C. Lasser, F. Marquardt, D. Sattlegger 29. November 2011

Aufgabe 7 (Fourier-Galerkin-Methode)

Die Koeffizienten der Fourierentwicklung können über die Galerkin-Methode oder durch Kollokation bestimmt werden.[1] Bei der Kollokationsmethode[2] gilt für den Koeffizientenvektor $c \in \mathbb{C}^K$ die Differentialgleichung[3]

$$i\,\frac{dc}{dt} = D_K\, c + \mathcal{F}_K V_K \mathcal{F}_K^{-1} c \tag{C}$$

mit den Diagonalmatrizen $D_K = \frac{1}{2\mu}\mathrm{diag}(k^2)$ und $V_K = \mathrm{diag}(V(x_j))$, wobei $\mathcal{F}_K$ die diskrete Fouriertransformation bezeichnet.

Analog zur Galerkin-Methode für Hermite-Funktionen[4] betrachten wir diese nun für die trigonometrischen Funktionen $\varphi_k(x) = \mathrm{e}^{-ikx}$, $k \in \{-\frac{K}{2}, \dots, \frac{K}{2} - 1\}$.

(a.) Zeigen Sie, dass der Vektor c der Entwicklungskoeffizienten die Differentialgleichung

$$i\,\frac{dc}{dt} = D_K\, c + \tilde{V}_K\, c$$

erfüllt, wobei D_K wieder die Diagonalmatrix $D_K = \frac{1}{2\mu}\mathrm{diag}(k^2)$ ist und $\hat{V}_K$ durch $(\hat{V}_K)_{jk} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{-ijx}\, V(x)\, \mathrm{e}^{ikx}\, dx$ gegeben ist.

(b.) Zeigen Sie, dass

$$\mathcal{F}_K V_K \mathcal{F}_K^{-1} = Q(\hat{V}_K)$$

gilt, wobei $Q(\hat{V}_K)$ die Approximation von $\hat{V}_K$ durch die aufsummierte Trapezregel bezeichne.

(c.) Wählen Sie zur Approximation von $\hat{V}_K$ eine andere Quadraturmethode, z.B. die Matlab-Funktion `quad`. Vergleichen Sie für $V(x) = 1$ numerisch das Verhalten der Matrizen $\mathcal{F}_K V_K \mathcal{F}_K^{-1}$ und $\hat{V}_K$ für $K \gg 1$. Erklären Sie ihre Beobachtungen.

Aufgabe 8 (Lösung der Differentialgleichung)

Betrachten Sie die Schrödingergleichung

$$i\,\frac{d}{dt}\psi(x,t) = \left(-\frac{1}{2\mu}\Delta + V(x)\right)\psi(x,t) \tag{S}$$

mit Potential $V(x) = -\cos(\frac{x}{2})$, Parameter $\mu = 100$ und Anfangswellenfunktion

$$\psi(x,0) = \sqrt[4]{\frac{20}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-10\,(x-0.5)^2}$$

auf dem Rechengebiet $[-\pi,\pi]$ für $t \in [0,100]$.

(a.) Lösen Sie (S) mittels Kollokation, indem Sie die gewöhnliche Differentialgleichung (C) lösen.

(b.) Stellen Sie die Lösung graphisch unter Verwendung von `ComplexPlot.m` aus **Aufgabe 3** dar.

---

[1] vlg. [L], III.1.3, p.75, "We might determine the unknown Fourier coefficients ..." und p.79, **Comparison with the Fourier Galerkin Method**
[2] vlg. [L], III.1.1
[3] vgl. [L], Kap. III.1.3, (1.32)
[4] vgl. [L], III.1.1