

Appunti per tesi di Laurea

Stefano Romboni

13 settembre 2022

Indice

1	Introduzione	1
2	Differenze centrali semplici	2
2.1	Approssimazione a 3 punti	2
2.2	Errori nell'approssimazione di differenze finite	3
3	Estrapolazione di Richardson	3
4	Buca infinita	3
4.1	SFD a 3pt	4
4.2	Estrapolazione Richardson	4
5	Oscillatore armonico	6
5.1	Scelta del dominio	6
5.2	SFD a 3pt	7
5.3	Estrapolazione Richardson	7
6	Oscillatore anarmonico	9
6.1	SFD a 3pt	9
6.2	Estrapolazione Richardson	10
6.3	Calcolo nella base degli operatori di salita e discesa	11
6.4	Confronto con teoria delle perturbazioni	12

1 Introduzione

Ci sono varie tipologie di metodi numerici per risolvere problemi di Sturm-Liouville con condizioni al bordo date. La più generica equazione differenziale di secondo grado è data da:

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u = \lambda w(x)u$$

definita su un intervallo finito o infinito $a < x < b$ con condizioni al bordo appropriate. Nel nostro caso ci limitiamo ai casi in cui $p(x) = w(x) = 1$:

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} + q(x)u = \lambda u.$$

Useremo il calcolo numerico per trovare i primi livelli energetici e autostati dell'hamiltoniana di vari sistemi, alcuni risolvibili analiticamente e utili per capire se il metodo usato effettivamente funziona, altri invece non risolvibili analiticamente per cui risulta fondamentale avere metodi numerici per risolverli.

2 Differenze centrali semplici

Vogliamo risolvere numericamente un'equazione differenziale del second'ordine con BC's di annullamento della funzione negli estremi:

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + q(x)u = \lambda u.$$

Per farlo, prendiamo il nostro intervallo di definizione e suddividiamolo in n sottointervalli. Avremo in totale, contando anche gli estremi dei punti dell'intervallo, $n + 1$ punti di discretizzazione x_i , con $i = 0, 1, \dots, n$. Andremo ad approssimare la derivata k -esima tramite i valori della funzione nei punti del reticolo.

2.1 Approssimazione a 3 punti

Abbiamo

$$a < x_0 < x_1 < \dots < x_n = b,$$

dove $x_i = a + ih$ con $h = (b - a)/n$. Si indica $u(x_i) = u_i$, $q(x_i) = q_i$ e $u''(x_i) = u''_i$. Per ricavare l'approssimazione ci serve lo sviluppo di Taylor della nostra funzione u :

$$u(x \pm h) = u(x) \pm hu'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) \pm \frac{h^3}{3!}u^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}u^{(4)}(x) \pm \frac{h^5}{5!}u^{(5)}(x) + O(h^6).$$

Adesso per ottenere una stima della derivata seconda basta sommare $u(x + h)$ con $u(x - h)$

$$u(x + h) + u(x - h) = 2u(x) + h^2u''(x) + O(h^2)$$

da cui si ottiene

$$u''_i = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + O(h^2).$$

Sostituendo nell'equazione differenziale da risolvere e indicando con U il vettore corrispondente alla nostra funzione discretizzata si ottiene

$$\frac{-U_{i-1} + 2U_i - U_{i+1}}{h^2} + q_i U_i = \lambda U_i, \quad \text{dove } i = 1, \dots, n-1.$$

Imponendo le condizioni al bordo $U_0 = U_n = 0$, possiamo scrivere l'equazione in forma matriciale di dimensione $(n-1) \times (n-1)$

$$KU = \lambda U, \quad \text{dove } K = \frac{1}{h^2}T + Q$$

e

$$U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{n-1} \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} q_1 & & & \\ & q_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & q_{n-1} \end{pmatrix}.$$

Gli autovalori e autofunzioni dell'operatore iniziale sono approssimati dagli autovalori e autovettori della matrice K .

