Aufgabe 5: Observablen für Hermite Galerkin Verfahren

Es sei $\mathcal{V}_K \subset L^2(\mathbb{R})$ der Ansatzraum, der von den Hermitefunktionen $\varphi_0, \ldots, \varphi_{K-1}$ aufgespannt wird. Weiter sei

$$\psi_K = P_K \psi = \sum_{k<K} \underbrace{\langle \varphi_k, \psi \rangle}_{=:c_k} \varphi_k$$

die Projektion von ψ auf $\mathcal{V}_K$.

Finden Sie Matrizen für die Abbildungen

a) $q : \psi_K \mapsto x\psi_K$ und

b) $p : \psi_K \mapsto -id/dx\psi_K$.

Verwenden Sie diese Abbildungen um die Orts- und Impulserwartungswerte $\langle \psi_K, q\psi_K \rangle$ beziehungsweise $\langle \psi_K, p\psi_K \rangle$ sowie die kinetische Energie $E_{kin} = \langle \psi_K, p^2\psi_K \rangle$ allein durch die Koeffizienten c_k zu berechnen.

Wie kann damit bei gegebenem H_K gemäß ([L], III.1.1, (1.4)) die potentielle Energie $E_{pot} = \langle \psi_K, V\psi_K \rangle$ berechnet werden?

Aufgabe 6: Implementation von Hermitefunktionen

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

$$\varphi_k = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(x) e^{-x^2/2}, \qquad \text{([L], III.1.1, (1.5))}$$

wobei H_k das k-te Hermitepolynom[1] bezeichnet.

a) Implementieren Sie die Funktionen φ_k in Matlab, indem Sie zur Berechnung der Hermitepolynome den Befehl `mfun` verwenden.

b) Implementieren Sie die Funktionen φ_k nun gemäß der Dreitermrekursion

$$\sqrt{k+1}\varphi_{k+1}(x) = \sqrt{2}x\varphi_k(x) - \sqrt{k}\varphi_{k-1}(x). \qquad \text{([L], III.1.1, (1.13))}$$

c) Vergleichen Sie beide Implementationen indem Sie die Graphen der Funktionen für $k = \{1, 4, 16, 64, 256\}$ auf dem Intervall $[-10, 10]$ betrachten. Erklären Sie Ihre Beobachtungen.

Aufgabe 7: Gauß-Hermite-Quadratur

Zur Berechnung der Matrixelemente bezüglich der Hermite-Basis wird die Gauß-Hermite-Quadratur verwendet ([L], III.1.1, **Computation of Matrix Elements**).

[1] vgl. z.B. http://mathworld.wolfram.com/HermitePolynomial.html

Eine schnelle Funktion zur Berechnung der Knoten und Gewichte der Gauß-Hermite-Quadratur bietet das Open-Source-Softwarepaket Chebfun[2]. Das Kommando `[x, w] = hermpts(n)` liefert für gegebenes $n \in \mathbb{N}$ die Stützstellen x_k und Gewichte w_k, sodass

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

gilt.

a) Stellen Sie die Gewichte üeber den Stützstellen für $n > 400$ graphisch dar. Betrachten Sie insbesondere den Wert des Gewichtes w_1 für $n > 400$. Welche Konsequenz hat das für die Quadratur?

b) Zeigen Sie, dass für die Stützstellen x_k der n-ten Gauß-Hermite-Quadratur gilt

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

und benutzen Sie die von der Funktion `hermpts` gelieferten Stützstellen zur Berechnung der Gewichte $\omega_k = w_k e^{x_k^2}$ über die Formel

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

c) Verwenden Sie die soeben ermittelten Gewichte zur numerischen Berechnung Sie des Wertes des Integrals

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

für selbst gewählte $k, l \in \mathbb{N}$ und verschiedene Anzahlen von Stützstellen $n \in N$. Was erwaten Sie und was beobachten Sie?

d) Gegeben seien nun Stützstellen $x_k = \sinh(t_k)$ und Gewichte $\omega_k = \frac{7}{n-1} \cosh(t_k)$ mit $t_k = -3.5 + 7(k-1)/(n-1)$ und $k = 1, \ldots, n$. Wiederholen Sie Ihre Versuche mit den so gegebenen Stützstellen und Gewichten. Was beobachten Sie?

Informationen

Die Besprechung der Aufgaben findet am **Dienstag, den 27.11.2012** statt.

Bei Fragen, der Entdeckung von Fehlern im Übungsblatt oder anderen Problemen melden Sie sich bitte per eMail bei Falko Marquardt (marquard@ma.tum.de).

[2] http://www2.maths.ox.ac.uk/chebfun/