

1 Fehler im Skript?

Vorlesung	Seite	Fehler	Korrekt
4	12	$R\vec{x} = \vec{b}$	$U\vec{x} = \vec{b}$
6	7	$x_{i+1} = \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6}$	$x_{i+1} = x_i + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6}$

2 Definitionen

Konvergenz Konvergenz ist das Erreichen einer bestimmten Genauigkeit.

Man kann für Konvergenz verlangen, dass der Fehler

$$\Delta x_n < \epsilon$$

ist. Es gibt den Absoluten sowie den Relativen Fehler

$$\Delta x_n = |x_n - \bar{x}| \qquad \delta_n = \frac{|x_n| - \bar{x}}{\bar{x}}$$

In der Praxis kennt man \bar{x} nicht, deswegen muss man Abschätzungen machen.

3 Algorithmen

Nullstellen finden

Bisektionsmethode. Die Funktion muss stetig sein und monoton in einem Intervall $[a, b]$ und eine Nullstelle $x_0 \in [a, b]$ haben. Man sucht dann die Nullstelle indem man das Vorzeichen der Funktion überprüft, wenn es sich ändert grenzt man das Intervall ein.

Minimas finden

Methode des goldenen Schnittes. Man hat ein Intervall worin sich ein Wert befindet an dem die Funktion kleiner ist als am Rand des Intervalls. Man sucht dann immer rechts und links von diesem Wert nach dem Minimum.

Quadratische Interpolation Genau wie vorhin, nur dass der neue Schätzwert für das Minimum durch Quadratische Interpolation gewonnen wird.

Minima mehrdimensionaler Funktionen

Blind Search Man minimiert die Funktion sukzessive in Richtung von Einheitsvektoren.

Steepest descent Man minimiert die Funktion in Richtung des Gradienten.

Newton-Methode Man macht eine Taylorentwicklung um einen Punkt und sucht dessen Minimum. Dann minimiert man in Richtung dieses Minimums.

Powell-Methode

Methode der konjugierten Gradienten

Ausgleichsrechnung

Newton-Methode

Quasi-Newton-Methode

Lineare Ausgleichsrechnung $S(\alpha)$ ist eine quadratische Funktion der Parameter α . Es gibt also nur ein einziges Minimum welches als Lösung eines linearen Gleichungssystems gegeben ist.

Lösen eines Linearen Gleichungssystems

LU Verfahren Das Gleichungssystem $M\vec{x} = \vec{b}$ soll gelöst werden. Dazu wird die Matrix M in ein Produkt einer oberen und unteren Dreiecksmatrix L und U zerlegt. Dann wird zuerst das Problem $L\vec{y} = \vec{b}$ für \vec{y} gelöst. Danach $U\vec{x} = \vec{b}$ für \vec{x} . Das Lösen der einzelnen Gleichungen ist schneller aufgrund der Dreiecksform der Matrizen.

Numerische Integration

Quadraturformel

Trapezregel

Simpson-Methode

Uneigentliches Integral

Gewöhnliche Differentialgleichungen Euler-Methode

Runge-Kutta-Methode 2. Ordnung

Runge-Kutta-Methode 4. Ordnung Das ist *die* Runge-Kutta-Methode.

Eigenwertproblem

$$\sum_{n,m} H_{n,m} \Phi_n = E_\alpha \sum_{n,m} S_{n,m} \Phi_n$$

$$H_{n,m} = \langle n | H | m \rangle \qquad S_{n,m} = \langle n | m \rangle$$

Das diagonalisieren einer Dichten Matrix der dimension N braucht $\propto N^3$ operationen. Wenn man eine dünn besetzte Matrix hat und nur die ersten M Eigenwerte wissen will, dann kann man sie in $\propto NM$ Operationen bestimmen.

Partielle Differentialgleichungen mit Randbedingungen

Jacobi-Methode Anzahl der Iterationen um Fehler um 10^{-P} zu reduzieren ist $\frac{1}{4}Pd$ ohne Überrelaxation. $\frac{1}{3}P\sqrt{d}$ mit Überrelaxation. Dabei ist $d = N_x N_y N_z$ die Anzahl der Gitterpunkte.

Gauß-Seidel Methode

Partielle Differentialgleichungen mit Anfangswert

Entwicklung in Energieeigenbasis Wenn die Dimension des Hilberttraums klein ist kann H diagonalisiert werden.

Krylov-Methode Erhält die Norm der Funktion. Gut für große, dünn besetzte Hamilton Matrizen.

Taylorentwicklung Erhält die Norm nicht. Einfach zu programmieren.

Crank-Nicolson-Methode Gut für große, tridiagonale Hamilton Matrizen.

Fourier Transformation

Split-Operator Methode

$$\Psi(x, t) = e^{i\frac{H}{\hbar}} \Psi(x, t_0)$$