Un teorema ci dice quanto è buona questa approssimazione:

Theorem 2.1 (...)

$$|\lambda_k - \Lambda_k^{(n)}| \leq Ck^4 h^2, \quad \text{dove } k = 1, \dots, n-1.$$

2.2 Errori nell'approssimazione di differenze finite

Si noti come la somma dei coefficienti nell'approssimazione di differenze finite è nulla. L'effetto sull'errore di arrotondamento può essere molto importante. Se h è molto piccolo, il valore di $f(x)$, $f(x \pm h)$, $f(x \pm 2h)$, e così via, saranno molto vicini tra loro. Quindi quando vengono moltiplicati per il proprio coefficiente e sommati, possono perdersi delle informazioni importanti. Allo stesso tempo però, non possiamo prendere h troppo grande, perchè altrimenti diventerebbe l'errore di troncamento a diventare troppo grande. Questi problemi sono irrisolvibili, è possibile però prendere alcune precauzioni per arginare il problema, ovvero:

- usare algebra con doppia precisione,
- usare differenze finite con una accuratezza almeno di $O(h^2)$.

3 Estrapolazione di Richardson

L'estrapolazione di Richardson è un semplice metodo per aumentare l'accuratezza di alcuni processi numerici, incluso l'ADF. Supponiamo di avere un metodo approssimativo per calcolare una certa quantità G , e assumiamo inoltre che il procedimento dipenda da un certo parametro h . Indicando il risultato del calcolo approssimativo con $g(h)$, si ha $G = g(h) + E(h)$, dove $E(h)$ indica l'errore commesso. Se l'errore ha una dipendenza dal nostro parametro h del tipo: $E(h) = ch^p$, con c e p costanti, allora l'approssimazione di Richardson può ridurre ulteriormente questo errore. Calcoliamo $g(h)$ per due valori di $h = h_1, h_2$:

$$\begin{aligned}G &= g(h_1) + ch_1^p, \\G &= g(h_2) + ch_2^p.\end{aligned}$$

Eliminiamo la costante c e risolviamo per G :

$$G = \frac{(h_1/h_2)^p g(h_2) - g(h_1)}{(h_1/h_2)^p - 1}.$$

Questa è la **formula di estrapolazione di Richardson**. Di solito si usa $h_2 = 2h_1$ così da ridurre la formula a:

$$G = \frac{2^p g(h_1/2) - g(h_1)}{2^p - 1}.$$

Nell'approssimazione di differenze centrali l'errore di troncamento è $E(h) = c_1 h^2 + c_2 h^4 + c_3 h^6 + \dots$. Per cui nel nostro caso andremo ad eliminare solamente il primo termine dominante, ponendo $p=2$, e otterremo un'accuratezza di almeno $O(h^4)$.

4 Buca infinita

Ci poniamo l'obiettivo di risolvere il problema della buca infinita, ovvero trovare gli autovalori e autovettori dell'hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < \pi \\ \infty, & x < 0, x > \pi \end{cases}.$$

Dal punto di vista matematico, se poniamo $\hbar = m = 1$, si riduce a risolvere il problema differenziale

$$-u'' = 2\lambda u,$$

con condizioni al bordo di annullamento, $u(0) = u(\pi) = 0$. Il problema è risolvibile analiticamente e ha come soluzione:

$$2\lambda_0 = 1, \quad 2\lambda_1 = 4, \quad 2\lambda_2 = 9, \dots, 2\lambda_n = (n+1)^2$$

4.1 SFD a 3pt

Utilizzando le differenze finite a 3pt per vari reticoli si ottiene come risultato:

	...	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$	$n = 80$	$n = 160$	$n = 320$
	$2\lambda_k$	Λ_k^{10}	Λ_k^{20}	Λ_k^{40}	Λ_k^{80}	Λ_k^{160}	Λ_k^{320}
$k = 0$	1.00000	0.99180	0.99795	0.99949	0.99987	0.99997	0.99999
$k = 1$	4.00000	3.87012	3.96721	3.99178	3.99794	3.99949	3.99987
$k = 2$	9.00000	8.35322	8.83468	8.95844	8.98960	8.99740	8.99935
$k = 3$	16.00000	14.00224	15.48050	15.86884	15.96713	15.99178	15.99794
$k = 4$	25.00000	20.26424	23.74103	24.68037	24.91978	24.97993	24.99498
$k = 5$	36.00000	26.52623	33.41287	35.33871	35.83376	35.95838	35.98959

Tabella 1: Primi 6 autovalori problema buca infinita per differenti reticoli

Verifichiamo inoltre che l'errore sull'autovalore sia effettivamente lineare in h^2 . Prendiamo come esempio l'andamento della sequenza per l'autovalore fondamentale

