

# Numerische Methoden und Simulation

K. Held, H. Leeb, Ch. Lemell, H. Müller

Fakultät Physik

Technische Universität Wien

Sommersemester 2014

5. Mai 2014



# GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Gewöhnlichen Differentialgleichungen</b>	<b>7</b>
1.1	Einleitung . . . . .	7
1.2	Einschrittverfahren . . . . .	8
1.2.1	Einschrittverfahren erster und zweiter Ordnung . . . . .	8
1.2.2	Konsistenz und Konvergenz von Einschrittverfahren . . . . .	10
1.2.3	Runge-Kutta-Verfahren . . . . .	11
1.2.3.1	Die Standardmethode . . . . .	11
1.2.3.2	Runge-Kutta-Methode mit angepasster Schrittweite . . . . .	11
1.2.4	Fehlerabschätzung von Einschrittverfahren . . . . .	13
1.3	Differentialgleichungen höherer Ordnung . . . . .	16
1.3.1	Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung . . . . .	16
1.3.2	Umformung gewöhnlicher Differentialgleichungen höherer Ordnung . . . . .	17
1.3.3	Anwendung von Einschrittverfahren mit vektorieller Lösung . . . . .	18
1.4	Mehrschrittverfahren . . . . .	19
1.4.1	Konstruktion einfacher Mehrschrittverfahren . . . . .	19
1.4.1.1	Prediktor-Verfahren . . . . .	20
1.4.1.2	Korrektor-Verfahren . . . . .	21
1.4.2	Allgemeine Mehrschrittverfahren . . . . .	22
1.4.3	Konsistenz und Konvergenz von Mehrschrittverfahren . . . . .	23
1.5	Numerov Verfahren . . . . .	24
1.5.1	Standardversion des Numerov Verfahrens . . . . .	25
1.5.2	Die modifizierte Numerov Methode . . . . .	27
<b>2</b>	<b>Schwingungsbewegung</b>	<b>31</b>
2.1	Die Bewegungsgleichung und ihre Lösung . . . . .	31
2.2	Lagrangeformalismus und Zustand im Phasenraum . . . . .	32
2.2.1	Die gedämpfte Schwingungsbewegung . . . . .	33
2.2.2	Frequenzspektrum . . . . .	34
2.3	Das getriebene physikalische Pendel . . . . .	35
2.4	Aufgaben . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Das Wasserstoffatom</b>	<b>41</b>
3.1	Die radiale Schrödingergleichung und ihre Lösungen . . . . .	41
3.2	Die numerische Lösung der radialen Schrödingergleichung . . . . .	42

3.3	Berechnung von Bindungszuständen . . . . .	44
3.4	Aufgaben . . . . .	45

# Kapitel 1

## Gewöhnlichen Differentialgleichungen

### 1.1 Einleitung

Viele physikalische und technische Probleme erfordern in ihrer mathematischen Formulierung die Lösung einer Differentialgleichung. Im einfachsten Fall ist eine differenzierbare Funktion  $y(x)$  gesucht, welche von einer reellen Veränderlichen  $x$  abhängt und die Gleichung

$$y' = f(x, y) \tag{1.1}$$

erfüllt. In diesem Kapitel der Lehrveranstaltung *Numerische Methoden und Simulation* beschäftigen wir uns vor allem mit Algorithmen zur numerischen Lösung von *gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung*. Im Allgemeinen wird die Differentialgleichung (1.1) von unendlich vielen Funktionen  $y(x)$  gelöst. Für eine eindeutige Lösung sind immer zusätzliche Forderungen, wie *Rand- oder Anfangswertbedingungen* erforderlich. Je nach Problemstellung spricht man von *Anfangs- oder Randwertproblemen*.

Für die numerische Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen stehen heute eine Vielzahl von allgemeinen und speziellen Verfahren zur Verfügung, die wichtigsten Klassen von Algorithmen sind:

- (a) Einschrittverfahren
- (b) Mehrschrittverfahren
- (c) Extrapolationsverfahren
- (d) Variationsverfahren

Im Rahmen dieses Kapitels behandeln wir nur (a) Einschrittverfahren und (b) das Konzept von Mehrschrittverfahren. Bei Mehrschrittverfahren wird insbesondere auf das *Numerov-Verfahren* eingegangen, eine effiziente Methode zur Lösung spezieller Differentialgleichungen 2. Ordnung, welche häufig für die numerische Lösung der Schrödingergleichung verwendet wird. Die numerische Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen stellt ein zentrales Gebiet der Numerischen Mathematik dar, sodass eine Reihe von einschlägigen Lehrbüchern existiert, welche eine detaillierte mathematische Behandlung der Algorithmen geben (z.B. Stoer [1]).

In den entsprechenden Kapitel des Abschnitts *Computational Physics* (Kapitel 2 und 3) werden Anwendungen der Methoden zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen an zwei typischen Fragestellungen der Physik diskutiert. Kapitel 2 beschäftigt sich mit grundlegenden Fragestellungen zu Schwingungsphänomenen, welche im Zusammenhang mit verschiedenen Variationen eines Pendels behandelt werden. Im Kapitel 3 werden am Beispiel des Wasserstoff-Atoms die Lösungen von Bindungs- und Streuproblemen in einfachen quantenmechanischen Systemen vorgestellt.

## 1.2 Einschrittverfahren

Eine Gruppe von einfachen Algorithmen zur numerischen Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen sind die *Einschrittverfahren*. Dies sind explizite Verfahren, die durch die Rekursionsvorschrift

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h_{i+1} \Phi(x_i, y(x_i); h_{i+1}) \quad (1.2)$$

mit der Anfangs- oder Randbedingung

$$y(x_0) = y(x_a) \quad (1.3)$$

gegeben sind. Dabei sind  $\{x_i, i = 0, \dots, N\}$  geeignet gewählte Stützstellen im Intervall  $[x_a, x_e]$ , in welchem die Lösung  $y(x)$  bestimmt werden soll. Der Stützstellenabstand  $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$  kann von  $i$  abhängen<sup>1</sup>. Die Funktion  $\Phi(x_i, y(x_i); h_{i+1})$  ist charakteristisch für das gewählte Einschrittverfahren und hängt nur vom Wert der Lösung  $y(x)$  an einer Stützstelle  $x_i$  ab. Man kann daher ausgehend vom Anfangs- bzw. Randwert  $y(x_0) = y(x_a)$  die Lösung durch aufeinanderfolgende Anwendung von (1.2) sukzessive berechnen. Die Genauigkeit der numerischen Lösung hängt dabei vom gewählten Algorithmus, d.h. von der charakteristischen Funktion  $\Phi(x_i, y(x_i); h_{i+1})$  ab. In den folgenden Unterkapiteln werden die einfachsten Einschrittverfahren kurz beschrieben.

### 1.2.1 Einschrittverfahren erster und zweiter Ordnung

Das einfachste Einschrittverfahren ist ohne Zweifel das Euler- oder Polygonzugverfahren. Betrachten wir die gewöhnliche Differentialgleichung,

$$y' = f(x, y), \quad (1.4)$$

mit vorgegebener Randbedingung. Ist  $y$  hinreichend oft differenzierbar, so kann man eine Reihenentwicklung der Lösung  $y(x)$  durchführen

$$y(x+h) = \sum_{k=0}^m \frac{h^k}{k!} y^{(k)}(x) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} y^{(m+1)}(x+\theta h) \quad \text{mit } 0 \leq \theta \leq 1. \quad (1.5)$$

---

<sup>1</sup>die Stützstellen können auch nicht äquidistant gewählt werden



Man benötigt in dieser Entwicklung die Kenntnis der Ableitungen  $y^{(k)}(x)$ . Die niedrigsten Ableitungen lassen sich einfach durch die Funktion  $f(x, y)$  der rechten Seite von (1.4) ausdrücken:

$$y' = f(x, y), \quad (1.6)$$

$$y'' = \frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{df}{dx} + \frac{df}{dy} \frac{dy}{dx} = f_x + f_y f, \quad (1.7)$$

$$y^{(3)} = f_{xx} + 2f f_{xy} + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f f_y^2, \quad (1.8)$$

$$\dots \dots \dots \quad (1.9)$$

Je nach der Wahl von  $m$  lassen sich unter Vernachlässigung des Resttermes verschiedene Verfahren ableiten.

Das *Euler- oder Polygonzugverfahren* ergibt sich bei der Wahl  $m = 1$ . Vernachlässigung des Resttermes für  $m = 1$  führt auf die Rekursionsbeziehung,

$$y(x+h) = y(x) + hf(x, y(x)) \quad \text{d.h.} \quad \Phi_{Euler}(x, y; h) = f(x, y). \quad (1.10)$$

Beim Euler- oder Polygonzugverfahren wird also der Differentialquotient durch den Differenzenquotienten ersetzt, d.h.

$$y' \approx \frac{y(x+h) - y(x)}{h} \quad (1.11)$$

Will man die Entwicklung (1.5) bis  $m = 2$  berücksichtigen, so kann man die Funktion  $\Phi$  in folgender Form ansetzen,

$$\Phi(x, y; h) = a_1 f(x, y) + a_2 f(x + p_1 h, y + p_2 h f(x, y)) \quad (1.12)$$

Eine Entwicklung von (1.12) bis zur ersten Ordnung in  $h$  liefert

$$\Phi(x, y; h) = (a_1 + a_2) f(x, y) + a_2 h [p_1 f_x(x, y) + p_2 f_y(x, y) f(x, y)] + o(h^2). \quad (1.13)$$

Wählt man  $a_1 + a_2 = 1$  und  $p_1 a_2 = p_2 a_2 = \frac{1}{2}$  so sind die Terme der Reihenentwicklung (1.5) bis  $m = 2$  durch die Funktion  $f(x, y)$  ausgedrückt. Diese Beziehungen können verschieden erfüllt werden. Eine Möglichkeit ist das *Verfahren von Heun*, welches auch als *verbessertes Polygonzugverfahren* bezeichnet wird,

$$\begin{aligned} a_1 = a_2 &= \frac{1}{2}, & p_1 = p_2 &= 1 \\ \Phi_{Heun}(x, y; h) &= \frac{1}{2} [f(x, y) + f(x + h, y + hf(x, y))] . \end{aligned} \quad (1.14)$$

Eine andere Möglichkeit ist das *modifizierte Euler-Verfahren*

$$\begin{aligned} a_1 &= 0 ; & a_2 &= 1 ; & p_1 &= p_2 = \frac{1}{2} \\ \Phi_{modEuler}(x, y; h) &= f(x + \frac{1}{2}h, y + \frac{1}{2}hf(x, y)) . \end{aligned} \quad (1.15)$$

Betrachtet man die Ausdrücke für die Funktionen  $\Phi_{Heun}$  und  $\Phi_{modEuler}$ , so sieht man, dass in diesen Verfahren die Funktion  $f(x, y)$  pro Schritt zweimal aufgerufen werden muss, während im Euler-Verfahren nur ein Aufruf von  $f(x, y)$  pro Schritt erforderlich ist.

### 1.2.2 Konsistenz und Konvergenz von Einschrittverfahren

Bei der Diskussion der Güte eines Einschrittverfahrens muss man zwischen Konsistenz und Konvergenz des Verfahrens unterscheiden. Die **Konsistenz** eines Verfahrens bezieht sich auf die Eigenschaften der Funktion  $\Phi(x, y; h)$ , während die **Konvergenz** die Lösung  $y(x)$  der Differentialgleichung betrifft.

Man nennt das Einschrittverfahren **konsistent**, wenn die Funktion  $\Phi(x, y; h)$  der Bedingung genügt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \Phi(x, y; h) = f(x, y), \quad x \in [x_a, x_e], \quad y \in R. \quad (1.16)$$

Man spricht von einem Verfahren der Ordnung  $p$ , falls

$$\tau(x, y; h) = \Delta(x, y; h) - \Phi(x, y; h) = \mathcal{O}(h^p) \quad (1.17)$$

gilt, wobei der Differenzenquotient folgendermaßen definiert ist

$$\Delta(x, y; h) = \begin{cases} \frac{z(y+h) - z(x)}{h} & h \neq 0, \\ f(x, y) & h = 0, \end{cases} \quad (1.18)$$

und  $z(x)$  die exakte Lösung der Differentialgleichung ist.

Durch Einsetzen in die entsprechenden Ausdrücke sieht man, dass das Euler-Verfahren konsistent in 1. Ordnung ist, während das Verfahren von Heun und das modifizierte Eulerverfahren konsistent in 2. Ordnung sind.

Neben der Konsistenz eines Verfahrens gibt es noch den Begriff der Konvergenz.

Ein Einschrittverfahren heißt an der Stelle  $x \in [x_a, x_e]$  **konvergent**, wenn

$$\lim_{h \rightarrow 0} (y_i^h - z(x_i)) = 0 \quad \text{für} \quad x_i = x \in [x_a, x_e], \quad (1.19)$$

wobei  $y_i^h$  die numerische Lösung an der Stelle  $x_i$  und  $z(x = x_i)$  die exakte Lösung der Differentialgleichung ist. Das Einschrittverfahren heißt konvergent zur Ordnung  $p > 0$ , wenn

$$y_i^h - z(x) = \mathcal{O}(h^p) \quad \text{für} \quad h \rightarrow 0, i = 0, 1, \dots, N \quad (1.20)$$

gilt.

Bei Einschrittverfahren läßt sich leicht ein Zusammenhang zwischen Konsistenz- und Konvergenzordnung herstellen. Es gilt folgender Satz:

Für eine Einzeldifferentialgleichung  $y' = f(x, y)$  sei ein Einschrittverfahren  $\Phi(x, y; h)$  mit folgenden Eigenschaften gegeben:

- $\Phi(x, y; h)$  ist bezüglich aller Veränderlicher  $(x, y; h)$  stetig für  $x_a \leq x \leq x_e$  und  $-\infty < y < +\infty$ , wobei  $0 \leq h \leq h_0$  für hinreichend kleines  $h_0$  gilt,
- Das Verfahren sei konsistent von der Ordnung  $p > 0$ ,
- Die Funktion  $\Phi(x, y; h)$  erfülle bezüglich  $y$  eine Lipschitzbedingung: “Es gibt eine Konstante  $L > 0$  sodass  $|f(x) - f(x + h)| < L|h|^p$ .”

Für dieses so gegebene Einschrittverfahren gilt, dass es konvergent von der Ordnung  $p$  ist.

