Übungsblatt 5

Aufgabe 10: Chebychev-Methode

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

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

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

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

a) Zeigen Sie, dass der Algorithmus das gewünschte Ergebnis liefert, also dass

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

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

Übungsblatt 5

Aufgabe 11: Schrittweitenbeschränkung

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

a) Wenden Sie den in **Aufgabe 10** b) implementierten Algorithmus auf das Problem aus **Aufgabe9** an, das heißt, lösen Sie die Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{1}{2\mu}\Delta + V(x)\right)\psi(x,t) \tag{S}$$

mit dem Potential $V(x) = -\cos(\frac{x}{2})$, Masse $\mu = 100$ und der Anfangswellenfunktion $\psi(x,0) = \sqrt[4]{\frac{20}{\pi}}e^{-10(x-0.5)^2}$ 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 sowie m und finden Sie Parametersätze für die der Algortihmus funktioniert und solche für die der Algorithmus keine vernünftigen Resultate liefert. Dokumentieren Sie Ihre Experimente.

Informationen

Die Besprechung der Aufgaben findet am **Dienstag, den 15.01.2013** statt.

Bei Fragen, der Entdeckung von Fehlern im Übungsblatt oder anderen Problemen melden Sie sich bitte per eMail bei Falko Marquardt (marquard@ma.tum.de).