
PROSJEKT 2

Å løse Schrödingers likning for étt og to elektroner

Jon Vegard Sparre
jonvsp@uio.no

Dato: 20. oktober 2015

Sammendrag

I dette prosjektet ser vi på numerisk integrasjon på tre (fire) måter. Vi starter med Gaussisk kvadratur (GK) i form av Gauss-Legendre og Gauss-Laguerre kombinert med Gauss-Legendre, deretter ser vi på rett fram-Monte Carlo og en litt forbedra Monte Carlo-metode.

Lenke til Jon Vegards GitHub-domene: <https://github.com/jonvegards/FYS4150>

Introduksjon

Numerisk integrasjon kan gjøres på mange måter, vi ser her nærmere på metoder som baserer seg på Gaussisk kvadratur og Monte Carlo-teknikker. Førstnevnte er den eldste metoden og ble utviklet før datamaskiner fantes, mens sistnevnte er en litt nyere metode som kom i første halvdel av 1900-tallet. Integralet som vi skal teste disse metodene på er,

$$\left\langle \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (1)$$

Dette integralet har en analytisk løsning som er $5\pi^2/16^2$, så vi kan lett sjekke om de numeriske resultatene stemmer.

Gaussisk kvadratur er en integrasjonsmetode som baserer seg på å summere opp funksjonsverdier ganget med en vektfunksjon som vekter leddene i summen forskjellig. De forskjellige vektene blir bestemt av ortogonale polynomer som Legendre- eller Laguerre-polynomer. Vi ser nærmere på utledninga av dette i Teori-delen.

Monte Carlo-metoder baserer også seg på summasjon av funksjonsverdier.

Teori

For å skjønne hvordan integrasjonsmetodene virker så kan det lønne seg å se litt på utledninga av de. Som nevnt i introduksjonen så baserer GK seg på summasjon av funksjonsverdier som er vektet forskjellig. I metoder som Simpsons metode så vektet alle integrasjonspunkt likt, og det er ikke alltid like fornuftig. Hvis integranden

vår ikke varierer mye over et større intervall, så vil metoder som den ovennevnte konvergere sakte og sørge for at vi bruker unødig mye regnekraft.

Vi kan derfor introdusere GK som kort og godt skrives,

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i). \quad (2)$$

Hvor vi da har ω_i som vektene og x_i er integrasjonspunktene. Det er flere måter å velge vektene på, i dette prosjektet ser vi først på Gauss-Legendre. Den bruker ortogonale polynomer i intervallet $x \in [-1, 1]$ med vektfunksjonen $W(x) = 1$. Men for å komme dit må vi først se litt på hvilken rolle vektfunksjonen har. Det viser seg at et integrand som ikke er glatt i integrasjonsintervallet kan gjøres glatt ved å dra ut en vektfunksjon fra den, vi får,

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b W(x)g(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i g(x_i). \quad (3)$$

Denne vektfunksjonen må være positiv i hele integrasjonsintervallet slik at $\int_a^b |x|^n W(x) dx$ er integrerbar. Likn. (??) kalles en GK hvis den kan integrere alle polynomer p eksakt,

$$I = \int_a^b W(x)p(x) dx = \sum_{i=1}^N \omega_i p(x_i).$$

Vi får av dette $2N$ likninger, N for integreringspunktene og N for vektene, dette impliserer at vi kan tilnærme integranden vår $f(x) \approx P_{2N-1}(x)$, en dobling fra metoder som for eksempel Simpsons metode.

Metode

Resultat

Numerisk stabilitet og presisjon

Konklusjon