### 1.2.3 Runge-Kutta-Verfahren

#### 1.2.3.1 Die Standardmethode

Eine der beliebtesten Methoden zur Integration von gewöhnlichen Differentialgleichungen ist das *Verfahren von Runge-Kutta*. Dieses Verfahren wurde 1985 erstmals formuliert und basiert auf einem allgemeinen Ansatz für die Funktion  $\Phi(x, y; h)$ . In der Standardform ist das Runge-Kutta-Verfahren für eine Funktion  $y' = f(x, y)$  durch folgende charakteristische Funktion  $\Phi(x, y; h)$  gegeben:

#### Standardform des Runge-Kutta-Verfahrens

Integrationsvorschrift:  $y(x + h) = y(x) + h \Phi_{RungeKutta}(x, y; h)$

Charakteristische Funktion:  $\Phi_{RungeKutta}(x, y; h) = \frac{1}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$

mit

$$k_1 = f(x, y)$$

$$k_3 = f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_2)$$

$$k_2 = f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_1)$$

$$k_4 = f(x + h, y + h k_3)$$

Entwickelt man  $\Phi_{RungeKutta}(x, y; h)$  in eine Taylorreihe nach  $h$ , so findet man, dass die oben angegebene Form des Runge-Kutta-Verfahrens konsistent in vierter Ordnung ist. Der Beweis der Konsistenzordnung ist trivial, erfordert aber eine längere Rechnung. Gemäß dem oben angegebenen Satz ist das Runge-Kutta-Verfahren auch konvergent in vierter Ordnung.

Varianten des Runge-Kutta-Verfahrens von höherer als vierter Ordnung wurden u.a. von Fehlberg [2, 3] formuliert. Die Runge-Kutta-Verfahren sind einfach, effizient und bestens geeignet, wenn man keine speziellen Genauigkeitsanforderungen an die Lösung stellt. Höhere Genauigkeit lässt sich eventuell durch den Einsatz einer *Predictor-Korrektor-Methode* erzielen (siehe Unterkapitel 1.4).

#### 1.2.3.2 Runge-Kutta-Methode mit angepasster Schrittweite

Ein guter Algorithmus für die Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen sollte die Güte der Lösung laufend kontrollieren und entsprechende Adaptierung der Parameter selbst vornehmen, um eine bestimmte vorgegebene Genauigkeit zu garantieren. In Einschrittverfahren lässt sich die Genauigkeit über die Schrittweite kontrollieren. In Bereichen starker Änderung der Lösung  $y(x)$  wird man zur Erreichung einer bestimmten Genauigkeit viele kleine Schritte benötigen, während man in Bereichen eines weitgehend glatten Funktionsverlaufes von  $y(x)$  mit wenigen großen Schritten das Auslangen findet. Sieht man eine entsprechende Anpassung der Schrittweite im Algorithmus vor, so kann man die Effizienz des Algorithmus wesentlich steigern (je nach Funktion  $y(x)$  sind Effizienzsteigerungen von 100 und mehr möglich).

Die Festlegung einer der jeweiligen Lösung angepassten Schrittweite erfordert die Bereitstellung einer Information über die Güte der Lösung bei jedem Integrations-schritt. Bei der Standard Runge-Kutta-Methode (konsistent in vierter Ordnung) erreicht man dies am einfachsten durch Verdopplung der Schritte, d.h. man rechnet jeden neuen Funktionswert zweimal, einmal in einem Schritt und einmal in zwei Schritten,

$$z(x+2h) = y_1(x+2h) + (2h)^5\Theta + O(h^6) + \dots, \quad (1.21)$$

$$z(x+2h) = y_2(x+2h) + 2h^5\Theta + O(h^6) + \dots. \quad (1.22)$$

Die exakte Lösung wurde mit  $z(x)$ , bezeichnet, die numerischen Lösungen,  $y_1(x)$ ,  $y_2(x)$ , wurden mit einer Schrittweite  $2h$  bzw.  $h$  gerechnet. Die Größe  $\Theta$  ist im wesentlichen ein Vielfaches der 5. Ableitung von  $y(x)$  an einer Stelle  $\bar{x}$  zwischen  $x$  und  $x+2h$ . Die numerischen Lösungen  $y_1(x+2h)$  und  $y_2(x+2h)$  unterscheiden sich auf Grund der verwendeten Schrittweiten ( $2h$  bzw.  $h$ ). Dies kommt in der Differenz

$$\Delta(x+2h) = y_2(x+2h) - y_1(x+2h) \quad (1.23)$$

zum Ausdruck. Vergleich von (1.21) und (1.22) liefert eine Abschätzung für den Termn fünfter Ordnung

$$\Delta = y_2(x+2h) - y_1(x+2h) \approx ((2h)^5 - 2h^5) \Theta \quad \longrightarrow \quad \Theta = \frac{\Delta}{30h^5} \quad (1.24)$$

und erlaubt eine Korrektur des numerisch erhaltenen Werts,

$$y^{corr}(x+2h) = y_1(x+2h) + \frac{32h^5}{30h^5}\Delta = y_1(x+2h) + \frac{16}{15}\Delta = y_2(x+2h) + \frac{1}{15}\Delta. \quad (1.25)$$

Die neue Abschätzung der Lösung ist nun konvergent in fünfter Ordnung und wird als *lokale Approximation* bezeichnet.

Die eigentliche Bedeutung der Parallelrechnung (1.21) und (1.22) liegt in der Möglichkeit den Parameter  $\Delta$  (1.23) als Kriterium für eine geeignete Schrittweite  $h$  zu verwenden. Die Forderung, das  $\Delta$  kleiner als ein vorgegebener Genauigkeitsparameter  $\text{acc}$  sein soll, ermöglicht eine automatisierte Schrittweitenanpassung des Runge-Kutta-Verfahrens. Erfüllt die gewählte Schrittweite das Kriterium  $\Delta < \text{acc}$  nicht, so wird die Schrittweite verkleinert und die Integration noch einmal ausgeführt. Ist das Kriterium  $\Delta < \text{acc}$  erfüllt, so kann  $y_2$  als Wert der Lösung verwendet werden und man führt den nächsten Integrationsschritt aus. Insgesamt erfordert diese Prozedur 11 Aufrufe der Funktion  $f(x, y)$  pro Schritt. Dies muss man vergleichen mit 8 Aufrufen, wenn man mit der Schrittweite  $h$  integriert. Die Rechenzeit erhöht sich zwar um den Faktor 1.375, aber man erhält damit ein Kriterium, um die Schrittweite zu adaptieren.

Eine alternative Konstruktion eines Differentialgleichungsintegrators mit automatisierter Schrittweitenanpassung beruht auf den *Eingebetteten Runge-Kutta-Formeln*. Fehlberg formulierte eine Methode fünfter Ordnung, welche sechs Aufrufe von  $f(x, y)$

$i$	$a_i$	$b_{ij}$					$c_i$	$\tilde{c}_i$
1	0						$\frac{37}{378}$	$\frac{2825}{27648}$
2	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{3}$					0	0
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				$\frac{250}{621}$	$\frac{18575}{48384}$
4	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$			$\frac{125}{594}$	$\frac{13525}{55296}$
5	1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$		0	$\frac{277}{14336}$
6	$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$\frac{253}{4096}$	$\frac{512}{1771}$	$\frac{1}{4}$

Tabelle 1.1: Koeffizienten von Cash und Karp [4] für die eingebettete Runge-Kutta-Methode fünfter Ordnung.

erfordert<sup>2</sup>,

$$k_i = hf(x_n + a_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} k_j) \quad j = 1, \dots, 6, \quad (1.26)$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^6 c_i k_i + O(h^6). \quad (1.27)$$

Eine andere Kombination der gleichen sechs Aufrufe liefert ein Verfahren vierter Ordnung,

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^6 \tilde{c}_j k_j + O(h^5), \quad (1.28)$$

Durch Differenzbildung erhält man wieder ein Kriterium für die Güte und damit für die Schrittweitenanpassung,

$$\Delta = y_{n+1} - \tilde{y}_{n+1} = \sum_{j=1}^6 (c_j - \tilde{c}_j) k_j. \quad (1.29)$$

In der praktischen Anwendung haben sich die Koeffizienten von Cash und Karp [4] bewährt, welche sich von den von Fehlberg angegebenen Werten unterscheiden. In Tab. 1.1 sind die Werte von Cash and Karp [4] angegeben.

### 1.2.4 Fehlerabschätzung von Einschrittverfahren

Die Abschätzung der Verlässlichkeit numerischer Lösungen ist für die Beurteilung der Güte eines Resultates unerlässlich. Bei numerischen Rechnungen lassen sich verschiedene Klassen von Fehlern unterscheiden:

<sup>2</sup>Allgemein lässt sich sagen, dass ein Runge-Kutta-Verfahren  $M$ . Ordnung zumindest  $M$  Aufrufe von  $f(x, y)$ , aber niemals mehr als  $M + 2$  Aufrufe erfordert.

- *Unsicherheit in den Eingabedaten:* Diese können im allgemeinen in der numerischen Rechnung nicht beeinflusst werden. Man muss jedoch die Stabilität bezüglich solcher Unsicherheiten diskutieren.
- *Abbrechfehler:* Darunter versteht man Fehler durch Vernachlässigung von Resttermen bzw. nicht vollständig durchgeführte Iterationen. Solche Fehler lassen sich über den verwendeten Algorithmus steuern.
- *Rundungsfehler:* Diese werden durch die Abbildung der numerischen Werte auf die Menge der Maschinenzahlen verursacht. Durch Auslöschungseffekte kann es zu einer unerwünschten Verstärkung dieser Fehler kommen. Durch Umstellung im Algorithmus kann oft der Einfluss der Rundungsfehler reduziert werden.

Im Unterkapitel 1.2.2 haben wir die Konvergenz der Verfahren betrachtet. Im nächsten Schritt wollen wir die Gesamtheit aller Fehler, und zwar Rundungs- und Verfahrensfehler gemeinsam betrachten. Sei  $z(x)$  die exakte Lösung und  $\eta_i$  die numerische Lösung an der Stelle  $x_i$ , dann gelten die Beziehungen

$$\text{Numerische Lösung: } \tilde{\eta}_{i+1} = \tilde{\eta}_i + h\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) + \varepsilon_{i+1}, \quad (1.30)$$

$$\text{Exakte Lösung: } z(x_{i+1}) = z(x_i) + h\Phi(x_i, z_i; h) + \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad (1.31)$$

wobei  $\varepsilon_{i+1}$  der gesamte Rundungsfehler für die Integration von  $x_i$  nach  $x_{i+1}$  ist. Dieser setzt sich aus drei Anteilen zusammen,

$$\varepsilon_{i+1} = h\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) [\alpha_{i+1} + \mu_{i+1}] + \tilde{\eta}_{i+1}\sigma_{i+1}. \quad (1.32)$$

Dabei sind

- $\alpha_{i+1}$  Rundungsfehler bei der Darstellung von  $\Phi$   
 $\alpha_{i+1} = \{\text{rd}[\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h)] - \Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h)\} / \Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h),$
- $\mu_{i+1}$  Fehler bei der Multiplikation von  $h \text{rd}[\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h)]$ ,
- $\sigma_{i+1}$  Fehler bei der Addition von  $\eta_{i+1} + h \text{rd}[\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h)]$ ,

wobei  $\text{rd}[C]$  die Maschinenzahl bei der Darstellung einer Zahl  $C$  angibt. Im allgemeinen ist  $\tilde{\eta}_i \gg h\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h)$ , sodass meist  $\tilde{\eta}_{i+1}\sigma_{i+1}$  der dominante Beitrag zum Gesamtfehler  $\varepsilon_{i+1}$  ist.

Subtraktion der Gleichungen (1.30) und (1.31) liefert,

$$\begin{aligned} r_{i+1} &= \tilde{\eta}_{i+1} - z(x_{i+1}) \\ &= \tilde{\eta}_i - z(x_i) + h [\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) - \Phi(x_i, z(x_i); h)] + \varepsilon_{i+1} + \mathcal{O}(h^{p+1}). \\ &= r_i + h [\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) - \Phi(x_i, z(x_i); h)] + \varepsilon_{i+1} + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned} \quad (1.33)$$

Aus der Gleichung (1.33) folgt die Ungleichung für  $|r_{i+1}|$

$$|r_{i+1}| \leq |r_i| + |h [\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) - \Phi(x_i, z(x_i); h)]| + \varepsilon_{i+1} + M(h^{p+1}), \quad (1.34)$$

wobei  $M$  eine positive Konstante ist. Unter der Annahme einer Lipschitz-Bedingung von  $\Phi$  bezüglich der Lösung  $y(x)$ ,

$$|\Phi(x_i, \tilde{\eta}_i; h) - \Phi(x_i, z(x_i); h)| \leq L|\tilde{\eta}_i - z(x_i)| = L|r_i| \quad \text{mit} \quad L > 0 \quad (1.35)$$

ergibt sich die Ungleichung für die Abschätzung des Gesamtfehlers

$$|r_{i+1}| \leq |r_i| + h L|r_i| + |\varepsilon_{i+1}| + Mh^{p+1} = (1 + h L)|r_i| + |\varepsilon_{i+1}| + Mh^{p+1}, \quad (1.36)$$

wobei  $|r_0| = 0$  der Anfangswert der Iteration ist.

