Computational Physics — SoSe 2022
7. Übungsblatt

Ausgabe: 26.05.2022 — Prof. H. Jelger Risselada
Abgabe: 02.06.2022 20 Uhr

Aufgabe 0: Verständnisfragen — 0 Punkte

1) Welche Diagonalisierungsalgorithmen kennen Sie und von welcher Ordnung ist ihre Laufzeit?

2) Diagonalisierung wird in der Physik häufig verwendet um die Eigenenergien eines Hamiltonoperators H zu bestimmen. Dazu muss H in einer geeigneten Basis formuliert werden. Eine Basis die immer verwendet werden kann, ist die vollständige Zustandsbasis von H. Warum ist die direkte Diagonalisierung größerer Systeme in der vollständigen Zustandsbasis oftmals nicht sinnvoll?

Aufgabe 1: Jacobi-Rotationen — 8 Punkte

Viele physikalische Systeme lassen sich durch Matrizen beschreiben, deren Eigenwerte den Eigenfrequenzen dieser Systeme entsprechen. Daher ist die Diagonalisierung von Matrizen ein mächtiges Tool in der Physik. Viele dieser Matrizen haben besondere Eigenschaften, sie sind beispielsweise symmetrisch oder hermitesch. Die Jacobi-Rotation ist ein einfaches Verfahren, mit welchem sich symmetrische Matrizen diagonalisieren lassen.

Eine Möglichkeit zur Diagonalisierung von Matrizen sind Jacobi-Rotationen. Implementieren Sie dieses Verfahren und wenden Sie es auf die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 & 4 \\ -2 & 3 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 6 & 3 \\ 4 & 0 & 3 & 5 \end{pmatrix} \tag{1}$$

an. Iterieren Sie dabei solange, bis für die Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente

$$\sum_{i \neq j} |a_{ij}|^2 < 10^{-6} \tag{2}$$

gilt. Berechnen Sie die Eigenwerte von A über die Eigen-Bibliothek[1] und vergleichen Sie die Ergebnisse.

Aufgabe 2: Householder mit QR-Iteration — 12 Punkte

Für große Matrizen dauert das Verfahren der Jacobi-Rotation, welches Sie in Aufgabe 1) verwendet haben, sehr lang. Daher wird in dieser Aufgabe mit dem Householder-Algorithmus mit QR-Iteration ein schnelleres Verfahren behandelt.

Gegeben ist die symmetrische $N \times N$ Matrix

$$A_{k,l} = k + l + k\delta_{k,l} \quad 0 \leq k, l < N. \tag{3}$$

a) Verwenden Sie Householder-Transformationen, um die Matrix A auf Tridiagonalgestalt zu bringen.

[1] `http://eigen.tuxfamily.org`

b) Bestimmen Sie mittels einer QR-Iteration die Eigenwerte von A.

c) Diagonalisieren Sie die Matrix A auch mit dem Jacobi-Verfahren welches Sie in Aufgabe 1 implementiert haben. Vergleichen Sie die Resultate und Laufzeiten.

Tun sie dies je für $N = 10$, $N = 100$, $N = 1000$