Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Projeto 2

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Junho de 2025

Sumário

1 Exercício 1

Tarefa: Na lista 5, foi considerado o poço de potencial infinito no intervalo $[0, L]$, para uma partícula de massa m, ou seja, a equacção

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_j(x) = E_j\psi_j(x). \tag{1}$$

Para encontrar as autofunções

$$\psi_j(x) \propto \sin\left(\frac{j\pi x}{L}\right)$$

foi considerada a matriz

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Agora, considere a matriz

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Que tipo de solucções para o poço de potencial infinito você espera encontrar nesse caso? Motive sua resposta.

Resposta:

Para um ponto no extremo inicial da grade, a discretização de diferenças finitas para a primeira derivada é:

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0} \approx \frac{\psi_1 - \psi_0}{h} \tag{3}$$

A Condição de Contorno de Neumann é:

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0} = 0 \tag{4}$$

O que nos leva a

$$\psi_0 = \psi_1 \tag{5}$$

Substituindo isto na discretização de diferenças finitas para a segunda derivada - no ponto x_i, temos:

$$\left.\frac{d^2\psi}{dx^2}\right|_{x=x_1} \approx \frac{\psi_2 - 2\psi_1 + (\psi_1)}{h^2} = \frac{\psi_2 - \psi_1}{h^2} \tag{6}$$

Que resulta em dois termos, justamente com os coeficientes -1 e 1, que temos na matriz dada. Logo, espera-se que a solução seja tal que obedeça a condição de contorno de Neumann e portanto o resultado será:

$$\psi_j(x) \propto \cos\left(\frac{j\pi x}{2L}\right)$$

2 Exercício 2

Tarefa: Usando o *power method* e a matriz (2), calcule a energia do estado fundamental E_0 com precisão de 10^{-4}. Compare o resultado com o valor exato. Faça um gráfico da autofuncção normalizada e compare com a solucção exata.

O código foi compilado com o comando:

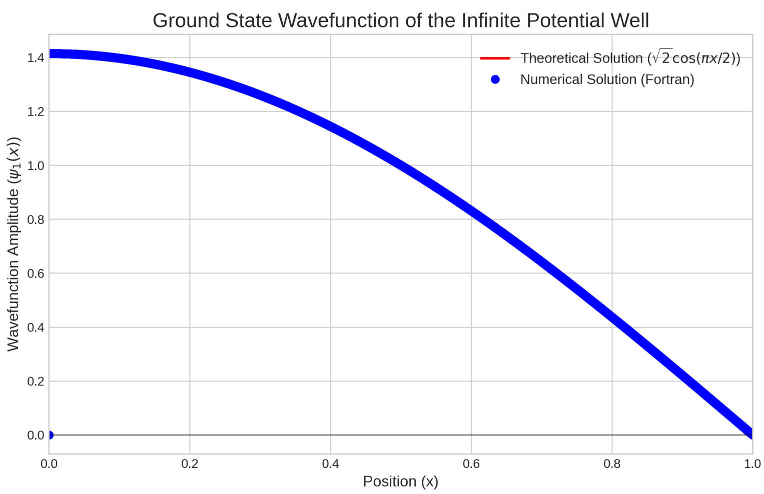
gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none P2-5255417-ex-2.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o P2-5255417-ex-2.exe

Resultados:

Utilizou-se N=100000 como se fosse N=infinito, obtendo a energia:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/projeto2
> $ ./P2-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
100000
 Insert tolerance
1.0e-4
computed E0:    2.4674258 real E0:    2.4674011
```

E obteve-se a seguinte autofunção:



Vê-se que a função analítica e a numérica se sobrepõe totalmente, de modo que o método numérico corresponde perfeitamente à função analítica conhecida. (O autovetor resultante foi salvo no arquivo "P2-5255417-ex-2-results.txt")

3 Exercício 3

Tarefa: Considere o método de Householder, estudado na lista 6. Naquele caso, para os elementos fora da diagonal k_i, foi usado o sinal oposto de $a_{i-1,i}$. O que acontece quando o sinal de k_i é o mesmo de $a_{i-1,i}$? Estude o problema para a mesma matriz considerada na lista 6, ou seja

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

Qual é a relacção entre a matriz tridiagonal obtida neste caso e a matriz tridiagonal obtida na lista 6?

Os códigos foram compilados com os comandos (original e modificado — respectivamente):

- gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none P2-5255417-ex-3a.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o P2-5255417-ex-3a.exe
- gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none P2-5255417-ex-3b.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o P2-5255417-ex-3b.exe

Resultados:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/projeto2
> $ ./P2-5255417-ex-3a.exe
 Insert matrix dimension:
10

-------> N = 10 <-------
 Original Matrix A (first 5x5):
   -2.500000    1.333333   -0.083333    0.000000    0.000000
    1.333333   -2.500000    1.333333   -0.083333    0.000000
   -0.083333    1.333333   -2.500000    1.333333   -0.083333
    0.000000   -0.083333    1.333333   -2.500000    1.333333
    0.000000    0.000000   -0.083333    1.333333   -2.500000
 Tridiagonal Matrix T (first 5x5):
   -2.500000   -1.335935    0.000000    0.000000    0.000000
   -1.335935   -2.666018    1.333384    0.000000    0.000000
    0.000000    1.333384   -2.666649    1.333335   -0.000000
    0.000000    0.000000    1.333335   -2.666666    1.333333
    0.000000    0.000000   -0.000000    1.333333   -2.666667

 --- Transformation Verification O^T A O = At ---
Difference norm ||At - O^T A O||:  0.38752E-14

Smallest eigenvalue (lambda_min):  -0.08384774
Largest eigenvalue (lambda_max):   -5.20135675

--- Verification for Eigenvalue smallest ---
Eigenvalue: -0.08384774
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.21547E-07

--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.15036E-05
```

```
> $ ./P2-5255417-ex-3b.exe
 Insert matrix dimension:
10

-------> N = 10 <-------
 Original Matrix A (first 5x5):
   -2.500000    1.333333   -0.083333    0.000000    0.000000
    1.333333   -2.500000    1.333333   -0.083333    0.000000
   -0.083333    1.333333   -2.500000    1.333333   -0.083333
    0.000000   -0.083333    1.333333   -2.500000    1.333333
    0.000000    0.000000   -0.083333    1.333333   -2.500000
 Tridiagonal Matrix T (first 5x5):
   -2.500000    1.335935   -0.000000   -0.000000   -0.000000
    1.335935   -2.666018   -1.333384   -0.000000   -0.000000
   -0.000000   -1.333384   -2.666649    1.333335   -0.000000
   -0.000000   -0.000000    1.333335   -2.666666    1.333333
   -0.000000   -0.000000   -0.000000    1.333333   -2.666667

 --- Transformation Verification O^T A O = At ---
Difference norm ||At - O^T A O||:  0.67461E-14

Smallest eigenvalue (lambda_min):  -0.08384774
Largest eigenvalue (lambda_max):   -5.20135675

--- Verification for Eigenvalue smallest ---
Eigenvalue: -0.08384774
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.17713E-07

--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.15179E-05
```

```
> $ diff A_eingenvector-a.txt A_eingenvector-b.txt
2,10d1
<   -0.1249
<    0.2328
<   -0.3226
<    0.3868
<   -0.4202
<    0.4202
<   -0.3868
<    0.3226
<   -0.2328
11a3,11
>   -0.2328
>    0.3226
>   -0.3868
>    0.4202
>   -0.4202
>    0.3868
>   -0.3226
>    0.2328
>   -0.1249
13,22c13,22
<    0.1142
<    0.2271
<    0.3216
<    0.3894
<    0.4247
<    0.4247
<    0.3894
<    0.3216
<    0.2271
<    0.1142
---
>   -0.1142
>   -0.2271
>   -0.3216
>   -0.3894
>   -0.4247
>   -0.4247
>   -0.3894
>   -0.3216
>   -0.2271
>   -0.1142
```

