Mathematische Methoden 2

SS 2024 — D. Gross, K. Meinerz

Blatt 8, Abgabefrist 09.06.24 — (Mit Material von J. Berg. Danke, J!)

1 Potenzmethode (10 + 4 P)

"Nullstellen das charakteristischen Polynoms finden" ist eine konzeptionell einfache Methode um Eigenwerte zu bestimmen. In der Praxis funktioniert sie aber für große Matrizen aufgrund numerischer Installbilitäten nicht gut. Computersysteme nutzen heute vor allem iterative Methoden um Eigenvektoren und Eigenwerte zu berechnen. Hier schauen wir uns die einfachste Variante an: Die *Potenzmethode*. Sie findet den *dominanten* Eigenwert, d.h. den Eigenwert mit dem größten Betrag, sowie den dazugehörigen Eigenvektor.

Gegeben sei eine $n \times n$-Matrix $\mathbf{A}$:

1. Wähle einen Anfangsvektor $\mathbf{v}_0 \in \mathbb{C}^n$.

   Am besten ist es, den Real- und Imaginärteil jeder Komponente zufällig zu ziehen, z.B. normalverteilt, oder gleichförmig aus dem Interval $[-1, 1]$.

2. Berechne iterativ

$$\mathbf{v}_{k+1} = \frac{\mathbf{A}\mathbf{v}_k}{\|\mathbf{A}\mathbf{v}_k\|} \qquad \text{mit} \quad \|\boldsymbol{v}\|^2 = \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \rangle = \sum_{i=1}^{n} \bar{v}_i v_i.$$

   Achtung: *Mathematisch* ist dies äquivalent zu $\boldsymbol{v}_k = \frac{(\mathbf{A}^k)\boldsymbol{v}_0}{\|(\mathbf{A}^k)\boldsymbol{v}_0\|}$. *Numerisch* verhalten die beiden Formeln sich aber unterschiedlich!

a) **Optionale Bonusaufgabe (4 P)**. Nehmen Sie an, dass $\mathbf{A}$ diagonalisierbar ist, und dass ein Eigenwert dominant ist, also einen strikt größeren Betrag als alle anderen hat. Argumentieren Sie, dass dann $\boldsymbol{v}_k$ exponentiell schnell gegen den entsprechenden Eigenvektor, und $\langle \boldsymbol{v}_k, \mathbf{A}\boldsymbol{v}_k \rangle$ gegen den dominanten Eigenwert konvergiert.

b) (6 P) Implementieren Sie die Potenzmethode mit einem Computersystem ihrer Wahl (Julia, Python, Mathematica, Excel, AArch64-Assembler, ...). Minimaler Test: Nutzen Sie Ihre Methode, um den dominanten Eigenwert von

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

zu finden. Wie groß muß k sein, damit das Ergebnis stabilisiert?

c) (4 P) Testen Sie Ihre Methoden an zufälligen $n \times n$-Matrizen, bei denen Real- und Imaginärteil jedes Eintrags normalverteilt gezogen wurden. Schaffen Sie $n = 1000$? $n = 5000$?

2 Matrixexponentiale (14 P)

a) (3 P) Zeigen Sie folgende Behauptung aus der VL: Gegeben eine $n \times n$-Matrix $\mathbf{\Lambda}$, so wird die DGL

$$\mathbf{M}'(t) = \mathbf{\Lambda}\mathbf{M}(t), \quad \mathbf{M}(0) = \mathbb{I}$$

durch das folgende Matrixexponential gelöst:

$$\mathbf{M}(t) = e^{t\mathbf{\Lambda}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(t\mathbf{\Lambda})^k.$$

Hinweis: Potenzreihen können gliedweise differenziert werden.

b) (4 P) Die Matrizen

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_4 = \begin{pmatrix} 0 & a & b \\ 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

haben alle die Eigenschaft, dass man *ohne Berechnung der Eigenbasis* eine Formel für $\mathbf{A}^k$ für alle Werte von k finden kann. Gehen Sie so vor und zeigen Sie damit die folgenden Matrixexponentiale:

$$e^{t\mathbf{A}_1} = \begin{pmatrix} e^t & 0 \\ 0 & e^{-t} \end{pmatrix}, \qquad e^{\mathbf{A}_3} = \begin{pmatrix} e & e \\ 0 & e \end{pmatrix},$$

$$e^{t\mathbf{A}_2} = \cosh(t)\mathbb{I} + \sinh(t)\mathbf{A}_2, \qquad e^{it\mathbf{A}_2} = \cos(t)\mathbb{I} + i\sin(t)\mathbf{A}_2,$$

$$e^{\mathbf{A}_4} = \begin{pmatrix} 1 & a & b + ac/2 \\ 0 & 1 & c \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Hinweis: Wer die Potenzreihendarstellung von $\sin, \sinh$ und co. gerade mal vergessen hat, dem wird ein Besuch auf Wikipedia nicht schaden.

c) (3 P) Und nun doch per Eigenbasis: Zeigen Sie, dass

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

die Matrix $\mathbf{A}_2$ diagonalisiert. Berechnen Sie $e^{t\mathbf{A}_2}$ auf diese Weise.

In der Hamiltonmechanik wird der harmonische Oszillator durch die Hamiltonfunktion $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ beschrieben. Die Bewegungslgeichungen sind

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial_p}, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial_x}.$$

d) (2 P) Zeigen Sie, dass für den Fall $m = \omega = 1$, die Bewegungsgleichungen in Matrixform gebracht werden können:

$$\dot{\boldsymbol{v}} = \mathbf{\Lambda}\boldsymbol{v}, \qquad \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{v}(t) = e^{t\mathbf{\Lambda}}\boldsymbol{v}_0$ die Bewegungslgeichungen mit Anfangsbedingungen $\boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{v}_0$ löst.

e) (2 P) Berechnen Sie $e^{t\mathbf{\Lambda}}$. Das Eregebnis $e^{t\mathbf{\Lambda}}$ ist uns in der VL schon mehrfach begegnet. Erkennen Sie es? Welche Bahn beschreibt $\boldsymbol{v}(t)$?

Hinweis: Vergleichen Sie $\mathbf{\Lambda}^2$ mit $(i\mathbf{A}_2)^2$ aus der letzten Aufgabe. Vielleicht können Sie ja die Rechnung wiederverwenden...

Hintergrund: Der Vektor $\boldsymbol{v}$ der Ort- und Impulsinformation vereint, heißt *Phasenraumvektor*. Sie haben also gesehen, dass die Phasenraumbahn des harmonischen Oszillators eine sehr einfache Form hat.

Matrixexponentiale wie $e^{t\Lambda} = e^{-it\sigma_y}$ spielen auch in der quantenmechanischen Behandlung von Drehungen eine wichtige Rolle.