D-MATH
Dr. Vasile Gradinaru
Alexander Dabrowski

Numerische Methoden

FS 2016

Serie 9

Best Before: 24.5/25.5, in den Übungsgruppen (2 wochen)
Koordinatoren: Alexander Dabrowski, HG G 52.1, `alexander.dabrowski@sam.math.ethz.ch`
Webpage: `http://www.math.ethz.ch/education/bachelor/lectures/fs2016/other/nm_pc`

1. *Vibration einer Saite*

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

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \frac{T}{m(x)} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \,, \tag{1}$$

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

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

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:

$$0 = x_0 < \ldots < x_i < \ldots < x_N = L \tag{3}$$

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:

$$\mathbf{A}\underline{\nu_n} = \lambda_n \underline{\nu_n} \tag{4}$$

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?

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 `eigsh` aus `scipy.sparse.linalg`

Bitte wenden!

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:

$$m(x) := \frac{1}{2}\left(m_1(L-x) + m_2 x\right) \tag{5}$$

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?

2. *Lineare ODEs mit Krylov-Verfahren*

Gegeben sei das lineare System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\dot{\underline{y}}(t) = -i\mathbf{A}\underline{y}(t) \tag{6}$$

$$\underline{y}(0) = \underline{y}_0 \tag{7}$$

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:

$$\|\underline{y}(t)\|_2 = \|\underline{y}(0)\|_2\,. \tag{8}$$

Hierbei ist:

$$\|\underline{u}\|_2^2 = \langle \underline{u}, \underline{u}\rangle = \sum_{j=1}^{d} \bar{u}_j u_j\,. \tag{9}$$

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:

$$\underline{u}_m(t) \in \mathcal{K}_m(\mathbf{A}, \underline{y}_0) \tag{10}$$

$$\underline{u}_m(0) = \underline{y}_0\,, \tag{11}$$

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_Template.py` implementiert sind, anwenden. Die Lösung soll mit

$$\underline{y}_0 = \frac{1}{\sqrt{d}}[1, 1, \ldots, 1]^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

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. 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:

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

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:

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

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 $N = 32, 64, \ldots, 1024$ 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.

Bitte wenden!

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*:

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

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:

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

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]

Siehe nächstes Blatt!

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/

[b] Die Lösungen dieser Aufgabe sollten ähnlich aber aufgrund anderer Parameter nicht identisch aussehen.

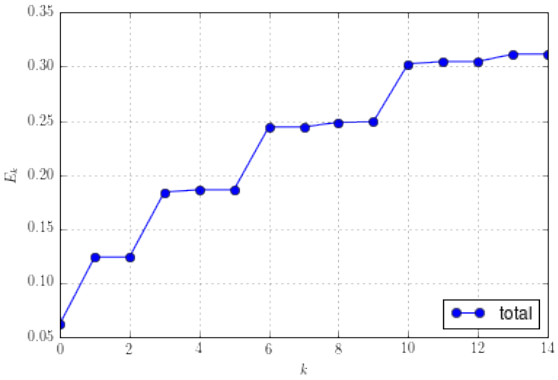

Abbildung 1: Energielevels des Henon-Heiles Potential.

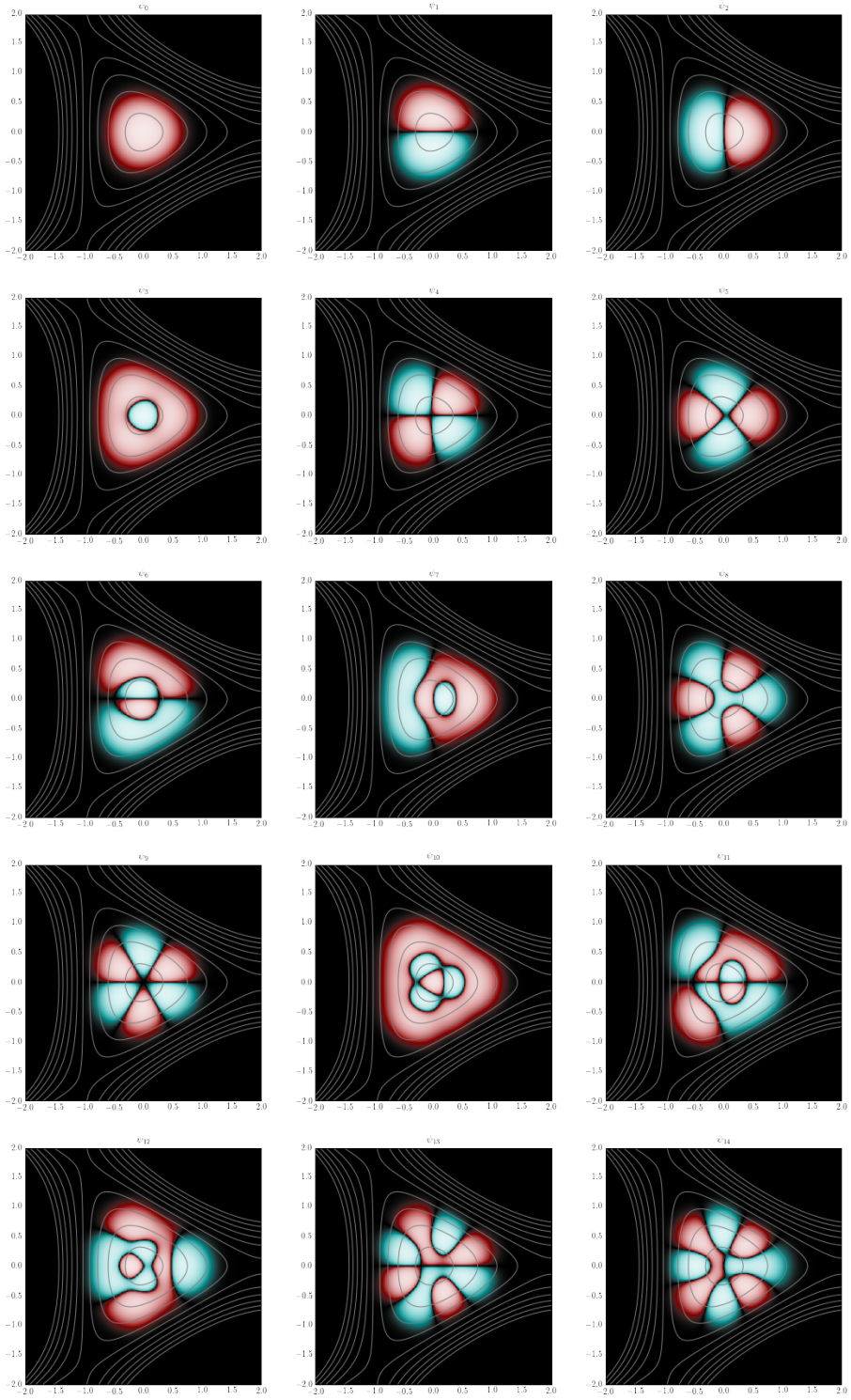

Abbildung 2: Eigenzustände des Henon-Heiles Potential.