

Serie 10

Abgabedatum: 23.5/24.5, in den Übungsgruppen

Koordinatoren: Luc Grosheintz, HG G 46, luc.grosheintz@sam.math.ethz.ch

Webpage: <http://metaphor.ethz.ch/x/2017/fs/401-1662-10L>

1. Potenzmethoden

Im Template `1_power_method.py` ist eine Matrix \mathbf{A} definiert. Verwenden Sie die Potenzmethoden der Vorlesung um den grössten und kleinsten Eigenwert, sowie den Eigenwert welcher am nächsten an 40 liegt zu berechnen.

Hinweis: Falls Sie keinen Zugang zum Template haben, können Sie sich jederzeit selber eine Matrix generieren.

2. Lineare ODEs mit Krylov-Verfahren

Gegeben sei das lineare System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\dot{\underline{y}}(t) = -i\mathbf{A}\underline{y}(t) \quad (1)$$

$$\underline{y}(0) = \underline{y}_0 \quad (2)$$

mit der Hermite-symmetrischen Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{d \times d}$.

a) Zeigen Sie, dass die $\|\cdot\|_2$ -Norm der Lösung durch die Evolution erhalten bleibt:

$$\|\underline{y}(t)\|_2 = \|\underline{y}(0)\|_2. \quad (3)$$

Hierbei ist:

$$\|\underline{u}\|_2^2 = \langle \underline{u}, \underline{u} \rangle = \sum_{j=1}^d \bar{u}_j u_j. \quad (4)$$

b) Verwenden Sie die Diagonalisierung von \mathbf{A} , um eine formale Lösung des Differentialgleichungssystems zu finden.

Hinweis: Siehe Beispiel 4.1.3 im Skript.

c) Verwenden Sie ein Krylov-Verfahren um eine numerische Lösung des Differentialgleichungssystems zu bauen. Suchen Sie dafür eine Lösung:

$$\underline{u}_m(t) \in \mathcal{K}_m(\mathbf{A}, \underline{y}_0) \quad (5)$$

$$\underline{u}_m(0) = \underline{y}_0, \quad (6)$$

so dass das Residuum $\dot{\underline{u}}_m(t) + i\mathbf{A}\underline{u}_m(t)$ orthogonal auf dem Krylov-Raum $\mathcal{K}_m(\mathbf{A}, \underline{y}_0)$ steht.

d) Wir wollen nun unsere Methoden für die Matrizen \mathbf{A}

1. `sqrt`
2. `minij`
3. `dvr`

welche im Template `2_krylov_ode.py` implementiert sind, anwenden. Die Lösung soll mit

$$\underline{y}_0 = \frac{1}{\sqrt{d}}[1, 1, \dots, 1]^T \quad (7)$$

bis zur Zeit $t = 10^{-2}$ numerisch berechnet werden. Für das Krylov-Verfahren verwenden Sie sowohl das *Arnoldi*- als auch das *Lanczos*-Verfahren. Benutzen Sie Als Referenzlösung das Ergebnis welches `expm` aus `scipy.linalg` liefert. Geben Sie die Rechenzeiten und die Fehler bezüglich der Referenzlösung aus. Welchen Einfluss hat der Parameter m (Dimension des Krylov-Raums) auf die Lösung?

Siehe nächstes Blatt!

3. Exponentielles Euler-Verfahren (Prüfungsaufgabe FS14)

Betrachten Sie das *exponentielle Euler-Verfahren* mit konstanter Schrittweite:

$$\underline{y}_{k+1} = \underline{y}_k + h\varphi(h\mathbf{J}_f)\underline{f}(\underline{y}_k), \quad k = 0, \dots, N \quad (8)$$

wobei:

$$\mathbf{J}_f := Df(\underline{y}_k), \quad \varphi(z) = \frac{e^z - 1}{z}$$

- a) Leiten Sie die Stabilitätsfunktion $S(z)$ von (8) her.
- b) Schreiben Sie eine Python-Funktion `expEV` die das nichtlineare Anfangswertproblem

$$\underline{\dot{y}} = \begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{y_1^2}{y_2} + y_2 \log(y_2) \\ -y_1 \end{bmatrix}, \quad \underline{y}(0) = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

mit dem exponentiellen Eulerverfahren (8) mit konstanter Schrittweite löst.

