Numerische Methoden der Physik

SoSe 2021 – Prof. Marc Wagner

Lasse Müller: lmueller@itp.uni-frankfurt.de
Laurin Pannullo: pannullo@itp.uni-frankfurt.de

Aufgabenblatt 5

Wird besprochen am 25.05 und 26.05.

Aufgabe 1 [*Die Schrödingergleichung*] (2+6+4+4=16 Pkt.)

Wir betrachten ein quantenmechanisches System, in dem sich ein Teilchen mit Masse m in einer Dimension in dem Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}\, m\, \omega^2\, x^2 + \lambda\, x^4 \;,$$

bewegt, wobei ω und λ Parameter des Systems sind.

(i) Schreibe die Schrödingergleichung auf. Führe dimensionslose Einheiten ein, um die numerische Lösung des Problems zu vereinfachen. Ist es hier möglich, wie in der Vorlesung im Fall des harmonischen Oszillators besprochen, das System für eine beliebige Wahl an Parametern m, ω und λ mit einer *einzigen* numerischen Simulation zu untersuchen? Wenn nicht, welche dimensionslosen Größen beschreiben unterschiedliche physikalische Situationen?

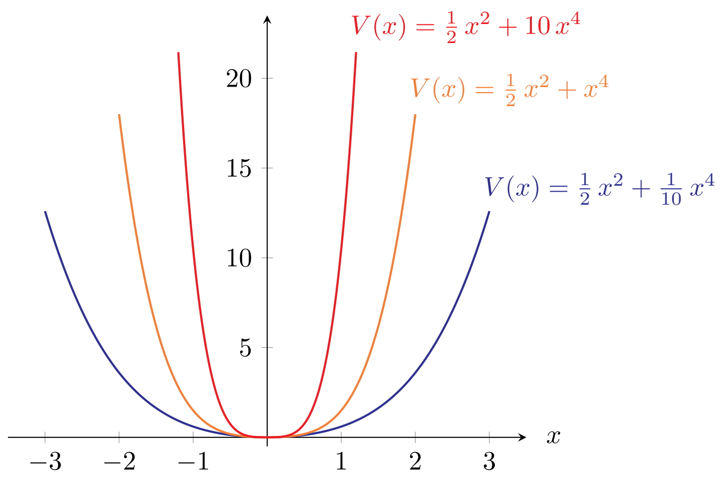
(ii) Um die Energieeigenwerte und Wellenfunktion des Systems numerisch zu berechnen, implementiere den in der Vorlesung besprochenen "Shooting"-Algorithmus. Welche Anfangs- und/oder Randbedingungen sind hier vorteilhaft?

(iii) Bestimme die Energie des Grundzustands für kleine λ analytisch in zeitunabhängiger Störungstheorie erster Ordnung. Nun teste deinen Code indem du die Energie des Grundzustandes für einen kleinen Wert für λ numerisch bestimmst und mit dem analytischen Ergebnis vergleichst. Nutze hierbei dein analytisches Ergebnis als Orientierung für den Startwert der Energie in dem Algorithmus.

(iv) Benutze nun deinen Code um die ersten drei Energieeigenwerte zu bestimmen. Benutze hierfür

$$\frac{2\,\hbar\,\lambda}{m^2\,\omega^3} = 0.1 \qquad \text{and} \qquad \frac{2\,\hbar\,\lambda}{m^2\,\omega^3} = 10.0 \quad .$$

Bestimme die Energielevel zunächst grob auf grafischem Weg, analog zu den Beispielen in der Vorlesung. Anschließend benutze die "Shooting"-Methode um präzise Ergebnisse zu erhalten. Interpretiere die Resultate. Was erwartest du für sehr große Werte von λ?



Aufgabe 2 [*Rechenoperationen im Gauss Verfahren*] `(4 Pkt.)`

Es sei A eine $N \times N$ Matrix mit $\det(A) \neq 0$, $\mathbf{b}_j$ Vektoren mit N Komponenten und $j = 0, \ldots, M-1$, dann beschreibt

$$A\mathbf{x}_j = \mathbf{b}_j$$

M lineare Gleichungssysteme mit jeweils N Gleichungen. In der Vorlesung wurde zur Lösung solcher linearen Gleichungssysteme sowohl die Gauß-Jordan-Elimination als auch die Gauß-Elimination mit Rückwärtssubstitution vorgestellt. Desweiteren wurde festgestellt, dass für $M \ll N$ das Verfahren mit Rücksubstitution $\approx 1.5\times$ schneller als das normale Verfahren ist.

Überprüfe diese Aussage analytisch indem du die Anzahl an benötigten Rechenoperationen für allgemeine N, M für die beiden Verfahren berechnest und dann den Spezialfall $M \ll N$ betrachtest. *Hinweis: Du kannst annehmen, dass Multiplikation, Division und Subtraktion die gleiche Rechenzeit in Anspruch nehmen.*