

## Serie 12

**Abgabedatum:** Di. 01.06. / Mi. 02.06, in den Übungsgruppen

**Koordinatoren:** Bei Fragen zu den Übungen kontaktieren Sie bitte

- Francesca Bartolucci `francesca.bartolucci@sam.math.ethz.ch`
- Luc Grosheintz `luc.grosheintz@sam.math.ethz.ch`

**Webpage:** <http://metaphor.ethz.ch/x/2021/fs/401-1662-10L>

### 1. Kernaufgabe: Lineare ODEs mit Krylov-Verfahren

#### Aufgabenstellung

Gegeben sei das lineare System gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned}\dot{\underline{y}}(t) &= -i\mathbf{A}\underline{y}(t) \\ \underline{y}(0) &= \underline{y}_0\end{aligned}$$

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:

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

Hierbei ist:

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

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 finden. Suchen Sie dafür eine Lösung:

$$\begin{aligned}\underline{u}_m(t) &\in \mathcal{K}_m(\mathbf{A}, \underline{y}_0) \\ \underline{u}_m(0) &= \underline{y}_0,\end{aligned}$$

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`

**Bitte wenden!**

### 3. dvr

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

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

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?

## 2. Kernaufgabe: Exponentielles Euler-Verfahren (Prüfungsaufgabe FS14)

### Problemstellung

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

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

wobei:

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

### Aufgabenstellung

- a) Leiten Sie die Stabilitätsfunktion  $S(z)$  von (1) her.
- b) Schreiben Sie eine Python-Funktion `expEV` die das nichtlineare Anfangswertproblem

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

mit dem exponentiellen Eulerverfahren (1) mit konstanter Schrittweite löst.

*Hinweis:* Verwenden Sie das Template `exp_euler.py`.

*Hinweis:* Die Aufgabe wird viel leichter wenn Sie beachten, dass  $D\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$  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  $N = 24, 48, 96, 192, 384$ .

## 3. Kernaufgabe: Stationäre Zustände der Schrödingergleichung

Siehe nächstes Blatt!

## 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  $\Delta$  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.

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

**Bitte wenden!**

- 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`<sup>a</sup> 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:

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

Das benötigte Gitter kann mit `meshgrid` erzeugt werden.

- g) Diskretisieren Sie den Hamilton-Operator  $\mathcal{H}$  und plotten Sie die linke obere  $50 \times 50$  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  $\psi_5(x, y)$ .
- 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  $\psi_5(x, y)$ .

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

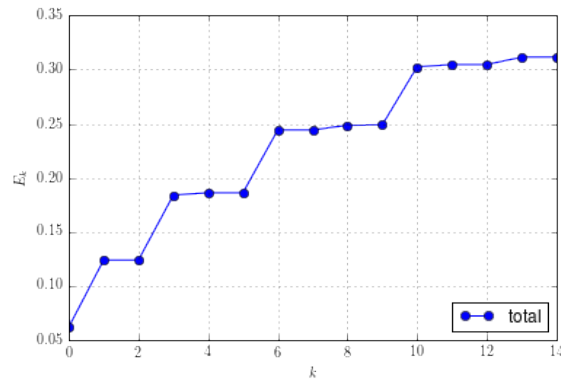


Abbildung 1: Energielevels des Henon–Heiles-Potential.

#### 4. 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  $\omega$  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  $\lambda_n$  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  $\lambda_n$  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:

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

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?

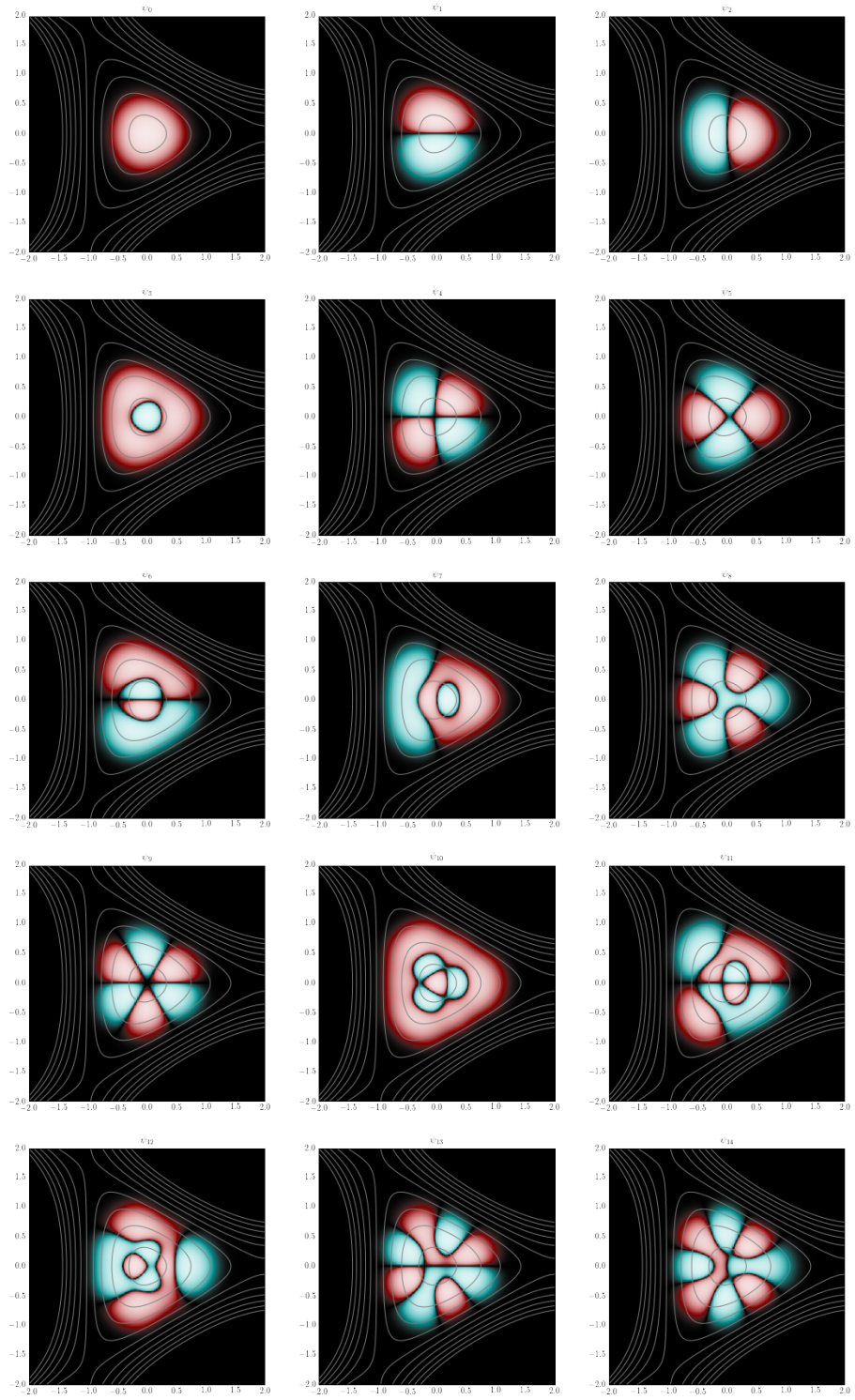


Abbildung 2: Eigenzustände des Henon-Heiles-Potential.