Mecânica Quântica Computacional

7600065

Lista 4

16/05/2025

- Sistema operacional: `Linux`
- Linguagem: `Fortran`
- Avaliação: 6 listas de exercícios (na média final serão utilizadas as 5 melhores notas, com peso 7% para cada lista) e 2 projetos (com peso 32.5% para cada projeto)
- Aulas: sexta-feira, 14:20-16:00, sala 149 + Lab. 206
- Email: attilio@ifsc.usp.br
- **Enviar as soluções por email até o dia 12 de Junho (quinta-feira) às 23:59; serão considerados somente os arquivos enviados no primeiro envio; no email e no projeto indicar claramente os exercícios não resolvidos**
- No relatório indicar claramente como os códigos foram compilados
- Para os códigos usar os nomes **LN-numerousp-ex-n**, onde N é o número da lista e n é o número do exercício. No caso de mais de um código para o mesmo exercício, usar letras a, b, c, etc. (além do número). Para os relatórios usar os nomes **LN-numerousp-relatorio**. Exemplos: **L4-12345678-ex-2b.F90**, **L4-12345678-relatorio.pdf**

Matrix Operations

Introdução ao capítulo 5 e seção 5.2 do livro *Computational Physics*, S. E. Koonin e D. C. Meredith (Addison-Wesley, EUA, 1990).

Lista de exercícios:

1. Calcule todos os autovalores da matriz simétrica e tridiagonal A com

$$A_{mm} = -2 \ , \qquad A_{m,m-1} = A_{m-1,m} = 1 \ ,$$

que está relacionada à discretização da derivada segunda em uma dimensão:

$$f''(x) \ = \ \frac{f(x+h) \ - \ f(x) \ + \ f(x-h)}{h^2} \ .$$

Use as relações

$$\begin{aligned}
P_1(\lambda) \ &= \ A_{11} \ - \ \lambda \\
P_2(\lambda) \ &= \ (\ A_{22} \ - \ \lambda \ ) \ P_1(\lambda) \ - \ A_{21} \, A_{12} \\
P_3(\lambda) \ &= \ (\ A_{33} \ - \ \lambda \ ) \ P_2(\lambda) \ - \ A_{32} \, A_{23} \, P_1(\lambda) \\
\ldots \ &= \ \ldots \\
P_m(\lambda) \ &= \ (\ A_{mm} \ - \ \lambda \ ) \ P_{m-1}(\lambda) \ - \ A_{m,m-1} \, A_{m-1,m} \, P_{m-2}(\lambda) \\
\ldots \ &= \ \ldots \\
P_n(\lambda) \ = \ P_A(\lambda) \ &= \ (\ A_{nn} \ - \ \lambda \ ) \ P_{n-1}(\lambda) \ - \ A_{n,n-1} \, A_{n-1,n} \, P_{n-2}(\lambda) \ .
\end{aligned}$$

Use o método de Newton-Raphson para calcular as raízes de $P_A(\lambda) = \det \, (\ A - \lambda \, I \ )$. Sugestão: escreva uma relação de recorrência para as derivadas primeira e segunda, em relação à variável λ, das funções $P_m(\lambda)$. Considere o caso $n \times n$, onde n é um input do código. Compare os resultados numéricos com o resultado exato

$$\lambda_m \ = \ - \, 4 \, \sin^2 \left[\frac{m \, \pi}{2 \, (n+1)} \right]$$

com $m = 1, 2, \ldots, n$. Sugestão: use as desigualdades

$$\max_{j=1,n} \left(A_{jj} \ + \ \sum_{k \neq j} |A_{jk}| \right) \ \geq \ \lambda_m \ \geq \ \min_{j=1,n} \left(A_{jj} \ - \ \sum_{k \neq j} |A_{jk}| \right)$$

para organizar a busca das raízes de $P_A(\lambda)$.

2. Considere a mesma matriz A do exercício anterior e o vetor d com elementos $d_i = \delta_{i,j}$, onde j é escolhido aleatoriamente entre os valores $1, 2, \ldots, n$. Resolva numericamente o sistema de equações lineares $Ax = d$, usando o algoritmo de Thomas:

$$x_1 = d'_1 - c'_1 \, x_2 \qquad \text{com} \qquad d'_1 = \frac{d_1}{b_1} \, , \;\; c'_1 = \frac{c_1}{b_1}$$

$$x_m = d'_m - c'_m \, x_{m+1} \qquad \text{com} \qquad d'_m = \frac{d_m - a_m \, d'_{m-1}}{b_m - a_m \, c'_{m-1}} \, , \;\; c'_m = \frac{c_m}{b_m - a_m \, c'_{m-1}}$$

para $m = 2, 3, \ldots, n-1$ e

$$x_n = \frac{d_n - a_n \, d'_{n-1}}{b_n - a_n \, c'_{n-1}} = d'_n \, .$$

Considere o caso $n \times n$, onde n é um input do código. Verifique a solução calculando $Ax - d$.