C. Lasser, F. Marquardt, D. Sattlegger 15. November 2011

Aufgabe 5 (Hermitefunktionen)

Für $k \in \mathbb{N}$ ist die k-te Hermitefunktion φ_k gegeben durch [1]

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(x)\, \mathrm{e}^{-x^2/2},$$

wobei H_k das k-te Hermitepolynom bezeichnet.

(a) Implementieren Sie die Funktionen φ_k in Matlab, indem Sie zur Berechnung der Hermitepolynome den Befehl `mfun` benutzen und erstellen Sie einen Plots der Funktionen für $k \in \{1, 4, 16, 64, 256\}$ auf dem Intervall $[-10, 10]$. Was beobachten Sie?

(b) Implementieren Sie nun die Hermitefunktionen gemäß der Dreitermrekursion [2]

$$\sqrt{k+1}\, \varphi_{k+1}(x) = \sqrt{2}\, x\, \varphi_k(x) - \sqrt{k}\, \varphi_{k-1}(x).$$

Erstellen Sie nun Plots analog zu (a). Was beobachten Sie dieses Mal?

(c) Erklären Sie ihre Beobachtungen aus (a) und (b).

Aufgabe 6 (Gauß-Hermite-Quadratur)

Zur Berechnung der Matrixelemente bezüglich der Hermite-Basis wird die Gauß-Hermite-Quadratur verwendet. [3]

(a) Um das Rad nicht neu erfinden zu müssen, verwenden Sie hierzu die Datei `hermpts.m` des Open-Source-Softwarepaket Chebfun [4]. Das Kommando `[x,w]=hermpts(n)` liefert für jedes $n \in \mathbb{N}$ die Stützstellen x_k und Gewichte w_k, sodass

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)\, \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x \approx \sum_{k=1}^{n} w_k\, f(x_k)$$

gilt.

(b) Verwenden Sie die durch `hermpts.m` berechneten Stützstellen und Gewichte um den Wert des Integrals

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi_k(x) \varphi_l(x) \mathrm{d}x \tag{1}$$

für die in Aufgabe 5 definierten Hermitefunktionen zu bestimmen. Testen Sie die Quadraturformel für beliebige Werte von $k, l \in \mathbb{N}$ und für $n \in \{100, 200, 300, 400, 500\}$. Was erwarten und was beobachten Sie?

(c) Benutzen Sie die von `hermpts.m` berechneten Stützstellen x_k. Zeigen Sie, dass

$$\varphi_n'(x_k) = \sqrt{2n}\, \varphi_{n-1}(x_k)$$

für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt und berechnen Sie die Gewichte der Quadratur über die Formel [5]

$$w_k = \frac{2}{(\varphi_n'(x_k))^2}$$

Bestimmen Sie mit diesen Gewichten den Wert des Integrals (1) analog zu (b). Was beobachten Sie nun?

(d) Erklären Sie die in (b) und (c) gemachten Beobachtungen.

[1] vgl. [L], Ch. III.1.1, (1.5)
[2] vgl. [L], Ch. III.1.1, (1.13)
[3] vgl. [L], Ch. III.1.1, **Computation of the Matrix Elements**
[4] http://www.maths.ox.ac.uk/chebfun/
[5] vgl. A. Glaser, X. Liu and V. Rokhlin, A fast algorithm for the calculation of the roots of special functions, SIAM Journal on Scientific Computing, 29(4):1420-1438:, 2007.