

# Ein numerisches Verfahren zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit einem Mehr-Elektronen Modell Hamiltonian

Viktoria Gleiser

Geboren am 28. Mai 1989 in Moskau

9. November 2011

Bachelorarbeit Mathematik

Betreuer: Prof. Dr. Michael Griebel

INSTITUT FÜR NUMERISCHE SIMULATION

MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT DER  
RHEINISCHEN FRIEDRICH-WILHELMS-UNIVERSITÄT BONN



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalischer Hintergrund</b>	<b>7</b>
2.1	Motivation . . . . .	7
2.2	Wellenfunktion . . . . .	8
2.3	Die Schrödingergleichung . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Fourier-Transformationen auf Gittern</b>	<b>11</b>
3.1	Motivation . . . . .	11
3.2	Fourier-Transformation . . . . .	12
3.2.1	Grundlagen . . . . .	12
3.2.2	Fourierbasis . . . . .	13
3.3	Dünngitter . . . . .	20
3.4	Adaptives Gitter . . . . .	22
3.4.1	Motivation . . . . .	22
3.4.2	Verallgemeinerte Dünngitter . . . . .	22
3.4.3	Konstruktion . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Strang-Splitting</b>	<b>25</b>
4.1	Einleitung . . . . .	25
4.2	Motivation . . . . .	26
4.3	Anwendung auf die Schrödingergleichung . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Numerische Ergebnisse</b>	<b>31</b>
5.1	Implementierung . . . . .	31
5.1.1	HCFFT . . . . .	31
5.1.2	SLEPc . . . . .	32
5.1.3	Verwendete Programme . . . . .	32
5.2	Numerische Beispiele . . . . .	32
5.2.1	Zeitunabhängige Potentiale . . . . .	34
5.2.2	Zeitabhängige Potentiale . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>55</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>59</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>62</b>



# 1 Einleitung

## Motivation

Die numerische Moleküldynamik ist ein aktuelles Forschungsgebiet und beschäftigt sich mit der Simulation von chemischen und physikalischen Experimenten durch Hochleistungscomputer. Bemerkenswert an der Möglichkeit, Computersimulationen durchzuführen ist, dass aufwendige Laborexperimente unterstützt werden können. Damit hat sich die numerische Simulation neben der Theorie und experimentellen Versuchen als dritte Säule der modernen Wissenschaft etabliert.

Ein wichtiges Anwendungsgebiet der Moleküldynamik ist das Materialdesign, welches sich mit der Entwicklung neuer Materialien beschäftigt. Mit Simulationen kann die Synthese neuer Materialien durch Laborexperimente vereinfacht oder sogar erst ermöglicht werden. Es lassen sich zahlreiche Anwendungen aufführen, beispielsweise Fortschritte in der Medizin durch Entwicklung von Medikamenten. Außerdem können auch Vorgänge im Bereich von Zellen in Organismen simuliert werden, wodurch das Verständnis für Zusammenhänge auf diesem Gebiet verbessert wird. Eine andere Anwendung des Materialdesigns ist die Verbesserung von Batterieleistungen. Forschungen in diesem Bereich halfen zum Beispiel erheblich bei der Entwicklung der Elektroautomobile. Dies verdeutlicht, wie groß die Bedeutung von moleküldynamischen Simulationen für unsere Gesellschaft ist, da viele Probleme dadurch verringert und unterschiedliche Forschungsgebiete erheblich unterstützt werden können.

Entscheidend für all diese Anwendungsbereiche ist die Berechnung von atomaren Bewegungen. Ein wichtiges Hilfsmittel ist dabei die sogenannte *Schrödingergleichung*, mit der die auf atomarer Ebene wirkenden Kräfte approximativ ermittelt werden können. Allerdings ist die analytische Lösung der Schrödingergleichung bis auf wenige Ausnahmen nicht bekannt und folglich muss sie näherungsweise gelöst werden. Das Ziel dieser Arbeit ist es ein neues, numerisches Approximationsverfahren zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung zu entwickeln.

## Problemstellung

Erwin Schrödinger stellte die nach ihm benannte Schrödingergleichung auf, deren Lösung das zentrale Problem dieser Arbeit darstellt. Es handelt sich um eine partielle Differentialgleichung, deren Lösungen Wellenfunktionen sind, welche die Wahrscheinlichkeiten für den Aufenthaltsort von Teilchen bestimmen, wobei wir uns nachfolgend auf Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen fokussieren werden. Hauptbestandteil der Schrödingergleichung ist der Hamilton-Operator, welcher die Energiemesswerte und den Zustand des Systems beschreibt. Er besteht aus der Summe von kinetischer Energie, der Bewegungsenergie, und potentiellen Energien, wie zum Beispiel dem Coulomb-Potential, welches einem elektrischen Potential entspricht. Je nach betrachtetem Modell können darüber hinaus Potentiale von außen auf das System wirken, beispielsweise Laser, die elektrische Impulse abgeben. Besonders der Grundzustand, der Zustand mit minimal möglicher Energie, ist von Bedeutung. Für eine genaue Lösung des Bewegungsproblems

von Atomen müsste nun die zugehörige, zeitabhängige Schrödingergleichung berechnet werden. Aufgrund der Komplexität bei der Lösung der Schrödingergleichung ist dies mit üblichen numerischen Approximationsverfahren nur ineffizient realisierbar. Schon eine Simulation für ein mittelgroßes System würde mehr Zeit in Anspruch nehmen als die restliche Zeit, die unsere Sonne noch scheinen wird.

Konkret hat die Schrödingergleichung die Form

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = H\psi(\mathbf{x}, t), \quad \text{für } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \text{ und } t > 0. \quad (1.1)$$

Hierbei bezeichnet  $\psi(\mathbf{x}, t)$  die Wellenfunktion. Das Betragsquadrat von  $\psi$  entspricht der Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Elektron in einem betrachteten Gebiet zu finden.  $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$  ist der Hamilton-Operator. Der Laplace-Operator korrespondiert hierbei mit der kinetischen Energie und Potentiale werden in  $V$  zusammengefasst, beispielsweise auch das Coulomb-Potential. Wir werden später zeigen, dass diese partielle Differentialgleichung einem Eigenwertproblem entspricht, das bedeutet, dass  $H\psi = E\psi$  zu lösen ist, wobei  $E$  mit einem Energieeigenwert korrespondiert. Dem kleinsten Eigenwert wird der Grundzustand zugeordnet. Bei einer stationären, d.h. zeitunabhängigen, Schrödingergleichung dürfen sich die Wahrscheinlichkeitsverteilungen von einem Zeitschritt zum nächsten nicht verändern, falls keine weiteren Kräfte auf dieses System einwirken.

Eine Schwierigkeit bei der Lösung der Schrödingergleichung ist, dass die Potentiale teilweise Singularitäten aufweisen, so beispielsweise im Fall des Coulomb-Potentials. Zur Behebung dieses Problems gibt es eine Reihe von physikalischen Modellen, die allerdings auch nicht analytisch gelöst werden können. Ein weiteres Problem ist, dass eine starke Dimensionsabhängigkeit vorhanden ist. Dies bedeutet, dass sich die Kosten zur Berechnung einer Lösung durch das Zufügen eines einzelnen Elektrons um drei zusätzlich zu lösende Gleichungen vergrößert. Dies führt zu einer exponentiellen Abhängigkeit des Rechenaufwands von der Anzahl der betrachteten Teilchen. Schon für wenige Atome ist eine enorm hohe Anzahl Rechnungen von Nöten. Dieses Phänomen der exponentiellen Dimensionsabhängigkeit wird als *Fluch der Dimension* bezeichnet.

Es wird also ein Verfahren benötigt, welches diese Probleme behebt und dabei trotzdem so genau wie möglich bleibt. Für eine gute Approximation des auf atomarer Ebene betrachteten Problems ist eine genaue Lösung der Schrödingergleichung besonders wichtig, da so die Potentiale vergleichsweise genau sind und dadurch die für die Newton-Gleichung genutzten Kräfte annähernd exakt sind. Dies bedeutet, je besser die Näherung ist, desto präziser können die Bewegungen der Atome simuliert werden. Dies bildet die Voraussetzung für verwertbare Ergebnisse.

### Lösungsansatz

Für die Lösung der Schrödingergleichung ist die *Born-Oppenheimer-Näherung* von großer Bedeutung. Die Idee dabei ist, dass die Bewegung der Kerne von der Bewegung der Elektronen getrennt werden kann. Da die Kerne im Vergleich zu den Elektronen eine viel größere Masse haben, werden diese zunächst als ortsfest betrachtet. Rechtfertigen lässt sich die Born-Oppenheimer-Näherung damit, dass die Kerne im Vergleich zu den Elektronen wesentlich träger sind und sich daher deutlich langsamer bewegen. In einem späteren Schritt werden dann auch die Kernbewegungen betrachtet. Die Annahme ortsfester Kerne wird lediglich zur Berechnung der Potentiale der Elektronen, die später zur Kernbewegung benötigt werden, getätigt. In der Simulation wird davon

---

ausgegangen, dass die Elektronen untereinander und mit den Kernen durch Coulomb-Potentiale wechselwirken. In der Born-Oppenheimer-Näherung ist die Wechselwirkung mit den Kernen allerdings nur einseitig, die Kerne beeinflussen die Elektronen, allerdings werden die Kerne nicht von den Elektronen beeinflusst. Diese Annahmen erlauben es, die Schrödingergleichung approximativ zu berechnen, dennoch ist diese Lösung immer noch zu aufwändig, als dass sie für alle von der Simulation betrachteten Atome in jedem Zeitschritt bestimmt werden könnte.

