Kubische Splineinterpolation

5.1 Aufgabe 1 (`aufgabe5_1.pdf`,`aufgabe5_1.c`, 5 Punkte)

Konstruieren Sie die kubische Spline-Näherung für die folgende Runge-Funktion:

$$f(x) = \frac{5}{1+25x^2}, \quad x \in [a,b], a = -1, b = 1. \tag{1}$$

basierend auf vier Stützpunkten mit Koordinaten $x = -2, -1, 1, 2$. Für diesen speziellen Fall sollten die Koeffizienten explizit analytisch berechnet und implementiert werden. Berechnen Sie die Werte der Runge-Funktion für hundert gleichmäßig verteilte Punkte im Intervall $[-5, 5]$. Plotten Sie die ursprüngliche Funktion und das interpolierende Polynom im Bereich $[-5, 5]$. Plotten Sie den absoluten Fehler der Interpolation.

Diskrete Fourier-Transformation

Für einen Vektor $\mathbf{h}$ mit Komponenten $h_l, \quad l = 0, \ldots, N-1$ ist die diskrete Fourier-Transformation definiert als:

$$H_m = \sum_{l=0}^{N-1} h_l \exp\left(\frac{2\pi i l m}{N}\right). \tag{2}$$

Die diskrete Fourier-Transformation kann in der Quantenmechanik für die Berechnung der Matrixelemente der kinetischen Energie verwendet werden. Dies beruht auf der Tatsache, dass der Operator der kinetischen Energie in der Impuls-Darstellung lokal ist. Dies kann für die numerische Berechnung der Eigenfunktionen und Eigenwerte von 1D-Potentialfunktionen verwendet werden. Der Hamilton-Operator für ein Teilchen mit der Masse M in einem 1D-Potential lautet:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \hat{V}(\hat{x}). \tag{3}$$

Die Matrixelemente dieses Operators in der Ortsdarstellung sind:

$$\langle x'|\hat{H}|x\rangle = \langle x'|\frac{\hat{p}^2}{2M}|x\rangle + \langle x'|\hat{V}|x\rangle \tag{4}$$

Die Matrixelemente der potentiellen Energie kann man einfach in der Ortsdarstellung ausrechnen, während man für die kinetische Energie die Impulsdarstellung verwendet:

$$\langle x'|\hat{H}|x\rangle = \int dp \langle x'|\frac{\hat{p}^2}{2M}|p\rangle\langle p|x\rangle + V(x)\delta(x-x') \tag{5}$$

Nach der Diskretisierung der Ortskoordinate $x' = m\Delta x$, $x = n\Delta x$, $\quad m, n = -\frac{N}{2}, \ldots, \frac{N}{2}$ und der Impulskoordinate $p = \hbar l \Delta k$, $\quad l = -\frac{N}{2}, \ldots, \frac{N}{2}$ erhalten wir eine endliche Matrixdarstellung des Hamilton-Operators mit Matrixelementen (wobei $i^2 = -1$):

$$\langle x'|\hat{H}|x\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{2M}\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} \hbar^3 \Delta k^3 l^2 \exp\left(il\Delta k \Delta x(m-n)\right) + \frac{1}{\Delta x} V_n \delta(m-n). \tag{6}$$

Nun nehmen wir an, dass das System ortsperiodisch ist (Periodenlänge $N\Delta x$). Wir wählen Δx und Δk so, dass:

$$\Delta x \Delta k = \frac{2\pi}{N} \tag{7}$$

Damit reduzieren sich die Matrixelemente H_{mn} auf:

$$H_{mn} = \frac{1}{2M}\frac{(2\pi\hbar)^2}{(N\Delta x)^3}\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} l^2 \exp\left(\frac{2\pi i l(m-n)}{N}\right) + V_n\delta_{mn} \tag{8}$$

Im folgenden nehmen wir an, dass $M = 1$ und $\hbar = 1$. Durch Änderung der Summationsgrenzen erhalten wir:

$$H_{mn} = \frac{2}{N}\left(\frac{\pi}{N\Delta x}\right)^2 \sum_{l=0}^{N-1}\left(l-\frac{N}{2}\right)^2 \exp\left(-\frac{2\pi i l n}{N}\right)\exp\left(\frac{2\pi i l m}{N}\right) + V_n\delta_{mn}. \tag{9}$$

Aus den Gl. (2), (9) folgt, dass der erste Term in H_{mn} (der kinetische Energie-Operator) gegeben ist durch die m-te Komponente der diskreten Fouriertransformierten des Vektors $\mathbf{h}^{(n)}$ mit Komponenten:

$$h_l^{(n)} = \left(l-\frac{N}{2}\right)^2 \exp\left(\frac{-2\pi i l n}{N}\right) \qquad \text{mit} \begin{cases} l = 0,\ldots,N-1 \\ n = -N/2,\ldots,+N/2 \end{cases} \tag{10}$$

5.2 Aufgabe 2 (`aufgabe5_2.c`,`aufgabe5_2.pdf`, 3 Punkte)

Schreiben Sie ein Programm für die Berechnung der diskreten Fourier-Transformation eines Vektors mit N Komponenten. Testen Sie das Programm am Beispiel der Funktion:

$$f(x) = \sin\frac{x}{2} + \sin^2 x \tag{11}$$

indem Sie diese durch 100 Punkte im Intervall $[-4\pi, 4\pi]$ darstellen. Plotten Sie das Fourierspektrum ($|H_n|^2$). Beachten Sie, dass es zur Vermeidung von Programmierfehlern sinnvoll ist, die 100 Punkte des Intervalls $[-4\pi, 4\pi]$ durch *positive* Indices $(0\ldots 99)$ in einem Array abzubilden.

5.3 Aufgabe 3 (`aufgabe5_3.c`,`aufgabe5_3.pdf`, 7 Punkte)

Berechnen Sie mit Hilfe der diskreten Fourier-Routine aus der Aufgabe 5.2 die Matrixdarstellung des Hamilton-Operators für den harmonischen Oszillator ($M = 1, V = \frac{1}{2}x^2$) im Intervall $[-25.0, 25.0]$ mit $\Delta x = 0.25$. Verwenden Sie die auf der Vorlesungs-Website bereitgestellte Routine jacobi(), um numerisch die Eigenwerte und Eigenfunktionen zu berechnen. Plotten Sie die fünf Eigenfunktionen zu den niedrigsten Eigenwerten zusammen mit dem Potential $V(x)$ und den bekannten analytischen Lösungen für den harmonischen Oszillator.

Sind Abweichungen zwischen numerischen und analytischen Wellenfunktionen erkennbar? Was ändert sich für höher angeregte Zustände des Harmonischen Oszillators? Vergleichen Sie hierzu nur die Energie-Eigenwerte für größere Quantenzahlen ν, z.B. $\nu = 50, 100, 150, 199$.

Welches Problem erkennen Sie, wenn Sie den Harmonischen Oszillator für ein schwächeres harmonisches Potential (z.B. $V = \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{100}\right)^2\cdot x^2$ numerisch mit Hilfe des obigen Verfahrens lösen? Plotten Sie hierzu wieder die numerischen und analytischen Lösungen der ersten fünf Zustände.