

Universität Osnabrück Fachbereich Physik	Numerische Physik WS 2003/2004	PD Dr. Jürgen Schnack Dipl.-Phys. Matthias Exler
---	-----------------------------------	---

Aufgabenblatt 10

10.1 Extremale Eigenwerte einer hermiteschen Matrix

Oft ist es nicht möglich oder auch nicht von Interesse, alle Eigenwerte und Eigenvektoren einer hermiteschen Matrix zu bestimmen. In solchen Fällen nutzt man Verfahren wie die Projektionsmethode oder den Lanczos-Algorithmus.

Verwenden Sie im Folgenden die unter

<http://obelix.physik.uni-osnabrueck.de/~schnack/teaching/2003-NP/> abgelegt Beispielmatrix. In der Datei sind nur die von Null verschiedenen Matrixelemente im Format k, l, H_{kl} enthalten.

- Schreiben Sie mit einem Werkzeug Ihrer Wahl (matlab, mathematica, Fortran, C) ein Programm, das mittels Projektionsmethode den Grundzustand sowie den zugehörigen Eigenwert sowie den ersten angeregten Zustand und seinen Eigenwert bestimmt.
- Schreiben Sie ebenfalls ein Programm, das mit dem Lanczos-Verfahren den kleinsten Eigenwert bestimmt.
- Vergleichen Sie die Eigenwerte mit den exakten Eigenwerten aus Übung 5 bzw. ermitteln Sie diese mit entsprechenden vorliegenden Routinen.