
Computerphysik

Übungsblatt 9

SS 2014

Website: <http://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2014-CompPhys.shtml>

Abgabedatum: Montag, 16. Juni 2014 vor Beginn der Vorlesung

36. Geschwindigkeitskontrolle

Programmiertechniken

Nachdem die erste Programmierhürde genommen ist und ein Programmcode das macht, was er soll, stellt sich häufig die Frage, ob der Code die gleiche Aufgabe nicht auch viel schneller erledigen könnte. Allgemeine Tipps zur **Code-Optimierung** sind rar. Deshalb ist es oft nützlich, verschiedene Varianten zu implementieren und miteinander zu vergleichen. In Python wird dies ermöglicht durch das Paket `timeit`, welches eine Funktion mehrfach ausführt und die mittlere Rechenzeit zurückgibt.

Um die Funktionalität des Pakets zu testen, wollen wir auf verschiedenen Wegen zwei Matrizen addieren und die dazu benötigte Zeit stoppen. Laden Sie sich dazu die Datei `timing.py` herunter und starten Sie als erstes das Programm, denn es wird etwa fünf bis zehn Minuten dauern bis ein Resultat ausgegeben wird. Analysieren Sie dann den ausgeführten Code und überlegen Sie was passiert. Erwarten Sie Geschwindigkeitsunterschiede und falls ja, warum? Gibt es andere Operationen aus der linearen Algebra bei denen eine der implementierten Funktionen die klügere Wahl ist?

37. Anharmonischer Oszillator

5 Punkte

Nachdem wir kürzlich den harmonischen Oszillation untersucht haben, wollen wir uns in dieser Aufgabe dem **anharmonischen Oszillator** zuwenden. Letzterer sei durch den folgenden Hamilton-Operator (mit $m = \omega = \hbar = 1$) beschrieben

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \hat{x}^2 + \lambda \hat{x}^4), \quad (1)$$

wobei der zusätzliche quartische Term \hat{x}^4 mit positivem Vorfaktor $\lambda \in \mathbb{R}^+$ auftritt.

Wir wollen nun die Eigenzustände und die dazugehörigen Energien dieses anharmonischen Oszillators (1) berechnen und dazu das in der Vorlesung kurz vorgestellte **variationelle Verfahren** einsetzen. Um die Eigenzustände variationell zu beschreiben wollen wir dabei auf die ersten N Eigenzustände $\{|n\rangle\}$ des *harmonischen* Oszillators zurückgreifen.

Implementieren Sie das variationelle Verfahren, indem Sie die Matrix des Hamilton-Operators in der endlichen Basis der ersten N Eigenzustände des harmonischen Oszillators aufstellen,

siehe dazu auch die folgenden Hinweise. Wählen Sie $N = 5$, $N = 10$ und $N = 20$ mit $\lambda = 0.1$. Geben Sie jeweils die Energien des Grundzustands und der ersten beide angeregten Zustände aus und plotten Sie die Wellenfunktionen. Wiederholen Sie diese Rechnungen nun für $\lambda = 0.5$ und $\lambda = 2$. Beschreiben Sie, wie sich die Energien verhalten.

Einige Hinweise:

- Hilfreich ist auch hier wieder die Einführung der *Auf-* und *Absteigeoperatoren* a^\dagger und a , die schon bei der Lösung des harmonischen Oszillators verwendet wurden. Diese sind definiert durch

$$\begin{aligned} a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned}$$

und gehorchen bosonischen *Kommutatorrelationen*

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1, \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0.$$

Orts- und Impulsoperator können damit wie folgt dargestellt werden

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \\ p &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \end{aligned}$$

- Schreiben Sie zunächst den Hamiltonian aus Gl. (1) unter Verwendung der Auf- und Absteiger a^\dagger und a . Rechnen Sie dann die Matrixdarstellung der Operatoren a und a^\dagger aus. Damit können Sie schließlich die komplette Hamiltonmatrix aufstellen. Zur Erinnerung: Die Matrixelemente der Auf- und Absteiger sind

$$\begin{aligned} a_{nm}^\dagger &= \langle n | a^\dagger | m \rangle = \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} \\ a_{nm} &= \langle n | a | m \rangle = \sqrt{m} \delta_{n,m-1}. \end{aligned}$$

Wenn Sie die Wellenfunktionen in der Ortsraumdarstellung plotten wollen, verwenden Sie für die Basisfunktionen die bereits bekannte Ortsraumdarstellung der Basiszustände:

$$\langle x | n \rangle = \phi_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-x^2/2}, \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2)$$

mit den Hermite-Polynomen H_n . Plotten Sie Ihre Ergebnisse auf dem Intervall $x \in [-2, 2]$.

- Beachten Sie, daß die hier verwendeten Eigenzustände des harmonischen Oszillators eine *Orthonormalbasis* bilden.
- Zur Lösung des letztendlichen Eigenwertproblems können Sie die Funktion `eigh` aus dem NumPy-Modul `linalg` benutzen:

```
import numpy as np
evals, evecs = np.linalg.eigh(matrix)
```

Danach enthält `evals` die Eigenwerte und `evecs` die Eigenvektoren der Matrix `matrix`.

