Freie Universität Berlin
Institut für Theoretische Physik

Übungsblatt 12

Computerphysik
WS 2009/2010

Dozent: PD Dr. Daniel Sebastiani

Ausgabe: Montag, 1.2.2010 **Abgabe:** Sonntag, 7.2.2010

12.1 Lösung des Harmonischen Oszillators mittels des Conjugate-Gradients-Verfahrens

(`aufgabe12_1.c`, `aufgabe12_1.pdf`, 7 Punkte)

Implementieren Sie den Conjugate-Gradients-Algorithmus, um den folgenden Ausdruck für die Grundzustandsenergie des eindimensionalen harmonischen Oszillators ($\hbar = 1$, $m = 1$, $\omega = 100$) zu minimieren:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\phi] &= \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \\ \hat{H} &= -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\omega^2 x^2. \end{aligned}$$

Vergleichen Sie die Konvergenz mit der Konvergenz des Steepest-Descent-Verfahrens mit optimierter Schrittlänge α, indem Sie $\beta = 0$ setzen. Plotten Sie die erhaltene Wellenfunktion und prüfen Sie, ob der richtige Energieeigenwert erhalten wurde.

Hinweise:

Für eine gegebene (äquidistante) Diskretisierung der x-Achse mit einer festen Zahl N von Punkten ($x_i = i\Delta$, $\Delta = 1/N$) stellen die $\phi_i = \phi(x_i)$ einen Vektor $\in \mathbb{R}^N$ dar, und $\mathcal{E}[\phi]$ entspricht dem $f(x)$ aus der Vorlesung. Allerdings ist $\mathcal{E}[\phi]$ hier *keine* einfache quadratische Funktion von ϕ.

Verwenden Sie der Einfachheit halber eine einfache Riemann-Summe für die auftretenden Integrale und die einfachste Diskretisierung für die Ableitungen der kinetischen Energie, also z.B. $\nabla^2\phi_i = \frac{\phi_{i+1}+\phi_{i-1}-2\phi_i}{2\Delta^2}$. Beachten Sie auch, dass dieser Ausdruck für ϕ_0 und ϕ_{N-1} leicht angepasst werden muss (man könnte z.B. einfach $\nabla^2\phi_0 \approx \nabla^2\phi_1$ setzen).

Beachten Sie weiterhin bei der Berechnung des Gradienten $\frac{d}{d\phi_i}\mathcal{E}$, dass die Wellenfunktion während der Minimierung nicht automatisch normiert ist (d.h. man darf nicht $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ voraussetzen!). Das conjugate-gradients-Verfahren erzeugt auch nicht automatisch eine normierte Wellenfunktion, d.h. es ist sinnvoll, ϕ in jedem Schritt neu zu normieren. Bei der Berechnung der Schrittlänge α muss der Hamiltonian selbst als Matrix verwendet werden, d.h. es muss $\langle p | \hat{H} | p \rangle$ aus der konjugierten Richtung p bestimmt werden.