Zur Abschätzung von  $|r_i|$  betrachten wir statt der Ungleichung die Differenzengleichung

$$\chi_{i+1} = (1 + h L)\chi_i + |\varepsilon_{i+1}| + Mh^{p+1} \quad \text{mit} \quad \chi_0 = 0. \quad (1.37)$$

Durch vollständige Induktion kann man zeigen, dass  $|r_i| < \chi_i$  für alle  $i \geq 0$  gilt<sup>3</sup>. Die Differenzengleichung (1.37) löst man analog wie eine Differentialgleichung erster Ordnung. Die homogene Gleichung  $\bar{\chi}_{i+1} = (1+hL)\bar{\chi}_i$  wird durch  $\bar{\chi}_i = C(1+hL)^i$  gelöst. Eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung ist  $\hat{\chi}_i = \alpha = \text{konstant}$ . Einsetzen in die Differenzengleichung (1.37) liefert

$$\hat{\chi}_i = \alpha = -\frac{1}{L} \left[ \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{h} + Mh^p \right]. \quad (1.38)$$

Die allgemeine Lösung ergibt sich aus homogener und partikulärer Lösung

$$\chi_i = \bar{\chi}_i + \hat{\chi}_i = C(1 + h L)^i - \frac{1}{L} \left[ \frac{|\varepsilon_{i+1}|}{h} + Mh^p \right]. \quad (1.39)$$

Die Konstante  $C$  bestimmt man durch Einsetzen der Randbedingung  $\chi_0 = 0$ . Dies führt auf die Lösung der Differenzengleichung (1.37)

$$\begin{aligned} \chi_i &= \left[ \frac{|\varepsilon_i|}{h} + Mh^p \right] \frac{(1 + h L)^i - 1}{L} \\ &\leq \left[ \frac{|\varepsilon_i|}{h} + Mh^p \right] \frac{e^{iLh} - 1}{L} \leq \left[ \frac{|\varepsilon_i|}{h} + Mh^p \right] \frac{e^{L(x_e - x_a)} - 1}{L} \end{aligned} \quad (1.40)$$

Man erhält somit die Abschätzung des Fehlers  $|r_i|$

$$|r_i| \leq \left[ \frac{|\varepsilon_i|}{h} + Mh^p \right] \frac{e^{L(x_e - x_a)} - 1}{L}. \quad (1.41)$$

Diese Abschätzung ist für praktische Anwendungen zu grob und hat daher nur qualitativen Wert. Sie zeigt aber das wesentliche Verhalten der Abhängigkeit des Gesamtfehlers von der Schrittweite. Es gibt einen optimalen Wert für die Schrittweite  $h$ . Für große Schrittweite  $h$  dominiert der Abbruchfehler den Gesamtfehler. Wird  $h$  kleiner, so steigt aufgrund der Rundungsfehler der Gesamtfehler an (Abb. 1.1).

---

<sup>3</sup>Induktionsanfang: für  $i = 0$  erfüllt, da  $|r_0| = \chi_0 = 0$ ,

Induktionsschluss: für  $i > 0$  erfüllt, d.h.  $|r_i| \leq \chi_i$ , dann folgt

$|r_{i+1}| \leq (1 + hL)|r_i| + |\varepsilon_{i+1}| + Mh^{p+1} \leq (1 + hL)\chi_i + |\varepsilon_{i+1}| + Mh^{p+1} = \chi_{i+1}$ .

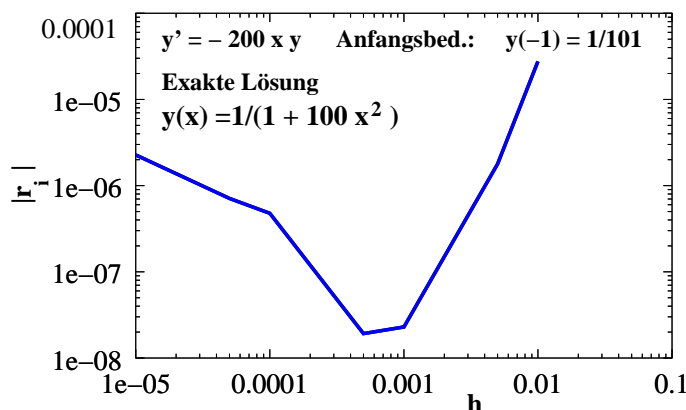


Abbildung 1.1: Beispiel für den Gesamtfehler bei der numerischen Lösung einer Differentialgleichung.

## 1.3 Differentialgleichungen höherer Ordnung

Viele physikalische und technische Problemstellungen führen auf Differentialgleichungen zweiter oder höherer Ordnung. Im Prinzip kann man jede Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung auf ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung umformen. Die entsprechenden Anfangs- und Randwertprobleme können dann mit einem erweiterten Einschrittverfahren numerisch bestimmt werden. In diesem Kapitel werden wir zunächst die Einschrittverfahren auf ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung verallgemeinern und anschließend die Umformung von Differentialgleichungen höherer Ordnung auf ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung darstellen.

### 1.3.1 Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung

Ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung hat die Form

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, \dots, y_n) \\ y_2' &= f_2(x, y_1, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, \dots, y_n) \end{aligned}, \quad (1.42)$$

wobei die Differentialgleichungen durch  $n$  Funktionen gegeben sind,  $f_i, i = 1, \dots, n$ . Das Differentialgleichungssystem lässt sich durch eine Vektornotation kompakt anschreiben

$$\underline{Y}' = \underline{F}(x, \underline{Y}). \quad (1.43)$$



Die Vektoren sind durch einen Unterstrich bezeichnet und wie folgt definiert

$$\underline{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \underline{F}(x, \underline{Y}) = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \dots, y_n) \\ \vdots \\ f_n(x, y_1, \dots, y_n) \end{pmatrix}. \quad (1.44)$$

Explizite Einschrittverfahren lassen sich direkt zur Lösung eines Systems von Differentialgleichungen erster Ordnung erweitern. An Stelle von Gleichung (1.2) gilt dann die vektorielle Form

$$\underline{Y}(x_{i+1}) = \underline{Y}(x_i) + h_{i+1} \underline{\Phi}(x_i, \underline{Y}(x_i); h_{i+1}) \quad \text{mit} \quad \underline{Y}(x_0) = \underline{Y}(x_a), \quad (1.45)$$

wobei die charakteristische Funktion  $\underline{\Phi}(x, \underline{Y}(x); h)$  in jeder Komponente mit der charakteristischen Funktion für eine Einzeldifferentialgleichung übereinstimmt. Wie bei einer Einzeldifferentialgleichung kann dann vom Anfangswertvektor  $\underline{Y}(x_a)$  die Lösung  $\underline{Y}(x_i)$  bei den Stützstellen  $i = 1, 2, 3, \dots$ , sukzessive berechnet werden.

Als Beispiel für den Übergang auf Vektoren wollen wir hier die charakteristische Funktion  $\underline{\Phi}(x, \underline{Y}(x); h)$  der Standardform der Runge-Kutta-Methode für ein System von Differentialgleichungen erster Ordnung (1.43) anschreiben.

#### Standardform des Runge-Kutta-Verfahrens für System von Differentialgleichungen erster Ordnung

Integrationsvorschrift:  $\underline{Y}(x+h) = \underline{Y}(x) + h \underline{\Phi}_{RungeKutta}(x, \underline{Y}(x); h)$

Charakteristische Funktion:  $\underline{\Phi}_{RungeKutta}(x, \underline{Y}(x); h) = \frac{1}{6} [\underline{k}_1 + 2\underline{k}_2 + 2\underline{k}_3 + \underline{k}_4]$

mit

$$\begin{aligned} \underline{k}_1 &= \underline{F}(x, \underline{Y}(x)) & \underline{k}_2 &= \underline{F}\left(x + \frac{h}{2}, \underline{Y}(x) + \frac{h}{2} \underline{k}_1\right) \\ \underline{k}_3 &= \underline{F}\left(x + \frac{h}{2}, \underline{Y}(x) + \frac{h}{2} \underline{k}_2\right) & \underline{k}_4 &= \underline{F}(x+h, \underline{Y}(x) + h \underline{k}_3) \end{aligned}$$

### 1.3.2 Umformung gewöhnlicher Differentialgleichungen höherer Ordnung

Wie bereits in der Einleitung zu Kapitel 1.3 erwähnt, kann man jedes Anfangswertproblem einer in der  $n$ -ten Ableitung von  $y$  linearen Einzeldifferentialgleichung

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}), \quad (1.46)$$

auf ein Anfangswertproblem eines Systems von  $n$  Differentialgleichungen erster Ordnung zurückführen kann. Definiert man nun

$$z_1 = y, \quad z_2 = y', \quad \dots, \quad z_n = y^{(n-1)} \quad (1.47)$$

so ergibt sich das System von Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\begin{aligned} z_1' &= z_2 \\ z_2' &= z_3 \\ &\vdots \\ z_n' &= f(x, z_1, \dots, z_n) \end{aligned} \quad . \quad (1.48)$$

In Vektornotation ergibt sich damit das System von Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\frac{d}{dx} \underline{Z} = \underline{F}(x, \underline{Z}(x)) \quad (1.49)$$

mit

$$\underline{F}(x, \underline{Z}(x)) = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \\ f(x, z_1, z_2, \dots, z_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_n \\ f(x, \underline{Z}(x)) \end{pmatrix} . \quad (1.50)$$

Für einen kompakten Algorithmus ist meist die Umwandlung auf ein *autonomes System* zweckmäßig, d.h. die unabhängige Veränderliche  $x$  erscheint nicht mehr explizit in der Funktion  $\underline{F}$  auf. Dies lässt sich durch die zusätzliche Definition von  $z_0 = x$  in jedem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung erreichen. Das autonome System hat gegenüber (1.51) eine um 1 erhöhte Dimension sowie eine kompaktere Form von  $\underline{F}$ , da kein Unterschied zwischen der unabhängigen Veränderlichen  $x$  und der Lösung  $y, y', y'', y^{(3)}, \dots, y^{(n)}$  gemacht wird,

$$\underline{F}(x, \underline{Z}(x)) = \begin{pmatrix} 1 \\ f_1(\underline{Z}) \\ f_2(\underline{Z}) \\ \vdots \\ f_n(\underline{Z}) \end{pmatrix} . \quad (1.51)$$

Durch das Einbinden der unabhängigen Veränderlichen  $x$  in den Vektor  $\underline{Z}$  entsteht kein Genauigkeitsverlust.

### 1.3.3 Anwendung von Einschrittverfahren mit vektorieller Lösung

Die Einfachheit von Einschrittverfahren erlaubt eine flexible Anwendung auch auf komplexere Probleme, wie z.B. eine dreidimensionale Bewegung im Gravitationsfeld,

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} = \mathbf{K}(\mathbf{r}, t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{r}(t=0) = \mathbf{r}^{(a)} \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t=0) = \mathbf{v}^{(a)}, \quad (1.52)$$

wobei  $\mathbf{r}(t) = x(t)\hat{\mathbf{x}} + y(t)\hat{\mathbf{y}} + z(t)\hat{\mathbf{z}}$  und  $\mathbf{K}(\mathbf{r}, t)$  der Kraftvektor ist. Diese Differentialgleichung lässt sich durch die folgende Definition

$$z_0 = t, z_1 = x, z_2 = \frac{dx}{dt}, z_3 = y, z_4 = \frac{dy}{dt}, z_5 = z_6, z_6 = \frac{dz}{dt} \quad (1.53)$$

in ein autonomes System überführen. Die entsprechende Funktion  $\underline{F}$  lautet nun

$$\underline{F}(\underline{Z}) = \begin{cases} 1 \\ z_2 \\ \frac{1}{m}K_x(\underline{Z}) \\ z_4 \\ \frac{1}{m}K_y(\underline{Z}) \\ z_6 \\ \frac{1}{m}K_z(\underline{Z}) \end{cases}. \quad (1.54)$$

Ausgehend von den Anfangsbedingungen

$$z_0 = 0, z_1 = x^{(a)}, z_2 = v_x^{(a)}, z_3 = y^{(a)}, z_4 = v_y^{(a)}, z_5 = z^{(a)}, z_6 = v_z^{(a)} \quad (1.55)$$

kann die Lösung  $\mathbf{r}$  mit einem Einschrittverfahren einfach bestimmt werden.

## 1.4 Mehrschrittverfahren

Bei den bisher betrachteten Algorithmen handelte es sich um Einschrittverfahren. Bei diesen wurde die Lösung aus der Kenntnis der Lösung an der vorangegangenen Stützstelle bestimmt. Diese Algorithmen sind einfach auf Systeme von Differentialgleichungen erweiterbar, indem man statt einer einfachen Lösung  $y(x)$  einen Lösungsvektor  $\underline{y}(x)$  ansetzt. Neben den einfachen Einschrittverfahren werden häufig auch sogenannte *Mehrschrittverfahren* zur Lösung von Differentialgleichungen verwendet. In diesem Unterkapitel wird die Formulierung von einfachen Mehrschrittverfahren dargestellt, deren Konstruktion als eine Erweiterung der Einschrittverfahren angesehen werden kann. Die charakteristischen Einsatzmöglichkeiten solcher Mehrschrittverfahren wird diskutiert.

### 1.4.1 Konstruktion einfacher Mehrschrittverfahren

Zur Konstruktion einfacher Mehrschrittverfahren gehen wir wieder von dem einfachen Anfangswertproblem (1.1) aus,

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0. \quad (1.56)$$

Die Lösung mittels eines Mehrschrittverfahrens geht davon aus, dass Näherungswerte  $\eta_k$  für die Lösung  $y(x_k)$  an  $k = j, j+1, \dots, j+r-1$  äquidistanten Stützstellen  $x_k = x_0 + k \cdot h$  bereits bekannt sind. Mit diesen Werten und der Differentialgleichung (1.56) lässt sich dann ein weiterer Näherungswert  $\eta_{j+r}$  für die Lösung  $y(x_{j+r})$  bestimmen. Für  $r > 1$  spricht man dann von einem Mehrschrittverfahren. Beim Start eines

solchen Algorithmus benötigt man also bereits an  $r$  Stützstellen Näherungswerte für die Lösung. Diese können z.B. über Einschrittverfahren generiert werden. Wir wollen hier eine einfache Gruppe von Einschrittverfahren besprechen, an Hand derer die prinzipiellen Anwendungsmöglichkeiten gut dargestellt werden können.

