Übungsbeispiele

1. Berechnen Sie die cubic-spline-Interpolation durch die Punkte in der Datei `punkte.dat`.
2. Bestimmen Sie den relativen Fehler der Iteration

$$A_{n+1} = 2^n \sqrt{2\left(1-\sqrt{1-\left(A_n / 2^n\right)^2}\right)}; \quad A_2 = 2\sqrt{2},$$

die gegen π konvergieren sollte, in single precision.

3. Lösen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein minimales Gauss'sches Wellenpaket mit Impuls k_0, das auf eine Potentialbarriere der Höhe V_0 trifft.

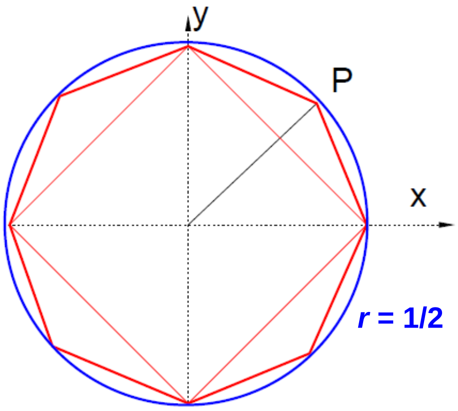
$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{ik_0 x}; \quad \sigma = 2; \quad k_0 = 1$$

$$V = \begin{cases} 10; & 10 < x < 14 \\ 0; & \text{sonst} \end{cases}$$

ad Bsp. 2:

Umfang eines eingeschriebenen regelmäßigen Vielecks sollte gegen den Umfang des Kreises konvergieren.

P=$\left(\cos(\frac{2\pi}{n})/2, \sin(\frac{2\pi}{n})/2\right)$



$$A_n = 2^n \cdot \frac{1}{2}\left|\begin{pmatrix}\cos(2\pi/n)-1 \\ \sin(2\pi/n)\end{pmatrix}\right|$$

$$= 2^{n-1}\sqrt{2(1-\cos(2\pi/n))}$$

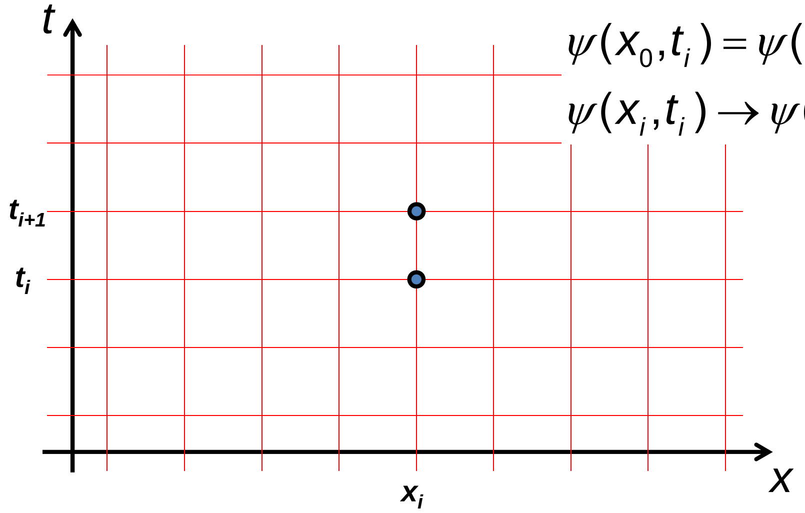
$$A_{n-1} = 2^{n-2}\sqrt{2\left(1-\cos\left(2\frac{2\pi}{n}\right)\right)}$$

$$\rightarrow \quad \cos(2\pi/n) = \sqrt{1-\left(\frac{A_{n-1}}{2^{n-1}}\right)^2}$$

ad Bsp. 3:

Diskretisierung in *x* und *t*; Randbedingung

$$i\partial_t \psi(x,t) = \{-\Delta/2 + V(x)\}\,\psi(x,t)\,; \quad e = \hbar = m_e = 1$$



$$\psi(x_0,t_i) = \psi(x_N,t_i) = 0$$

$$\psi(x_i,t_i) \to \psi(x_i,t_{i+1})?$$

explizites Euler-Verfahren (konsistent, nur für $\Delta t \leq \Delta x^2/2$ stabil):

$$\psi''(x_i,t_j) = \frac{\psi(x_{i-1},t_j) - 2\psi(x_i,t_j) + \psi(x_{i+1},t_j)}{\Delta x^2}\,; \quad \dot{\psi}(x_i,t_j) = \frac{\psi(x_i,t_{j+1}) - \psi(x_i,t_j)}{\Delta t}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1,j+1} \\ \\ \psi_{i,j+1} \\ \\ \psi_{N-1,j+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \left\{ \delta_{ij} - \frac{i\Delta t}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 1 & -1/2 & & & & & 0 \\ -1/2 & 1 & -1/2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & -1/2 & 1 & -1/2 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & -1/2 & 1 & -1/2 \\ 0 & & & & & -1/2 & -2 \end{pmatrix} - \delta_{ij} i \Delta t V_j \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{1,j} \\ \vdots \\ \psi_{i-1,j} \\ \psi_{i,j} \\ \psi_{i+1,j} \\ \vdots \\ \psi_{N-1,j} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi(x_i,t_{j+1}) = (1 - i\tau\mathbf{A} - i\Delta t V(x_i))\,\psi(x_i,t_j)$$ → Matrix-Vektor-Multiplikation

implizites Euler-Verfahren (konsistent, immer stabil):

$$\psi''(x_i,t_j) = \frac{\psi(x_{i-1},t_{j+1}) - 2\psi(x_i,t_{j+1}) + \psi(x_{i+1},t_{j+1})}{\Delta x^2}; \quad \dot{\psi}(x_i,t_j) = \frac{\psi(x_i,t_{j+1}) - \psi(x_i,t_j)}{\Delta t}$$

Umformung:

$$(1 + i\tau\mathbf{A})\psi(x_i,t_{j+1}) = -i\Delta t V(x_i)\,\psi(x_i,t_j)$$ → lin. Gleichungssystem

Crank-Nicolson-Verfahren (konsistent, immer stabil):

$$\psi''(x_i,t_j) = \frac{1}{2}\left(\frac{\psi(x_{i-1},t_j) - 2\psi(x_i,t_j) + \psi(x_{i+1},t_j)}{\Delta x^2} + \frac{\psi(x_{i-1},t_{j+1}) - 2\psi(x_i,t_{j+1}) + \psi(x_{i+1},t_{j+1})}{\Delta x^2}\right)$$

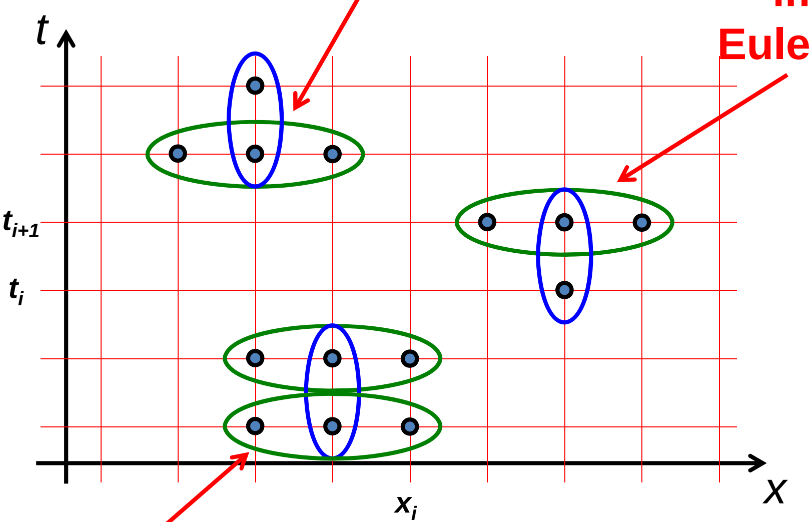
$$\rightarrow \quad (1 + \frac{i\tau}{2}\mathbf{A})\,\psi(x_i,t_{j+1}) = (1 - \frac{i\tau}{2}\mathbf{A} - i\Delta t V(x_i))\,\psi(x_i,t_j)$$

→ Matrix-Vektor-Multiplikation + lin. Gleichungssystem

ad Bsp. 3:

explizites Eulerverfahren

implizites Eulerverfahren



Crank-Nicolson-Verfahren