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/projeto2
> $ diff At_eingenvector-a.txt At_eingenvector-b.txt
2c2
<  -0.1249
---
>   0.1249
4,10c4,10
<   0.3550
<  -0.4223
<   0.4478
<  -0.4291
<   0.3678
<  -0.2702
<   0.1478
---
>  -0.3550
>   0.4223
>  -0.4478
>   0.4291
>  -0.3678
>   0.2702
>  -0.1478
13c13
<   0.1142
---
>  -0.1142
15,21c15,21
<  -0.2856
<  -0.3466
<  -0.3859
<  -0.4009
<  -0.3906
<  -0.3559
<  -0.3010
---
>   0.2856
>   0.3466
>   0.3859
>   0.4009
>   0.3906
>   0.3559
>   0.3010
```

Nota-se que todas as verificações - em ambos os códigos - resultaram em valores pequenos, mostrando que o método funcionou bem para ambos os códigos.

Entretando, ao comparar os arquivos que contêm os autovetores resultantes (”At_eingenvector-a.txt”e ”A_eingenvector-a.txt”para o sinal original e ”At_eingenvector-b.txt”e ”A_eingenvector-b.txt”para o sinal modificado) - além de comparar as matrizes impressas como resultado dos códigos - percebe-se que há uma diferença de sinal em alguns elementos da matriz (além de uma pequena diferença no valor absoluto de alguns elementos), enquanto os autovetores apresentam - além da diferença de sinal - uma inversão da ”ordem”dos elementos (apesar de serem os mesmos).

Deste modo, percebe-se que o método funcionou bem para ambos os sinais - encontrando, para cada sinal, uma das duas soluções possíveis. O erro esperado - devido ao erro de subtração numérica - não foi um problema devido a um ”bom comportamento”da matriz.

4 Exercício 4

Tarefa: Considere novamente o problema da lista 6. Tente resolvê-lo usando a menor quantidade possível de mem ória. Indique, em função do tamanho n da matriz, qual é a quantidade de espaço de memória utilizado pelas variáveis (do tipo real) no programa 3

O código foi compilado com o comando:

gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none P2-5255417-ex-4.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o P2-5255417-ex-4.exe

Modificações Feitas no Algoritmo

As seguintes alterações foram implementadas para passar de uma abordagem com alto consumo de memória para uma otimizada:

1. **Eliminação da Matriz de Transformação (`O`):** A mudança mais significativa foi deixar de construir e armazenar a matriz de transformação ortogonal explícita O (de tamanho $n \times n$).
2. **Eliminação da Cópia da Matriz Original (`A`):** A cópia da matriz original, que era mantida para verificações, foi removida. O algoritmo agora opera "in-place" em uma única matriz (`At`).
3. **Armazenamento Implícito dos Vetores de Householder:** Em vez de descartar os vetores de Householder u_k a cada passo, suas informações essenciais são agora armazenadas:
   - Uma parte do vetor u_k (os elementos de u_{k+2} em diante) é guardada na parte triangular inferior da matriz `At`, aproveitando o espaço que é zerado pelo próprio algoritmo.
   - O primeiro elemento de cada vetor u_k (`u1_storage`) e o escalar de transformação β_k (`betas`) são guardados em dois novos vetores auxiliares de dimensão n.
4. **Criação da Sub-rotina `backward_transformation`:** Uma nova sub-rotina foi criada com a finalidade de aplicar as transformações de Householder em ordem inversa $(P_{n-2}, \ldots, P_1)$ diretamente no autovetor `yt`. Ela reconstrói cada transformação a partir das informações salvas e substitui a operação `matmul(O, yt)`.
5. **Eliminação de Matrizes e Vetores Temporários:** Para a otimização máxima de memória, a função `outer_product` foi removida. A atualização da matriz na sub-rotina de Householder foi reescrita com um laço explícito,

evitando a alocação de matrizes temporárias de tamanho $n \times n$. Adicionalmente, o vetor de trabalho `q` foi eliminado, reutilizando-se o vetor `p` para os cálculos.

6. **Adaptação da Verificação:** Para cumprir o requisito de verificar a transformação, a sub-rotina (`verify_transformation`) foi modificada. Em vez de reconstruir a matriz `O` e usar $O(n^2)$ de memória, esta rotina verifica a identidade matemática equivalente $A \cdot O = O \cdot A_t$ coluna por coluna, utilizando apenas vetores temporários de tamanho $O(n)$.

Comparação do Uso de Memória

Versão Antiga (Não Otimizada)

Nesta versão, o programa mantém múltiplas cópias da matriz e constrói explicitamente a matriz de transformação O.

1. Variáveis Alocadas no Programa Principal (Globais)