38. Hofstadter-Butterfly

5 Punkte

In dieser Aufgabe wollen wir die **Energieniveaus eines Elektrons** betrachten, welches sich auf einem zweidimensionalen Quadratgitter in Anwesenheit eines senkrecht zum Gitter stehenden Magnetfelds bewegt. Die entstehende Struktur ist der sogenannte **Hofstadter-Butterfly** – benannt nach Douglas Hofstadter, welcher diesen während seiner **Doktorarbeit** 1976 entdeckt hat. Weithin bekannt geworden ist Douglas Hofstadter später durch sein Buch *Gödel, Escher, Bach*.

Als ersten Schritt betrachten wir die Wellenfunktion des Elektrons welche in der *Landau-Eichung* des elektromagnetischen Vektorpotenzials in zwei Teile entlang der x und y -Richtung zerfällt

$$\psi(x, y) = g(x)f(y) = g(x)e^{iy\mu}, \quad (3)$$

wobei der Teil entlang der y -Richtung $f(y)$ von einer ebenen Wellen $f(y) = e^{iy\mu}$ mit Wellenzahl μ beschrieben wird und der Teil $g(x)$ in x -Richtung den Effekt des Magnetfelds enthält.

Wir wollen uns fortan nur noch auf die x -Abhängigkeit konzentrieren. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung führt zu einer Bestimmungsgleichung für $g(x)$, welche in Matrixschreibweise gegeben ist als

$$\begin{pmatrix} g(x+1) \\ g(x) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon - 2\cos(2\pi x\alpha - \mu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=A(x)} \begin{pmatrix} g(x) \\ g(x-1) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

wobei ε die Energie des Elektrons ist und der Parameter α den Magnetfluß durch eine Einheitszelle des Quadratgitters beschreibt. Wir sehen also, dass, wenn wir einen Startvektor $(g(1), g(0))$ kennen, wir alle weiteren Vektoren $(g(x+1), g(x))$ iterativ berechnen können als

$$\begin{pmatrix} g(x+1) \\ g(x) \end{pmatrix} = \underbrace{\left[\prod_{j=1}^x A(j) \right]}_{=Q(x)} \cdot \begin{pmatrix} g(1) \\ g(0) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Sei nun α eine rationale Zahl, also $\alpha = p/q$. Wenn wir $\mu = \pi/(2q)$ setzen, sehen wir, dass die Matrix $A(x)$ periodisch in x ist mit Periode q . Man kann zeigen, dass in diesem Fall die Energieeigenwerte des Systems wie folgt berechnet werden können:

1. Wir gehen von einem unendlich ausgedehnten System aus. Da $A(x)$ die Periode q hat, reicht es, für ein gegebenes ε die folgende Matrix Q auszurechnen:

$$Q(q) = \prod_{j=0}^{q-1} A(j). \quad (6)$$

2. Wir müssen jetzt noch überprüfen, ob diese Energie ε im System überhaupt vorkommen kann. Das ist der Fall, wenn die von $Q(q)$ generierten Wellenfunktionen physikalisch sind (was hier gleichbedeutend dazu ist, dass sie beschränkt sind). Dies wiederum ist genau dann der Fall, wenn $|\text{Spur}(Q)| \leq 4$.

Wir können also mit dem obigen Rechenverfahren das Spektrum der Energiebänder als Funktion von α ausrechnen. Implementieren Sie dieses Verfahren, indem Sie für α alle rationalen Zahlen

zwischen 0 und 1 einsetzen, deren Nenner kleiner gleich 50 ist – siehe hierzu auch Aufgabe 6 vom ersten Übungsblatt. Die Energie ε können Sie dabei in 500 Schritten von -4 bis +4 laufen lassen. Für jedes Wertepaar (ε, α) überprüfen Sie nun mit der obigen Anleitung, ob für ε eine sinnvolle Wellenfunktion generiert wird. Falls ja, ist ε ein erlaubter Eigenwert. Plotten Sie in diesem Fall einen Punkt bei (ε, α) . Die sich so ergebende Struktur ist eben jener, oben erwähnter Hofstadter Butterfly.

Experimentell wurde der Hofstadter-Butterfly erst kürzlich zum ersten Mal beobachtet. Zum einen 2012/13 in einatomigen Lagen von **Graphen**, siehe dazu diese Veröffentlichungen von [Philip Kim's Gruppe](#), [Andre Geim's Gruppe](#) und [Ray Ashoori's Gruppe](#). Zum anderen 2013 in **ultrakalten Atomen** in optischen Gittern in [Immanuel Bloch's Gruppe](#), wozu auch diese [Zusammenfassung](#) sehr lesenswert ist.

39. Down the rabbit hole

*optionale Aufgabe – 6 Punkte
Abgabe am Montag, 23. Juni*

Wir wollen in dieser Aufgabe unseren Streifzug durch die dynamischen Systeme und ihr **chaotisches Verhalten** fortsetzen. Dazu betrachten wir heute ein besonders einfaches System, anhand dessen wir weitere zentrale Charakteristiken chaotischen Verhaltens kennenlernen wollen – nach Poincaré Schnitten und seltsamen Attraktoren sind dies die sogenannten **Lyapunov-Exponenten**.