Hinweis: Verwenden Sie das Template `3_exp_euler.py`.

Hinweis: Die Aufgabe wird viel leichter wenn Sie beachten, dass $Df \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ klein ist. Sie können also hier einfach `expm` verwenden.

- c) Bestimmen Sie empirisch die Konvergenzordnung des Verfahrens. Betrachten Sie das Zeitintervall $[0, 6]$ und berechnen Sie den Fehler bezüglich der exakten Lösung:

$$\underline{y}(t) = \begin{bmatrix} -\cos(t) \exp(\sin(t)) \\ \exp(\sin(t)) \end{bmatrix}$$

für verschiedene Anzahl von Zeitschritten $N = 24, 48, 96, 192, 384$.

Bitte wenden!

4. Kernaufgabe: Stationäre Zustände der Schrödinger Gleichung

Modellierung der Physik

Wir betrachten die zeitunabhängige oder stationäre Schrödingergleichung:

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi$$

wobei $\Psi(\underline{x})$ die Wellenfunktion, E die Energie und:

$$\mathcal{H} := -\frac{1}{2}\Delta + V(\underline{x})$$

der Hamilton Operator ist. Wir wollen nun für ein gegebenes Potential $V(\underline{x})$ den Grundzustand $\Psi_0(\underline{x})$ sowie ein paar weitere Zustände $\Psi_n(\underline{x})$ niedriger Energie finden. Man diskretisiert die Gleichung indem man auf dem Intervall $[a, b]$ genau N Punkte:

$$a = x_0 < \dots < x_i < \dots < x_{N-1} = b$$

gleichmässig verteilt und für den Laplace Operator Δ eine Approximation mit finiten Differenzen verwendet. Dann kann die Gleichung als lineares Eigenwertproblem:

$$\mathbf{H}\underline{\psi} = E\underline{\psi}$$

geschrieben werden wobei die Wellenfunktion zu einem Vektor von Punktauswertungen:

$$\underline{\psi} = [\dots, \psi_i, \dots]^T = [\dots, \psi(x_i), \dots]^T \in \mathbb{R}^N$$

und der diskretisierte Hamilton Operator $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ zu einer Matrix wird.

Aufgabenstellung

Betrachten Sie als erstes, simples Beispiel den *harmonischen Oszillator* gegeben durch das Potential $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ auf dem Intervall $x \in [-10, 10]$.

- a) Leiten Sie die Matrix \mathbf{H} für diesen Fall explizit her und formulieren Sie danach das diskrete Eigenwertproblem. Benutzen Sie zentrale finite Differenzen im Innern des Intervalls sowie die passende asymmetrische Form am Rande.

Hinweis: Finite Differenzen:

- Vorwärts: $f''(x_i) \approx \frac{f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}))}{h^2} + \mathcal{O}(h)$
- Zentral: $f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$
- Rückwärts: $f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i-2}) - 2f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^2} + \mathcal{O}(h)$

Bemerkung: Verwendet man die Randbedingung $\Psi(\text{rand}) = 0$, ist \mathbf{H} symmetrisch.

- b) Berechnen Sie die Eigenvektoren $\underline{\psi}_n$ und Eigenwerte E_n für $N = 32, 64, \dots, 1024$ Punkte im Intervall $[-10, 10]$ mit `eig`.

Hinweis: Sortieren Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren. Beispielsweise mit einer geschickten Anwendung von `argsort`.

- c) Plotten Sie, für alle N , die ersten $0 \leq n < 32$ Energien $E_n^{(N)}$ gegen n . Berechnen und Plotten Sie ebenso den Fehler $|E_n^{(N)} - E_n^{\text{exact}}|$ der gefundenen Energien.

Siehe nächstes Blatt!

Hinweis: Die exakten Energien sind: $E_n^{\text{exact}} = n + \frac{1}{2}$.

- d) Sei $N = 1024$ fix. Plotten Sie die ersten $0 \leq n \leq 6$ Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ gegen x . Berechnen und Plotten Sie den Fehler $\|\psi_n^N - \psi_n^{\text{exact}}\|_2$.

Hinweis: Die exakte Lösung ist: $\psi_n^{\text{exact}}(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-\frac{1}{2}x^2}$ wobei $H_n(x)$ das (physicists') Hermite Polynom ist.

