

Serie 12

Abgabedatum: Fr. 26.05, in den Übungsgruppen

Forum: <https://forum.math.ethz.ch/c/spring-23/numerische-methoden-phys/>

Webpage: <https://metaphor.ethz.ch/x/2023/fs/401-2664-00L/>

1. Potenzmethoden

Im Template `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.

2. Vibration einer Saite

Die Vibration einer Saite, die an beiden Enden fixiert ist und unter gleichmässiger Spannung T steht, wird durch folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \frac{T}{m(x)} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2},$$

wobei $m(x)$ die Masse ist. Die Methode der Separation der Variablen liefert:

$$\frac{T}{m(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \omega^2 \psi(x) = 0,$$

wobei ω durch die Randbedingungen gegeben ist. Für die Approximation der Ableitungen wollen wir finite Differenzen verwenden. Wir unterteilen das Intervall in $N = 513$ Stücke der Länge h indem wir $N + 1$ Punkte gleichmässig verteilen:

$$0 = x_0 < \dots < x_i < \dots < x_N = L$$

Dann approximieren wir die exakte Lösung in diesen Punkten mit $\psi_i \approx \psi(x_i)$.

Die Saite sei an den beiden Endpunkten $x = 0$ und $x = L$ fest eingespannt. Die Spannung T und die Masse $m(x)$ sind hier fix auf 1 gesetzt.

a) Stellen Sie die Matrix \mathbf{A} *effizient* auf und lösen Sie das Eigenwertproblem:

$$\mathbf{A} \underline{\nu}_n = \lambda_n \underline{\nu}_n$$

per `eigh` aus `scipy.linalg`. Berechnen Sie sowohl die Eigenwerte λ_n als auch die Eigenvektoren $\underline{\nu}_n$.

b) Warum verwenden wir besser `eigh` als `eig`? Beide Funktionen sind in `scipy.linalg` zu finden. Welche Funktionen aus diesem Modul könnten hier auch noch nützlich sein?

Bitte wenden!

- c) Stellen Sie \mathbf{A} *effizient* als dünnbesetzte Matrix auf.
Hinweis: Nutzen Sie dazu die Funktion `diags` aus `scipy.sparse`.
- d) Berechnen Sie die 50 kleinsten Eigenwerte λ_n sowie die dazugehörigen Eigenvektoren $\underline{\nu}_n$ von \mathbf{A} . Benutzen Sie dafür die Funktion `eighs` aus `scipy.sparse.linalg`
- e) Plotten Sie die ersten 10 Eigenschwingungen $\psi_n(x)$.
- f) Plotten Sie die Energien E_n der ersten 20 Eigenschwingungen gegen n .
- g) Wiederholen Sie die Aufgabe (ohne den Teil für dünnbesetzte Matrizen) für eine inhomogene Massenverteilung:

$$m(x) := \frac{1}{2} (m_1(L - x) + m_2x)$$

mit $m_1 = 1 - \delta m$, $m_2 = 1 + \delta m$ und $\delta m = 0.99$. Welche Routinen zur Berechnung der Eigenwerte dürfen wir in diesem Fall verwenden?

3. Stationäre Zustände der Schrödingergleichung

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.

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

Siehe nächstes Blatt!

- 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.

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 Krylov-Raum der Grösse $k = 150$ Iterationen.

Bemerkung: Für eine echte Anwendung soll man `eigs`, `eigsh` verwenden. Dies ist der `scipy` Wrapper um die `Arpack`¹ 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.

¹<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>

- 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 $\psi_5(x, y)$.²
- i) Berechnen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren mit dem Arnoldi-Verfahren und einem Krylov-Raum der Grösse $k = 220$ Iterationen. Plotten Sie wiederum die ersten sechs Eigenfunktionen $\psi_0(x, y)$ bis $\psi_5(x, y)$.

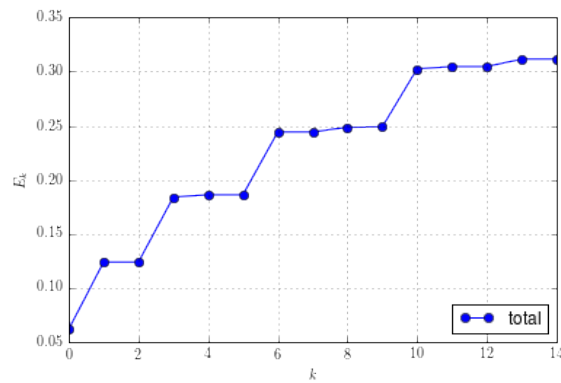


Abbildung 1: Energielevels des Henon–Heiles-Potential.