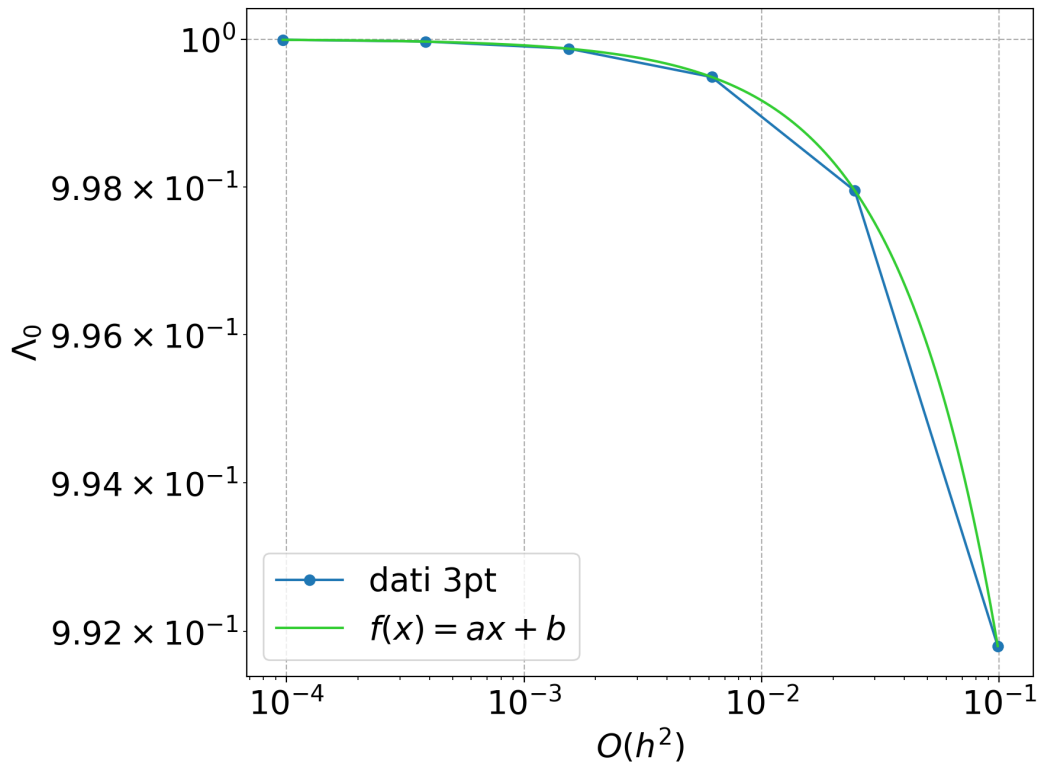


Figura 1: Immagine di best-fit dell'autovalore fondamentale

4.2 Estrapolazione Richardson

Implementando quanto detto nel paragrafo 2, possiamo migliorare ulteriormente la precisione dei nostri autovalori. Utilizzando infatti la formula dell'estrapolazione Richardson con $p = 2$:

$$G = \frac{2^2 g(h_1/2) - g(h_1)}{2^2 - 1},$$

si ottiene per esempio per l'autovalore fondamentale:

	Λ_0
$h_1 = 10$	0.9999993
$h_1 = 20$	0.9999996
$h_1 = 40$	0.99999997
$h_1 = 80$	0.999999998
$h_1 = 160$	0.99999999990

Tabella 2: Autovalore fondamentale per vari reticoli con RE.

Dalla figura 2 si vede come l'andamento dell'errore sia lineare in h^4 , in accordo con la teoria.