Zur Darstellung der Konstruktion dieser Algorithmen integrieren wir zunächst die Differentialgleichung (1.56)

$$y(x_{p+k}) - y(x_{p-j}) = \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dt f(t, y(t)), \quad (1.57)$$

Im nächsten Schritt ersetzt man den Integranden durch ein interpolierendes Polynom  $P_q(x)$  vom Grad  $q$ , welches die Interpolationsvorschrift

$$P_q(x_i) = f(x_i, y(x_i)), \quad \text{mit } i = p, p-1, \dots, p-q \quad (1.58)$$

erfüllt. Verwendung der Lagrangeschen Interpolationsformeln

$$P_q(x) = \sum_{i=0}^q f(x_{p-i}, y_{p-i}) L_i(x), \quad \text{mit } L_i(x) = \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{x - x_{p-\ell}}{x_{p-i} - x_{p-\ell}} \quad (1.59)$$

führt auf die Grundformel eines Mehrschrittverfahrens,

$$\begin{aligned} y_{p+k} - y_{p-j} &\approx \sum_{i=0}^q f(x_{p-i}, y_{p-i}) \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dx L_i(x) \\ &= h \sum_{i=0}^q \beta_{qi} \cdot f(x_{p-i}, y_{p-i}) \end{aligned} \quad (1.60)$$

mit

$$\beta_{qi} := \frac{1}{h} \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dx L_i(x) = \int_{-j}^k ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}, \quad i = 0, 1, \dots, q, \quad (1.61)$$

wobei  $x = x_p + s \cdot h$ . Ersetzt man nun die Werte der Lösung  $y_i = y(x_i)$  durch die Näherungswerte  $\eta_i$ , so erhält man einen einfachen Algorithmus eines Mehrschrittverfahrens

$$\eta_{p+k} = \eta_{p-j} + h \sum_{i=0}^q \beta_{qi} \cdot f_{p-i}, \quad \text{mit } f_i = f(x_i, \eta_i). \quad (1.62)$$

Durch die Wahl von  $k, j$  und  $q$  erhält man verschiedene Lösungsalgorithmen. Insbesondere ergibt sich für  $k = 1, j = 0$  und  $q = 0$  das einfache Euler- oder Polygonzugverfahren. Wir wollen uns nun einige charakteristische Verfahren ansehen.

#### 1.4.1.1 Prediktor-Verfahren

Ein Prediktor-Verfahren erlaubt die explizite Berechnung eines Näherungswertes der Lösung für eine Stützstelle. Als Beispiele sollen hier die Verfahren von *Adams-Bashforth*

$\beta_{qi}$	$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$
$\beta_{0i}$	1				
$2\beta_{1i}$	3	-1			
$12\beta_{2i}$	23	-16	5		
$24\beta_{3i}$	55	-59	37	-9	
$720\beta_{4i}$	1901	-2774	2616	-1274	251

Tabelle 1.2: Koeffizienten der Mehrschritt-Verfahren nach Adam-Bashforth

genannt werden, welche durch die Wahl  $k = 1, j = 0$  und  $q = 0, 1, 2, \dots$  charakterisiert sind.

$$\eta_{p+1} = \eta_p + h [\beta_{q0}f_p + \beta_{q1}f_1 + \dots + \beta_{qq}f_q] \quad (1.63)$$

mit

$$\beta_{qi} := \int_0^1 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i} \frac{\ell + s}{\ell - i}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, q. \quad (1.64)$$

Es handelt sich dabei um  $r = q + 1$ -Schritt Verfahren. In Tab. 1.2 sind die entsprechenden Koeffizienten  $\beta_{qi}$  angegeben.

Ein weiteres Prediktor-Verfahren ist der *Algorithmus von Nyström*, welchen man mit  $k = 1$  und  $j = 1$  erhält

$$\eta_{p+1} = \eta_{p-1} + h [\beta_{q0}f_p + \beta_{q1}f_{p-1} + \dots + \beta_{qq}f_{p-q}] \quad (1.65)$$

mit

$$\beta_{qi} = \int_{-1}^{+1} ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}, \quad i = 0, 1, \dots, q. \quad (1.66)$$

#### 1.4.1.2 Korrektor-Verfahren

Ein Korrektor-Verfahren erlaubt im Allgemeinen keine explizite Berechnung eines Näherungswertes der Lösung, weil diese auch in die entsprechenden Funktionen als Argumentwerte eingehen und daher nicht separiert werden können. Man spricht daher von impliziten Verfahren, welche sich zur Korrektur/Verbesserung einer bereits vorhandenen Näherungslösung eignen.

Mit der Wahl  $k = 0$  und  $j = 1$  ergeben sich die Verfahren von *Adams-Moulton*,

$$\eta_p = \eta_{p-1} + h [\beta_{q0}f_p + \beta_{q1}f_{p-1} + \dots + \beta_{qq}f_{p-q}] , \quad (1.67)$$

Umbenennung des Index  $p \rightarrow p + 1$  liefert die Standardform für die numerische Implementierung

$$\eta_{p+1} = \eta_p + h [\beta_{q0}f_{p+1} + \beta_{q1}f_p + \dots + \beta_{qq}f_{p+1-q}] \quad (1.68)$$

$\beta_{qi}$	$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$
$\beta_{0i}$	1				
$2\beta_{1i}$	1	1			
$12\beta_{2i}$	5	8	-1		
$24\beta_{3i}$	9	19	-5	1	
$720\beta_{4i}$	251	646	-264	106	-19

Tabelle 1.3: Koeffizienten der Mehrschritt-Verfahren nach Adams-Moulton

mit

$$\beta_{q,i} := \int_{-1}^0 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}. \quad (1.69)$$

Die Koeffizienten für das Adams-Moulton-Verfahren sind bis  $q=4$  in Tab. 1.3 angegeben.

In der Rekursionsformel (1.68) erscheint nun  $\eta_{p+1}$  auf beiden Seiten der Gleichung, wobei  $\eta_{p+1}$  auf der rechten Seite als Argument in der Funktion  $f(x, y)$  auftritt. Im Allgemeinen bewirkt diese Funktion einen nichtlinearen Zusammenhang, sodass eine direkte Berechnung von  $\eta_{p+1}$  nicht möglich ist. Man bezeichnet daher das Verfahren von *Adams-Moulton* als *implizites Verfahren*.

Mit einem impliziten Verfahren kann nun ein iteratives Verfahren definiert werden, welches den Funktionswert  $\eta_{p+1}$  verbessert,

$$\eta_{p+1}^{(i+1)} = \eta_p + h \left[ \beta_{q0} f(x_{p+1}, \eta_{p+1}^{(i)}) + \beta_{q1} f_p + \cdots + \beta_{qq} f_{p+1-q} \right]. \quad (1.70)$$

Man spricht daher von einem *Korrektor-Verfahren*, weil man durch die Iteration den Wert von  $\eta_{p+1}$  korrigiert bzw. verbessert.

Eine weitere Gruppe von Korrektorenverfahren geht auf Milne-Thompson zurück und ist durch  $k = 0, j = 2$  charakterisiert. Erstzt man wieder  $p$  durch  $p + 1$ , so ergibt sich

$$\eta_{p+1} = \eta_{p-1} + h [\beta_{q0} f_{p+1} + \beta_{q1} f_p + \cdots + \beta_{qq} f_{p+1-q}] \quad (1.71)$$

mit

$$\beta_{q,i} := \int_{-2}^0 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}. \quad (1.72)$$

Analog zu (1.70) wird auch (1.71) durch Iteration gelöst.

### 1.4.2 Allgemeine Mehrschrittverfahren

Wir betrachten wieder die einfache gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung (1.56),

$$y' = f(x, y) \quad \text{mit } y(x_0) = y_0.$$

Alle besprochenen Mehrschrittverfahren und Einschrittverfahren lassen sich gemeinsam in der folgenden Form beschreiben

$$\eta_{j+r} + a_{r-1}\eta_{j+r-1} + \cdots + a_0\eta_j = hF(x_j; \eta_{j+r}, \eta_{j+r-1}, \dots, \eta_j; h; f). \quad (1.73)$$

Ein durch (1.73) gegebenes Mehrschrittverfahren wird als  $r$ -Schrittverfahren bezeichnet. Die im vorhergehenden Unterabschnitt 1.4.1 beschriebenen Verfahren sind *lineare  $r$ -Schrittverfahren*, weil  $F$  linear von der Funktion  $f$  abhängt,

$$F(x_j; \eta_{j+r}, \eta_{j+r-1}, \dots, \eta_j; h; f) = b_r f(x_{j+r}, \eta_{j+r}) + \cdots + b_0 f(x_j, \eta_j), \quad (1.74)$$

wobei  $b_i, i = 0, \dots, r$  Konstanten sind.

Betrachten wir als Beispiel das  $r = q + 1$ -Schrittverfahren von Adams-Bashforth, so haben die Koeffizienten die folgenden Werte:

$$q_q = -1, \quad a_{q-1} = \cdots = a_0 = 0, \quad b_{q+1} = 0 \quad (1.75)$$

und

$$b_{q-i} = \beta_{qi} = \int_0^1 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}. \quad (1.76)$$

### 1.4.3 Konsistenz und Konvergenz von Mehrschrittverfahren

Wie bei Einschrittverfahren kann man den lokalen Diskretisierungsfehler  $\tau(x, y; h)$  eines Mehrschrittverfahrens (1.73) definieren,

$$\begin{aligned} \tau(x, y; h) &:= \frac{1}{h} \left[ z(x + rh) + \sum_{i=0}^{r-1} a_i z(x + ih) \right. \\ &\quad \left. - hF(x; z(x + rh), z(x + (r-1)h), \dots, z(x); h; f) \right], \end{aligned} \quad (1.77)$$

wobei  $z(x)$  die Lösung des Anfangswertproblems ist.

#### **Konsistenz eines Mehrschrittverfahrens:**

Ein Mehrschrittverfahren heißt konsistent, falls für jedes  $f \in F_1(a, b)$  eine Funktion  $\sigma(h)$  existiert mit  $\lim_{h \rightarrow 0} \sigma(h) = 0$ , sodass

$$|\tau(x, y; h)| \leq \sigma(h) \quad \text{für alle } x \in [a, b].$$

Man spricht von einem Verfahren  $p$ -ter Ordnung, falls für  $f \in F_p(a, b)$  die Beziehung  $\sigma(h) = O(h^p)$  gilt.

Dabei ist  $F_p(a, b)$  die Menge aller auf  $[a, b]$   $p$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen.

Davon zu unterscheiden ist die Konvergenz des Mehrschrittverfahrens, die sich auf die Güte der numerischen Lösung  $\eta(x, \epsilon; h)$  bezieht. Die numerischen Näherungswerte der Lösungen  $\eta$  hängen von der Stützstellenschrittweite  $h$  und den Fehlern  $\epsilon_i = \eta_i - y(x_i)$  an den  $r$  im Mehrschrittverfahren vorgegebenen Stützstellen ab. Für ein konvergentes Verfahren kann man nun erwarten, dass der *globale Diskretisierungsfehler*

$$e(x, \epsilon; h) := \eta(x; \epsilon; h) - y(x) \quad (1.78)$$

bei festem  $x$  für  $h = h_n = (x - x_0)/n$  und  $n = 1, 2, \dots$  gegen 0 konvergiert, wenn auch die Fehler  $\epsilon(x, h)$  mit  $h \rightarrow 0$  beliebig klein werden. Die Konvergenz des Mehrschrittverfahrens kann daher wie folgt definiert werden.

**Konvergenz eines Mehrschrittverfahrens:**

Ein Mehrschrittverfahren heißt konvergent, falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \eta(x; \epsilon; h_n) = y(x), \quad h_n := \frac{x - x_0}{n}, \text{ mit } n = 1, 2, \dots,$$

falls für alle  $x \in [a, b]$ , für alle  $f \in F_1(a, b)$  und alle Funktionen  $\epsilon(z; h)$ , für die es ein  $\rho(h)$  gibt, die folgenden Beziehungen genügen,

$$|\epsilon(z, h)| \leq \rho(h) \quad \text{für alle } z \in R_h \text{ und } \lim_{h \rightarrow 0} \rho(h) = 0.$$

Dabei ist die Menge  $R_h = \{x_0 + ih | i = 0, 1, 2, \dots\}$ .

## 1.5 Numerov Verfahren

Viele Fragestellungen der Quantenphysik und der Elektrodynamik lassen sich auf eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + w(x) \right] y(x) = S(x) \quad (1.79)$$

zurückführen. Dabei ist  $w(x)$  eine Funktion, welche die Stärke des *Response* angibt und  $S(x)$  stellt einen Quellterm dar.

Probleme der Physik, die auf eine derartige gewöhnliche Differentialgleichung führen sind z.B. (a) die radiale Schrödingergleichung und (b) die Poissongleichung für eine Ladungsverteilung, die nur eine radiale Abhängigkeit aufweist.



**Beispiel (a): Schrödingergleichung**

Die radiale Schrödingergleichung mit einem Potential  $V(r)$  hat die Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} \psi_\ell(r) = E \psi_\ell(r),$$

wobei  $\ell$  die Bahndrehimpulsquantenzahl,  $m$  die Masse des Teilchens und  $\psi_\ell(r)$  die radiale Wellenfunktion des Teilchens sind. Mit den Definitionen

$$\psi_\ell(r) = \frac{y(r)}{r}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$$

ergibt sich eine gewöhnliche Differentialgleichung der Form (1.79) mit

$$w(r) = k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r).$$

**Beispiel (b): Poissongleichung**

Die Poissongleichung für eine Ladungsverteilung, die nur von  $r$  abhängt führt auf die Radialgleichung

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right\} \Phi(r) = -4\pi\rho(r)$$

mit dem Skalarpotential  $\Phi(r)$  und der Ladungsdichte  $\rho(r)$ . Definiert man nun  $y(r) = r\Phi(r)$ , so ergibt sich die folgende Differentialgleichung für  $y(r)$

$$\frac{d^2}{dr^2} y(r) = -4\pi r \rho(r).$$

Die Differentialgleichung ist äquivalent zur Differentialgleichung (1.79), falls  $w(r) = 0$  und  $S(r) = -4\pi r \rho(r)$  gesetzt werden.

**1.5.1 Standardversion des Numerov Verfahrens**

Die numerische Lösung der Differentialgleichung (1.79) kann im Prinzip durch ein Einschrittverfahren, z.B. das Runge-Kutta-Verfahren, erfolgen. Diese Vorgangsweise ist zweckmäßig, falls neben der Funktion  $y(x)$  auch die Ableitung  $dy/dx$  in der weiteren Rechnung benötigt wird. In den meisten Fällen geht allerdings die erste Ableitung nicht explizit ein.

