

Расчет собственных значений и собственных функций гамильтониана БКШ при точном сохранении числа частиц

Thursday 3 July 2025 19:00 (20 minutes)

Для определения собственных функций и собственных значений гамильтониана модели БКШ с точным сохранением числа частиц N

$$BCS = \sum_t (\varepsilon_t - \mu) \hat{N}_t - G \sum_{t,p} A_t^\dagger A_p,$$

$$\text{где } t = a_t^\dagger a_t + a_{\bar{t}}^\dagger a_{\bar{t}}, \quad A_t^\dagger = a_t^\dagger a_{\bar{t}}^\dagger, \quad A_p = a_{\bar{p}} a_p,$$

a_t^\dagger (a_t) – фермионные операторы рождения (уничтожения); $t(p)$ – совокупность одночастичных квантовых чисел, состояние \bar{t} сопряжено по времени к состоянию t , ε_t – одночастичные энергии, μ – уровень отсчета энергий, разработан программный пакет, отличающийся: 1) методом построения изоморфизма между однокомпонентными индексами, нумерующими строки и столбцы в диагонализуемых матрицах, и одночастичными состояниями каждого одночастичного уровня, характеризуемого определенным сениорити и количеством частиц на данном уровне; 2) гибкостью метода диагонализации, позволяющего выбирать наиболее быстродействующий метод диагонализации, соответствующий специфическим особенностям задачи. Например, наибольшая эффективность при работе с получаемыми матрицами больших порядков отмечается для метода Ланцоша и его модификаций. Однако, в случаях, когда не выполняются критерии устойчивости метода, либо для матриц сравнительно малых порядков предпочтительным оказывается выбор других методов диагонализации; 3) использованием для матриц наибольших порядков (более $10^4 \times 10^4$) интерактивных подходов к алгоритмам, подразумевающих предварительную факторизацию матриц до применения вычислительных методов.

Для реализации вычислительных методов и повышения производительности в программном комплексе, разработанном на C++, использованы последние версии современных библиотек линейной алгебры (Eigen 3, Armadillo), применены технологии параллельного и распределённого программирования. Произведены программный анализ и оптимизация кода средствами MS Visual Studio и расширений.

В результате существенно повышены скорость расчета собственных функций и собственных состояний рассматриваемого гамильтониана для многоуровневых задач.

Ключевые слова: *Гамильтониан БКШ, точное сохранение числа частиц, метод диагонализации*

Список использованных источников

1. Лунёв А.В., Михайлов В.М., Власников А.К., Изв. РАН. Сер. физ. **79**, 997 (2015).

Primary authors: ВЛАСНИКОВ, Александр (Санкт-Петербургский государственный университет); ЛУНЁВ, Арсений (Санкт-Петербургский государственный университет); МИХАЙЛОВ, Валерий (Санкт-Петербургский государственный университет)

Presenter: ВЛАСНИКОВ, Александр (Санкт-Петербургский государственный университет)

Session Classification: 9. Poster Session

Track Classification: Section 1. Experimental and theoretical studies of nuclei.