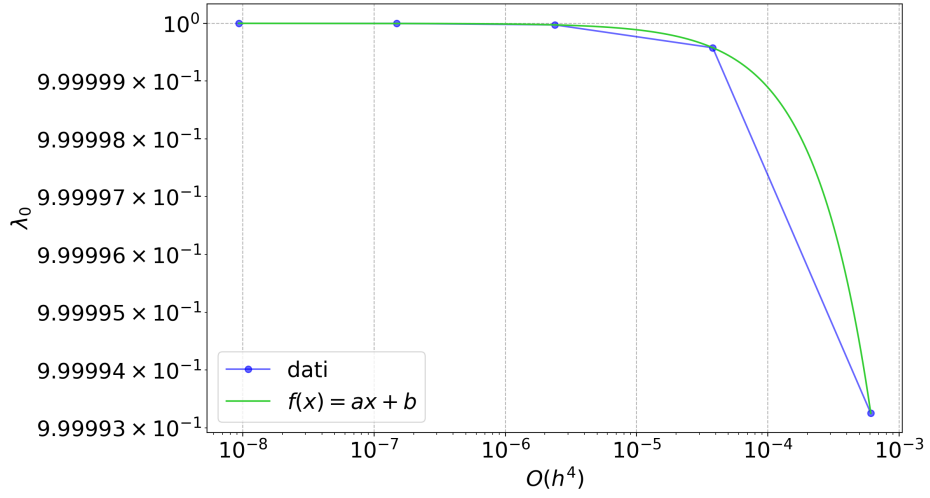


Figura 2: Best-fit dati autovalore fondamentale con RE

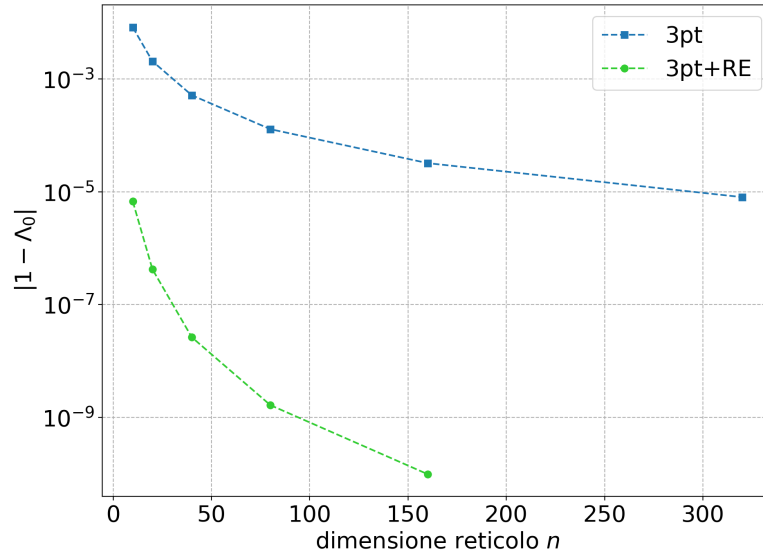


Figura 3: Andamento errore

5 Oscillatore armonico

Ci poniamo l'obiettivo di risolvere il problema dell'oscillatore armonico, ovvero trovare gli autovalori e autovettori dell'hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Dal punto di vista matematico, se poniamo $\hbar = m = \omega = 1$, si riduce a risolvere il problema differenziale

$$-u'' + x^2 u = 2\lambda u,$$

su un intervallo che teoricamente dovrebbe essere $(-\infty, +\infty)$, ma che noi prenderemo pari a $[-6, 6]$, in quanto già sufficientemente ampio dato che le autofunzioni si annullano "gaussianamente" all'infinito. Il problema è risolvibile analiticamente e ha come soluzione:

$$2\lambda_0 = 1, \quad 2\lambda_1 = 3, \quad 2\lambda_2 = 5, \dots, 2\lambda_n = (1 + 2n).$$

5.1 Scelta del dominio

La scelta del dominio non è casuale, infatti, una volta decisa la precisione che si vuole ottenere per un dato autovalore, che nel nostro test è quello fondamentale λ_0 , si vede come la stima migliore ("con mesh infinito") al variare dell'intervallo tende esponenzialmente ad un determinato valore.

