Computational Physics SoSe 2022
8. Übungsblatt

Ausgabe: 02.06.2022 Prof. H. Jelger Risselada
Abgabe: 09.06.2022 20 Uhr

Aufgabe 0: Verständnisfragen 0 Punkte

1) Welche physikalischen Anwendungsfälle einer Eigenwertberechnung fallen Ihnen ein?

2) Für Aufgabe 1 sollen Sie einen Profiler verwenden, welcher die Zeit zwischen zwei Punkten im Programmcode stoppt. Welche anderen Arten von Profilern/Profiling gibt es?

Aufgabe 1: Profiling zur Untersuchung eines Algorithmus 8 Punkte

Neben der Korrektheit eines Algorithmus ist auch seine Laufzeit relevant. Je effizienter ein Algorithmus implementiert ist, desto komplizierte Problemstellungen beziehungsweise desto höhere Genauigkeiten können behandelt werden. Durch Profiling Ihrer Programme können Sie sowohl abschätzen, welche Parameterpaare realistisch behandelbar sind, als auch überprüfen, bei welchen Programmteilen sich eine Optimierung lohnen kann.
Im Folgenden sollen Sie für vorgefertigte Eigen-Routinen ein einfaches Profiling anwenden, damit Sie später auch eigene Programme schnell profilen können.

a) Stellen Sie ein lineares Gleichungssystem $Mx = b$ aus einer zufälligen quadratisches Matrix M mit `Eigen::MatrixXd::Random` und einer zufälligen rechten Seite b mit `Eigen::VectorXd::Random` auf. Die Dimension sei durch eine Variable N gegeben.
Bestimmen Sie die Lösung x des Systems nun auf folgende Art

   1) Erstellen Sie mit `Eigen::MatrixXd::Random` eine Matrix M mit zufälligen Einträgen.
   2) Führen Sie eine QR-Zerlegung mit `Eigen` durch.
   3) Lösen Sie mit der QR-Zerlegung das linare Gleichungssystem mit einer entprechenden Methode aus `Eigen`.

b) Untersuchen Sie die Laufzeit ihres Algorithmus mit dem beigelegten Profiler-Code oder einem Profiler Ihrer Wahl. Wählen Sie hierzu unterschiedliche Größen N und messen Sie jeweils die Laufzeit von jedem einzelnen der drei Schritte aus a). Speichern Sie alle Laufzeiten und plotten Sie doppeltlogarithmisch.

   Hinweis: Sie können N linear ($N = 1, 2, 3, ..., 1000$) oder logarithmisch ($N = 1, 2, 4, ..., 1024$) variieren. Ihr maximales N können Sie abhängig von der Rechenleistung Ihres Computers wählen, allerdings sollte der Trend für große N gut erkennbar sein.

c) Deuten Sie Ihre Ergebnisse aus dem letzten Aufgabenteil hinsichtlich

   i) **Gesamtlaufzeit:** Extrapolieren Sie, wie lange Ihr Programm in etwa für $N = 1.000.000$ laufen würde.
   ii) **Optimierungspotential:** In welchen der drei Schritte aus a) würde es sich am meisten auszahlen, den Code bezüglich der Laufzeit zu optimieren?

d) Gibt es neben der Laufzeit noch andere numerische Faktoren, die eine Rechnung mit beliebig großen Matrizen einschränken?

Aufgabe 2: Anharmonischer Oszillator **12 Punkte**

In der Quantenmechanik kann die numerische Lösung der stationären Schrödingergleichung auf die Diagonalisierung einer endlich-dimensionalen Matrix zurückgeführt werden, indem man das quantenmechanische System in einem geeigneten endlich-dimensionalen Unterraum seines Hilbertraumes betrachtet.
In dieser Aufgabe sollen Sie auf diese Weise die Energieeigenwerte des anharmonischen Oszillators mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4 \tag{1}$$

numerisch berechnen.

a) In welchen Einheiten müssen Sie Längen ($x = \alpha\xi$) und Energien ($E = \beta\epsilon$) messen, um die stationäre Schrödingergleichung in die dimensionslose Form

$$\left(-\partial_\xi^2 + \xi^2 + \tilde{\lambda}\xi^4\right)\psi(\xi) = \epsilon\psi(\xi) \tag{2}$$

zu bringen? Wie lautet die resultierende Beziehung zwischen dem dimensionslosen Störungsparameter $\tilde{\lambda}$ und dem ursprünglichen λ?