Eine sehr einfache Methode zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen von Typ (1.79) geht auf Numerov [5] zurück. Man bezeichnet den Algorithmus auch als *Cowling Methode* oder *Fox-Godwin-Verfahren* [6]. Wir definieren nun ein äquidistantes Gitter  $\{x_n = x_0 + nh\}, n = 0, 1, 2, \dots$  mit der Schrittweite  $h$  auf dem Definitionsbereich und entwickeln die Lösung  $y(x)$  an der Stelle  $y_n = y(x_n)$  in eine Taylor-Reihe. Man erhält somit für

$$y_{n\pm 1} = y_n \pm h y'_n + \frac{h^2}{2} y''_n \pm \frac{h^3}{6} y'''_n + \frac{h^4}{24} y_n^{(iv)} \pm \frac{h^5}{120} y_n^{(v)} + O(h^6) \quad (1.80)$$

Aus Gleichung (1.80) ergibt sich der Ausdruck

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y''_n + \frac{h^2}{12} y_n^{(iv)} + O(h^4). \quad (1.81)$$

Die zweite Ableitung  $y''_n$  kann also als Differenzenausdruck plus einem Korrekturterm dargestellt werden, welcher die vierte Ableitung der Funktion enthält. Der charakteristische Schritt des Numerov-Verfahrens besteht nun in der Darstellung der vierten Ableitung durch die Differentialgleichung (1.79),

$$y^{(iv)} = \frac{d^2}{dx^2} y'' = \frac{d^2}{dx^2} [-w(x)y(x) + S(x)]. \quad (1.82)$$

Damit lässt sich der Korrekturterm wieder durch die rechte Seite der Differentialgleichung ausdrücken, sodass wir nun folgenden Differenzenausdruck für die Lösung der Differentialgleichung erhalten,

$$\begin{aligned} y''_n &= \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} y_n^{(iv)} + O(h^4) = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} \\ &+ \frac{h^2}{12} \left[ \frac{w_{n+1}y_{n+1} - 2w_n y_n + w_{n-1}y_{n-1}}{h^2} - \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2} + O(h^2) \right] \\ &= -w_n y_n + S_n + O(h^4). \end{aligned} \quad (1.83)$$

Ordnet man nun die Terme nach der Potenz von  $h$ , so ergibt sich die Grundgleichung für die Lösung der Differentialgleichung (1.79) im Numerov-Verfahren

$$\begin{aligned} y_{n+1} \left[ 1 + \frac{h^2}{12} w_{n+1} \right] - y_n \left[ 2 - \frac{10h^2}{12} w_n \right] + y_{n-1} \left[ 1 + \frac{h^2}{12} w_{n-1} \right] \\ = \frac{h^2}{12} [S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}] + O(h^6). \end{aligned} \quad (1.84)$$

Das Numerov-Verfahren ist konsistent und konvergent in vierter Ordnung und eignet sich bestens für die Lösung von Anfangswertproblemen.

Für den Start des Verfahrens sollte die Funktion  $y(x)$  an zwei nebeneinanderliegenden Stützstellen bekannt sein. Dies entspricht auch den erforderlichen zwei Anfangsbedingungen für die eindeutige Lösung gewöhnlicher Differentialgleichung zweiter Ordnung. So kann z.B. die Kenntnis von  $y(x)$  und  $y'(x)$  an einer Stützstelle  $\bar{x}$  durch

einen linearisierten Zusammenhang zur Berechnung der Funktion an zwei Stützstellen ausgenutzt werden.  $y_j = y(\bar{x}) + (x_j - \bar{x})y'(\bar{x})$  für  $j = n, n+1$ .

Für die praktische Rechnung ist es zweckmäßig die Größe  $Q(r)$  zu definieren,

$$Q_n = \left[ 1 + \frac{h^2}{12} w_n \right] y_n. \quad (1.85)$$

Die Rekursionsformel (1.84) reduziert sich dann auf die einfache Form

$$Q_{n+1} + 10Q_n + Q_{n-1} - 12y_n = \frac{h^2}{12} [S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}] + O(h^6), \quad (1.86)$$

welche eine Rekursionsvorschrift für die Hilfsgröße  $Q(r)$  darstellt. Bei der praktischen Anwendung muss man allerdings beachten, dass die Funktion  $Q(x)$  auch bei verschwindendem Funktionswert der Lösung  $y(x)$  einen endlichen Wert aufweisen kann, falls  $w(x)$  eine Singularität an dieser Stelle hat.

### 1.5.2 Die modifizierte Numerov Methode

Die Rekursionsvorschrift (1.86) hat den Nachteil, dass bei jedem Schritt die Wellenfunktion  $y_n$  durch Division bestimmt werden muss,

$$y_n = \frac{Q_n}{1 + \frac{h^2}{12} w_n}. \quad (1.87)$$

Dies erfordert z.B. bei der Schrödingergleichung bei endlichem Potential am Ursprung,  $V_0$ , eine spezielle Behandlung für  $n = 1$  bei  $\ell = 1$ . Außerdem kann das Numerov Verfahren in seiner Standardform nicht auf Differentialgleichungen zweiter Ordnung angewendet werden, in welchen auch ein linearer erster Ordnungsterm auftritt. Ein weiterer Nachteil der Standardform des Numerov-Verfahrens ist die Tatsache, dass die Übertragung auf Systeme gekoppelter Differentialgleichungen nicht einfach ist.

Die *modifizierte Numerov Methode* von Melkanoff et al. [7] vermeidet die Division zur Bestimmung der Wellenfunktion. Eine Verallgemeinerung der Numerov Methode auf Differentialgleichungen zweiter Ordnung, welche auch die erste Ableitung linear enthalten, wurde 2002 von Tselyaev [8] vorgeschlagen. Um die verallgemeinerte Numerov-Methode zu formulieren, folgen wir der Ableitung von Ref. [8].

Im folgenden betrachten wir die lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$y''(x) + g(x)y'(x) + f(x)y(x) = 0, \quad (1.88)$$

wobei  $g(x)$  und  $f(x)$  bekannte Funktionen sind. Wir betrachten nun die Lösung  $y(x)$  bei einem bestimmten Gitterpunkt  $x_0$  und bezeichnen den Wert an dieser Stelle mit  $y_0 = y(x_0)$  und  $y_{\pm} = y(x_0 \pm h)$ , wobei  $h$  wieder die Schrittweite ist. Verwendet man

nun eine Taylorreihenentwicklung von  $y(x)$ , so führt dies zu folgenden Ausdrücken

$$y_+ + y_- = 2y_0 + h^2 y_0'' + \frac{h^4}{12} y_0^{(4)} + \frac{h^6}{360} y_0^{(6)} + O(h^8), \quad (1.89)$$

$$y_+ - y_- = 2hy_0' + \frac{h^3}{3} y_0^{(3)} + \frac{h^5}{60} y_0^{(5)} + O(h^7), \quad (1.90)$$

$$y_+' + y_-' = 2y_0' + h^2 y_0^{(3)} + \frac{h^4}{12} y_0^{(5)} + O(h^6), \quad (1.91)$$

$$y_+' - y_-' = 2hy_0'' + \frac{h^3}{3} y_0^{(4)} + \frac{h^5}{60} y_0^{(6)} + O(h^7), \quad (1.92)$$

$$y_+'' + y_-'' = 2y_0'' + h^2 y_0^{(4)} + \frac{h^4}{12} y_0^{(6)} + O(h^6), \quad (1.93)$$

$$y_+'' - y_-'' = 2hy_0^{(3)} + \frac{h^3}{3} y_0^{(5)} + O(h^5). \quad (1.94)$$

Weiters ergeben sich aus der Differentialgleichung (1.88) die Ausdrücke

$$y_0'' = -g_0 y_0' - f_0 y_0, \quad (1.95)$$

$$y_+'' = -g_+ y_+' - f_+ y_+, \quad (1.96)$$

$$y_-'' = -g_- y_-' - f_- y_-. \quad (1.97)$$

Die Gleichungen (1.90)-(1.97) stellen ein System von linearen Gleichungen in den 8 Unbekannten  $y_0', y_0'', y_0^{(3)}, y_0^{(4)}, y_\pm', y_\pm''$  dar,

$$\begin{pmatrix} 2h & 0 & \frac{h^3}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & h^2 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2h & 0 & \frac{h^3}{3} & -1 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & h^2 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 2h & 0 & 0 & 0 & -1 & +1 \\ g_0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_+ & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_- & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0' \\ y_0'' \\ y_0^{(3)} \\ y_0^{(4)} \\ y_+' \\ y_-' \\ y_+'' \\ y_-'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_+ - y_- - \frac{h^5}{60} y_0^{(5)} + O(h^7) \\ -\frac{h^4}{12} y_0^{(5)} + O(h^6) \\ -\frac{h^5}{60} y_0^{(6)} + O(h^7) \\ -\frac{h^4}{12} y_0^{(6)} + O(h^6) \\ -\frac{h^3}{3} y_0^{(3)} + O(h^5) \\ -f_0 y_0 \\ -f_+ y_+ \\ -f_- y_- \end{pmatrix}. \quad (1.98)$$

Setzt man die Lösung des Gleichungssystems (1.98) in die Gleichung (1.89) ein, so erhält man den Rekursionsausdruck

$$T_0 y_0 = T_+ y_+ + T_- y_- + R^{(6)}, \quad (1.99)$$

wobei die Koeffizienten folgend gegeben sind

$$T_0 = 2a - \frac{5h^2}{6} b_0 f_0, \quad (1.100)$$

$$T_\pm = a \pm \frac{h}{24} (10c g_0 + g_+ + g_-) + \frac{h^2}{12} b_\pm f_\pm, \quad (1.101)$$

$$R^{(6)} = \frac{h^6}{240} (y_0^{(6)} + 3g_0 y_0^{(5)}) + O(h^8) \quad (1.102)$$

mit den Konstanten

$$a = \left(1 + \frac{h}{3}g_+\right) \left(1 - \frac{h}{3}g_-\right) + \frac{h^2}{18}g_0(g_+ + g_-), \quad (1.103)$$

$$b_0 = \left(1 + \frac{4h}{15}g_+\right) \left(1 - \frac{4h}{15}g_-\right) + \left(\frac{h}{15}\right)^2 g_+g_-, \quad (1.104)$$

$$b_{\pm} = \left(1 \pm \frac{5h}{6}g_0\right) \left(1 \mp \frac{5h}{6}g_{\mp}\right) + \left(\frac{h}{3}\right)^2 g_0g_{\mp}, \quad (1.105)$$

$$c = \left(1 + \frac{7h}{20}g_+\right) \left(1 - \frac{7h}{20}g_-\right) + \left(\frac{3h}{20}\right)^2 g_+g_-. \quad (1.106)$$

Die Rekursionsgleichung wird im Fall der Schrödingergleichung 1.79 besonders einfach, da  $g(x) = 0$  und  $f(x) = w(x)$  (Bei der Schrödingergleichung ist  $S(x) = 0$ ). Damit ergeben sich die Konstanten mit

$$a = b_0 = b_{\pm} = c = 1 \quad (1.107)$$

und man erhält die einfache Rekursionsformel

$$\left(2 - \frac{5h^2}{6}w_0\right) y_0 = \left(1 + \frac{h^2}{12}w_+\right) y_+ + \left(1 + \frac{h^2}{12}w_-\right) y_- + \frac{h^6}{240}y_0^{(6)} + O(h^8). \quad (1.108)$$

Mit der Definition einer Hilfsfunktion  $z(x)$

$$y(x) = \left(1 + \frac{h^2}{12}w(x)\right) z(x) \quad (1.109)$$

lässt sich die Rekursionsformel für die Schrödingergleichung kompakt anschreiben

$$z_+ = 2z_0 - z_- - h^2w_0z_0. \quad (1.110)$$

Der Rekursionsausdruck (1.110) ist einfach zu programmieren und erfordert für die Bestimmung der Wellenfunktion  $y(x)$  keine Division, sondern nur die Multiplikation mit einem Faktor, siehe (1.109). Außerdem lässt sich dieser Algorithmus direkt auf Systeme von linearen Differentialgleichungen übertragen. Die Integration der Differentialgleichung erfolgt in analoger Weise wie in der Standardform des Numerofverfahrens. Für die Bestimmung der reguläre Lösung ist wieder der Ansatz  $z(x = 0) = 0$  und  $z(x = h) = p$  erforderlich, wobei  $p$  vorerst eine beliebige nichtverschwindende Zahl ist.



# Kapitel 2

## Schwingungsbewegung

### 2.1 Die Bewegungsgleichung und ihre Lösung

Wir betrachten zunächst eine an einer Feder aufgehängte Masse  $m$  wie sie in Abb. 2.1 dargestellt ist. Im Gravitationsfeld der Erde sei die Ruhelage der Feder bei  $z = \zeta_0$ . Bei Abweichung von der Ruhelage erfüllt das System die Bewegungsgleichung

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = -C(z - \zeta_0), \quad (2.1)$$

wobei  $C$  die Federkonstante ist. Der lineare Zusammenhang zwischen Kraft und Auslenkung ist bei Federn in einem weiten Bereich erfüllt. Die Wirkung der Gravitationskraft ist dabei in der Ruheauslenkung  $\zeta_0$  bereits berücksichtigt. Die Lösung von (2.1) ist ein Standardbeispiel bei der Behandlung von Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Man erhält die allgemeine Lösung

$$z(t) = A \sin(\omega_0 t + \alpha), \quad (2.2)$$

welche eine ungedämpfte Schwingung mit der Eigenfrequenz

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (2.3)$$

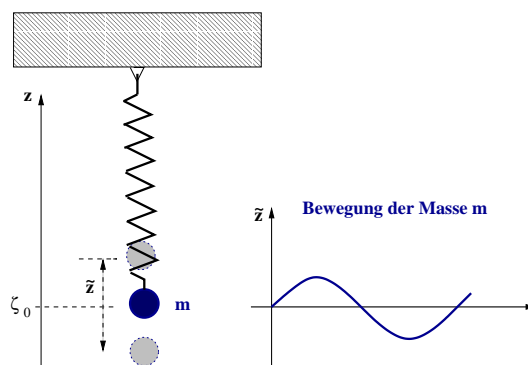


Abbildung 2.1: Anordnung einer Masse  $m$  an einer Feder mit der Federkonstante  $C$

darstellt. Die Größen  $A$  und  $\alpha$  ergeben sich aus den Anfangsbedingungen, die stets integraler Bestandteil einer Problemstellung im Zusammenhang mit einer Differentialgleichung sein müssen.

