

Name, Matr.Nr.:

1. Test aus Numerische Methoden und Simulationen 3.5.2013

1. (8 Punkte) Was berechnet der folgende Programmteil?

```
do i=1,5
  read(1,*) x(i), f(i,1)
end do
do j=2,5
  do i=j,5
    f(i,j) = (f(i,j-1)-f(i-1,j-1))/(x(i)-x(i-j+1))
  end do
end do
```

und wofür kann man die Feldelemente $f(i, i)$ verwenden?

2. (4 Punkte) In welchen Fällen ist ein kubischer Spline gegenüber einer Polynominterpolation zu bevorzugen?

3. (6 Punkte) Was ist der Unterschied zwischen einer Anpassung und einer Interpolation?
Geben Sie ein Anwendungsbeispiel für beide Methoden.

4. (18 Punkte) Eindimensionaler, endlich tiefer Potentialtopf:

- ★ Stellen Sie die Hamiltonmatrix für ein System auf. Die Breite des Potentialtopfes betrage a , seine Tiefe V_0 . Begründen Sie Ihre Wahl der Systemgröße und des gewählten Gitterabstandes.
- ★ Welche Methode zur Lösung der stationären Schrödingergleichung kennen Sie?
- ★ Beschreiben Sie jene Methode(n) genauer, die Sie zur Berechnung des Grundzustandes und des ersten Angeregten Zustandes (Eigenenergie und Wellenfunktion) verwenden würden.
- ★ Eine zeitabhängige Störung $V(x, t)$ wirke auf des System. Welche Methoden zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung kennen Sie?
- ★ Die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ kann in Eigenzustände des ungestörten Systems entwickelt werden, $\psi(x, t) = \sum_i c_i(t) \varphi_i(x)$. Wie würden Sie den Entwicklungskoeffizienten $c_1(t)$ zum ersten angeregten Zustand $\varphi_1(x)$ berechnen? Begründen Sie Ihre Methodenwahl und beschreiben Sie die Vorgangsweise.
- ★ Führen Sie für jeden der vorangegangenen Schritte eine Fehlerabschätzung durch und beschreiben Sie Ihre Strategie zur Verbesserung der numerischen Genauigkeit.