Die Schrödingergleichung wird daher nur für eine Reihe von Standardsituationen gelöst, d.h. es werden unterschiedliche Kombinationen von Atomen betrachtet und es werden die Energiewerte für verschiedene Abstände zwischen den Kernen berechnet. Mithilfe dieser Werte lassen sich dann Energiekurven erstellen. Anschließend wird eine Zeitintegration durchgeführt. Die Idee ist nun, dass wie bei Festkörpern zur Berechnung der Bewegung der Atome die Newtonschen Bewegungsgesetze benutzt werden. Dazu benötigen wir die Kraft, die auf die Atome wirkt. Diese erhalten wir nun mittels der eben erwähnten Energiekurven, indem die Energien, die im betrachteten Fall wirken, differenziert werden. Von Zeitschritt zu Zeitschritt kann so die Bewegung der Atome mittels Newtonscher Gesetze beschrieben werden, was den Rechenaufwand erheblich verringert.

Doch selbst für Elektronen-Kern-Kombinationen der Standardsituationen kann die Schrödingergleichung mit naiven Verfahren nicht ohne erheblichen Aufwand gelöst werden und so müssen bereits an dieser Stelle der Simulation numerische Approximationen entworfen und verwendet werden.

Eben die Entwicklung eines neuen Approximationsverfahrens wird in dieser Arbeit thematisiert. Hierzu wurde in Kooperation mit dem Nanoscience Center der University of Jyväskylä, Finnland eine neue Approximation der Schrödingergleichung entwickelt. Eine der wesentlichen Ideen dabei ist, dass die Elektronen nun als eindimensionale Teilchen betrachtet werden und die Schrödingergleichung auf einem sogenannten *Dünngitter* gelöst wird, um dem *Fluch der Dimension* entgegen zu wirken. Bei unserer Approximation werden außerdem die Singularitäten der Potentiale ausgesondert.

Wir betrachten wieder einen Hamilton-Operator, nämlich  $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ . Im Falle von  $M$  Kernen und  $N$  Elektronen, ist das Potential durch

$$V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M v_j^{en}(\|x_i - R_j\|) + \sum_{i,j} v^{ee}(\|x_i - x_j\|) + \sum_{i=1}^N V_F(x_i, t) \quad (1.2)$$

gegeben. Die Kernpositionen werden mit  $R_1, \dots, R_M$  bezeichnet und die Elektronen sind eindimensional mit den Koordinaten  $x_1, \dots, x_N$ . Das Elektron-Kern-Coulomb-Potential wird als

$$v_j^{en}(r) = \frac{Z_j}{\sqrt{r^2 + a_j^2}}$$

und das Elektron-Elektron Coulomb-Potential wird als

$$v^{ee}(r) = \frac{Z_{ee}}{\sqrt{r^2 + a_e^2}}$$

mit  $Z_{ee} = 1$  gesetzt.  $Z_j$ , welches ein Modellparameter für die Kernladung ist, wird im Verlauf dieser Arbeit dem dreidimensionalen Problem entsprechend optimiert.  $r$  bezeichnet hier je nach

betrachtetem Potential den Kern-Elektron- oder den Elektron-Elektron-Abstand, das bedeutet entweder  $r = \|x_i - R_j\|$  oder  $r = \|x_i - x_j\|$ . Der Nenner des Quotienten der Potentiale wird also um eine reellwertige Konstante  $a$ , welche die Singularität im Punkt  $r = 0$  verhindert, modifiziert. Es ist zu bemerken, dass  $V_F$  ein externes Feld ist, welches direkt von der Zeit abhängt. Dies könnte beispielsweise ein Laser sein, der elektrische Impulse an die Atome abgibt.

Zur numerischen Umsetzung bedarf es sowohl einer Ortsdiskretisierung als auch eines iterativen Verfahrens zur Berechnung der Zeitintegration. Für die Ortsdiskretisierung werden wir einen klassischen und einen adaptiven Dünngitteransatz mit einer Fourier-Basis anwenden, wofür wir die am Institut für Numerische Simulation entwickelte HCFFT-Bibliothek (Hyperbolic Cross Fast Fourier Transformation)[16] nutzen. Das daraus resultierende Eigenwertproblem kann nun leicht durch bereits implementierte Routinen gelöst werden, was zu einem diskretisierten Anfangswertproblem führt. Dieses werden wir mit dem Strang-Splitting-Verfahren, welches auf der Variation der Konstanten basiert, lösen.

Ziel dieser Arbeit ist es, beide Verfahren möglichst effizient auf das Ausgangsproblem anzuwenden und dabei den Diskretisierungsfehler zu minimieren.

### Eigenen Beiträge

An dieser Stelle wollen wir die eigenen Beiträge dieser Arbeit zusammenfassen.

- Optimierung der Parameter im verwendeten Coulomb-Potential.
- Analyse der Konvergenz des Eigenwerts mit verschiedenen Gitteransätzen, dabei wurden Schwerpunkte auf Dünngitter und adaptive Gitter gesetzt.
- Implementierung der Zeitintegration mit der Strang-Splitting-Routine und anschließender Analyse der Stabilität besonders in Bezug auf die Zeitschrittweite.

### Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit ist wie im Folgenden beschrieben strukturiert. Wir beginnen im Kapitel 2 mit einer kurzen Erläuterung der physikalischen Hintergründe der Schrödingergleichung, wobei wir die Schrödingergleichung und die Wellenfunktion sowohl motivieren als auch definieren und erklären werden.

Für die Diskretisierung im Ort analysieren wir in Kapitel 3 die Theorie der Gitterdiskretisierungen. Hierbei erläutern wir zunächst den Vorteil der Wahl einer Fourier-Basis, um anschließend die Idee des Dünngitteransatzes zu betrachten. Insbesondere stellen wir hier auch die benötigte Theorie vor, um ein Dünngitter konstruieren zu können. Zusätzlich wollen wir uns in diesem Kapitel die Grundlagen der Konstruktion Adaptiver Gitter ansehen, welches zu einer Verbesserung gegenüber dem regulären Dünngitter führen soll.

In Kapitel 4 werden wir das Strang-Splitting-Verfahren zur Zeitintegration vorstellen.

Abschließend werden wir in Kapitel 5 die vorher theoretisch diskutierten Verfahren anhand numerischer Beispiele auswerten. Mithilfe der betrachteten Ergebnisse werden sowohl Probleme bei der Implementierung als auch Vor- und Nachteile der einzelnen Verfahren verdeutlicht.

Abschließend werden wir im letzten Kapitel unser Vorgehen und wie auch unsere Ergebnisse zusammenfassen, um dann einen Ausblick auf Aspekte, welche den Umfang dieser Arbeit übersteigen, zu geben.

---

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. Michael Griebel für die Vergabe eines interessanten Themas sowie zahlreichen Anregungen und Hilfestellungen bei Schwierigkeiten und Problemen bedanken. Des Weiteren bedanke ich mich bei Prof. Dr. Sören Bartels für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Betreut wurde ich von Christian Neuen, welcher durch seine zahlreichen Erläuterungen, Diskussionen, Korrekturen und besonders sein Verständnis diese Arbeit in diesem Ausmaß ermöglicht hat.

Insgesamt möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Instituts für Numerische Mathematik für viele Hilfestellungen, Diskussionen und eine sehr freundliche Arbeitsatmosphäre bedanken. Dabei gilt mein besonderer Dank Dr. Jan Hamaekers, Ralph Thesen, Jutta Adelsberger, Dr. Christian Rieger und Jens Oettershagen.

Außerdem bedanke ich mich bei Daniel Schmeier und Sonja Willerscheid für ihre Anregungen und das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Schließlich möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden für ihre langjährige Unterstützung, ihr Verständnis und besonders ihre Geduld bedanken.



## 2 Physikalischer Hintergrund

### 2.1 Motivation

In dem Zusammenhang der Schrödingergleichung ist die wichtigste Erkenntnis diejenige, dass Atome neben den Teilcheneigenschaften auch Welleneigenschaften besitzen. Der Welle-Teilchen-Dualismus lässt sich durch das Doppelspaltexperiment besonders gut veranschaulichen.

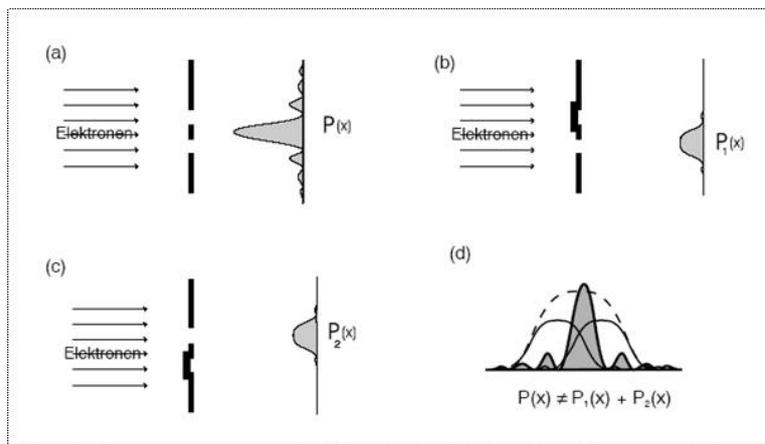


Abbildung 2.1: Doppelspaltexperiment für Elektronen.