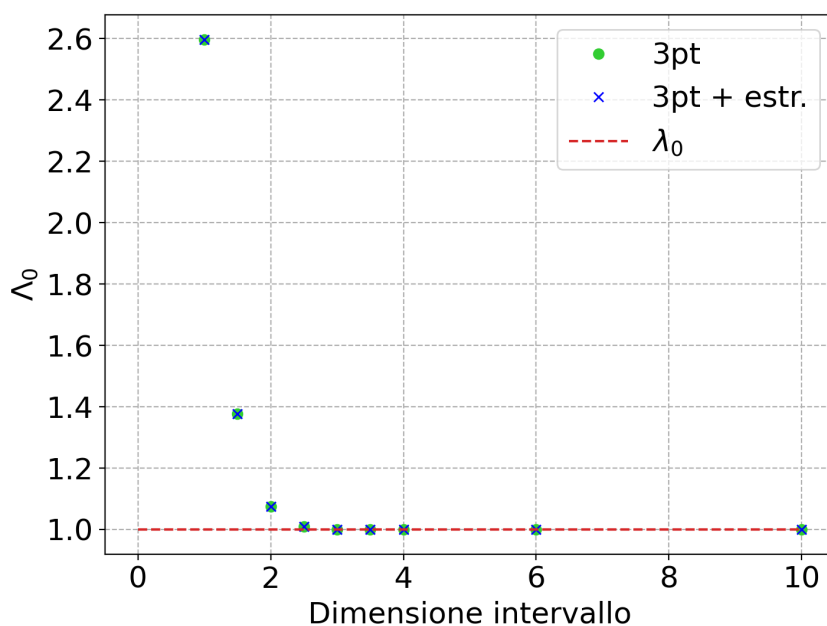


Figura 4: Convergenza autovalore al variare dell'intervallo

5.2 SFD a 3pt

Utilizzando le differenze finite a 3pt per vari reticoli si ottiene come risultato:

	...	$n = 20$	$n = 40$	$n = 80$	$n = 160$	$n = 320$	$n = 640$
	$2\lambda_k$	Λ_k^{20}	Λ_k^{40}	Λ_k^{80}	Λ_k^{160}	Λ_k^{320}	Λ_k^{640}
$k = 0$	1.00000	0.92987	0.98412	0.99608	0.99902	0.99976	0.99994
$k = 1$	3.00000	2.68672	2.91948	2.98033	2.99511	2.99878	2.99969
$k = 2$	5.00000	3.70727	4.78720	4.94867	4.98727	4.99682	4.99921
$k = 3$	7.00000	6.11301	6.58303	6.90090	6.97550	6.99389	6.99847
$k = 4$	9.00000	6.16245	8.30173	8.83682	8.95978	8.98998	8.99750
$k = 5$	11.00000	11.05735	9.93655	10.75620	10.94010	10.98509	10.99628

Tabella 3: Primi 6 autovalori problema buca infinita per differenti reticoli

Dalla figura 6 si vede anche in questo caso l'andamento lineare in h^2 .

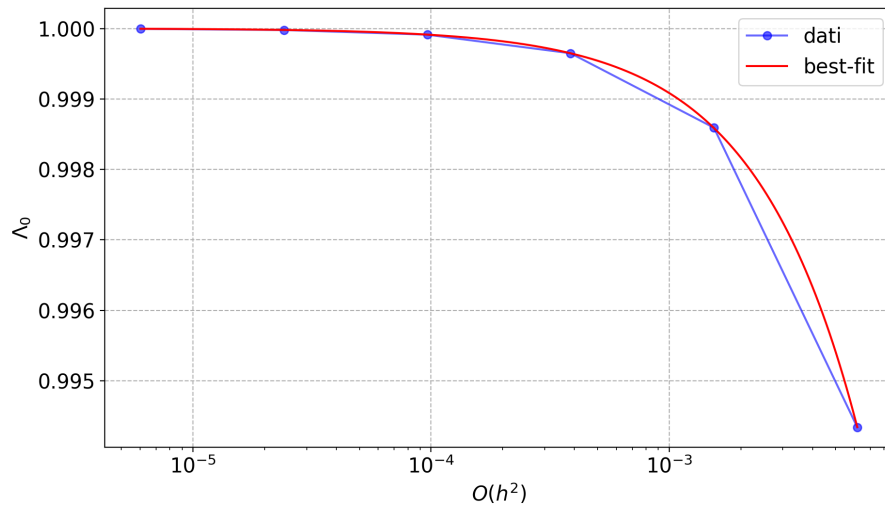


Figura 5: Andamento autovalore fondamentale

5.3 Estrapolazione Richardson

Come fatto per la buca infinita, andiamo ad eseguire un estrapolazione di Richardson per migliorare ulteriormente la precisione numerica sul calcolo degli autovalori.

$$G = \frac{2^2 g(h_1/2) - g(h_1)}{2^2 - 1},$$

	Λ_0
$h_1 = 20$	1.002
$h_1 = 40$	1.00006
$h_1 = 80$	1.000004
$h_1 = 160$	1.0000002
$h_1 = 320$	1.00000001

Tabella 4: Autovalore fondamentale per vari reticoli con ER.