Estas variáveis existem durante toda a execução do programa.

- Matriz Original `A`: n^2 elementos
- Matriz de Trabalho `At`: n^2 elementos
- Matriz de Transformação `O`: n^2 elementos
- Vetores de Diagonais `d`, `e`: $2n$ elementos
- Vetores de Autovetores `yt_min/max`, `y_min/max`: $4n$ elementos

Subtotal (Globais): $3n^2 + 6n$ elementos.

2. Pico de Memória Local (Dentro de Sub-rotinas)

A memória de pico ocorre quando o programa principal chama a sub-rotina que mais aloca memória localmente, neste caso, a `verify_transformation`.

- Matriz `C`: n^2 elementos
- Matriz `TEMP`: n^2 elementos

Pico Local: $2n^2$ elementos.

Total de Memória de Pico (Versão Antiga)

A memória total de pico é a soma das variáveis globais mais o pico de alocação local.

$$M_{\text{antiga}}(n) = \underbrace{(3n^2 + 6n)}_{\text{Globais}} + \underbrace{2n^2}_{\text{Pico Local}} = 5n^2 + 6n$$

Em bytes (assumindo 8 bytes por `real(dp)`):

$$\text{Memória}_{\text{antiga}} = (5n^2 + 6n) \times 8 \text{ bytes}$$

Versão Nova (Otimizada)

Nesta versão, as matrizes `A` e `O` são eliminadas. A informação da transformação é guardada em vetores.

1. Variáveis Alocadas no Programa Principal (Globais)

- Matriz de Trabalho `At`: n^2 elementos
- Vetores de Diagonais `d`, `e`: $2n$ elementos
- Vetores de Autovetores `yt_min/max`, `y_min/max`: $4n$ elementos
- Vetores Auxiliares `betas`, `u1_storage`: $2n$ elementos

Subtotal (Globais): $n^2 + 8n$ elementos.

2. Pico de Memória Local (Dentro de Sub-rotinas)

O pico de alocação local agora ocorre na nova sub-rotina de verificação, `verify_transformation`

- Vetor `previous_O_column`: n elementos
- Vetor `current_O_column`: n elementos
- Vetor `next_O_column`: n elementos
- Vetor `left_hand_side_column`: n elementos
- Vetor `right_hand_side_column`: n elementos
- Vetor `basis_vector`: n elementos

Pico Local: $6n$ elementos.

Total de Memória de Pico (Versão Otimizada)

A memória total de pico é a soma das novas variáveis globais mais o novo pico de alocação local.

$$M_{\text{otimizada}}(n) = \underbrace{(n^2 + 8n)}_{\text{Globais}} + \underbrace{6n}_{\text{Pico Local}} = n^2 + 14n$$

Em bytes:

$$\text{Memória}_{\text{otimizada}} = (n^2 + 14n) \times 8 \text{ bytes}$$

Análise Focada na Sub-rotina `householder_reduction`

Para isolar o impacto direto da otimização, podemos comparar a memória total (argumentos + variáveis locais) utilizada apenas pela sub-rotina de Householder em cada versão.

Tabela 1: Comparação de Memória - Apenas Sub-rotina Householder

Versão da Sub-rotina	**Fórmula de Memória (elementos)**
Antiga (não otimizada)	$2n^2 + 4n$
Otimizada	$n^2 + 4n$

Esta tabela mostra que a otimização reduziu o consumo de memória quadrático da própria sub-rotina em 50%, ao eliminar a necessidade de passar a matriz de transformação `Q` como argumento.

Conclusão Comparativa

Versão	**Fórmula de Memória (elementos)**	**Termo Dominante**
Antiga	$5n^2 + 6n$	$5n^2$
Otimizada	$n^2 + 14n$	n^2

A otimização reduziu o uso de memória que escala com o quadrado da dimensão da matriz de $5n^2$ para n^2. Isso representa uma **redução de 80%** no termo dominante, que é a principal fonte de consumo de memória para matrizes grandes.

Resultados:

```
> $ ./P2-5255417-ex-4.exe
 Insert matrix dimension:
10

-------> N = 10 <-------

 --- Transformation Verification O^T A O = At ---
Difference norm ||At - O^T A O||:  0.43568E-14

Smallest eigenvalue (lambda_min):  -0.08384774
Largest eigenvalue (lambda_max):   -5.20135675

--- Verification for Eigenvalue smallest ---
Eigenvalue: -0.08384774
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.20432E-07

--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual ||Ay - lambday||:  0.14439E-05

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/projeto2
> $ diff A_eingenvector-a.txt A_eingenvector-4.txt

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/projeto2
> $ diff At_eingenvector-a.txt At_eingenvector-4.txt
4c4
<   0.3549
---
>   0.3550
```

Nota-se que todas as verificações resultaram em valores pequenos, comprovando que o código permanece funcional , comprovando que o código permanece funcional — mas utilizando significativamente menos memória. Além disso, a pequena diferença em um elemento do vetor final pode ser atribuída a problemas de aproximação que ocorrem em ambos os códigos — não afetando a validade do resultado.