
Numerische Methoden der Physik

Verwendung numerischer Bibliotheken

Marc Wagner

Institut für theoretische Physik
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

SS 2014

Eigenwerte mit GSL (Gnu Scientific Library)

- Installation, Dokumentation, etc.: <http://www.gnu.org/software/gsl/>.

```
1. // *****
2.
3.
4.
5. // GSL_Eigensystems.C
6.
7. // Demonstriert die Verwendung von GSL am Beispiel eines Eigenwertproblems.
8.
9.
10.
11. // *****
12.
13.
14.
15. #include <math.h>
16. #include <stdio.h>
17. #include <stdlib.h>
18.
19. #include <gsl/gsl_blas.h>
20. #include <gsl/gsl_eigen.h>
21.
```

```
22.
23.
24. // *****
25.
26.
27.
28. int main(int argc, char **argv)
29. {
30.     int i1;
31.
32.     const int n = 2; // Matrix ist n x n.
33.
34.
35.     // *****
36.
37.
38.     // Die Matrix deren Eigenwerte berechnet werden (hier die erste
39.     // Pauli-Matrix).
40.
41.     gsl_matrix *A = gsl_matrix_alloc(n, n);
42.
43.     gsl_matrix_set(A, 0, 0, 0.0);
44.     gsl_matrix_set(A, 0, 1, +1.0);
45.     gsl_matrix_set(A, 1, 0, +1.0);
46.     gsl_matrix_set(A, 1, 1, 0.0);
47.
48.     // Hier werden am Ende die Eigenwerte gespeichert.
```

```
49.  gsl_vector *lambda = gsl_vector_alloc(n);
50.
51.
52.  // *****
53.
54.
55.  // Temporärer Speicherplatz für Eigenwertberechnung.
56.  gsl_eigen_symm_workspace *workspace = gsl_eigen_symm_alloc(n);
57.
58.  // Der Aufruf der GSL-Eigenwert-Funktion (symmetric bidiagonalization,
59.  // QR reduction).
60.  gsl_eigen_symm(A, lambda, workspace);
61.
62.  // Ausgabe der berechneten Eigenwerte.
63.  for(i1 = 0; i1 < n; i1 ++)
```

64. fprintf(stderr, "\\lambda_%d = %+.6lf\\n", i1, gsl_vector_get(lambda, i1));

```
65.
66.  // Speicher freigeben.
67.  gsl_eigen_symm_free(workspace);
68.
69.
70.  // *****
71.
72.
73.  // Speicher freigeben.
74.  gsl_matrix_free(A);
75.  gsl_vector_free(lambda);
```

```
76.  
77.  
78. // *****  
79.  
80.  
81. return EXIT_SUCCESS;  
82. }  
83.  
84.  
85.  
86. // *****
```

```
mwagner@laptop-tigger:~/Physik/Teaching/14SS_Numerik/GSL_Eigensystems$ ls -l  
insgesamt 4  
-rw-r--r-- 1 mwagner mwagner 1682 Apr 13 21:16 GSL_Eigensystems.C  
mwagner@laptop-tigger:~/Physik/Teaching/14SS_Numerik/GSL_Eigensystems$ g++ -o GSL_Eigensystems GSL_Eigensystems.C -lm -lgsl -lgslcblas  
mwagner@laptop-tigger:~/Physik/Teaching/14SS_Numerik/GSL_Eigensystems$ ls -l  
insgesamt 16  
-rwxrwxr-x 1 mwagner mwagner 9204 Jun 24 11:56 GSL_Eigensystems  
-rw-r--r-- 1 mwagner mwagner 1682 Apr 13 21:16 GSL_Eigensystems.C  
mwagner@laptop-tigger:~/Physik/Teaching/14SS_Numerik/GSL_Eigensystems$ ./GSL_Eigensystems  
\lambda_0 = +1.000000  
\lambda_1 = -1.000000
```