C. Lasser, F. Marquardt, D. Sattlegger

14. Dezember 2011

Aufgabe 9 (Chebyshev-Methode)

Wir untersuchen eine Möglichkeit zur Approximation der Matrixexponentialfunktion. Sei dazu $A \in \mathbb{C}^{d\times d}$ eine hermitesche Matrix, deren Eigenwerte in einem Intervall $[a, b]$ liegen und $v \in \mathbb{C}^d$. Dann gilt[1] $\exp(-i\,\Delta t\, A)\, v \approx P_{m-1}(\Delta t A)v$ mit

$$P_{m-1}(\Delta t A)v = \exp(-i\,\Delta t\,\tfrac{a+b}{2})\left(c_0 v + 2\sum_{k=1}^{m-1} c_k T_k\left(\tfrac{2}{b-a}\left(A - \tfrac{a+b}{2}I\right)\right)v\right)$$

und $c_k = (-i)^k J_k\left(\Delta t \frac{b-a}{2}\right)$, wobei J_k die k-te Besselfunktion bezeichne. Um $P_{m-1}(\Delta t A)v$ zu berechnen verwenden wir den Clenshaw-Algorithmus[2]. Dieser lautet in Pseudocode:

1. `Setze` $d_{m+1} = d_m = 0$ `und` $X = \frac{2}{b-a}\left(A - \frac{a+b}{2}I\right)$.
2. `Für k = (m-1):(-1):0 berechne` $d_k = c_k v + 2Xd_{k+1} - d_{k+2}$.
3. `Ausgabe:` $d = \exp(-i\,\Delta t\,\frac{a+b}{2})\,(d_0 - d_2)$

(a.) Zeigen Sie, dass der Algorithmus das gewünschte Resultat liefert, also dass

$$d = P_{m-1}(\Delta t A)v$$

gilt.

(b.) Implementieren Sie einen Algorithmus zur Lösung der Schrödingergleichung, bei dem die Ortsdiskretisierung mittels Fourierkollokation und die Zeitdiskretisierung mit Hilfe der Chebyshev-Methode durchgeführt wird.

Aufgabe 10 (Schrittweitenbeschränkung)

Die Voraussetzung $m \geq \omega$ für das Einsetzen der Fehlerreduktion bei der Chebyshev-Methode kann auch als Beschränkung der Zeitschrittweite durch die Ortsschrittweite verstanden werden [3].

(a.) Wenden Sie den in **Aufgabe 9** (b.) implementierten Algorithmus auf das Problem aus **Aufgabe 8** an, d.h. lösen Sie die Schrödingergleichung $i\,\frac{d}{dt}\psi = \left(-\frac{1}{2\mu}\Delta + V\right)\psi$ mit Potential $V(x) = -\cos(\frac{x}{2})$, Masse $\mu = 100$ und Anfangswellenfunktion

$$\psi(x, 0) = \sqrt[4]{\frac{20}{\pi}}\, \mathrm{e}^{-10\,(x-0.5)^2}$$

auf dem Rechengebiet $[-\pi, \pi]$ für $t \in [0, 100]$. Wählen Sie die Parameter a und b geeignet und verwenden Sie zur Ortsdiskretisierung $N = 128$ Punkte, $\Delta t = 0.1$ als Zeitschrittweite und den Parameter $m = 101$.

(b.) Variieren Sie die Parameter N, Δt und m und finden Sie Parametersätze für die der Algorithmus funktioniert und solche für die der Algorithmus keine vernünftigen Resultate liefert. Dokumentieren Sie ihre Experimente.

[1] siehe [L], p.90, **Theorem 2.4**
[2] siehe [L], p.90, **Algorithm 2.3**
[3] siehe [L], p.91, (2.15)