Abgabe: Herleitung der Beziehungen zwischen den ursprünglichen und transformierten Größen

b) Um aus der Ortsdarstellung eine endlich-dimensionale Darstellung zu bekommen, muss der Ortsraum mit $\xi_n = n\Delta\xi$ diskretisiert und die Koordinate ξ nur auf einem endlichen Intervall $\xi \in [-L, L]$ betrachtet werden.

Der Hamilton-Operator nimmt dann die Matrixform

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \langle \xi_n | \hat{H} | \xi_m \rangle \\ &= -\frac{1}{(\Delta\xi)^2}\left(\delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} - 2\delta_{nm}\right) + \left[(\Delta\xi)^2 n^2 + \tilde{\lambda}(\Delta\xi)^4 n^4\right]\delta_{nm} \end{aligned} \tag{3}$$

an, wobei die Indizes n, m nun endlich viele Werte $n, m = -L/\Delta\xi, \ldots, L/\Delta\xi$ annehmen können.

Bestimmen Sie die zehn niedrigsten Energieeigenwerte für $\tilde{\lambda} = 0.2$ näherungsweise numerisch, indem Sie die Matrix (3) auf einem durch $L = 10$ gegebenen Intervall mit $\Delta\xi = 0.1$ diagonalisieren (wie in Aufgabe 1 auf Übungsblatt 6). Sie sollen dazu wieder die entsprechenden Routinen aus der `Eigen`-Bibliothek verwenden.

Betrachten Sie zuerst zur Kontrolle den Fall $\lambda = 0$, der das bekannte Resultat $\epsilon_n = 2(n + 1/2)$ liefern sollte.

Abgabe: Eigenwerte

c) Nun soll für den Hamilton-Operator eine endlich-dimensionale Darstellung aus der Besetzungszahldarstellung gewonnen werden. Dazu werden die Besetzungszahl-Eigenzustände $|n\rangle$ des ungestörten Oszillators ($\lambda = 0$) verwendet. Zunächst werden dazu die Matrixelemente

$$H_{nm} = \langle n | \hat{H} | m \rangle \tag{4}$$

berechnet. Hierfür wird der Erzeugsoperator

$$\hat{a}^+ = \frac{\xi - \partial_\xi}{\sqrt{2}} \tag{5}$$

und Vernichtersoperator

$$\hat{a} = \frac{\xi + \partial_\xi}{\sqrt{2}} \tag{6}$$

verwendet und man schreibt die Anharmonizität mittels

$$\xi = \frac{\hat{a} + \hat{a}^+}{\sqrt{2}} \tag{7}$$

um. Nach längerer Rechnung erhält man folgendes Ergebnis für den ξ^4-Term

$$\begin{aligned}\langle n|\xi^4|m\rangle = \frac{1}{4}\Big(&[m(m-1)(m-2)(m-3)]^{1/2}\,\delta_{n,m-4} \\ &+ [(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)]^{1/2}\,\delta_{n,m+4} \\ &+ [m(m-1)]^{1/2}\,(4m-2)\delta_{n,m-2} + [(m+1)(m+2)]^{1/2}\,(4m+6)\delta_{n,m+2} \\ &+ (6m^2+6m+3)\delta_{n,m}\Big)\,. \end{aligned} \tag{8}$$

Überprüfen Sie zuerst, dass die durch (8) gegebene Matrix wirklich hermitesch ist. Wie lauten dann die Matrixelemente H_{nm} für den gesamten Hamiltonoperator in dieser Darstellung?

Die Energieeigenwerte für $\tilde{\lambda} = 0.2$ werden nun näherungsweise numerisch berechnet, indem man H_{nm} in einem endlich-dimensionalen Unterraum $n = 0, 1, \ldots, N$ diagonalisiert. Berechnen Sie auf diese Art die 10 niedrigsten Energieeigenwerte für $N = 50$ mit Hilfe der `Eigen`-Routinen.

Abgabe: Eigenwerte

d) Vergleichen Sie die Ergebnisse aus b) und c). Welche Ergebnisse halten Sie für genauer und warum?

Hinweis: Dazu bei b) die Diskretisierung verändern bzw. bei c) N verändern und beobachten, wie sich die Ergebnisse ändern.)

Abgabe: Eigenwerte für verschiedene Diskretisierungen bzw. N und Interpretation Ihres Ergebnisses