²Ein 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.

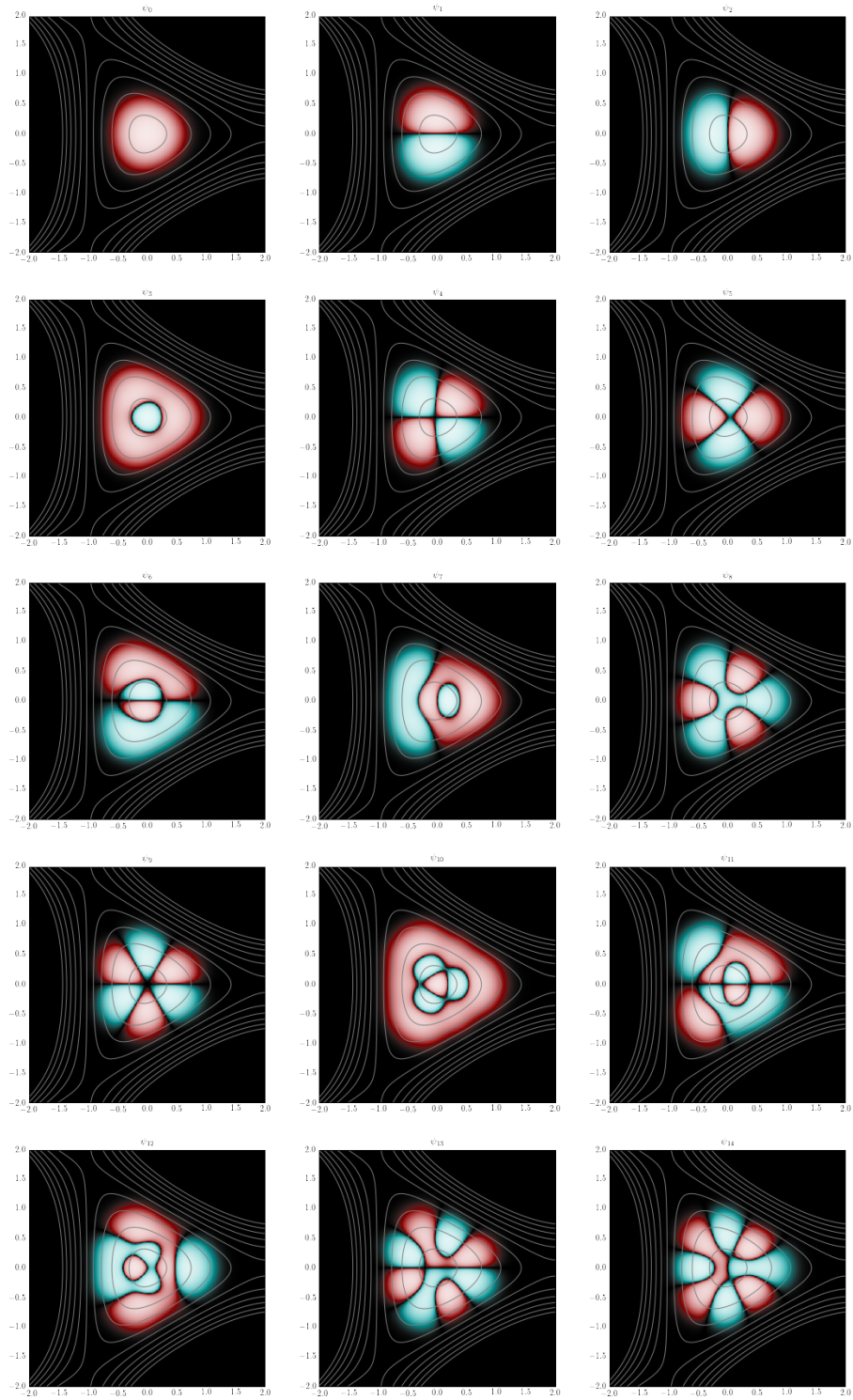


Abbildung 2: Eigenzustände des Henon-Heiles-Potential.