

FYS3150 Computational Physics 2014

Oblig 2

Løysning av Schrödinger likninga for to elektron i ein tredimensjonal oscillator brønn.

Øyvind Sigmundson Schøyen

26. september 2014

Sammendrag

Skriv eit samandrag av prosjektet her oppe.
<https://github.com/Schoyen/FYS3150/tree/master/Oblig2>

Innhold

1 Introduksjon

I dette prosjektet er me interesserte i å løyse Schrödinger likninga for to elektron. Likninga er skriva om slik at me kan jobbe med eit ein-lekam problem istadenfor to. Me nyttar lineær algebra for å løyse differensiallikningane som eit sett med lineær likningar. Måten me gjer dette på er ved Jacobirotasjon for å finne eigenvektorar og eigenverdiar. Til slutt vil me plotte bølgefunksjonen for grunntilstanden til elektronane ved hjelp av eigenvektorane og eigenverdiane.

2 Jacobirotasjon

For å løyse eigenverdi- og eigenvektorproblem vil me nytte Jacobirotasjon. Dette er ein algoritme som, etter ein rekke similaritetsformasjonar, vil gjere alle ikkje-diagonale matriseelement til null. Denne algoritmen er likevel ikkje ein veldig effektiv algoritme då me ved ein rotasjon kan kome i skade for å gjere eit element som tidlegare var null til å bli ikkje-null. Numerisk kan det og ta lang tid før elementa vert null. Me vil difor heile tida teste verdiane mot ein toleranse.

2.1 Algoritma

Ein similaritetstransformasjon er gitt ved

$$B = S^T A S$$

kor S er ein ortogonal matrise der $SS^T = SS^{-1} = I$. Matrisa S transformerer A ein vinkel θ i planet medan S^T tek ho tilbake. Me vil då velje θ slik at alle ikkje-diagonale element vert null. Når me gjer dette numerisk må me gjere ein rekke similaritetstransformasjonar for å oppnå dette. Då har me

$$B = S_n^T \dots S_1^T A S_1 \dots S_n.$$

Kvar matrise S og S^T er identitetsmatrisa med unntak av elementa $s_{kk} = s_{ll} = \cos \theta$, $s_{kl} = -s_{lk} = -\sin \theta$ og $s_{ii} = 1$ for $i \neq k$ og $i \neq l$. Produktet $B = S^T A S$ kan då skrivast som

$$\begin{aligned} b_{ii} &= a_{ii}, & i \neq k, i \neq l \\ b_{ik} &= a_{ik} \cos \theta - a_{il} \sin \theta, & i \neq k, i \neq l \\ b_{il} &= a_{il} \cos \theta + a_{ik} \sin \theta, & i \neq k, i \neq l \\ b_{kk} &= a_{kk} \cos^2 \theta - 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{ll} \sin^2 \theta \\ b_{ll} &= a_{ll} \cos^2 \theta + 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{kk} \sin^2 \theta \\ b_{kl} &= (a_{kk} - a_{ll}) \cos \theta \sin \theta + a_{kl}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta). \end{aligned}$$

Me vil no velje θ slik at alle ikkje-diagonale element b_{kl} i praksis vert null. For kvar iterasjon vil me då teste om summen av alle dei ikkje-diagonale elementa er mindre enn ein toleranse ϵ . Me vil derimot ikkje gjer dette då det er ein tidkrevande prosess. Erstatninga vert då å sjå om det største elementet blant dei ikkje-diagonale elementa er mindre enn ϵ . Dette vil då vere

$$|a_{kl}| = \max_{i \neq j} |a_{ij}|.$$

Me krever at $b_{kl} = b_{lk} = 0$. Det gjer oss likninga

$$a_{kl}(c^2 - s^2) + (a_{kk} - a_{ll})cs = b_{kl} = 0. \quad (1)$$

Me definerer no

$$\tau = \frac{a_{ll} - a_{kk}}{2a_{kl}} \quad \Rightarrow \quad a_{ll} - a_{kk} = 2\tau a_{kl}.$$

Setter dette inn i (1) og får

$$\begin{aligned} a_{kl}c^2 - a_{kl}s^2 - 2\tau a_{kl}cs &= 0, \\ \Rightarrow \quad a_{kl} - a_{kl}\frac{s^2}{c^2} - 2\tau a_{kl}\frac{s}{c} &= 0. \end{aligned}$$

Siden $c = \cos \theta$ og $s = \sin \theta$ vil me få

$$\begin{aligned} a_{kl} - a_{kl} \tan^2 \theta - 2\tau a_{kl} \tan \theta &= 0, \\ \Rightarrow \quad 1 - t^2 - 2\tau t &= 0, \\ \Rightarrow \quad t^2 + 2\tau t - 1 &= 0, \end{aligned}$$

kor $t = \tan \theta$. Me vil då få

$$\begin{aligned} t &= \frac{-2\tau \pm \sqrt{4\tau^2 - 4(-1)}}{2} \\ &= -\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}. \end{aligned}$$

For å unngå avrundingsfeil ved $\tau \gg 0$ gonger me andregradslikninga med den konjugerte. Det vil gje oss

$$\begin{aligned} t &= \left(-\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}\right) \left(\frac{-\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}}{-\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}}\right) \\ &= \frac{-\tau^2 + (1 + \tau^2)}{\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}} = \frac{1}{\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}}, \end{aligned}$$

som gjer oss

$$t = \frac{1}{\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}} \quad \vee \quad t = \frac{-1}{-\tau + \sqrt{1 + \tau^2}}.$$

Me vil no velje den minste av røttene t slik at c og s henholdsvis går mot ein og null ved

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2}}, \quad s = tc.$$

Då vil me kunne begrense vinkelen $\theta \leq \frac{\pi}{4}$ slik at differansen mellom matrisa B og A vert så liten som mogleg ved formelen

$$|B - A|_F^2 = 4 \underbrace{(1 - c)}_{=0 \text{ for } c \rightarrow 1} \sum_{i=1, i \neq k, l}^n (a_{ik}^2 + a_{il}^2) + \frac{2a_{kl}^2}{c^2}.$$

Me vil fortsette desse operasjonane heilt til $\max(a_{ij})^2 \leq \epsilon$ for $i \neq j$.

2.2 Implementering

Algoritma vert implementert i ein klasse med tre metodar som løyser eigenverdi og egenvektor problemet.

3 Resultat

Denne seksjonen vil bli delt opp i fire deler. Me vil diskutere metoden i seg sjølv kor me ser på køyretid og stabilitet. Me vil sjå på energinivåa til elektronane med, og uten, Coulomb interaksjon for forskjellige ω_r og ρ_{\max} . Eg har valt å gjere dette ved Jacobi. Dette krev at me normaliserer eigenvektorane for å få riktige verdiar. Det vil bli forklart i meir nøyaktighet. Til slutt har eg lagt ved ein feilanalyse på eigenverdiane som funksjon av n_{step} .

3.1 Jacobi

Jacobirotasjon er ein reknetung algoritme som har ein $\mathcal{O}(n^3)$.