## 2.2 Lagrangeformalismus und Zustand im Phasenraum

Die Bewegungsgleichung (2.1) entspricht im Lagrange-Formalismus der Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial L}{\partial z} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) = 0, \quad (2.4)$$

wobei  $\dot{z} = \frac{dz}{dt}$  und  $L(z, \dot{z}, t)$  die Lagrangefunktion des Systems ist. Aus Gleichung (2.1) folgt

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{z} \partial \dot{z}} = m \implies L(z, \dot{z}, t) = \frac{1}{2} m \dot{z}^2 + R(z, t) \dot{z} + S(z, t) \quad (2.5)$$

Die Integrationskonstanten  $R$  und  $S$  können dabei nur von  $z$  und  $t$  abhängen. Aus der Bewegungsgleichung lassen sich  $R(z, t)$  und  $S(z, t)$  nicht vollständig bestimmen, da die Lagrangefunktion nur bis auf eine Eichtransformation bestimmt werden kann, d.h.

$$\tilde{L}(z, \dot{z}, t) = L(z, \dot{z}, t) + \frac{d}{dt} \Omega(z, t) \quad (2.6)$$

erfüllt dieselbe Euler-Lagrange-Gleichungen wie  $L(z, \dot{z}, t)$ , wobei  $\Omega(z, t)$  eine beliebige Eichfunktion ist. Insbesondere ergibt sich aus (2.5) und (2.6)

$$\tilde{L}(z, \dot{z}, t) = \frac{1}{2} m \dot{z}^2 + \left[ R(z, t) + \frac{\partial \Omega}{\partial z} \right] \dot{z} + \left[ S(z, t) + \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right]. \quad (2.7)$$

Ausnützen der Eichfreiheit erlaubt ohne Einschränkung der Allgemeinheit die Annahme

$$\tilde{R}(z, t) = R(z, t) + \frac{\partial \Omega}{\partial z} = 0. \quad (2.8)$$

Stellt man nun die Euler-Lagrange-Gleichung mit  $\tilde{L}$  auf und vergleicht die Terme mit jenen der Bewegungsgleichung (2.1), so ergibt sich

$$\tilde{S}(z, t) = S(z, t) + \frac{\partial \Omega}{\partial t} = \frac{1}{2} C \tilde{z}^2 + D(t), \quad (2.9)$$

wobei

$$\tilde{z} = z - \zeta_0. \quad (2.10)$$

Wie man aus der Gleichung (2.9) erkennt, hat man in  $\tilde{S}(z, t)$  noch eine Eichfreiheit, sodass ohne Einschränkung der Allgemeinheit  $D(t) = 0$  gesetzt werden kann. Damit ergibt sich die Lagrange-Funktion der in Abb. 2.1 dargestellten Anordnung mit

$$L(z, \dot{z}, t) = \frac{1}{2} m \dot{z}^2 - \frac{1}{2} C \tilde{z}^2, \quad (2.11)$$



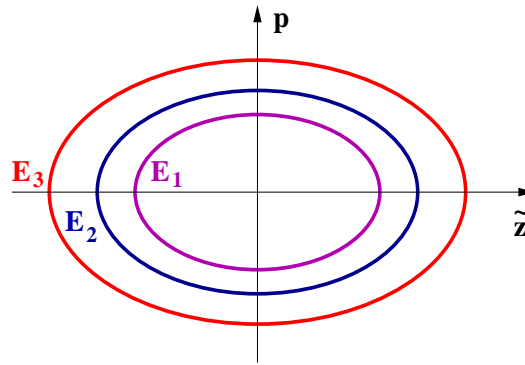


Abbildung 2.2: Phasendiagramm ungedämpfter Schwingungsbewegungen (mathematisches Pendel) mit unterschiedlichen Gesamtenergien  $E_3 > E_2 > E_1$ .

wobei wir hier die Unterscheidung zwischen  $\tilde{L}$  und  $L$  unterdrückt haben. Mit dem verallgemeinerten Impuls des Systems

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} \quad (2.12)$$

erhält man über die Legendre-Transformation die Hamiltonfunktion des linearen harmonischen Oszillators

$$H(z, p, t) = z \cdot p - L(z, \dot{z}, t) = \frac{1}{2}m\dot{z}^2 + \frac{1}{2}Cz^2. \quad (2.13)$$

Da die Hamiltonfunktion keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, ist die Gesamtenergie des Systems eine Erhaltungsgröße.

Für eine eingehende physikalische Diskussion ist es sinnvoll die Bewegung des Systems im Phasenraum zu betrachten. Die allgemeine Lösung (2.2) liefert im Phasenraumdiagramm eine Ellipse (siehe Abb. 2.2), welche durch die Gesamtenergie charakterisiert werden kann. Das Auftreten einer geschlossenen Kurve (im gegenständlichen Fall eine Ellipse) im Phasenraum zeigt eine periodische Bewegung des Systems an.

### 2.2.1 Die gedämpfte Schwingungsbewegung

In realistischen Systemen ist stets eine Dämpfung vorhanden, sodass die Energie keine Erhaltungsgröße ist. Ein typischer Dämpfungsterm ist der Luftwiderstand, welcher in einer laminaren Strömung proportional zur Geschwindigkeit der Masse ist. Die Bewegungsgleichung (2.1) muss nun um diesen Reibungsterm ergänzt werden,

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = -C(z - \zeta_0) - \gamma \dot{z}, \quad (2.14)$$

wobei  $\gamma$  ein konstanter Dämpfungskoeffizient ist. Für diesen einfachen Reibungsterm lässt sich wieder eine allgemeine Lösung der Bewegungsgleichung angeben,

$$z(t) = A \exp(-\gamma t) \sin(\omega t + \alpha), \quad (2.15)$$

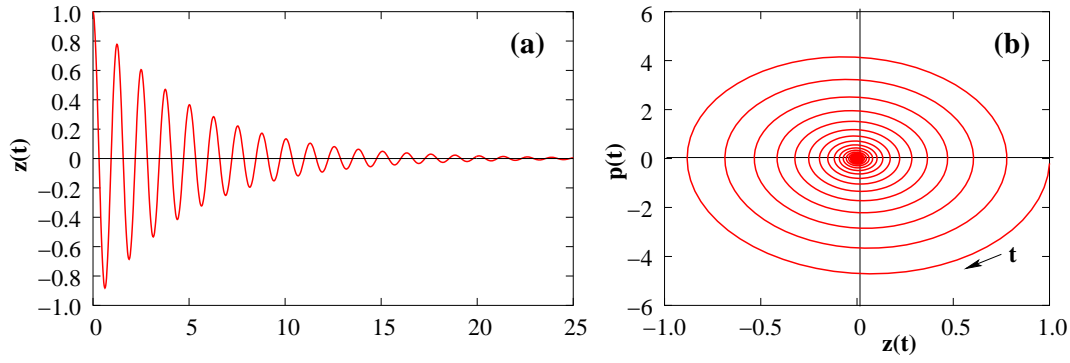


Abbildung 2.3: Die gedämpfte Schwingung. (a) Zeitliche Bewegung; (b) Phasendiagramm der gedämpften Schwingung.

welche eine gedämpfte Schwingung mit der Frequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{m} - \left(\frac{\gamma}{2m}\right)^2} \quad (2.16)$$

darstellt. Die Größen  $A$  und  $\alpha$  ergeben sich wieder aus den Anfangsbedingungen. Die Abweichung der Frequenz  $\omega$  von der Eigenfrequenz  $\omega_0$  des ungedämpften Systems steigt mit steigender Dämpfung. Außerdem bewirkt die Dämpfung eine exponentiell fallende Amplitude der Lösung, sodass die Masse  $m$  schließlich zum Stillstand kommt.

Der Dämpfungsterm kann nicht durch eine Lagrange-Funktion beschrieben werden, sondern geht in die Euler-Lagrange-Gleichung als nichtkonservativer Term ein,

$$\frac{\partial L}{\partial z} - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) = \gamma \dot{z}. \quad (2.17)$$

Dabei ist die Lagrange-Funktion jene der ungedämpften Bewegung (2.11) und der verallgemeinerte Impuls durch (2.12) gegeben. Die Dämpfung bewirkt eine ständige Verringerung der Schwingungsenergie, sodass sich eine zum Koordinatenursprung laufende Kurve im Phasenraum ergibt. Diese ist in Abb. 2.3 gemeinsam mit der zeitlichen Entwicklung der Auslenkung dargestellt.

### 2.2.2 Frequenzspektrum

Neben der zeitlichen Entwicklung interessiert bei allgemeinen Schwingungsbewegungen vor allem das Frequenzspektrum  $Z(\omega)$ . Dieses ergibt sich über Fouriertransformation aus der zeitlichen Entwicklung

$$Z(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt z(t) e^{i\omega t} \quad (2.18)$$

Ist die Funktion  $z(t)$  reel-wertig, so hat die Fouriertransformation die Symmetrie  $Z(-\omega) = Z(\omega)^*$ .

Setzt man nun für  $z(t)$  die Lösung (2.2) des ungedämpften Pendels ein, so ergibt sich die Fouriertransformierte

$$Z(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} A \sin(\omega_0 t + \alpha) = i\pi A [e^{-i\alpha} \delta(\omega - \omega_0) - e^{i\alpha} \delta(\omega + \omega_0)] . \quad (2.19)$$

Wir haben dabei angenommen, dass die Schwingung zu allen Zeiten im Gang ist. Nimmt man an, dass die Auslenkung  $z(t) = 0$  für  $t < 0$ , so erhält man auf Grund der Identität,

$$\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} , \quad (2.20)$$

für die Fouriertransformierte

$$Z(\omega) = \int_0^{+\infty} dt e^{i\omega t} A \sin(\omega_0 t + \alpha) = i\frac{\pi}{2} A [e^{-i\alpha} \delta(\omega - \omega_0) - e^{i\alpha} \delta(\omega + \omega_0)] . \quad (2.21)$$

In beiden Fällen zeigt das Spektrum die typische Form einer periodischen Bewegung, nämlich das Auftreten von Delta-Funktionen bei  $\omega = \pm\omega_0$ .

Hat das Pendel eine Dämpfung, so hat man die Fouriertransformierte der Lösung (2.15) zu bilden,

$$Z(\omega) = \frac{1}{2} A \left[ \frac{e^{i\alpha}}{(\omega + \omega_0) + i\gamma} - \frac{e^{-i\alpha}}{(\omega - \omega_0) + i\gamma} \right] . \quad (2.22)$$

Je nach Stärke der Dämpfung  $\gamma$  kommt es zu einer Verschiebung (Gleichung (2.16)) und Verbreiterung der Resonanz (Abb. 2.4).

Für die in diesem Kapitel behandelten Beispiele haben wir nur die Realteile der Fouriertransformierten betrachtet,

$$Z(\omega) = \int_0^{\infty} dt z(t) \cos(\omega t) . \quad (2.23)$$

Diese sind leicht darzustellen und zeigen bei einer periodischen Bewegung (ungedämpfte Federschwingung, periodische erzwungene Federschwingung) gemäss (2.21) das Auftreten einer Linie in der Spektralverteilung. Bei einer gedämpften Schwingung kommt es zu einer Verbreiterung der Linie (siehe Abb. 2.4).

## 2.3 Das getriebene physikalische Pendel

Abschließend zu diesem Kapitel wollen wir kurz das getriebene physikalische Pendel betrachten (Abb. 2.5). Wir nehmen dabei an, dass eine Masse  $m$  an einer Stange mit fester Länge  $L$  beweglich aufgehängt ist und eine Schwingung im Gravitationsfeld in einer Ebene ausführt. Unter Berücksichtigung des fixen Abstandes  $L$  zwischen Masse und Aufhängungspunkt, reduziert sich die Bewegungsgleichung zu

$$mL \frac{d^2\alpha}{dt^2} + \gamma L \frac{d\alpha}{dt} + mg \sin(\alpha) = F \sin(\Omega t + \beta) , \quad (2.24)$$

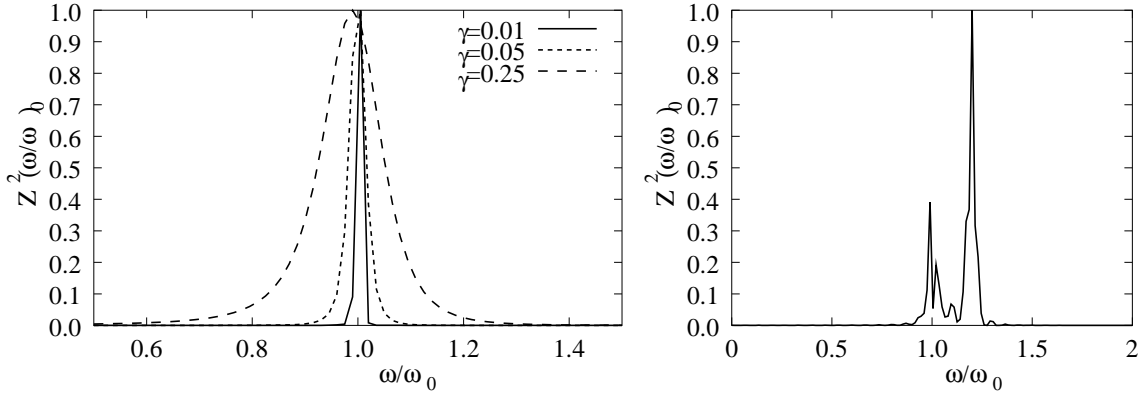


Abbildung 2.4: Die Spektralanalyse einer (a) freien ungedämpften [ $\gamma = 0.01 \text{ Nsm}^{-1}$ ] und gedämpften Federbewegung [ $\gamma = 0.05, 0.025 \text{ Nsm}^{-1}$ ] (b) einer getriebenen Feder. Die Verteilungen sind normiert auf den Maximalwert. Die Frequenz ist in Einheiten der Eigenfrequenz gegeben.

wobei  $g$  die Erdbeschleunigung,  $F$  und  $\Omega$  die Stärke bzw. die Frequenz der treibenden Kraft und  $\beta$  deren Phasenverschiebung sind. Es ist dabei festzuhalten, dass die Treiberkraft auf die Masse in Richtung der Drehbewegung angreift.

Nach der mathematischen Formulierung des physikalischen Problems, ist der erste Schritt bei der numerischen Umsetzung die Suche nach einer geeigneten Skalierung des Systems, sodass die Variablen in natürlichen Einheiten des betrachteten Systems angegeben werden. Beim physikalischen Pendel bietet sich die Eigenfrequenz des Pendels für die Definition der Zeiteinheit an, d.h.  $\tau = t/t_0$  mit

$$t_0 = \frac{1}{\omega_0} = \sqrt{\frac{L}{g}}. \quad (2.25)$$

Damit ergibt sich die *nichtlineare* Differentialgleichung zweiter Ordnung für den Auslenkwinkel  $\alpha(t)$  in Radian

$$\frac{d^2\alpha}{d\tau^2} + \Gamma \frac{d\alpha}{d\tau} + \sin(\alpha) = f \sin\left(\frac{\Omega}{\omega_0}\tau + \beta\right), \quad (2.26)$$

wobei die dimensionslosen Koeffizienten  $\Gamma$  und  $f$  durch

$$\Gamma = \frac{\gamma}{m} \sqrt{\frac{L}{g}} \quad \text{und} \quad f = \frac{F}{mL} \quad (2.27)$$

gegeben sind.

