

Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos

Lista 5

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Junho de 2025

Sumário

1	Exercício 1	2
2	Exercício 2	3
3	Exercício 3	4

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 equação

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

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

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

Que tipo de soluções 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:

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

A Condição de Contorno de Neumann é:

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

O que nos leva a

$$\psi_0 = \psi_1 \quad (5)$$

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

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

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 autofunção normalizada e compare com a solução exata.

O código foi compilado com o comando:

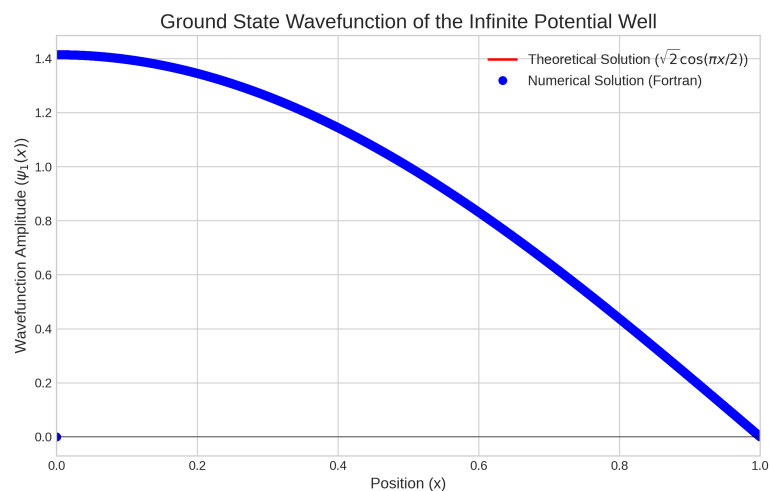
```
gfortran -ffree-form -ffree-line-length-none P2-5255417-ex-2.f90 -Wall -Wextra -pedantic -o P2-5255417-ex-2.exe
```

Resultados:

Utilizou-se $N=100000$ como se fosse $N=\infty$, 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 relação entre a matriz tridiagonal obtida neste caso e a matriz tridiagonal obtida na lista 6?

Resultados:

Obteve-se os seguintes 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  $O^T A O = A_t$  ---
Difference norm  $||A_t - O^T A O||$ : 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  $||Ay - \lambda y||$ : 0.21547E-07

--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual  $||Ay - \lambda y||$ : 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  $O^T A O = A_t$  ---
Difference norm  $||A_t - O^T A O||$ : 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  $||Ay - \lambda b||$ : 0.17713E-07

--- Verification for Eigenvalue biggest ---
Eigenvalue: -5.20135675
Norm of residual  $||Ay - \lambda b||$ : 0.15179E-05

```

```

> $ diff A eigenvector-a.txt A eigenvector-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. Entretanto, 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, 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 utilização de dupla precisão nas contas.