Als Nächstes betrachten wir das *Morse Potential*:

$$V(x) := V_0 (e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x})$$

mit den Parametern $V_0 = 16$ und $\beta = 1$. Dieses wichtige Potential ist auf der einen Seite asymptotisch flach und ermöglicht so die Simulation der Aufspaltung zweiatomiger Moleküle.

- e) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren mittels `eig`. Verwenden Sie $N = 256$ Punkte im Intervall $[-2, 8]$. Plotten Sie die ersten vier Eigenfunktionen $\psi_0(x)$ bis $\psi_3(x)$. (Achtung, $\psi_{n \geq 6}(x)$ existieren aus quantenmechanischen Gründen nicht.)
- f) Implementieren Sie ein Arnoldi Verfahren um die kleinsten Eigenwerte einer Matrix zu approximieren. Testen Sie das Verfahren am Morse Potential mit einem Krylovraum der Grösse $k = 150$ Iterationen.

Bemerkung: Für eine echte Anwendung soll man `eigs`, `eigsh` verwenden. Dies ist der `scipy` Wrapper um die `Arpack`^a Library, die sehr effiziente und robuste Krylov Verfahren implementiert. Für die Beispiele hier sind weniger als 20 Iterationen notwendig.

Zum Schluss wollen wir noch ein zweidimensionales Problem berechnen. Gegeben sei das *Henon-Heiles* Potential:

$$V(x, y) := \frac{a}{2}(x^2 + y^2) + b \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right)$$

mit $a = 2.0$ und $b = 0.4$. Wir verwenden ein zweidimensionales Gitter auf $[-3, 3] \times [-3, 3]$ mit je $N = 32$ Punkten in jede Richtung. Ordnen Sie die Gitterpunkte $\underline{x}_{i,j} := (x_i, y_j)$ in einen Spaltenvektor der Länge N^2 . Die Wellenfunktion ist dann wie folgt diskretisiert:

$$\begin{aligned} \underline{\psi} &= [\dots, \psi_{i,j}, \dots]^T \\ &= [\psi(x_0, y_0), \psi(x_1, y_0), \dots, \psi(x_{N-1}, y_0), \psi(x_0, y_1), \dots, \psi(x_{N-1}, y_1), \dots, \psi(x_{N-1}, y_{N-1})]^T \end{aligned}$$

Das benötigte Gitter kann mit `meshgrid` erzeugt werden.

- g) Diskretisieren Sie den Hamilton Operator \mathcal{H} und plotten Sie die linke obere 50×50 Ecke von \mathbf{H} mit Hilfe von `matshow`.

Hinweis: Es gilt $\Delta f = f_{xx} + f_{yy}$ und somit:

$$\Delta f(\underline{x}_{i,j}) \approx \frac{f(\underline{x}_{i-1,j}) - 2f(\underline{x}_{i,j}) + f(\underline{x}_{i+1,j}))}{h^2} + \frac{f(\underline{x}_{i,j-1}) - 2f(\underline{x}_{i,j}) + f(\underline{x}_{i,j+1}))}{h^2}$$

- h) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren mittels `eig` und plotten Sie die ersten sechs Eigenfunktionen $\psi_0(x, y)$ bis $\psi_5(x, y)$.^b

i) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren mit dem Arnoldi Verfahren und einem Krylovraum der Grösse $k = 220$ Iterationen. Plotten Sie wiederum die ersten sechs Eigenfunktionen $\psi_0(x, y)$ bis $\psi_5(x, y)$.

^a<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>

^bEin Plot der Eigenfunktionen, berechnet mit einer wesentlich genaueren Methode, ist hier zu finden: http://raoulbq.github.io/WaveBlocksND/_images/henon_heiles_eigenstates.png
Die Lösungen dieser Aufgabe sollten ähnlich aber aufgrund anderer Parameter nicht identisch aussehen.

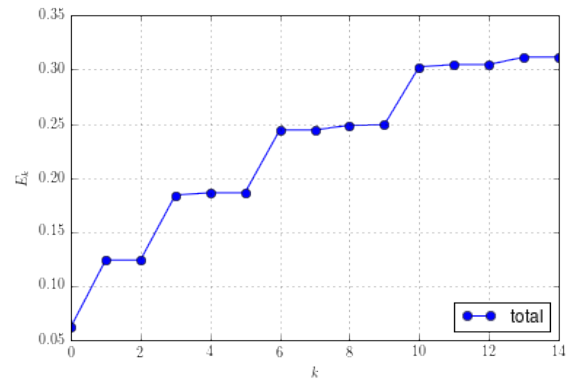


Abbildung 1 – Energielevels des Henon-Heiles Potential.

