Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2023	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 12

12.1 Projektionsmethode (Abgabe 03.07.2023)

Untersuchen Sie die beiden Matrizen aus Aufgabe 11.2 mit der Projektionsmethode.

1. Schreiben Sie ein Programm, das die zu untersuchende Matrix (H_{ij}) einliest und die folgenden Iterationsschritte ausführt.

   Nullter Schritt: Erzeugung eines normierten (zufälligen) Zustandes ϕ_0 mit den Komponenten ϕ_0^j.

   Erster Schritt: Erzeugung des unnormierten neuen Zustandes

   $$\tilde{\phi}_1^i \quad = \quad \sum_j \left(\delta_{ij} - \epsilon H_{ij}\right) \phi_0^j \tag{1}$$

   mit einem kleinen ϵ, z.B. $\epsilon = 0.01$.

   Zweiter Schritt: Normierung des neuen Zustandes

   $$\phi_1^i \quad = \quad \tilde{\phi}_1^i \Big/ \sqrt{\sum_j |\tilde{\phi}_1^j|^2} \; . \tag{2}$$

   Dritter Schritt: Berechnung des Energieerwartungswertes zu Kontrollzwecken

   $$E_1 \quad = \quad \sum_{i,j} \phi_1^i H_{ij} \phi_1^j \; . \tag{3}$$

   Danach wird mit dem ersten Schritt fortgefahren und der nächste Zustand erzeugt usw..

2. Nutzen Sie für alle Operationen die fertigen Routinen von `numpy`, da diese den Vorteil haben schon `openMP`-parallelisiert zu sein. Testen Sie mal, was das bringt.

3. Tragen Sie den Energieerwartungswert gegen die Zahl der Schritte auf. Untersuchen Sie unterschiedliche ϵ. Erreichen Sie den aus Aufgabe 11.2 bekannten Grundzustand?

4. **Zusatzpunkte:** Oft speichert man die Matrix nicht als Matrix, sondern nur die von Null verschiedenen Elemente und ihre Indizes. Wie könnte man das jetzt machen? Sie können das selbst programmieren (wenige Zeilen) oder `scipy`-Routinen für dünn besetzte Matrizen nutzen. Finden Sie approximativ den kleinsten Eigenwert der ganz großen Matrix auf meiner Webseite.

5. **Zusatzpunkte:** Machen Sie sich noch einmal klar, welche Komponenten eines Zufallsvektors die Projektionsmethode verstärkt und erklären Sie, welche dies bei der Power-Methode sind, bei der man den Hamiltonoperator (in hoher Potenz) auf einen Zufallsvektor anwendet. Damit versteht man gut, welche Energien in der Lanczos-Methode am schnellsten konvergieren.

6. **Zusatzpunkte:** Wenn Sie die Aufgabe geschafft haben, ist eigentlich eine Erweiterung auf Lanczos nicht mehr so schwierig. Toben Sie sich aus für noch mehr Zusatzpunkte.

12.2 Fourier-Transformation

Ich wurde einmal darauf angesprochen, dass ich zu viele Beispiele aus der Theorie bringe. Hier kommt der Ausgleich.
Für Freunde der Experimentalphysik: Ein Experimentalphysiker hat in seinem Experiment die in der Datei `experiment.dat` gespeicherten experimentellen Messdaten $b(t)$ experimentell bestimmt. Sein experimenteller Messapparat hat dabei das experimentelle Ergebnis etwas verrauscht. Der auch theoretisch nicht ganz unversierte Experimentator weiß aber, dass sein wahres experimentelles Messergebnis $f(t)$ aus einer Überlagerung dreier harmonischer Schwingungen besteht, d.h.

$$f(t) = \sum_{i=1}^{3} \sin(2\pi f_i t) \ . \tag{4}$$

f_1, f_2 und f_3 sind die unbekannten Frequenzen.
Rekonstruieren Sie die wahren experimentellen Werte $a(t)$, indem Sie die experimentellen Messdaten $b(t)$ mit einem selbstgeschriebenen Programm fouriertransformieren und die vorkommenden Frequenzen filtern. Erläutern Sie Ihr Vorgehen und stellen Sie die experimentellen Messdaten $b(t)$ sowie die rekonstruierten wahren experimentellen Werte $a(t)$ graphisch dar. Diskutieren Sie insbesondere die Filterprozedur und vergleichen Sie auch mit dem Ausgangssignal $f(t)$.

Diskutieren Sie, ob die Filterprozedur die „wahren“ Messdaten beeinflusst.

Informieren Sie sich über fertige Routinen zur Fouriertransformation.

In dieser Teilaufgabe kam der Term „Experiment“ 14-mal vor. Das gleicht das sonstige Übergewicht der theoretischen Physik in dieser Veranstaltung mehr als aus!