Übungsblatt 9

Dozent: PD Dr. Daniel Sebastiani

Ausgabe: Montag, 11.1.2010 **Abgabe:** Sonntag, 17.1.2010

9.1 Aufenthaltsdichte des H.O. (`aufgabe9_1.c`, `aufgabe9_1.pdf`, 4 Punkte)

1. Die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators (mit $m = \omega = \hbar = 1$) im Zustand $n = 10$ ist gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
\varphi_{10}(x) &= A\,\mathrm{e}^{-x^2/2}\,H_{10}(x) \\
H_{10}(x) &= x^{10} - 45x^8 + 630x^6 - 3150x^4 + 4725x^2 - 945
\end{aligned}
$$

   Berechnen Sie die Nullstellen z_i der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\varphi_{10}(x)|^2$ numerisch. Verwenden Sie hierzu zunächst das normale Newton-Raphson-Verfahren (mit numerischem Differenzenquotienten) und iterieren Sie bis zur implizit gegebenen Genauigkeit $\left|\varphi_{10}\left(z_i^{(t)}\right)\right|^2 \leq 10^{-6}$. Wählen Sie geeignet verteilte Startpunkte $z_i^{(t=0)}$ für die Iterationen, so dass Sie alle 10 Nullstellen von $|\varphi_{10}(x)|^2$ finden. Welches Phänomen beobachten Sie, falls ein Startpunkt $z_i^{(t=0)}$ (zu) nah an einem Maximum liegt? Wie können Sie dieses beheben? Ändert sich die Zahl der benötigten Iterationen, wenn Sie stattdessen nach den Nullstellen der Wellenfunktion $\varphi_{10}(x)$ suchen? Warum?

2. Implementieren Sie auch die Methode der impliziten Deflation in das Newton-Raphson-Verfahren und bestimmen Sie erneut die Nullstellen von $|\varphi_{10}(x)|^2$ und $\varphi_{10}(x)$. Erkennen Sie Unterschiede zum Algorithmus ohne Deflation (Konvergenz, Zahl der Startpunkte)?

9.2 Matrixnormen (`aufgabe9_2.pdf`, 2 BonusPunkte)

1. Es sei eine Norm $\|\cdot\|_v$ auf $\mathbb{R}^n$ gegeben. Zeigen Sie, dass die hierdurch auf $\mathbb{R}^{n\times n}$ induzierte Matrixnorm $\|\cdot\|_M$ submultiplikativ ist, d.h. dass gilt:

$$
\|A\,B\|_M \leq \|A\|_M\ \|B\|_M \qquad \forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n} \tag{1}
$$

2. Es sei $A = ((a_{jk})) \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Zeigen Sie, dass die durch $\|x\|_\infty := \max\limits_{j=1,\ldots,n} |x_j|$ gegebene Vektornorm die folgende induzierte Matrixnorm $\|\cdot\|_\infty$ (die "maximale Zeilensumme") besitzt:

$$
\|A\|_\infty := \max_{j=1,\ldots n} \left(\sum_{k=1}^{n} |a_{jk}| \right) \tag{2}
$$

Hinweise:

zu 1: Nehmen Sie den Ausdruck, den Sie durch Einsetzen der Definition der induzierten Matrixnorm $\|A\|_M = \sup_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$ in die linke Seite von (1) erhalten, und erweitern Sie den Bruch mit einem geeigneten Term. Dieser könnte z.B. aus der Norm eines Matrix-Vektor-Produkts bestehen, welches wiederum selbst $\in \mathbb{R}^n$ ist, was eine Abschätzung nach oben ermöglicht.

zu 2: Zeigen Sie zunächst über die in der Vorlesung gegebene Abschätzung für $\|Ax\|_\infty$ die Verträglichkeit der Matrixnorm (2) mit der Vektornorm. Damit erhalten Sie eine Abschätzung *nach oben* ($\hat{=} \sup_{x\in\mathbb{R}^n}$) für $\frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty}$. Zeigen Sie anschließend, dass es andererseits einen Vektor $\tilde{x}$ gibt, für den gilt: $\|A\tilde{x}\|_\infty \geq \|A\|_\infty \|\tilde{x}\|_\infty$. Versuchen Sie hierfür den Vektor mit den Elementen $\tilde{x}_j = \frac{|a_{mj}|}{a_{mj}}$ (und $\tilde{x}_j = 0$ falls $a_{mj} = 0$), wobei der Index m gegeben sei durch diejenige Zeile der Matrix A mit der größten Zeilensumme, d.h. für den gilt: $\max\limits_{j=1,\ldots n} \left(\sum_{k=1}^{n} |a_{jk}| \right) = \sum_{k=1}^{n} |a_{mk}|$.