Betrachten wir dazu einen flachen Container, welchen wir als unendlich groß annehmen wollen. Im Boden dieses Containers sind an den Positionen $(\pm a, 0)$ zwei Ausgüsse angebracht, die *zeitlich abwechselnd* geöffnet werden. Wir bringen nun eine mehrfarbige Flüssigkeit in den Container ein und wollen beobachten, wie diese durch die Strudel um die Abflüsse zunächst vermengt wird und schließlich abfließt.

Um die Flüssigkeit zu simulieren, betrachten wir einen *radialen* und einen *zirkulären Teilchen-Fluss* wie folgt. Den radialen Fluss (in Richtung eines Ausgusses) beschreiben wir anhand einer Teilchen-Geschwindigkeit, welche mit r^{-1} abfallen soll, und eine zu parametrisierende Stärke Q habe, so dass gelte

$$\dot{r} = -\frac{Q}{r}$$

Auch für den zirkulären Fluss (rund um einen Ausguss) wollen wir annehmen, dass dessen Geschwindigkeitskomponente mit dem Abstand vom Ausguss abfällt wie r^{-1} und durch eine Stärke K parametrisiert sei

$$r\dot{\phi} = \frac{K}{r}$$

Diese beiden Differential-Gleichungen lassen sich nun für gegebene Anfangsbedingungen (r_0, ϕ_0) lösen bzw. integrieren. Besonders kompakt ist diese Lösung, wenn wir den Ortsraum (r, ϕ) durch komplexe Zahlen $z = r \exp(i\phi)$ darstellen:

$$z(t) = (z_0 \pm a) \left(1 - \frac{2Qt}{|z_0 \pm a|^2} \right)^{(1-iK/Q)/2} \mp a$$

Es soll jeweils nur ein Abfluss geöffnet sein und die Periodenlänge sein T sein, d.h. nach $T/2$

wird der aktuelle Abfluss zugemacht und der andere geöffnet. Beachten Sie, dass diese Werte direkt eingesetzt werden können und wir den Ort des Teilchens nach einer halben Periode $T/2$ bzw. einer ganzen Periode T genau kennen.

Es ergeben sich so die folgenden Iterationsgleichungen:

$$z' = -1 + (z + 1) \cdot \left(1 - \frac{\eta}{|z + 1|^2}\right)^{1/2 - i\xi/2},$$

$$z'' = +1 + (z' - 1) \cdot \left(1 - \frac{\eta}{|z' - 1|^2}\right)^{1/2 - i\xi/2}.$$

Dabei haben wir die beiden dimensionslosen Größen

$$\eta = \frac{QT}{a^2} \quad \text{und} \quad \xi = \frac{K}{Q}$$

eingeführt, welche die Stärke des radialen bzw. des zirkulären Flusses beschreiben. Wir wollen im folgenden die Werte

$$\eta = 0.5 \quad \text{und} \quad \xi = 10$$

annehmen.

Wichtig für die Simulation ist schließlich noch eine *Abbruchbedingung*, die dafür sorgt, dass Teilchen aus dem System verschwinden, wenn sie einen Abfluss erreicht haben. Dies sei dann der Fall, wenn das Teilchen sich innerhalb eines Radius der Größe $\sqrt{\eta}$ um den gerade geöffneten Abfluss befindet (wie man anhand der obigen Gleichungen nachvollziehen kann).

Dass dieses System chaotisches Verhalten zeigt, wollen wir nun untersuchen. Eine systematische Analyse würde den Rahmen dieser Aufgabe sprengen, aber die grundlegenden Ideen lassen sich relativ schnell verstehen. Zur genauen Charakterisierung des Verhaltens würden wir den sogenannten *Lyuapunov-Exponenten* berechnen, der die mittlere Rate angibt, mit der sich zwei anfangs infinitesimal benachbarte Kurven voneinander entfernen. Ob dies geschieht, können Sie mithilfe zweier Testteilchen feststellen. Lassen Sie diese von verschiedenen, aber sehr nahe beieinanderliegenden Startpunkten mithilfe der obigen Gleichungen propagieren und schauen sie, was passiert. Kommentieren Sie Ihre Beobachtung und vergleichen Sie mit dem entsprechenden Verhalten eines harmonischen Oszillators.

Auch für dieses System gilt, dass sein chaotischen Verhalten zu einigen schönen visuellen Effekten führen kann. Sie können zum Beispiel aus einer größeren Menge einzelner Teilchen eine Anordnung mehrfarbiger Streifen erzeugen und diese sich zeitlich entwickeln lassen. Alternativ zum Streifenbild, können Sie auch andere, externe Bilder laden und diese in den Wettbewerb zwischen den beiden Abflüssen schicken.

Wem dieser Streifzug durch die chaotischen Systeme Lust auf mehr gemacht hat, dem sei etwa das Buch **Chaotic Dynamics** empfohlen, welches wir als Inspirationsquelle für die eine oder andere Aufgabe genutzt haben.