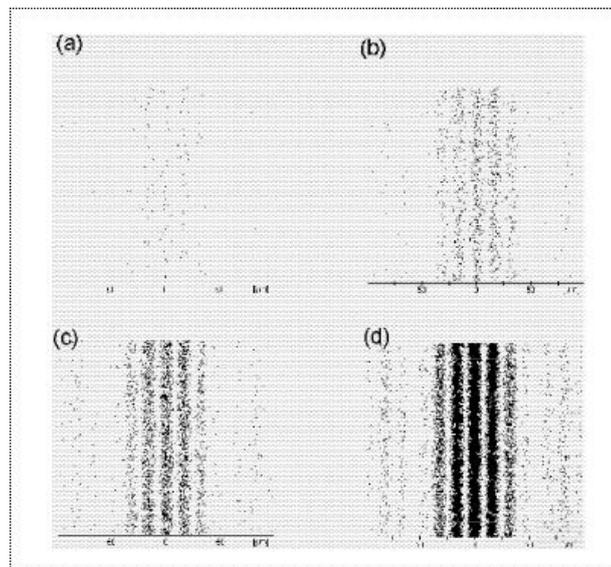


Abbildung 2.2: Doppelspaltexperiment für Elektronen.

Schematisch wird dieser Sachverhalt durch Abbildung 2.1 beschrieben. Hier werden Elektro-

nen durch einen Doppelspalt geschickt und die Wahrscheinlichkeitsverteilung der auftretenden Elektronen wird mit  $P(x)$  bezeichnet und auf dem dahinter liegenden Auffangschirm abgebildet. Wird nur ein Spalt offen gelassen, so verhält sich das Elektron wie ein Teilchen und es entsteht eine normale Gaußkurve, wobei die maximale Wahrscheinlichkeit genau gegenüber der Spaltöffnung ist, was man in Teil (b) und (c) sieht. Normalerweise würde man erwarten, dass sich die beiden Wahrscheinlichkeiten aufaddieren und man eine Wahrscheinlichkeitsdichte erhält, welche der gestrichelten Kurve in Teil (d) entspricht. Tatsächlich ist dies nicht der Fall und es entsteht eine wellenartige Dichte, wie in (a) und (d) verdeutlicht wird. Es gilt also nicht, dass  $P(x) = P_1(x) + P_2(x)$  ist. Wenn beide Spalte geöffnet bleiben, dann stören sich die Elektronen und dies führt zu Interferenzen (a). Hierbei ist zu beachten, dass man für diese Beobachtung nicht zwangsläufig mehrere Elektronen benötigt. Es genügt bereits, nur ein Elektron mit einem gewissen zeitlichen Abstand durch den Doppelspalt zu schicken, um ein wellenförmiges Interferenzbild zu erhalten.

In Abb. 2.2 werden die Ergebnisse eines Doppelspaltexperiments mit dem gleichen Versuchsaufbau, wie bereits beschrieben, betrachtet. Wieder werden Elektronen durch eine Doppelspaltwand geschickt und auf einem hinten liegenden Schirm aufgefangen. Elektronen, die auf dem Schirm landen, hinterlassen an dem Ort ihrer Ankunft schwarze Punkte auf dem Schirm. Zwischen (a) und (d) von Abb. 2.2 wird jeweils die Anzahl an Elektronen vergrößert, die durch den Doppelspalt geschickt werden. Hierbei ist zu beachten, dass die Teilabbildungen von Abb. 2.1 und Abb. 2.2 nicht miteinander korrespondieren. Zu Beginn des Versuchs, also bei Teil (a), scheinen die Punkte noch zufällig zu sein, doch bei Teil (d) hat sich deutlich ein Muster herausgebildet, welches analog zu Abb. 2.1.a ist.

### 2.2 Wellenfunktion

Die oben beschriebenen Phänomene führten zu der Definition der Wellenfunktion, welche wir für den Rest dieser Arbeit als  $\psi(\mathbf{x}, t)$  bezeichnen wollen, um den Ideen von [17] zu folgen. Die Wellenfunktion ist komplexwertig und hängt sowohl vom Ort  $\mathbf{x}$  als auch von der Zeit  $t$  ab. Wird die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\psi\bar{\psi}$  über ein Gebiet  $\Omega$  integriert, d.h.  $\int_{\Omega} \psi(\mathbf{x}, t)\bar{\psi}(\mathbf{x}, t) dx$ , so ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür, dass sich ein Elektron in diesem Gebiet befindet. Da  $\psi\bar{\psi}$  eine Wahrscheinlichkeitsdichte sein soll, muss sie auch normiert sein, was bedeutet, dass  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi\bar{\psi} = 1$  gelten muss. Dies ist eine wesentliche Forderung und muss gegebenenfalls durch eine Normierung der Form  $\frac{\psi}{\|\psi\|_{L^2}} = \psi'$  sichergestellt werden. Außerdem ist gerade im Kontext der Schrödingergleichung wichtig, dass Linearkombinationen von Wellenfunktionen wieder Wellenfunktionen ergeben. Betrachtet man also zwei Wellenfunktionen  $\psi_1, \psi_2$ , so muss  $\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2$  wieder eine Wellenfunktion sein.

### 2.3 Die Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung hat als Lösung die zu dem betrachteten Problem gehörende Wellenfunktion

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = H\psi(\mathbf{x}, t), \quad \text{für } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \text{ und } t > 0. \quad (2.1)$$

Der Hamiltonoperator  $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$  addiert die Potentiale und Energien auf, die sich in dem System befinden. Die Gesamtenergie eines Systems setzt sich zusammen aus potentieller und

kinetischer Energie,  $E_{tot} = E_{kin} + E_{pot}$ . Die kinetische Energie entspricht  $-\frac{1}{2}\Delta$ , wobei wir bei diesem mathematischen Ansatz die physikalischen Einheiten vernachlässigen wollen und die potentiellen Energien, welche systemabhängig sind, werden in  $V$  zusammengefasst.

Folglich entspricht die Schrödingergleichung einer partiellen Differentialgleichung, dessen Lösung einer Wellenfunktion entspricht. Wie wir im nächsten Abschnitt näher erläutern werden, kann die Schrödingergleichung auch als Eigenwertproblem aufgefasst werden. Wir interpretieren dann jede Wellenfunktion als Eigenfunktion mit korrespondierendem Eigenwert, welcher dann den Zustand des Systems beschreibt. Physikalisch ist es sinnvoll den kleinsten Eigenwert zu betrachten, welcher den Grundzustand des Systems beschreibt.

### Stationäre Schrödingergleichung

Nehmen wir an, dass der Hamiltonoperator  $H$  zeitunabhängig ist, dann können wir die Wellenfunktion in einen zeitabhängigen und einen zeitunabhängigen Teil aufteilen:  $\psi(\mathbf{x}, t) = f(t)\tilde{\psi}(\mathbf{x})$ . Wir können diese Identität nun in unsere Schrödingergleichung (2.1) einsetzen:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}f(t)\tilde{\psi}(\mathbf{x}) &\stackrel{!}{=} Hf(t)\tilde{\psi}(\mathbf{x}) \\ \Leftrightarrow i\tilde{\psi}(\mathbf{x})\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= f(t)H\tilde{\psi}(\mathbf{x}), \quad (\text{da } H, \tilde{\psi} \text{ zeitunabhängig sind}) \\ \Leftrightarrow i\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= \frac{1}{\tilde{\psi}(\mathbf{x})}H\tilde{\psi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Wir sehen, dass die linke Seite der Gleichung ausschließlich von  $t$  abhängt und die rechte nur von  $\mathbf{x}$ , daraus schließen wir, dass es sich in diesem Fall nur um eine Konstante handeln kann, diese nennen wir  $E$ . Mittels dieser Überlegung lässt sich auf der rechten Seite  $\tilde{\psi}$  kürzen und wir erhalten:

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow i\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= Ef(t) \\ \Rightarrow f(t) &= e^{-iEt} \end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion ist die einzige mögliche Funktion für  $f(t)$ , da sie die einzige differenzierbare Funktion  $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $y' = y$  und  $y(0) = 1$  darstellt, siehe [12]. Für den ortsabhängigen Anteil gilt natürlich auch  $H\tilde{\psi}(\mathbf{x}) = E\tilde{\psi}(\mathbf{x})$ . Die zeitunabhängige Schrödingergleichung entspricht einem Eigenwertproblem, wobei  $E$  Energieeigenwert des Systems genannt wird.

Soll nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung aus der Dichtefunktion  $\psi\bar{\psi}$  berechnet werden, so führt dies zu

$$\int_{\Omega} \psi(\mathbf{x})\bar{\psi}(\mathbf{x})d^3x = \int_{\Omega} \tilde{\psi}(\mathbf{x})\bar{\tilde{\psi}}(\mathbf{x})e^{-iEt}e^{iEt}d^3x = \int_{\Omega} \tilde{\psi}(\mathbf{x})\bar{\tilde{\psi}}(\mathbf{x})d^3x.$$

Offensichtlich ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Schrödingergleichung unabhängig von der Zeit, obwohl die Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{x}, t)$  zeitabhängig ist.



## 3 Fourier-Transformationen auf Gittern

### 3.1 Motivation

Als ersten Schritt zur Lösung der Schrödingergleichung müssen wir diese auf dem betrachteten Gebiet diskretisieren. Das zentrale Problem dabei stellt der sogenannte *Fluch der Dimension* dar, wodurch sich ein naiver Gitteransatz für eine Ortsdiskretisierung als ungünstig herausstellt.

*Fluch der Dimension* bedeutet in unserem Zusammenhang die exponentielle Dimensionsabhängigkeit des Rechenaufwands von der Anzahl der betrachteten Elektronen, denn pro betrachtetem Partikel werden drei Dimensionen in dem zu lösenden Gleichungssystem benötigt. Deswegen wäre ein naives Tensorproduktgitter nur für sehr kleine Probleme sinnvoll beziehungsweise überhaupt realisierbar. Hierbei wird das Gebiet an uniformen Freiheitsgraden ausgewertet. Dieses wird in jeder Dimension gebildet und die einzelnen Gitter, die daraus entstehen, werden mithilfe von Tensorprodukten zu einem mehrdimensionalen Gitter zusammengesetzt.

