Aufgabe 16

Als Beispiel für eine Geometrieoptimierung betrachten wir den eindimensionalen Fall des Morsepotentials

$$V = D(1 - \exp(-\alpha(R - R_0)))^2$$

mit den konkreten Werten ($D = 10, \alpha = 2, R_0 = 1$).

(a) Bestimmen Sie zunächst das Minimum analytisch.

(b) Wir versuchen es numerisch, zuerst mit Intervall-Schachtelung. Wir vermuten das Minimum im Bereich $0.5 < R < 2.0$. Bei welchen Werten der Koordinate R würden Sie die nächsten beiden Funktionswerte bestimmen, um das Intervall optimal verkleinern zu können? Wie viele Schritte werden Sie brauchen, um das Minimum mit einer Genauigkeit von $\Delta R < 0.01$ zu bestimmen? (Hinweis: Sie brauchen dazu die Optimierungsschritte nicht wirklich durchführen - Sie können es aber gerne z.B. mit MAPLE machen.

(c) Nun versuchen wir das Newton-Verfahren und beginnen bei $R = 0.5$. Wohin bringt Sie der erste Schritt? (Hinweis: wenn Sie die Formel in MAPLE eingeben, können Sie dies schnell ausrechnen und gleich auch weitere Schritte berechnen. Wie viele Schritte brauchen Sie in diesem Fall, um das Minimum mit einer Genauigkeit von $\Delta R < 0.01$ zu bestimmen?)

(d) Wenn wir statt bei $R = 0.5$ bei $R = 2.0$ angefangen hätten, hätten wir ein Problem gehabt. Welches?

Aufgabe 17

Wir betrachten ein Teilchen mit der Masse 1, das sich in folgendem zweidimensionalen Potential bewegen soll:

$$F = 2x^2 + 3y^2 + 2xy - 3x - 4y$$

Wir interessieren uns für die Gleichgewichtsgeometrie (x_0, y_0), die Schwingungsfrequenzen, und die Normalkoordinaten.

(a) In diesem Fall ist eine analytische Lösung möglich. Finden Sie diese zuerst.

(b) Als zweites wollen wir das Minimum numerisch mit dem Newton-Verfahren finden. Beginnen Sie am Punkt $(x, y) = (1, 1)$. Wohin führt Sie der erste Schritt?

(c) Was schließen Sie aus dem Ergebnis?