Wir betrachten zunächst das freie physikalische Pendel, d.h.  $F = 0$ . Bei kleiner Auslenkung ergibt sich zunächst das gleiche Bild wie bei der einfachen Schwingungsbewegung. Erhöht man die Auslenkung der Schwingung auf über 90 Grad, so erkennt man im zeitlichen Verlauf deutliche Abweichungen von einer Sinuskurve (Abb. 2.6), die

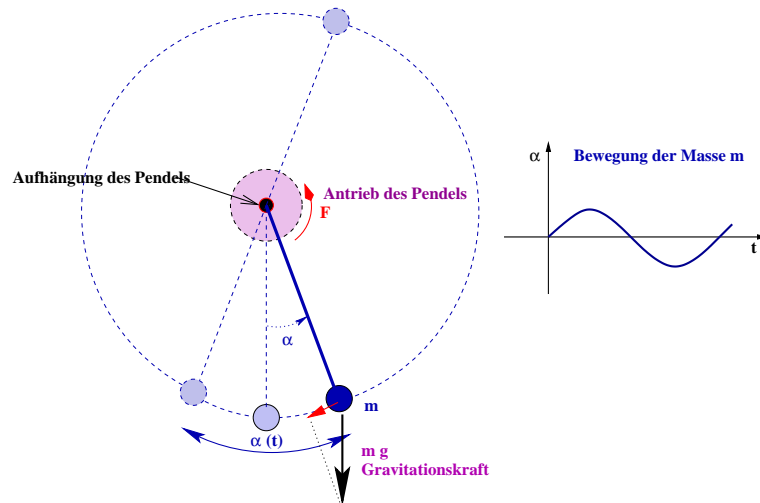


Abbildung 2.5: Anordnung eines getriebenen physikalischen Pendels.

sich auch im Phasenraum bemerkbar macht. Im Frequenzspektrum erkennt man nun bei größeren Auslenkungen auch das Auftreten von Oberwellen, die der Eigenfrequenz überlagert sind. Das Auftreten von Oberwellen ist eine direkte Konsequenz der Nicht-linearität der Gleichung. Die Dämpfung führt wie im Fall der Schwingungsgleichung wieder zu einer Verbreiterung der Eigenresonanz.

Führt man nun eine periodische Treiberkraft ein, so kann es bei ausreichend starker Treiberkraft zu einem Überschlag des Pendels kommen, d.h. der Auslenkwinkel übersteigt die Grenzen des Intervall  $[-\pi, \pi]$ . Bei ausreichend starker Treiberkraft erfolgt dann der Übergang zu einer chaotischen Bewegung, welche durch ein exponentiell abfallendes Spektrum signalisiert wird. (siehe Abb. 2.7).

## 2.4 Aufgaben

- **Aufgabe 7.1: Runge-Kutta Algorithmus**

Schreiben Sie ein FORTRAN Unterprogramm SUBROUTINE RKBAS( $Y, YY, N, H, DGRHS, W$ ), in welcher ein Lösungsschritt von  $Y(0)=x_0$  nach  $YY(0)=x + H$  für ein System von  $N$  Differentialgleichungen 1. Ordnung mittels des Standard Runge-Kutta-Algorithmus gemacht wird.  $Y$  ist ein Feld, welches die Funktion am Eingang enthält,  $YY$  ist ein Feld, welches die Funktionswerte nach dem Schritt enthält.  $W$  ist ein Arbeitsfeld und SUBROUTINE DGRHS( $Y, N, F$ ) ist ein Unterprogramm, welches die rechte Seite des Gleichungssystem  $y' = f(y)$  an der Stelle  $Y$  berechnet und im Feld  $F$  speichert. Testen Sie das Unterprogramm durch Lösen der Differentialgleichung der Federschwingung.

- **Aufgabe 7.2: Physikalisches Pendel**

Implementieren Sie in das vorhandene Programm für die getriebene Schwingung einen Programnteil, in welchem die Lösung des getriebenen physikalischen Pen-

dels berechnet wird. Sie müssen dabei auch eine entsprechende Routine für die Berechnung der rechten Seite des entsprechenden Gleichungssystems erstellen.

- **Aufgabe 7.3: Phasendiagramm und Frequenzspektrum**

Untersuchen Sie die Bewegung eines getriebenen Pendels und betrachten Sie den Übergang zu einer chaotischen Bewegung bei Steigerung der Treiberkraft.

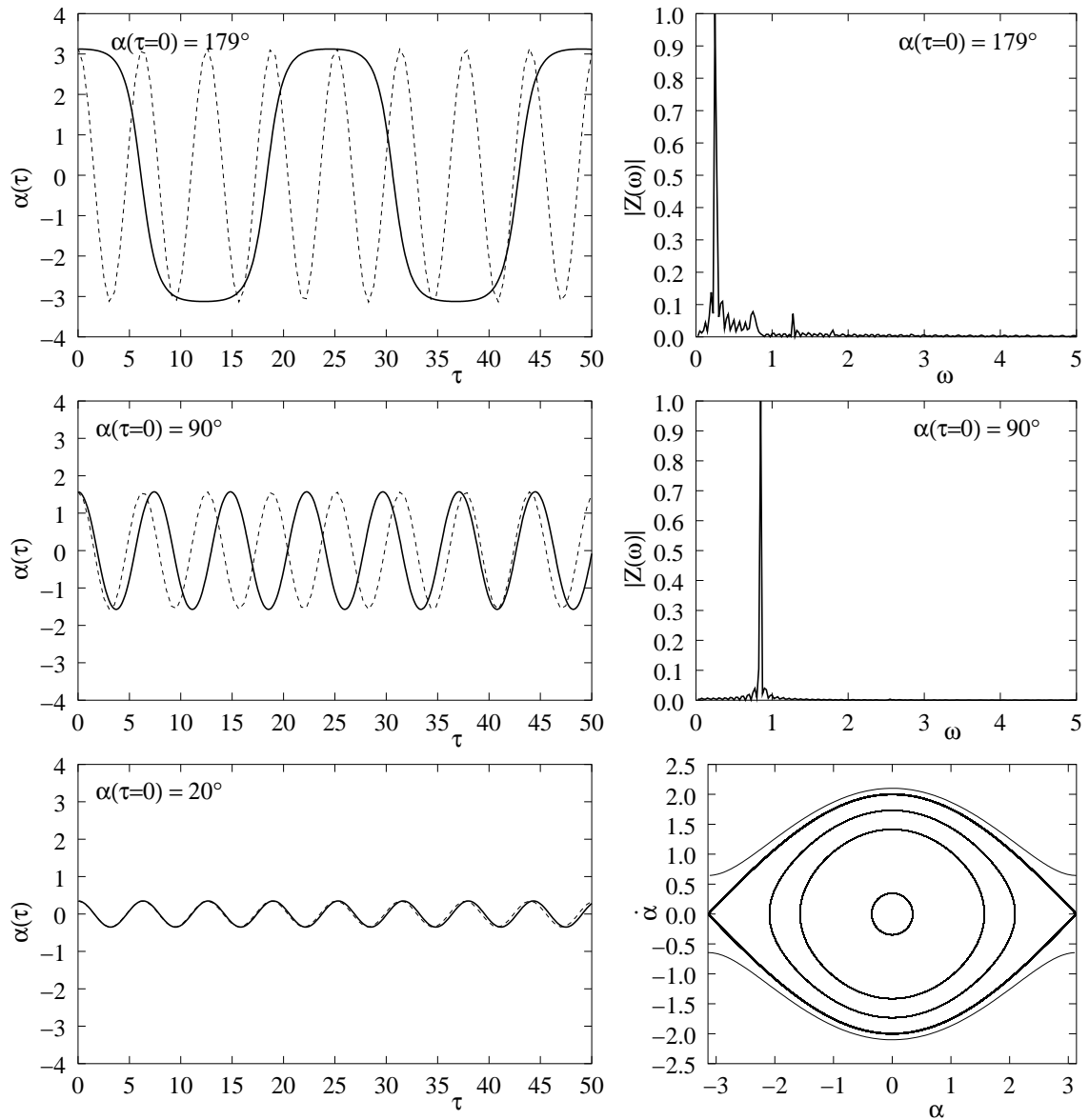


Abbildung 2.6: Die Schwingungen eines freien physikalischen Pendels. In der linken Spalte sind die Lösungen für  $\alpha(\tau)$  für verschiedene Startwerte  $\alpha(\tau = 0)$  gezeigt. In der rechten Spalte sind die Spektralanalysen der Lösungen mit den Startwerten  $\alpha(\tau = 0) = 179$  und  $90$  Grad angegeben. Ein Phasendiagramm des physikalischen Pendels ist in der rechten Spalte unten gezeigt.

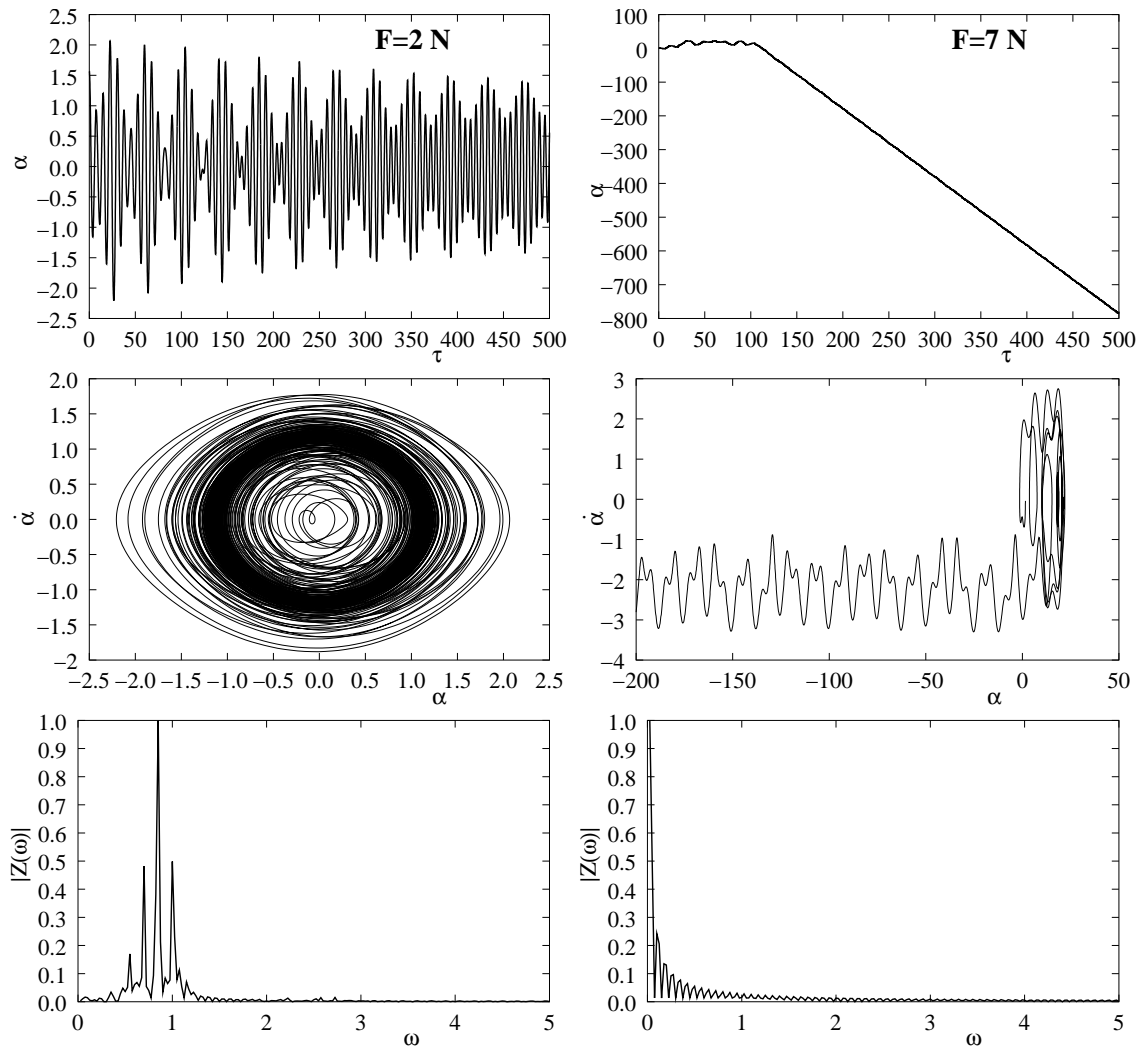


Abbildung 2.7: Lösung, Phasendiagramm und Spektralanalyse für ein mit 2 bzw. 7 N getriebenes ungedämpftes physikalisches Pendel. Die Treiberfrequenz ist mit  $\Omega = 3.2\text{ s}^{-1}$  angenommen. Man erkennt die beiden Extremfälle: (a) eine erzwungene Schwingung mit Schwebungserscheinungen und (b) den Übergang zu chaotischer Bewegung bei großer Treiberkraft.



# Kapitel 3

## Das Wasserstoffatom

### 3.1 Die radiale Schrödingergleichung und ihre Lösungen

Für explizit zeitunabhängige Hamiltonoperatoren ist es zweckmäßig die Schrödingergleichung

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (3.1)$$

durch den Ansatz stationärer Lösungen  $\Psi = \psi \exp(-iEt/\hbar)$  in die zeitunabhängige Schrödingergleichung überzuführen. Für ein Einteilchenproblem erhält man dann

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

wobei  $V(\mathbf{r})$  die Wechselwirkung ist, die ein Teilchen der Masse  $m$  erfährt.