Der Ansatz, welcher in dieser Arbeit verfolgt werden soll, ist die Dünngitterdiskretisierung.

Im Gegensatz zum Vollgitter wird beim Dünngitter keine äquidistante Punktauswertung betrachtet. Die wichtigste Idee dabei ist, dass nicht alle Punkte bei einer äquidistanten Betrachtung gleichermaßen zu Informationsgewinnen für das Problem führen. Aus diesem Grund können solche Punkte unbetrachtet bleiben, die nur wenige Informationen enthalten, was zu einem nicht äquidistanten Gitter führt. Der Aufwand wird erheblich verringert aber auch die Genauigkeit leidet unter den Vereinfachungen. Dieser zusätzliche Fehler lässt sich allerdings durch die Wahl des Diskretisierungslevels regulieren. Durch die Anwendung des Dünngitters lässt sich die Komplexität des Problems von  $\mathcal{O}(N^d)$  auf  $\mathcal{O}(N(\log N)^{d-1})$ , wobei  $d$  die Dimensionen und  $N$  die Anzahl der Stützstellen in einer Dimension sind, verringern. Die Konvergenzordnung hängt allerdings sowohl von der Glattheit der Lösung als auch von jener der Anfangs- und Randwerte ab. Diese Auswirkungen wollen wir in diesem Abschnitt noch detailliert betrachten.

Wir werden außerdem den adaptiven Gitteransatz betrachten, welcher eine Verbesserung des Dünngitters darstellen soll. Auch hier werden die Punkte, welche zu vergleichsweise wenig Informationsgewinn führen vernachlässigt. Die Konstruktion erfolgt im Gegensatz zum Dünngitter in Abhängigkeit vom betrachteten Problem und einer gewählten Fehlerschranke. Die einzelnen Dimensionen werden einzeln abhängig von der Fehlerschranke diskretisiert, was wieder zu einem nicht-äquidistanten Gitter führen kann. Hierbei können sogar die einzelnen Dimensionen unterschiedlich diskretisiert werden.

Wir benutzen eine trigonometrische Interpolation mit einer Fourierbasis, um das Dünngitter zu konstruieren. Die Fourier-Transformation ist ein gängiges Verfahren bei der Lösung der Schrödingergleichung, welches in dieser Arbeit als  $2\pi$ -periodisches Anfangswertproblem betrachtet wird. Die Fourier-Transformation transformiert eine üblicherweise reellwertige Funktion der Zeit oder auch des Ortes in eine komplexwertige Funktion der Frequenz. Dies bedeutet, dass komplizierte Funktionen mittels mehrerer Sinus- und Kosinusfunktionen beschrieben werden können.

## 3.2 Fourier-Transformation

### 3.2.1 Grundlagen

In diesem Abschnitt werden die grundlegenden mathematischen Ideen zur Fourier-Transformation erläutert, wobei eine genaue Analyse den Rahmen dieser Arbeit übersteigen würde. Der interessierte Leser kann sämtliche Beweise und Vertiefungen in bekannten Standardwerken nachlesen. Wir werden uns in dieser Arbeit auf [13] beziehen.

**Definition 3.1** (Fourier-Transformierte). *Es sei  $f$  eine integrierbare Funktion auf  $\mathbb{R}^n$ . Dann ist die Fourier-Transformierte zu  $f$  die Funktion  $\widehat{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  mit*

$$\widehat{f}(\mathbf{k}) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} d\mathbf{x}. \quad (3.1)$$

$\widehat{f}$  ist stetig und beschränkt.

Außerdem ist es wichtig, dass es für diese Formel eine Umkehrung gibt, damit die Reversion von der Fourier-Transformierten auf die reelle Funktion und umgekehrt problemlos ist.

**Satz 3.1** (Umkehrsatz). *Es sei  $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$  eine Funktion, deren Fourier-Transformierte ebenfalls zu  $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$  gehört. Dann gilt für fast alle  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$*

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} d\mathbf{k}. \quad (3.2)$$

Im Folgenden wollen wir den Schwarzraum  $\mathcal{S}$  aller *schnell fallenden* Funktionen betrachten, also den Raum aller Funktionen  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$  und außerdem muss für jedes Paar  $\alpha, \beta$  von Multiindizes die Funktion  $t^\alpha \partial^\beta f(t)$  auf  $\mathbb{R}^n$  beschränkt sein. Wir führen außerdem das *Skalarprodukt* für  $\mathcal{S}$  ein. Seien  $f, g \in \mathcal{S}$ , dann ist

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} f \cdot \bar{g} d\mathbf{x}$$

das Skalarprodukt mit der zugehörigen Norm  $\|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle}$ . Diese Definitionen führen auf die

**Satz 3.2** (Formel von Plancherel). *Für  $f, g \in \mathcal{S}$*

$$\langle \widehat{f}, \widehat{g} \rangle = \langle f, g \rangle, \quad \|\widehat{f}\|_2 = \|f\|_2.$$

Das bedeutet, dass die Fourier-Transformierte normäquivalent zu der ursprünglichen Funktion ist.

Zusätzlich gilt

$$i\widehat{\partial_j f}(\mathbf{k}) = k_j \widehat{f}(\mathbf{k}), \quad (3.3)$$

d.h. dass durch Fourier-Transformation aus einer partiellen Ableitung eine Multiplikation mit dem Fourierkoeffizienten wird. Im Zusammenhang der Schrödingergleichung ist dies besonders für den Laplace-Operator von Interesse. Hierfür wird die quadrierte euklidische  $l^2$ -Norm  $|\mathbf{k}|_2 = k_1^2 + \dots + k_d^2$  benutzt

$$-\widehat{\Delta f}(\mathbf{k}) = |\mathbf{k}|_2^2 \widehat{f}(\mathbf{k}). \quad (3.4)$$

### 3.2.2 Fourierbasis

In dieser Arbeit werden wir die Spektralmethode zur Ortsdiskretisierung betrachten. Wir orientieren uns dabei hauptsächlich an der Struktur von [8]. Dazu wird eine orthonormale Basis  $\phi_k$  betrachtet, womit sich jede Funktion  $f \in L^2$  durch

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} c(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad (3.5)$$

$$c(\mathbf{k}) = \langle f, \phi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (3.6)$$

darstellen lässt. Aufgrund des Rechenaufwands ist eine kontinuierliche Fourier-Transformation nicht möglich. Deswegen wird im Folgenden die diskrete Fourier-Transformation vgl. [15] benutzt, wobei  $N$  die Anzahl der Gitterpunkte bezeichnet.

**Satz 3.3** (Diskrete Fourier-Transformation). *Es sei  $\mathcal{F}_k : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$  die diskrete Fourier-Transformation, die durch*

$$\hat{v} = \mathcal{F}_N v \quad \text{mit} \quad \hat{v}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} e^{-ikj \cdot 2\pi/N} v_j \quad (k \in \{-N/2, \dots, N/2 - 1\})$$

gegeben ist. Außerdem ist die inverse Transformation als  $\mathcal{F}_N^{-1} = N \overline{\mathcal{F}_N}^T$  definiert, dann gilt

$$v = \mathcal{F}_K^{-1} \hat{v} \quad \text{mit} \quad v_j = \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} e^{ikj \cdot 2\pi/N} \hat{v}_k \quad (j \in \{-N/2, \dots, N/2 - 1\}).$$

Für ein solches Verfahren ist die gewählte Basis entscheidend. Wir werden im Folgenden die Fourierbasis, eine trigonometrische Basis,

$$\phi_k(x) = e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx) \quad (3.7)$$

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \prod_{j=1}^d (\cos(k_j x_j) + i \sin(k_j x_j)) \quad (3.8)$$

wie in [4] betrachten. Da so dargestellte Polynome glatt und periodisch sind, eignet sich die Fourierbasis besonders gut zur Approximation glatter und periodischer Funktionen mit der Spektralmethode.

Um die obigen Überlegungen nun umsetzen zu können, betrachten wir zunächst den eindimensionalen Ortsraum  $[0, 2\pi]$ , welcher durch

$$G_n := \{x_{nk} := 2\pi k 2^{-n}, \text{ für } k = 0, \dots, 2^n - 1\}$$

diskretisiert wird. Mit

$$G'_n = \{1 - 2^{n-1}, \dots, 2^{n-1}\}$$

als Frequenzbereich für die Diskretisierungslevel  $n \geq 1$ . Für  $n = 0$  setzen wir  $G'_0 = 0$ .

Im Folgenden wollen wir einige Funktionen definieren, die es uns später erlauben werden, eine

hierarchische Basis zu konstruieren, vgl.[1]. Die Idee dahinter ist, dass die Basis als eine Hierarchie von Funktionen aufgebaut wird. Die Größe der Träger der hierarchischen Basen korrespondiert hierbei mit dem Beitrag, welche diese zur Funktionsapproximation leisten. Die Basen, welche kleinere Träger besitzen, werden benutzt, um die kleineren Korrekturen, die sogenannten *hierarchischen Überschüsse*, darzustellen. Die hierarchische Basis ist nur von dem betrachteten Level abhängig und nicht von den vorhergehenden Leveln. Werden Gitterpunkte ausgewertet, welche schon im vorigen Level vorhanden waren, so verschwindet die Auswertung. Dies ist eine fundamentale Voraussetzung an eine *hierarchische Basis*.

Wir beginnen hierfür mit der Definition des *Level-Sets*, welches es uns zusammen mit der später folgenden *Zigzag-Funktion* ermöglichen wird, nur Stützstellen auf dem höchsten Gitter zu betrachten.