Grafichiamo i risultati ottenuti tramite python per un confronto:

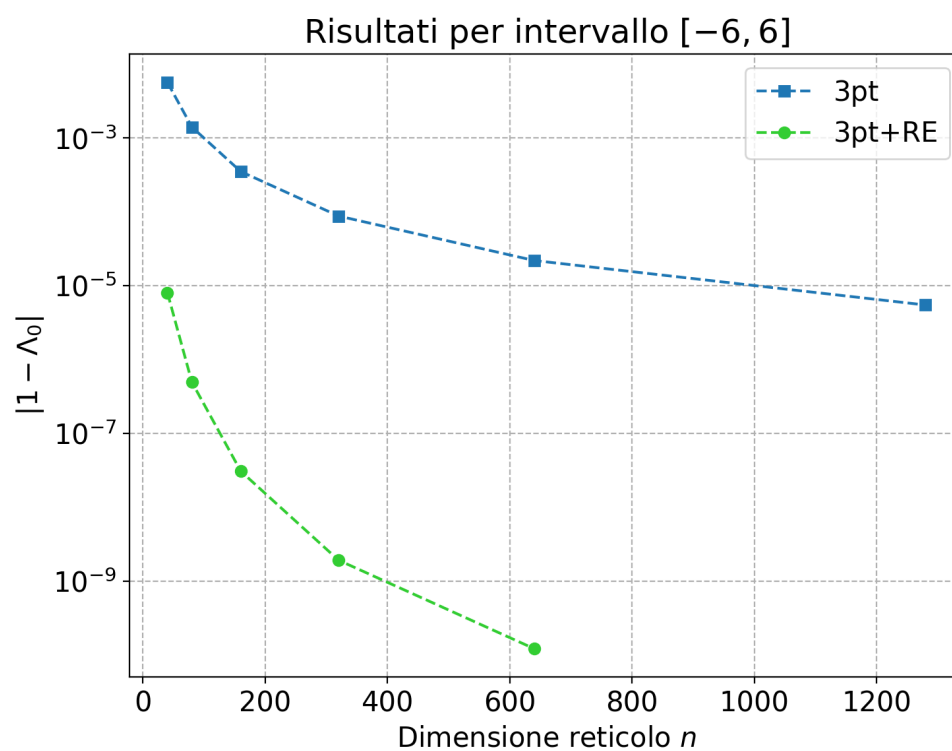


Figura 6: Andamento autovalore fondamentale

6 Oscillatore anarmonico

In questo paragrafo si vuole risolvere il problema dell'oscillatore anarmonico. Questo problema non ha una soluzione analitica ed è quindi risolvibile analiticamente solo tramite la teoria perturbativa, quindi quando la perturbazione è piccola rispetto alla scala del problema. L'hamiltoniana di cui vogliamo trovare le autofunzioni e autovalori è:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}\tilde{g}x^4.$$

Utile passare da subito in unità adimensionali:

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}gx^4,$$

$$\text{con} \quad g = \frac{\hbar}{m^2\omega^3}\tilde{g}.$$

6.1 SFD a 3pt

Utilizzando le differenze finite a 3pt per vari reticoli si ottiene come risultato:

	...	$n = 20$	$n = 40$	$n = 80$	$n = 160$	$n = 320$
	λ_k	Λ_k^{20}	Λ_k^{40}	Λ_k^{80}	Λ_k^{160}	Λ_k^{320}
$k = 0$	0.62882	0.67583	0.69113	0.69492	0.69586	0.69610
$k = 1$	1.97229	2.18765	2.29089	2.31607	2.32232	2.32389
$k = 2$	2.34331	3.87717	4.21909	4.30062	4.32081	4.32585
$k = 3$	11.02057	5.51879	6.33042	6.51708	6.56311	6.57458
$k = 4$	11.02072	6.96149	8.56042	8.91342	9.00004	9.02160
$k = 5$	46.00440	8.47312	10.86384	11.45626	11.60082	11.63676

Tabella 5: Primi 6 autovalori problema oscillatore anarmonico per differenti reticoli

Grafichiamo l'andamento dell'autovalore fondamentale partendo da un reticolo $n = 40$ fino ad arrivare ad $n = 1280$ per verificare che l'andamento sia effettivamente lineare in h^2 come aspettato dalla teoria

