
Universität Osnabrück Fachbereich Physik	Numerische Physik WS 2004/2005	Apl. Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uos.de
---	-----------------------------------	--

Aufgabenblatt 9

9.1 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 `matrix.dat`. In der Datei sind nur die von Null verschiedenen Matrixelemente im Format k, l, H_{kl} enthalten.

Lösen Sie eine der beiden folgenden Aufgaben:

- Schreiben Sie mit einem Werkzeug Ihrer Wahl (matlab, mathematica, Fortran, C) ein Programm, das mittels Projektionsmethode den Grundzustand und den zugehörigen Eigenwert bestimmt.
- Schreiben Sie ein Programm, das mit dem Lanczos-Verfahren den kleinsten Eigenwert bestimmt.

Lösen Sie dann bitte noch die folgenden Aufgaben:

- Vergleichen Sie die Eigenwerte mit den exakten Eigenwerten aus Übung 5 bzw. ermitteln Sie diese mit entsprechenden vorliegenden Routinen.
- Mit welcher matlab-Routine kann man das Problem lösen? Vergleichen Sie die Ergebnisse.