**Definition 3.2** (Level-Set). Sei  $I_n$  die Menge des  $n$ -ten Levels, das Level-Set ist dann durch

$$I_n := \begin{cases} \{0\} & \text{für } n = 0 \\ \{2^{n-1}, \dots, 2^n - 1\} & \text{für } n \geq 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

gegeben.

Außerdem wollen wir die Zigzag-Funktion auf das *Level-Set* anwenden, was eine Transformation der betrachteten Indexwerte aus dem  $\mathbb{N}_0$  in den  $\mathbb{Z}$  vornimmt.

**Definition 3.3** (Zigzag-Funktion).

$$\sigma(q) := \begin{cases} -\frac{q}{2}, & \text{für } q \text{ gerade} \\ \frac{q+1}{2}, & \text{für } q \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.10)$$

Betrachten wir hierfür ein Beispiel auf Level  $n = 3$ , dann wird  $I_3 = \{4, 5, 6, 7\}$  zu  $\sigma(I_3) = \{-2, 3, -3, 4\}$  umsortiert. Offensichtlich gilt  $\sigma(I_{n+1}) = G'_{n+1} \setminus G'_n$ . Das bedeutet, dass  $\sigma(I_{n+1})$  genau denjenigen Punkten im Frequenzbereich entspricht, die hinzukommen, wenn man ein Level auf das nächsthöhere erweitert.

In dieser Arbeit wollen wir sowohl die *nodale* als auch die *hierarchische trigonometrische Basis* betrachten. Eine glatte, stetige und  $2\pi$ -periodische Funktion  $u$  kann mit einer trigonometrischen nodalen Basis als

$$\mathcal{I}_n u(x) := u_n(x) := \sum_{k \in G'_n} c_{nk} e^{ikx} \quad k \in G'_n$$

dargestellt werden, wobei  $\mathcal{I}_n$  der Restriktion der Funktion auf die betrachtete Basis im  $n$ -ten Level entspricht. Mittels dieser Definition lassen sich die *nodalen trigonometrischen Koeffizienten* mit

$$c_{nk} := \frac{1}{2^n} \sum_{x \in G_n} u(x) e^{-ikx} \quad (3.11)$$

bestimmen. Zur Konstruktion der hierarchischen Basis wollen wir nun die nodale Basis umindizieren. Wir definieren:

$$\beta_{nq}(x) := e^{i\sigma(q)x} := \begin{cases} e^{-i\frac{q}{2}x}, & \text{für } q \text{ gerade} \\ e^{i\frac{q+1}{2}x}, & \text{für } q \text{ ungerade.} \end{cases}$$

Bemerkenswert ist, dass  $n$  hierbei lediglich das Level bezeichnet, in welchem sich die Basis befindet, also in welchem Bereich sich der Index  $q$  bewegen darf:  $\{0, \dots, 2^n - 1\}$ . Also hängt  $\beta_{nq}$  nur indirekt von  $n$  ab und direkt hängt  $\beta_{nq}$  nur vom Index  $q$  ab. Mit der obigen Definition 3.3 können wir die Summationsreihenfolge zu

$$u_n(x) = \sum_{q=0}^{2^n-1} c_{n\sigma(q)} \beta_{nq}(x) = \sum_{q=0}^{2^n-1} \tilde{c}_{nq} \beta_{nq}(x) \quad (3.12)$$

ändern. Wir wollen uns nun die hierarchische Basis konstruieren. Zur Motivation betrachten wir zunächst

$$\begin{aligned} u_{n+1} - u_n &\stackrel{(3.12)}{=} \sum_{q=0}^{2^{n+1}-1} \tilde{c}_{n+1q} \beta_{n+1q}(x) - \sum_{q=0}^{2^n-1} \tilde{c}_{nq} \beta_{nq}(x) \\ &= \sum_{q=2^n}^{2^{n+1}-1} \tilde{c}_{n+1q} \beta_{n+1q}(x) + \sum_{q=0}^{2^n-1} \tilde{c}_{n+1q} \beta_{n+1q}(x) - \sum_{q=0}^{2^n-1} \tilde{c}_{nq} \beta_{nq}(x) \\ &= \sum_{q \in I_{n+1}} \tilde{c}_{n+1q} (\beta_{n+1q}(x) - \beta_{n+12^{n+1}-q-1}) \\ &\quad + \sum_{q=0}^{2^n-1} (\tilde{c}_{n+12^{n+1}-q-1} + \tilde{c}_{n+1q} - \tilde{c}_{nq}) \beta_{nq}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Wir werden nun zeigen, dass

$$\tilde{c}_{n+12^{n+1}-q-1} + \tilde{c}_{n+1q} - \tilde{c}_{nq} = 0 \quad (3.14)$$

gilt, womit wir die Konstruktion der hierarchischen Basis motivieren. Diese Aussage wollen wir nun, für den Fall, dass  $q$  gerade ist, beweisen. Der Fall, dass  $q$  ungerade ist, kann analog gezeigt werden.

*Beweis.* Wir betrachten zum Beweis die einzelnen Teile der Gleichung (3.14), um sie in die Summenformel (3.11) zurückzuführen,

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{n+1q} &= c_{n+1\sigma(q)} = c_{n+1-\frac{q}{2}} \\ \tilde{c}_{nq} &= c_{n\sigma(q)} = c_{n-\frac{q}{2}} \\ \tilde{c}_{n+12^{n+1}-q-1} &= c_{n+1\sigma(2^{n+1}-q-1)} = c_{n+1-\frac{2^{n+1}-q}{2}}. \end{aligned}$$

Eingesetzt in (3.11) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 (3.14) &= \frac{1}{2^{n+1}} \left( \sum_{k=1-2^{n+1}}^{2^{n+1}} u(x_k) \left( e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} + \underbrace{e^{-i \frac{2\pi k (2^{n+1}-q)}{2^{n+1} \cdot 2}}}_{\star} \right) \right) - \frac{1}{2^n} \left( \sum_{k=1-2^n}^{2^n} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^n \cdot 2}} \right) \\
 &= \frac{1}{2^{n+1}} \sum_{k=1-2^{n+1}, k \text{ gerade}}^{2^{n+1}} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} - \frac{1}{2^n} \sum_{k=1-2^n}^{2^n} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^n \cdot 2}} \\
 &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=2^* m (1-2^{n-1})}^{2^* 2^{n-1}} u(x_k) e^{i \frac{2\pi 2k q}{2^{n+1} \cdot 2}} - \frac{1}{2^n} \sum_{k=1-2^n}^{2^n} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^n \cdot 2}} \\
 &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=2^* m (1-2^{n-1})}^{2^* 2^{n-1}} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1}}} - \frac{1}{2^n} \sum_{k=1-2^n}^{2^n} u(x_k) e^{i \frac{2\pi k q}{2^n \cdot 2}} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

$$\star = e^{-i \frac{2\pi k (2^{n+1}-q)}{2^{n+1} \cdot 2}} = e^{-i \frac{2\pi k 2^{n+1}}{2^{n+1} \cdot 2}} \cdot e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} = \underbrace{e^{-i 2\pi \frac{k}{2}}}_{\star\star} \cdot e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} = \begin{cases} -e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} & \text{für } k \text{ ungerade} \\ e^{i \frac{2\pi k q}{2^{n+1} \cdot 2}} & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases}$$

$$\star\star = \begin{cases} -1, & \text{falls, } k \text{ ungerade} \\ 1, & \text{falls, } k \text{ gerade.} \end{cases}$$

□

Dies führt zu der Definition der *hierarchischen trigonometrischen Basis*:

$$\chi_{nq} := \beta_{nq} - \beta_{n2^n - q - 1}, \quad \text{für } q \in I_n, n \geq 1, \quad (3.15)$$

bei welcher die Auswertung aller Gitterpunkte zum kleineren Level  $n - 1$  verschwinden.

**Satz 3.4** (Hierarchische Basis). *Die hierarchische Basis (3.15) im Level  $n$  verschwindet in  $G_{n-1}$  vgl.[4]:*

$$\chi_{nq}(x) = 0 \quad \text{für alle } x \in G_{n-1}.$$

*Beweis.* Wir betrachten zunächst den zweiten Teil der hierarchischen Basis, nämlich  $\beta_{n2^n - q - 1}$ .

Fall 1:  $q$  gerade

$$\beta_{n2^n - q - 1}(x) = e^{i \frac{2^n - q - 1 + 1}{2} x} = e^{i(2^{n-1} - \frac{q}{2})x} = e^{i(\sigma(q) - \text{sign}(\sigma(q)) 2^{n-1})x}$$

Fall 2:  $q$  ungerade

$$\beta_{n2^n - q - 1}(x) = e^{-i \frac{2^n - q - 1}{2} x} = e^{-i(2^{n-1} - \frac{q+1}{2})x} = e^{i(\sigma(q) - \text{sign}(\sigma(q)) 2^{n-1})x}$$

Dies ermöglicht es, die Darstellung  $\beta_{n2^n - q - 1}(x) = e^{i(\sigma(q) - \text{sign}(\sigma(q)) 2^{n-1})x}$  zu wählen. Im Folgenden wollen wir  $\sigma(q) = s$  setzen.

$$\chi_{nq}(x) = e^{isx} - e^{i(s - \text{sign}(s) 2^{n-1})x} = e^{isx} (1 - e^{i \text{sign}(s) 2^{n-1} x})$$

Wir wollen anschließend zeigen, dass  $1 - e^{i \operatorname{sign}(s) 2^{n-1} x} = 0$  für  $x \in G_{n-1}$  gilt. Demnach müssen wir zeigen, dass

$$2^{n-1} x \pmod{2\pi} = 0. \quad (3.16)$$

Hierbei bezeichnet  $\operatorname{mod}$  eine Erweiterung der klassischen Modulo-Funktion auf eine reellwertige Modulo-Funktion.