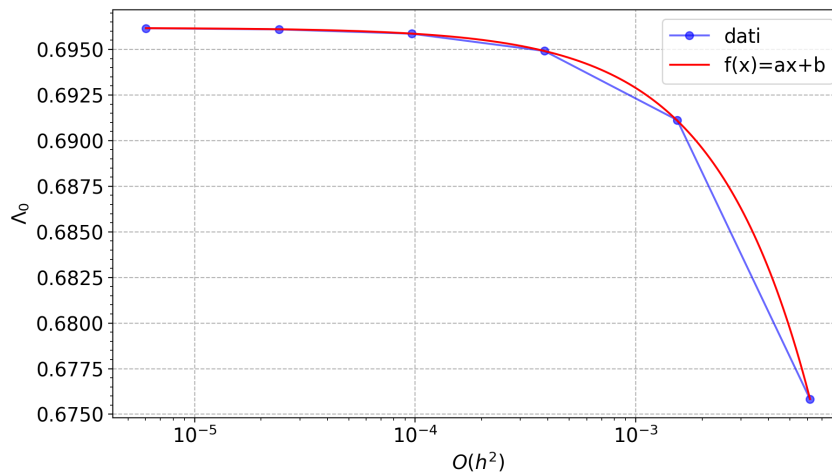


Figura 7: Andamento autovalore fondamentale

6.2 Estrapolazione Richardson

Come fatto per la buca infinita, andiamo ad eseguire un'estrapolazione di Richardson per migliorare ulteriormente la precisione numerica sul calcolo degli autovalori. Anche stavolta si verifica che l'andamento dell'errore sia lineare in h^4 .

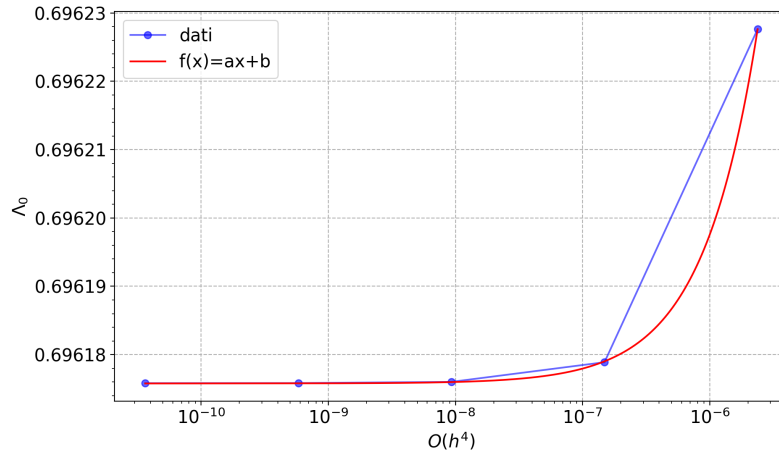


Figura 8: Andamento autovalore fondamentale con RE

	Λ_0
$h_1 = 20$	0.691
$h_1 = 40$	0.6962
$h_1 = 80$	0.696179
$h_1 = 160$	0.696176
$h_1 = 320$	0.6961758

Tabella 6: Autovalore fondamentale per vari reticoli con ER.

Per verificare per entrambi i risultati ottenuti come cambia l'autovalore ad un raddoppio della precisione reticolare grafichiamo sempre tramite python la differenza tra gli autovalori $|\Lambda_0^{n_1} - \Lambda_0^{n_2}|$