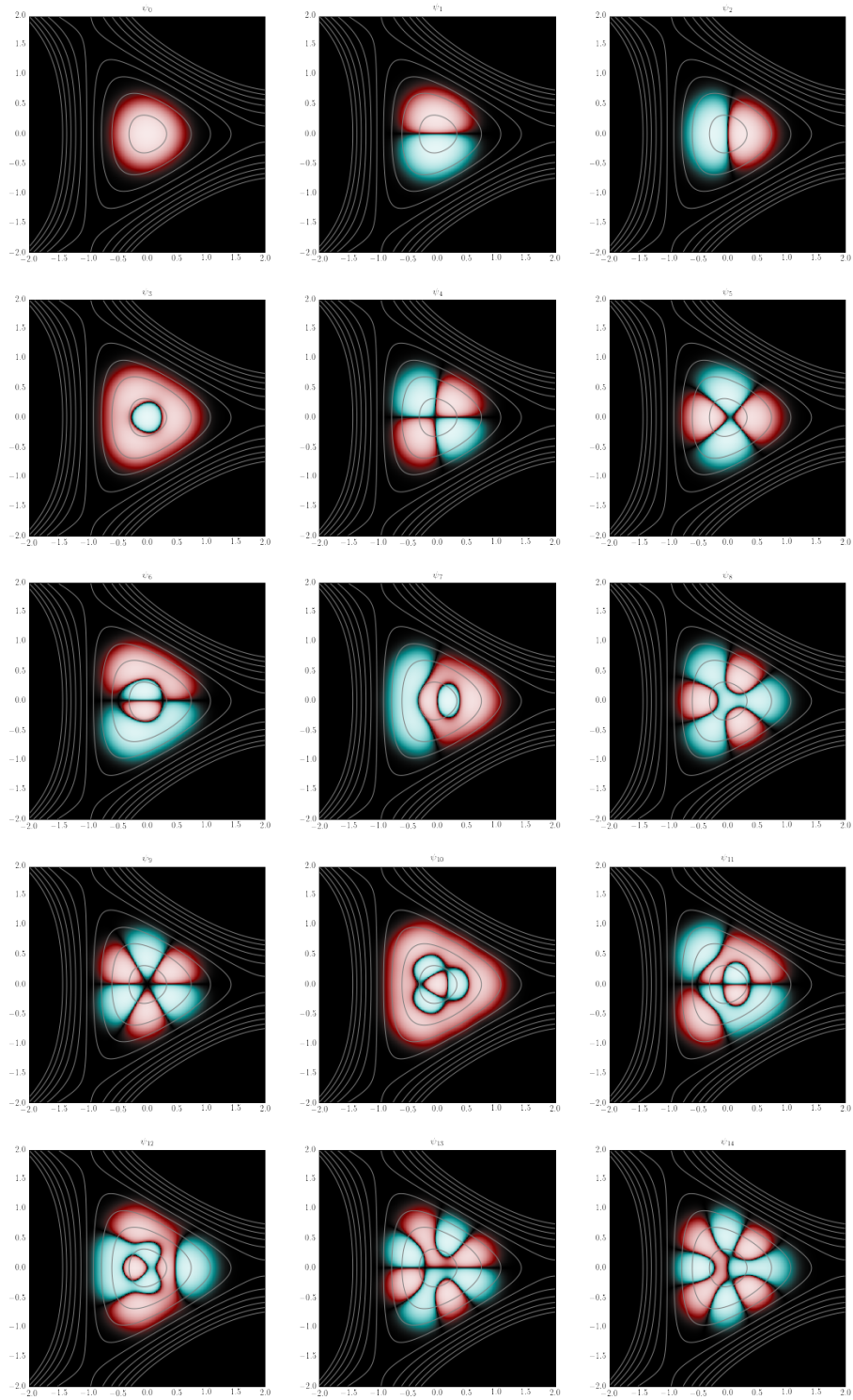


Abbildung 2 – Eigenzustände des Henon-Heiles Potential.