Wir können alle  $x \in G_{n-1}$  als

$$x = \pi \frac{2d}{2^{n-1}} \quad d \in G'_{n-1}$$

schreiben. Eingefügt in (3.16) ergibt dies

$$2^{n-1} \pi \frac{2d}{2^{n-1}} \pmod{2\pi} = 2\pi d \pmod{2\pi} = 0.$$

Dies gilt nicht nur für  $x \in G_{n-1}$ , sondern auch für alle Level  $m$ , die kleiner als  $n$  sind, da

$$2^{n-1} \pi \frac{2d}{2^m} \pmod{2\pi} = 2^{n-m} \pi d \pmod{2\pi} = 0 \quad \text{für } m < n.$$

□

Mit diesen Ergebnissen lässt sich nun die hierarchische trigonometrische Interpolation einer Funktion aufstellen:

$$\mathcal{I}_n u(x) = \sum_{l=1}^n \sum_{q \in I_l} d_{lq} \chi_{lq},$$

wobei  $d_{lq} := \tilde{c}_{lq} = c_{l\sigma(q)}$  und  $\tilde{c}_{lq}$  wie in (3.11) die diskreten Fourierkoeffizienten zum Level  $l$  bezeichnen. Mit  $x_{nk} = x_{nk+l2^n}$  für  $k, l \in \mathbb{Z}$  folgt

$$d_{lq} = \tilde{c}_{lq} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \hat{u}(\sigma(q) + m2^l), \quad (3.17)$$

da

$$\begin{aligned} c_{n\sigma(q)} &= \mathcal{F}_k(u_n(x)) = \frac{1}{2^n} \sum_{x \in G_n} e^{-ikx} \left( \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_{nl} e^{ilx} \right) \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{x \in G_n} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_{nl} \underbrace{e^{i(l-k)x}}_{\star} \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=1-2^{n-1}}^{2^{n-1}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_{nl} e^{\frac{i(l-k)2\pi}{2^n}} \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{u}_{nl} \delta_{l, k+m2^n} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{u}(k + m2^n) \\ \star &= \begin{cases} 1, & \text{wenn } l = k \text{ oder } l - k = m2^n, n \in \mathbb{Z} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

wobei  $\hat{u}$  die Fourier-Transformierte bezeichnet.

Für diese Arbeit ist besonders die Möglichkeit zwischen der nodalen und hierarchischen Basis leicht wechseln zu können wichtig. Zu diesem Zweck wurden in [9] Algorithmen eingeführt, die wir im Folgenden betrachten werden. Wir beschäftigen uns zuerst mit der Dehierarchisierung, was bedeutet, dass die hierarchische Basis in die nodale Basis transformiert wird. Zunächst wird ein Array  $A[0 \dots 2^n - 1]$ , in dem die hierarchischen Fourierkoeffizienten der betrachteten Funktion  $u$  enthalten sind, ansehen. Dies entspricht dann  $A[q] = d_{lq}$ . Als Output sollen die nodalen Fourierkoeffizienten in  $A$  in der Form:  $A[k] = c_{l\sigma(q)}$  ausgegeben werden. Die detaillierte Herleitung für den unten aufgeführten Algorithmus kann in [7] nachgelesen werden. Wir betrachten den Vektor von geordneten Koeffizienten  $d_{lq}$  und multiplizieren diesen an eine Matrix  $\mathcal{A}$  und erhalten als Ergebnis einen Vektor, der die geordneten Koeffizienten  $c_{lq}$  enthält. Für den Fall  $n = 3$  sieht die Matrix dann wie folgt aus:

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Nach der Definition (3.15) lautet der Algorithmus dann:

---

**Algorithmus 1:** Dehierarchisierung( $A, n$ )

---

```

for  $j = 1$  to  $n$  do
    | for  $q = 2^{j-1}$  to  $2^j - 1$  do
    | |  $A[2^j - 1 - q] = A[2^j - 1 - q] - A[q]$ 
    | end
end
return  $A$ 

```

---

Nun wollen wir die Hierarchisierung, d.h. die Transformation aus einer nodalen in eine hierarchische Basis, betrachten. Allerdings wäre es ungünstig dafür die Formel aus (3.17) zu benutzen, da diese bei  $2^n$  Elementen auf  $O(n2^n)$  Operationen führen würde. Der Dehierarchisierungs-Algorithmus hingegen benötigt nur  $O(2^n)$  Operationen. Deswegen benutzen wir zur Hierarchisierung eine einfache Umkehrung des Dehierarchisierungsalgorithmus. Die dadurch entstandene

Matrix entspricht dann der inversen Dehierarchisierungsmatrix

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Dies führt dann zu Algorithmus 2.

---

**Algorithmus 2:** Hierarchisierung  $(A, n)$

---

```

for  $j = n$  to 1 do
  | for  $q = 2^j - 1$  to  $2^{j-1}$  do
  | |  $A[2^j - 1 - q] = A[2^j - 1 - q] + A[q]$ 
  | end
end
return  $A$ 
    
```

---

Die bisherigen Ergebnisse lassen sich leicht auf  $d$ -dimensionale Gebiete  $\Omega := [0, 2\pi]^d$ ,  $d \geq 2$  mit Hilfe von Multiindizes erweitern. Das Level ist dann  $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{N}$  und der Index  $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d$ . Daraus ergibt sich für das Vollgitter in Ortskoordinaten, wobei  $\mathbf{x}_{\mathbf{n}\mathbf{k}}$  vektorwertig ist,

$$G_{\mathbf{n}} := \{\mathbf{x}_{\mathbf{n}\mathbf{k}} \text{ mit } x_{n_s k_s} := 2\pi k_s 2^{-n_s}, \text{ für } k_s \in G'_{n_s}\}$$

und daraus ergibt sich als Frequenzbereich des Vollgitters

$$G'_{\mathbf{n}} = \{\omega_{\mathbf{n}\mathbf{k}} := \mathbf{k}, \text{ mit } k_s \in G'_{n_s}, s = 1, \dots, d\}.$$

Nun wollen wir die nodale Interpolation einer Funktion  $u$  auf einem vollen Gitter betrachten, also die Auswertung dieser Funktion mit der nodalen Basis an jedem betrachteten Gitterpunkt in  $G_{\mathbf{n}}$

$$\mathcal{I}_{\mathbf{n}}^{\text{voll}} u(\mathbf{x}) := u_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{k} \in G'_{\mathbf{n}}} c_{\mathbf{n}\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.18)$$

mit den nodalen Koeffizienten

$$c_{\mathbf{n}\mathbf{k}} := \frac{1}{2^{|\mathbf{n}|_1}} \sum_{\mathbf{x} \in G_{\mathbf{n}}} u(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}},$$

wobei  $|\mathbf{n}|_1 := n_1 + \dots + n_d$  bezeichnet. Außerdem wird ein Tensorprodukt benutzt, um das Gitter mehrdimensional durch  $I_{\mathbf{l}} = I_{l_1} \times \dots \times I_{l_d}$  aufzubauen. Jedes  $I_{l_i}$  entspricht einem eindimensionalen Gitter. Die Konstruktion der mehrdimensionalen *hierarchischen Basis* ist  $\chi_{\mathbf{l}\mathbf{q}} := \prod_{s=1}^d \chi_{l_s q_s}(\mathbf{x})$ . Dies führt auf eine Darstellung der Interpolation durch

$$\mathcal{I}_{\mathbf{n}}^{\text{voll}} u(\mathbf{x}) := u_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) := \sum_{|\mathbf{l}|_{\infty} \leq n} \sum_{\mathbf{q} \in I_{\mathbf{l}}} d_{\mathbf{l}\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{l}\mathbf{q}}(\mathbf{x}) \quad (3.19)$$

in der *hierarchischen Basis*. Wir bezeichnen die Maximumsnorm mit  $|\mathbf{l}|_\infty = \max\{l_s, s = 1, \dots, d\}$ . Für gewöhnlich wird die “ $\leq$ “-Relation komponentenweise verstanden. Da wir allerdings für die folgende Konstruktion des Dünngitters in allen Dimensionsrichtungen das gleiche Diskretisierungslevel nutzen werden, setzen wir  $\mathbf{n} = n$  in allen Dimensionen. Deswegen lässt sich unsere oben angegebene Summe über  $|\mathbf{l}|_\infty \leq n$  betrachten. Für die *Zigzag-Funktion* 3.3 im mehrdimensionalen Fall gilt dann  $\mathbf{k} := \sigma(\mathbf{q}) := (\sigma(q_1), \dots, \sigma(q_d))$ . Außerdem definieren wir analog zum eindimensionalen Fall die alternative Formel für die *hierarchischen Fourierkoeffizienten* als

$$d_{\mathbf{l}\mathbf{q}} = c_{\mathbf{l}\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}} \hat{u}(\sigma(q_1) + m_1 2^{l_1}, \dots, \sigma(q_d) + m_d 2^{l_d}) \quad (3.20)$$

### 3.3 Dünngitter

Ein volles Gitter, wie es oben definiert wurde, führt allerdings wegen der hohen Komplexität zum Problem des *Fluchs der Dimension*. Deswegen wollen wir einen *Dünngitteransatz* betrachten. Der entscheidende Gedanke dabei ist, dass bestimmte Bereiche vernachlässigt werden können. Es handelt sich um Gitterpunkte, bei welchen neue Informationsgewinne vergleichsweise klein sind. Im eindimensionalen Fall werden die Freiheitsgrade weggelassen, für welche  $|k| > n$  gilt. Im Mehrdimensionalen werden die Gebiete mit  $|\mathbf{k}|_1 > n$  vernachlässigt. Dies führt in unserer Arbeit zu

$$S_n := \{\mathbf{x}_{\mathbf{l}\sigma(\mathbf{q})}, \text{ wobei } |\mathbf{l}|_1 \leq n, \text{ und } \mathbf{q} \in I_{\mathbf{l}}\}$$

als Definition für das Dünngitter in Ortskoordinaten. Auch den Frequenzraum können wir analog umschreiben und erhalten

$$S'_n = \{\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{l}\sigma(\mathbf{q})} := \sigma(\mathbf{q}), \text{ wobei } |\mathbf{l}|_1 \leq n, \text{ und } \mathbf{q} \in I_{\mathbf{l}}\}.$$