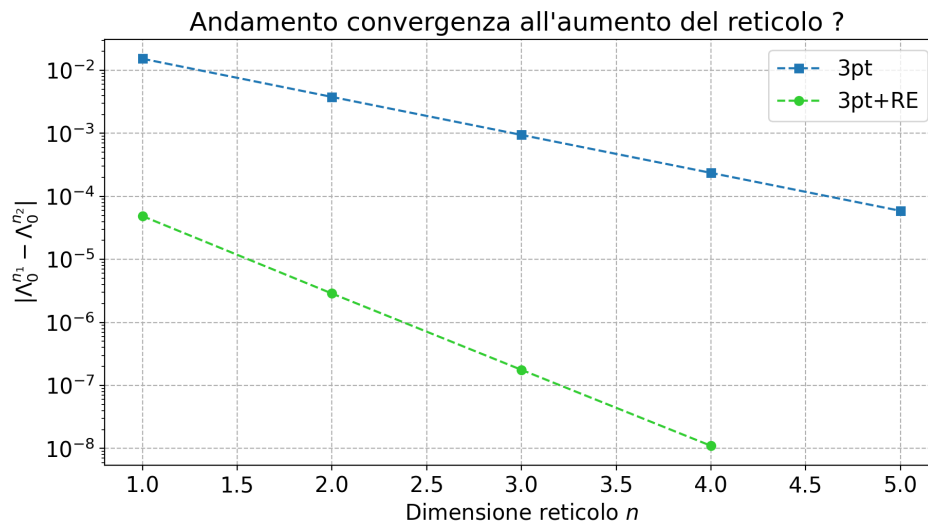


Figura 9: Andamento autovalore fondamentale con RE

6.3 Calcolo nella base degli operatori di salita e discesa

Un ulteriore metodo che sfrutta la conoscenza degli operatori di creazione e di distruzione, prevede la costruzione della matrice H sulla base degli autostati degli operatori a, a^\dagger . Prendiamo l'hamiltoniana del problema

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}gx^4,$$

e costruiamo le matrici che corrispondono agli operatori p^2, x^2 e x^4 sulla base di a, a^\dagger . In questo caso, date le relazioni

$$p = \frac{m\omega l}{i2}(a - a^\dagger), \quad x = \frac{l}{2}(a + a^\dagger), \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

si ha, ponendo $m = \omega = \hbar = 1$:

$$\begin{aligned} x_{n,n}^2 &= \frac{1}{2}(2n+1), & x_{n,n+2}^2 &= x_{n+2,n}^2 = \frac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}, \\ p_{n,n}^2 &= \frac{1}{2}(2n+1), & p_{n,n+2}^2 &= p_{n+2,n}^2 = -\frac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}, \\ x_{n,n}^4 &= \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1), & x_{n,n+2}^4 &= x_{n+2,n}^4 = \frac{2n+3}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}, \\ x_{n,n+4}^4 &= x_{n+4,n}^4 = \frac{1}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}, \end{aligned}$$

mentre tutti gli altri elementi sono nulli. Costruendo una matrice 50×50 ad esempio, si ottiene come stima dei primi 6 autovalori:

k	Λ_k
0	0.696175820765
1	2.324406352111
2	4.327524978905
3	6.578401949768
4	9.028778725911
5	11.64872073677

Tabella 7: Primi 6 autovalori oscillatore anarmonico

6.4 Confronto con teoria delle perturbazioni

Per visualizzare effettivamente la potenza di questo metodo numerico, si confrontano i risultati ottenuti tramite l'approssimazione a 3 punti con la teoria delle perturbazioni al primo, secondo e terzo ordine in funzione del parametro perturbativo g :

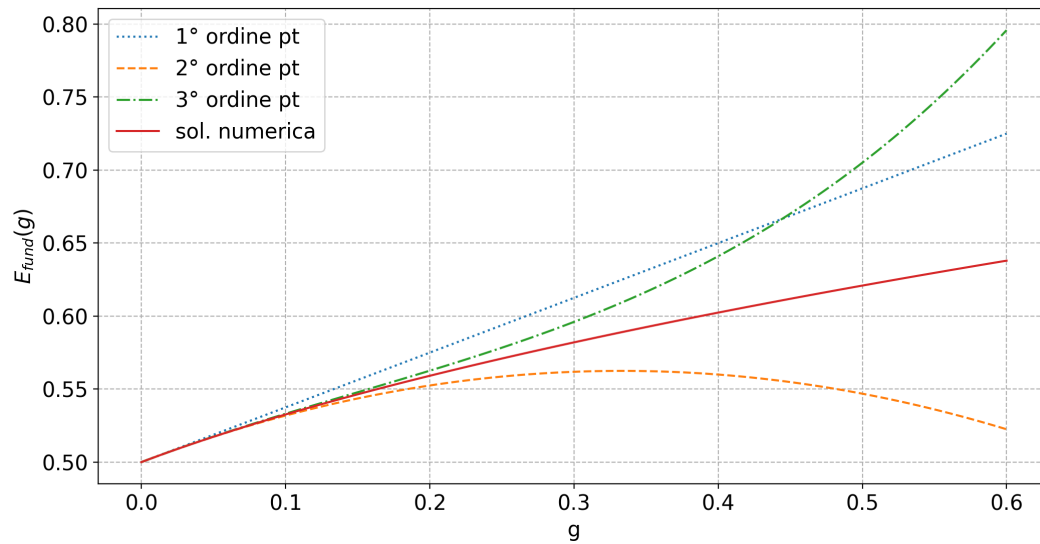


Figura 10: Risultati per l'autovalore fondamentale