Im folgenden beschränken wir uns auf sphärisch symmetrische Potentiale, d.h.  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , sodass eine Entwicklung von  $\psi(\mathbf{r})$  nach Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  zweckmäßig ist,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{u_{\ell}(r)}{r} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} a_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (3.3)$$

Die Größen  $a_{\ell m}$  sind geeignet gewählte Vorfaktoren, welche vom betrachteten physikalischen Problem anhängen. Einsetzen von (3.3) in (3.2) und Ausnützen der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (3.4)$$

führt zur sogenannten radialen Schrödingergleichung,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) + V(r) \right\} u_{\ell}(r) = E u_{\ell}(r). \quad (3.5)$$

In praktischen Rechnungen wird diese Gleichung meist in geeigneter Form skaliert, d.h. es werden die Einheiten an das betrachtete Problem angepasst.

Bedingt durch den Zentrifugalwall  $\ell(\ell+1)/r^2$  tritt deshalb für  $\ell \neq 0$  eine Singularität bei  $r = 0$  auf. Wie bereits in den Methoden der theoretischen Physik gezeigt wurde, sprechen wir bei  $r = 0$  von einer außerwesentlichen singulären Stelle. Die Lösung kann an dieser Stelle als verallgemeinerte Potenzreihe angesetzt werden, d.h.

$$u_\ell(r) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{\alpha+i}. \quad (3.6)$$

Einsetzen des Potenzreihenansatzes (3.6) in die radiale Schrödingergleichung (3.5) und Vergleich der Koeffizienten der niedrigsten Potenz  $r^{\alpha-2}$  liefert die zwei möglichen Werte für  $\alpha$ . Bezüglich des Verhaltens bei  $r = 0$  unterscheidet man daher zwei Typen von Lösungen:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \{\varphi_\ell(r) r^{-(\ell+1)}\} = a \quad \text{reguläre Lösung,} \quad (3.7)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \{\varphi_\ell(r) r^\ell\} = b \quad \text{irreguläre Lösung.} \quad (3.8)$$

wobei  $a$  und  $b$  Konstanten sind. Abgesehen von der Normierung ist die reguläre Lösung durch die Randbedingung (3.7) eindeutig bestimmt. Im Gegensatz dazu bilden die irregulären Lösungen (3.8) eine eindimensionale Mannigfaltigkeit. Unter den irregulären Lösungen sind besonders die *Jostlösungen* hervorzuheben, weil sie in analytischen Behandlungen eine wichtige Rolle spielen. Die Jostlösungen sind durch die Randbedingungen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \{e^{\mp ikr} f_\ell^\pm(k, r)\} = 1 \quad (3.9)$$

gegeben. Eine lineare Differentialgleichung 2. Ordnung hat zwei linear unabhängige Lösungen. Die beiden Jostlösungen  $f_\ell^+(k, r)$  und  $f_\ell^-(k, r)$  stellen ein derartiges Doppel dar. Zwei Funktionen  $\varphi_\ell(k, r)$  und  $\eta_\ell(k, r)$  sind linear unabhängig, wenn ihre *Wronski-Determinante*

$$W\{\varphi_\ell, \eta_\ell\} = \varphi_\ell \eta'_\ell - \varphi'_\ell \eta_\ell \quad (3.10)$$

nicht verschwindet. Die Wronski-Determinante der beiden Jostlösungen ergibt  $W\{f_\ell^+, f_\ell^-\} = 2ik$ , die beiden Jostlösungen sind deshalb linear unabhängige Funktionen.

## 3.2 Die numerische Lösung der radialen Schrödingergleichung

Im folgenden beschränken wir uns auf die Betrachtung der radialen Schrödingergleichung, welche auf die Form 1.79 mit verschwindenden Quellterm  $S(x) = 0$  gebracht werden kann, wobei wir im Hinblick auf die Interpretation für die Variable  $x$  die Variable  $r$  verwenden. Für zwei Teilchen, die über ein Potential  $V(r) = v(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$

wechselwirken, hat  $w(r)$  die Form

$$w(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}. \quad (3.11)$$

Dabei ist  $\mu$  die reduzierte Masse des Systems,  $\ell$  die Bahndrehimpulsquantenzahl und  $E$  die Energie im Schwerpunktsystem. Die Wellenfunktion physikalischer Probleme ist meist die reguläre Lösung. Gemäß Gl. (3.7) ist die reguläre Lösung durch die Randbedingung am Ursprung charakterisiert,

$$\lim_{r \rightarrow 0} y(r) = r^{\ell+1}. \quad (3.12)$$

Dies bedeutet, dass die reguläre Lösung  $y(r)$  bei  $r = 0$  unabhängig von der Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell$  verschwindet, d.h.  $y_0 = y(r=0) = 0$ . An der ersten Stützstelle wird vorerst ein beliebiger Wert  $y_1 = y(r=h) = a$  für die Lösung angesetzt. Dies stellt keine Einschränkung dar, da aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung, die Lösung nachträglich auf den richtigen Wert normiert werden kann. Ausgehend von den Anfangswerten  $y_0 = 0$  und  $y_1 = a$  und den damit bekannten Werten der Hilfsfunktion,  $Q_0$  und  $Q_1$ , wird dann die Lösung  $y_n, n = 2, 3, \dots$  rekursiv über die Gleichung (1.86) konstruiert:

$$Q_2 = 12y_1 - 10Q_1 - Q_0 \quad \text{und} \quad y_2 = Q_2 \left[ 1 + \frac{h^2}{12}w_2 \right]^{-1} \quad (3.13)$$

$$Q_3 = 12y_2 - 10Q_2 - Q_1 \quad \text{und} \quad y_3 = Q_3 \left[ 1 + \frac{h^2}{12}w_3 \right]^{-1} \quad (3.14)$$

$$\dots\dots\dots \quad (3.15)$$

$$Q_{n+1} = 12y_n - 10Q_n - Q_{n-1} \quad \text{und} \quad y_{n+1} = Q_{n+1} \left[ 1 + \frac{h^2}{12}w_{n+1} \right]^{-1} \quad (3.16)$$

$$\dots\dots\dots \quad (3.17)$$

Die Durchführung dieser Rekursion ist unproblematisch. Einzig bei der Bestimmung von  $Q_0$  muss die Singularität des Zentrifugalwells berücksichtigt werden. Eine genauere Betrachtung liefert:

$$\begin{aligned} Q_0 &= \lim_{r \rightarrow 0} \left[ 1 - \frac{h^2}{12} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] y(r) \\ &= -\frac{h^2}{12} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} a_0 r^{\ell+1} \\ &= -\frac{1}{6} y_1 \delta_{\ell,1}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

wobei wir die Reihenentwicklung für  $y_1 = a_0 h^2$  eingesetzt haben. Der Wert der Hilfsfunktion bei  $r = 0$ , weicht also nur bei  $\ell = 1$  von Null ab.

Ein Beispiel sind die mit diesem Verfahren bestimmten regulären Lösungen der radialen Schrödingergleichung mit  $V = 0$  bei verschiedenen Bahndrehimpulsquantenzahlen  $\ell$ . Für die numerische Rekursion wurde eine Schrittweite von  $h = \Delta\rho = 0.1$  verwendet. Die erhaltenen Lösungen entsprechen den sphärischen Besselfunktionen und weisen bei dieser Gitterannahme eine mittlere Abweichung von weniger als 0.1% auf.

Im Rahmen theoretischer Rechnungen ist auch die Berechnung von irregulären Lösungen erforderlich. Diese sind im allgemeinen durch asymptotische Randbedingungen, d.h. bei  $r \rightarrow \infty$ , definiert. Betrachten wir als Beispiel die Berechnung der Jostlösungen  $f_\ell^\pm(\rho)$ . Diese sind durch die asymptotische Randbedingung

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \frac{f_\ell^\pm(\rho)}{H_\ell^\pm(\rho)} = 1 \quad (3.19)$$

festgelegt, wobei  $H_\ell^\pm(\rho)$  die einlaufenden (–) und auslaufenden (+) Hankelfunktionen sind. Für die numerische Rechnung der Jostlösungen geht man daher von Stützpunkten  $r_N$  und  $r_{N+1}$  aus, die außerhalb des Wechselwirkungsbereiches liegen, d.h.  $V_N = V_{N+1} = 0$ . An diesen Stützstellen sind daher die Lösungen durch

$$y_N = f_\ell^\pm(kr_N) = H_\ell^\pm(k, r_N) \quad \text{und} \quad y_{N+1} = f_\ell^\pm(kr_{N+1}) = H_\ell^\pm(kr_{N+1}) \quad (3.20)$$

gegeben. Die Werte der Lösung  $y_n$  für  $n = N-1, N-2, \dots, 1$  werden nach Gleichung (1.86) durch Einwärtsrekursion

$$Q_{n-1} = 12y_n - 10Q_n - Q_{n+1} \quad \text{und} \quad y_{n-1} = Q_{n-1} \left[ 1 + \frac{h^2}{12} w_{n-1} \right]^{-1} \quad (3.21)$$

rekursiv bestimmt. Der Funktionswert  $y_0$  kann abgesehen von  $\ell = 0$  nicht bestimmt werden. Dies entspricht dem singulären Verhalten irregulärer Lösungen für  $r \rightarrow 0$ .

### 3.3 Berechnung von Bindungszuständen

Ein wichtiges Problem in der Atom- und Kernphysik ist die Bestimmung von Bindungszuständen von Einteilchenproblemen. Dabei ist es unwesentlich, ob ein tatsächliches Einteilchenproblem wie im H-Atom oder ein effektives Einteilchenproblem (z.B. Hartree-Fock-Modell) vorliegt. Die Einteilchenzustände stellen den Ausgangspunkt für Berechnungen der Atom- und Kernstruktur jedes Vielteilchensystems dar. Die mathematische Problemstellung besteht für Bindungszustände in der Bestimmung der Eigenzustände und Eigenwerte im diskreten Spektrum des Einteilchen-Hamiltonoperators  $H$ . Für ein sphärisch symmetrisches Potential  $V(r)$  lautet die radiale Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} u_{n\ell}(r) = \epsilon_{n\ell} u_{n\ell}(r). \quad (3.22)$$

Die Eigenfunktionen sind unter der Nebenbedingung der Normierbarkeit

$$\int_0^\infty dr u_{n\ell}^2(r) = 1 \quad (3.23)$$

zu bestimmen. Die Forderung der quadratischen Normierbarkeit der Lösung  $u_{n\ell}(r)$  liefert eine Einschränkung auf diskrete Energieeigenwerte  $\epsilon_{n\ell}$  (siehe z.B. die analytische Ableitung der Bindungsenergien im Wasserstoffatom). Gilt für das Potential  $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$ , dann haben alle Bindungszustände negative Energieeigenwerte,  $\epsilon_{n\ell} < 0$ .

Aufgrund ihrer Normierbarkeitsforderung sind die Eigenfunktionen für Bindungszustände reguläre Lösungen der radialen Schrödingergleichung zu einer vorerst unbekannten Bindungsenergie  $\epsilon_{n\ell}$ . Für  $r \rightarrow 0$  hat  $u_{n\ell}(r)$  die Eigenschaft

$$\lim_{r \rightarrow 0} u_{n\ell}(r) r^{-(\ell+1)} = a_{n\ell}, \quad (3.24)$$

wobei  $a_{n\ell}$  eine Konstante ist, die dazu dient, die Normierungsbedingung (3.23) zu erfüllen. Für asymptotische  $r$ -Werte muss die Bindungswellenfunktion dem Grenzwert

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{u_{n\ell}(r)}{H_{n\ell}^+(i\kappa_{n\ell}r)} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{u_{n\ell}(r)}{e^{-\kappa_{n\ell}r}} = A_{n\ell} \quad (3.25)$$

genügen, wobei

$$\kappa_{n\ell} = \sqrt{-\frac{2\mu\epsilon_{n\ell}}{\hbar^2}}. \quad (3.26)$$

Durch Integration der radialen Schrödingergleichung von großen  $r$ -Werten begonnen, lässt sich  $Q_0$  bestimmen. Ein Energieeigenwert ist dann gefunden, wenn  $Q_0 = -\frac{1}{6}\delta_{1\ell}u_{n\ell}(h)$  erfüllt. Der Energieeigenwert lässt sich also als Nullstellensuche der Funktion  $Q_0(\epsilon_{n\ell})$  formulieren. Man bezeichnet solche Verfahren allgemein auch als Schießverfahren.

## 3.4 Aufgaben

### • Aufgabe 9.1: Fox-Goodwin-Algorithmus

- Konstruieren Sie einen Modul auf der Basis des Numerov-Verfahrens zur Lösung der radialen Schrödingergleichung mit vorgegebenen Potential  $V(r)$ , Schwerpunktsenergie  $E$ , reduzierter Masse  $m$  und Bahndrehimpulsquantenzahl  $\ell$ .
- Berechnen Sie durch numerische Lösung der Differentialgleichung die sphärischen Besselfunktionen  $j_\ell(\rho)$  und die sphärischen Neumannfunktionen  $n_\ell(\rho)$ .
- Untersuchen Sie die Genauigkeit der Lösung als Funktion der verwendeten Schrittweite.

### • Aufgabe 9.2: Berechnung von Energieeigenwerten

- Konstruieren Sie ein Modul zur Bestimmung der Energieeigenwerte der radialen Schrödingergleichung mittels Einfachschießverfahren. Verwenden Sie die Integration von außen und den Abgleich auf  $Q_0 = -\frac{1}{6}y_1\delta_{\ell 1}$  als Kriterium.

- b) Bestimmen Sie die Energieeigenwerte und die normierten Bindungswellenfunktionen des Wasserstoffatoms bis zur Hauptquantenzahl  $N = 3$ . Vergleichen Sie die erhaltenen Energieeigenwerte und Bindungswellenfunktionen mit den exakten Lösungen. Überprüfen Sie die Orthogonalität der Bindungswellenfunktionen.

# Literaturverzeichnis

- [1] Stoer, Burlisch, *Numerische Mathematik II* (Springer, Heidelberg, 1980).
- [2] E. Fehlberg, *New high order Runge-Kutta formulas with an arbitrarily small truncation error*, ZAMM **46**, 1-16 (1966).
- [3] E. Fehlberg, *Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle*, Computing **4**, 93-106 (1969).
- [4] J.R. Cash, A.H. Karp, ACM Trans. Math. Software **16**, 201 (1990).
- [5] B. Numerov, Pubs.observatoire central astrophys.Russ., **2** (1933) 188.
- [6] L. Fox, E. T. Goodwin, Proc. Camb. Phil. Soc. **45** (1949) 373.
- [7] M.A. Melkanoff, T. Sawada, J. Raynal, Math. Comput. Phys. **6** (1966) 1.
- [8] V.I. Tselyaev, arXiv:math/0210320v1