Der Dünngitteransatz vernachlässigt also die Punkte mit  $|\mathbf{l}|_1 \geq n$ , was zu einer stark verringerten Anzahl an Stützpunkten führt. Demnach wird die trigonometrische Interpolation einzig auf dem Dünngitter durch

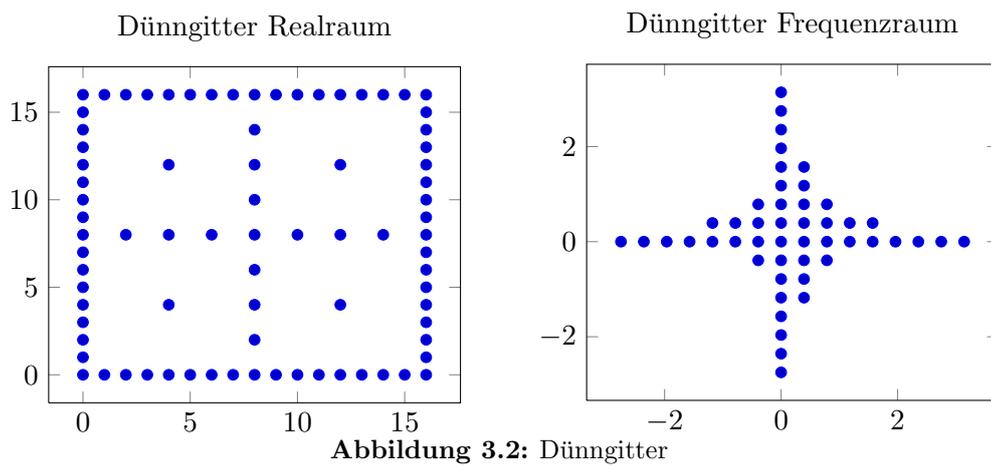
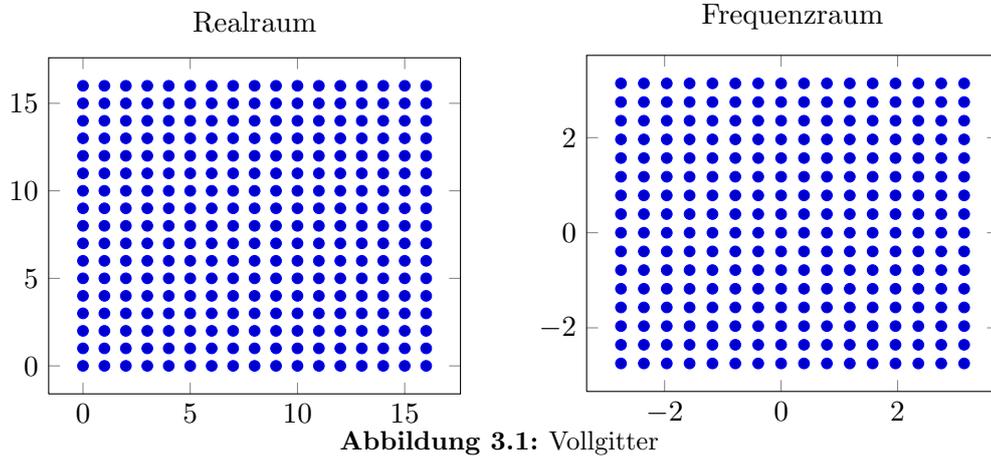
$$\mathcal{I}_n u(\mathbf{x}) := \sum_{|\mathbf{l}|_1 \leq n} \sum_{\mathbf{q} \in I_{\mathbf{l}}} d_{\mathbf{l}\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{l}\mathbf{q}}(\mathbf{x}) \quad (3.21)$$

betrachtet. Außerdem kann von der hierarchischen Darstellung (3.21) in die nodale Darstellung

$$\mathcal{I}_n u(\mathbf{x}) = u_n(\mathbf{x}) = \sum_{\boldsymbol{\omega} \in S'_n} a_{\boldsymbol{\omega}} e^{i\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.22)$$

gewechselt werden. Zu beachten ist allerdings, dass dies nur auf den Dünngitterpunkten geschieht und das die Fourierkoeffizienten  $a_{\boldsymbol{\omega}}$  nicht den entsprechenden Fourierkoeffizienten  $c_{\mathbf{n}\mathbf{k}}$  des Vollgitters entsprechen. Ein Dünngitter hat  $O(N \log(N)^{d-1})$  Stützstellen und das Vollgitter hingegen  $O(N^d)$ . Dieser Sachverhalt soll nun mit den folgenden Abbildungen verdeutlicht werden, wobei hier ein Gebiet der Größe  $[0, 16]^2$  diskretisiert wird.

Hierbei ist sowohl der Real- als auch der Frequenzraum im Vollgitter Abb. 3.1 und Dünngitter Abb. 3.2 abgebildet. Wir sehen bei beiden Räumen sehr deutlich, dass viel weniger Funktionsauswertungen mit dem Dünngitter benötigt werden, wobei jeder blaue Punkt einer Stützstelle beziehungsweise einer Funktionsauswertung an diesem Punkt entspricht. Um den Dünngitteransatz



verfolgen zu können werden stärkere Voraussetzungen an die Glattheit der Anfangswerte gemacht, wobei die Details in [5] nachgelesen werden können. Während für die meisten Probleme auf dem vollen Gitter  $u \in H^2$  genügt, so muss für das Dünngitter  $\|u\|_2 = \left\| \frac{\partial^{2d} u}{\partial x_1^2 \dots \partial x_d^2} \right\|_2 < \infty$  gelten, d.h. die gemischten Ableitungen müssen beschränkt sein.

Es sei  $N = 2^n - 1$  die Anzahl der Stützstellen in eine Raumrichtung in einem Vollgitter. Durch die Einschränkungen des Dünngitters ergibt sich auch eine Verschlechterung der Darstellungsgenauigkeit der Funktion. So hat man bei einem Vollgitter eine Genauigkeit von  $O(N^{-2})$ , bei einem Dünngitter hingegen nur von  $O(N^{-2} \log(N)^{d-1})$ .

### 3.4 Adaptives Gitter

#### 3.4.1 Motivation

Der Nachteil des klassischen Dünngitteransatzes besteht darin, dass alle Dimensionen in gleichem Maße und einzig vom Diskretisierungslevel abhängig verfeinert werden. Das bedeutet, dass das Gitter unabhängig vom betrachteten Problem generiert wird. Dadurch werden Funktionen, bei welchen es starke Unterschiede in der Dimensionsrichtung gibt, nicht gesondert betrachtet. Es ist denkbar, dass eine Funktion in eine Richtung stark oszilliert und in die andere Richtung sehr glatt ist, wobei wir hier glatt im Gegensatz zu den vorherigen Abschnitten im Sinne von nicht oszillierend verwenden. Für eine verwendbare Approximation werden also in eine Richtung viel mehr Freiheitsgrade als in die andere benötigt. Deshalb können Vorteile wie beispielsweise besonders hohe Glattheitseigenschaften in einer Dimension durch den regulären Dünngitteransatz nicht genutzt werden.

Der *adaptive Gitteransatz*, welcher in [6] vorgestellt wird, ist speziell für solche Probleme konzipiert worden. Hierbei werden die Auswertungspunkte der betrachteten Funktion angepasst, wobei die jeweiligen Dimensionen unterschiedliche Diskretisierungslevel erhalten können. Der Vorteil liegt darin, dass die Richtungen, in welchen das betrachtete Problem glatt ist weniger Freiheitsgrade erhalten als diejenigen, in welche es oszilliert. Dies schränkt einerseits den Rechenaufwand ein und erhöht andererseits die Genauigkeit der Diskretisierung.

Folgend wollen wir die formale Definition für die adaptive Gittergenerierung betrachten und zusätzlich die Konstruktion eines adaptives Auswertungsmusters vorstellen.

