Problema agli autostati / autovalori

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Voglio utilizzare algoritmi iterativi

Es. per trovare lo stato fondamentale voglio trovare il minimo di

$$E(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle$$

con la condizione $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

introduciamo il moltiplicatore di Lagrange λ

$$E(|\psi\rangle, \lambda) = \langle\psi|H|\psi\rangle - \lambda(\langle\psi|\psi\rangle - 1)$$

al minimo di E

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E}{\partial |\psi\rangle} = 0 \\ \dfrac{\partial E}{\partial \lambda} = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \langle\psi|H - \lambda\langle\psi = 0 \\ \langle\psi|\psi\rangle - 1 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} H|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \\ \langle\psi|\psi\rangle = 1 \end{cases}$$

Ricerca con steepest descent

comincio con $|\psi^{(0)}\rangle$ (indice di iterazione) tale che $\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle$

$|\psi^{0}\rangle$ $\qquad \dfrac{\partial E}{\partial\langle\psi|}$

$$|\tilde{\psi}(\varepsilon)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \varepsilon \frac{\partial E}{\partial\langle\psi}(\langle\psi^{(0)}|, \lambda)$$

scegliamo λ in maniera che

$$\langle\tilde{\psi}(\varepsilon)|\tilde{\psi}(\varepsilon)\rangle = 1 + O(\varepsilon^2)$$

$$\langle\tilde{\psi}(\varepsilon)|\tilde{\psi}(\varepsilon)\rangle = \underbrace{\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle}_{=1} + \varepsilon\langle\psi^{(0)}|\left(H|\psi^{(0)}\rangle - \lambda|\psi^{(0)}\rangle\right) + \varepsilon\left(\lambda\langle\psi^{(0)}| + \langle\psi^{(0)}|H\right)|\psi^{(0)}\rangle + O(\varepsilon^2)$$

$$\overset{!}{=} 1 + 2\varepsilon\underbrace{\left(\langle\psi^{(0)}|H|\psi^{(0)}\rangle - \lambda\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle\right)}_{\text{scelgo } \lambda \text{ in maniera che sia pari a } 0} + O(\varepsilon^2)$$

$$\lambda = \langle\psi^{(0)}|H|\psi^{(0)}\rangle$$

in generale $\lambda = \langle\psi^{(i)}|H|\psi^{(i)}\rangle$

EQUAZIONE DI DIFFUSIONE

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t) \qquad 1-D$$

Nota

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = D\nabla^2\rho(\vec{r},t) \qquad 3-D$$

con $x \in [a,b]$ e $\begin{cases} \rho(a,t) = \rho_a \\ \rho(b,t) = \rho_b \end{cases}$

considero le condizioni iniziali

$$\rho(x,t_0) = \rho_0(x) \qquad \text{fne data}$$

definiamo una griglia equispaziata su x

$$x_1 = a \qquad x_N = b \qquad h = \frac{b-a}{N-1}$$

definiamo una griglia equispaziata su t con intervallo Δt

$$\rho_i^{(n)} = \rho(x_i, t_0 + n\Delta t)$$

Metodo di Eulero esplicito:

$$\rho_i^{(n+1)} = \rho_i^{(n)} + \frac{\partial\rho}{\partial t}(x_i, t_n)\Delta t$$

$$= \rho_i^{(n)} + \frac{\rho_{i+1}^{(n)} - 2\rho_i^{(n)} + \rho_{i-1}^{(n)}}{h^2}\Delta t$$

dove $i = 2, \dots, N-1$

Valore critico: il metodo esplode per

$$\frac{D\Delta t}{h^2} > \frac{1}{2}$$

argomentazione

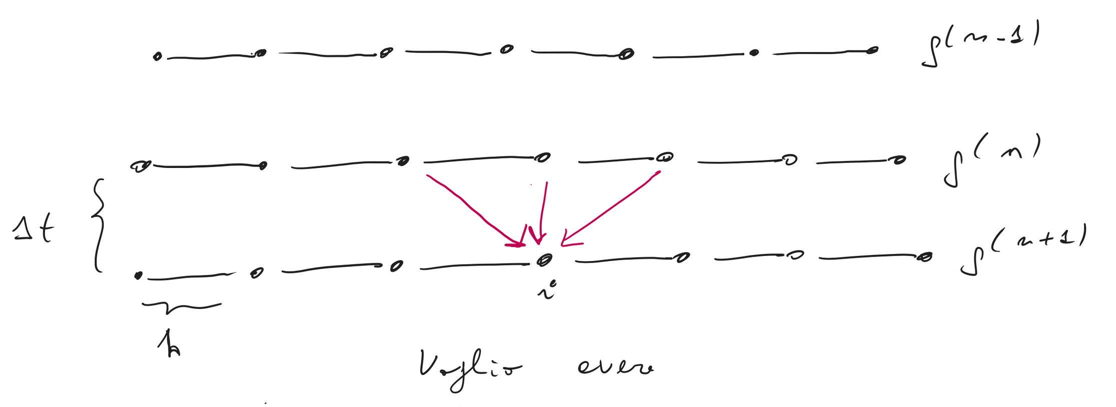
trascuriamo le condizioni al contorno

$$\rho(\vec{r},t) = \int d\vec{r}\,'\, G(\vec{r},\vec{r}\,'; t-t_0)\,\rho(\vec{r}\,',t_0)$$

dimensione

$$G(\vec{r},\vec{r}\,'; t'-t) = \left(\frac{1}{4\pi D(t'-t)}\right)^{N/2} e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}\,'|^2}{4D(t'-t)}}$$

come una funzione gaussiana la cui larghezza è $\sqrt{2D(t'-t)}$



Voglio avere

$$\sqrt{2D\Delta t} < h$$

$$2D\Delta t < h^2$$

$$\frac{D\Delta t}{h^2} < \frac{1}{2}$$

SOLUZIONE: EULERO IMPLICITO

$$\rho_i^{(n+1)} = \rho_i^{(n)} + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x_i, t_{n+1})\Delta t$$

$$= \rho_i^{(n)} + D\,\frac{\rho_{i+1}^{(n+1)} - 2\rho_i^{(n+1)} + \rho_{i-1}^{(n+1)}}{h^2}\Delta t$$

Definiamo

$$\vec{\rho}^{(n)} = \begin{pmatrix} \rho_2^{(n)} \\ \vdots \\ \rho_{N-1}^{(n)} \end{pmatrix}$$

$$M_{ij} = \begin{cases} -\dfrac{2D\Delta t}{h^2} & j = i \\ \dfrac{D\Delta t}{h^2} & j = i+1 \quad o \quad j = i-1 \end{cases}$$

$$\vec{\rho}^{(n+1)} = \vec{\rho}^{(n)} + \hat{M}\cdot\vec{\rho}^{(n+1)}$$

$$(\mathbb{1} - \hat{M})\cdot\vec{\rho}^{(n+1)} = \vec{\rho}^{(n)}$$

$$\vec{\rho}^{(n+1)} = (\mathbb{1} - \hat{M})^{-1}\cdot\vec{\rho}^{(n)}$$