // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Математическая. - 2006. - № 4. - С. 32-40.
10. Торшина О.А. Формула регуляризованного следа дифференциального оператора со сложным вхождением спектрального параметра / О.А. Торшина // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. - 2003. - Т. 8. - № 3. - С. 467-468.

Оригинальность 90%