#### 3.4.2 Verallgemeinerte Dünngitter

Wir betrachten weiterhin die Gittergenerierung und die Basisfunktion wie bei einem klassischen Dünngitter, welches bereits in dieser Arbeit eingeführt worden ist. Wir müssen einzig die Indexmenge verändern, die wir benutzen werden. Zu beachten ist allerdings, dass die Dimensionen nicht völlig unabhängig voneinander diskretisiert werden können, was an der Konstruktion der hierarchischen Basis liegt. Dieser Zusammenhang wird durch Abbildung 3.3 veranschaulicht, denn zur Berechnung eines neuen Levels werden immer die vorhergehenden benötigt. Damit dies bei der Konstruktion des Gitters sichergestellt wird, definieren wir, dass eine Indexmenge  $\mathcal{I}$  *erreichbar* ist, wenn  $\forall \mathbf{k} \in \mathcal{I}$

$$\mathbf{k} - \mathbf{e}_j \in \mathcal{I} \quad \text{für } 1 \leq j \leq d, k_j > 1$$

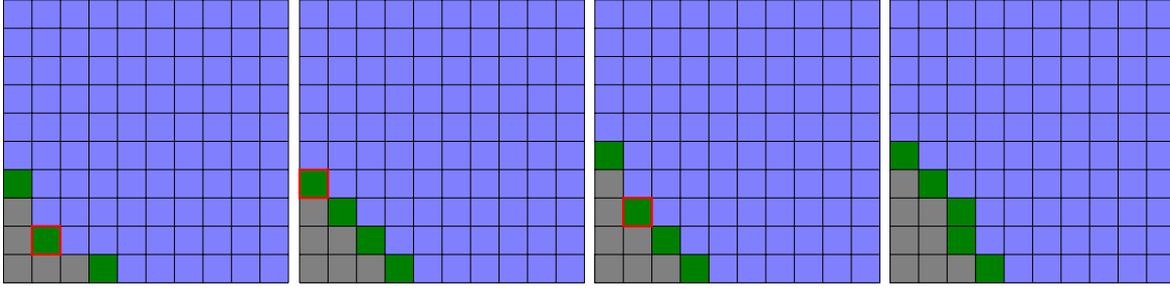


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung der Indexgenerierung bei dem adaptiven Gitter.

gilt.  $e_j$  ist nach üblicher Konvention der  $j$ -te Einheitsvektor. Hiermit können wir die *verallgemeinerte Dünngitterkonstruktion* als

$$\mathcal{I}^{adaptiv} := \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}} \sum_{\mathbf{q} \in I_{\mathbf{k}}} d_{\mathbf{l}, \mathbf{q}} \chi_{\mathbf{l}, \mathbf{q}}(\mathbf{x}) \quad (3.23)$$

für eine zulässige Indexmenge  $\mathcal{I} \in \mathbb{N}^d$  definieren, wobei wir analog zum vorhergehenden Abschnitt mit  $d_{\mathbf{l}, \mathbf{q}}$  die hierarchischen Fourierkoeffizienten bezeichnen. An dieser Stelle erinnern wir erneut an die Tensorproduktstruktur der hierarchischen Basis  $\chi$ .

Sowohl das klassische Dünngitter als auch ein Vollgitter können so als Spezialfälle entstehen.

### 3.4.3 Konstruktion

In diesem Abschnitt wollen wir eine Möglichkeit zur Konstruktion eines adaptiven Gitters betrachten. Der Aufbau geschieht in Abhängigkeit einer gewählten Fehlerschranke  $\epsilon$ . Hiernach wird entschieden, ob Indexbereiche hinzugefügt werden müssen oder nicht. Motiviert wird dies durch den Abfall der Fourierkoeffizienten  $d_{\mathbf{l}, \mathbf{q}}$ , die bei höheren Leveln immer kleiner werden. Wir fügen einzig diejenigen Koeffizienten hinzu, die zu einer erreichbaren Indexmenge führen und zusätzlich größer als  $\epsilon$  sind.

Wir betrachten zwei Indexmengen, die alte Indexmenge  $\mathcal{O}$  und die aktive Indexmenge  $\mathcal{A}$ . In Abbildung 3.3 ist die alte Indexmenge in grau und die aktive in grün dargestellt. Begonnen wird mit  $\mathcal{A} = \{\mathbf{i}\} = \{(1, \dots, 1)\}$ . In der aktiven Indexmenge wird die Indexkombination mit dem größten Fourierkoeffizient ausgewählt, welcher in Abb.3.3 rot umrandet ist. Dafür werden in alle Raumrichtungen die Nachbarn berechnet, wobei wir dann die aktive Indexmenge zur alten hinzufügen. Um die Erreichbarkeit der Indexmenge zu garantieren, dürfen die Nachbarn nur aus Indizes von  $\mathcal{A}$  berechnet werden. In Abb. 3.3 kann deswegen der rechte Nachbar von dem im zweiten Schaubild ausgewählten Index nicht berechnet werden, was in der danach folgenden Abbildung deutlich wird. Hierbei müsste auf die aktive statt auf die alte Indexmenge zugegriffen werden.

Dies wird nun solange durchgeführt, bis der größte Fourierkoeffizient unterhalb der gewählten Fehlerschranke  $\epsilon$  liegt.



## 4 Strang-Splitting

### 4.1 Einleitung

Im vorhergehenden Kapitel beschäftigten wir uns mit der Ortsdiskretisierung unseres Problems durch unterschiedliche Gitteransätze. Da wir uns darüber hinaus mit der zeitabhängigen Schrödingergleichung beschäftigen, spielt für uns auch die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung eine wichtige Rolle. Aus diesem Grund führen wir in diesem Kapitel ein iteratives Verfahren für die Zeitintegration ein.

In der Literatur werden verschiedene Lösungsverfahren hierfür eingeführt. So beschreibt [15] beispielsweise die Chebyshev Methode und die Lanczos Methode. Der Vorteil hierbei ist, dass beide lediglich Matrix-Vektor-Produkte mit dem Hamiltonoperator benötigen. Allerdings stellen diese starke Voraussetzungen an die Zeitschrittweite  $\tau$ , welche strikt abhängig von der Norm des Hamiltonoperators ist. Aus diesem Grund werden wir hier den sogenannten *Strang-Splitting*-Ansatz verfolgen, der viel schwächere Voraussetzungen benötigt. Bedingungen werden lediglich an die Beschränktheit des Potentials  $V$  gestellt.

Das Strang-Splitting, vgl. [11] und [8], löst dabei das Anfangswertproblem:

$$u' = (A + B)u, \quad u(0) = u_0 \quad (4.1)$$

indem mit

$$u^{m+1} = e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u^m \quad (4.2)$$

iterativ eine Lösung für  $u^m := u(m\tau)$  berechnet wird, wobei  $\tau$  die Zeitschrittweite bezeichnet. Zum Lösen der Schrödingergleichung mit der betrachteten Problemstellung eignet sich dieses Verfahren besonders gut, da die Operatoren  $A$  und  $B$  genau so gewählt werden können, dass die betrachtete Ortsdiskretisierung darin einfließt. Wie wir im Folgenden sehen werden, haben wir lediglich Voraussetzungen an unser Potential  $V$ , die vergleichsweise schwach sind. [8] erläutert dieses Verfahren sehr ausführlich für ein zeitunabhängiges Potential  $V$  und beweist eine Reihe wichtige Fehlerabschätzungen. Ein fundamentaler Vorteil dieser Methode liegt darin, dass sie sich leicht auf ein zeitabhängiges Potential  $V(x, t)$  erweitern lässt, vgl.[15].

Betrachten wir nun unsere Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad \text{mit} \quad H = T + V,$$

wobei wir  $-\frac{1}{2}\Delta = T$  substituiert haben, so führt dies zu folgender Iteration mit dem zeitabhängigen Potential  $V(t) = V(\cdot, t)$

$$\psi_{n+1} = e^{-i\frac{\tau}{2}V(t_{n+1})} e^{-i\tau T} e^{-i\frac{\tau}{2}V(t_n)} \psi_n. \quad (4.3)$$

Diese Gleichung und die dazugehörige Fehlerabschätzung ist das zentrale Ergebnis dieses Kapitels.

## 4.2 Motivation

Wir wollen zunächst die Formel (4.2) als Lösungsverfahren für unser betrachtetes Anfangswertproblem (4.1) motivieren, wobei wir zunächst davon ausgehen, dass die beiden Operatoren  $A$  und  $B$  zeitunabhängig sind.

$$\begin{aligned}
 & \frac{du(x, \tau)}{d\tau} = (A + B)u(x, \tau) \\
 \iff & \frac{du(x, \tau)}{u(x, \tau)} = (A + B)d\tau \\
 \text{beidseitige Integration} & \iff \int_0^t \frac{du(x, \tau)}{u(x, \tau)} = \int_0^t (A + B)d\tau \\
 \iff & \ln(u(x, t)) - \ln(u(x, 0)) = (A + B)t \\
 \iff & \frac{u(x, t)}{u(x, 0)} = e^{(A+B)t} \\
 \iff & u(x, t) = e^{(A+B)t}u_0(x)
 \end{aligned}$$

Statt des obigen Ansatzes benutzen wir allerdings die Iterationsvorschrift (4.2), was sich damit motivieren lässt, dass

$$\begin{aligned}
 u^{m+1} &= e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u^m \\
 &= e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u^{m-1} \\
 &= e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u^{m-1} \\
 &= e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau(A+B)} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} u^{m-1}
 \end{aligned}$$

gilt. Falls  $A$  und  $B$  kommutieren, führt dies wieder zu der obigen Form  $u(x, t) = e^{(A+B)t}u_0(x)$ . Um den Fehler, welcher durch diese Iterationsvorschrift gemacht wird, abschätzen zu können, definieren wir den Kommutator  $[A, B] = AB - BA$  und den wiederholten Kommutator  $[A, [A, B]] = A^2B - 2ABA + BA^2$ . Wir nehmen an, dass es nicht-negative  $\alpha$  oder  $\beta$  gibt, sodass

$$\|[A, B]v\| \leq c_1 \|(-A)^\alpha v\| \quad \forall v, \tag{4.4}$$

$$\|[A, [A, B]]v\| \leq c_2 \|(-A)^\beta v\| \quad \forall v, \tag{4.5}$$

Hierbei bedeutet  $\forall v$ , für alle  $v$  in einem geeigneten dichten Definitionsbereich, welcher in dem betrachteten Zusammenhang der Definitionsbereich von  $(-A)^\alpha$  beziehungsweise von  $(-A)^\beta$  ist.

Außerdem nehmen wir wie in [11] an, dass

$$\|e^{tA}\| \leq 1, \quad \|e^{tB}\| \leq 1, \quad \|e^{t(A+B)}\| \leq 1 \quad (t \geq 0)$$

gilt, da dies sonst durch lineare Transformationen erreicht werden kann, d.h. es wird  $u(t) \rightarrow e^{(\lambda+\mu)t}u(t)$  mit den zugehörigen Shifts  $A \rightarrow A + \lambda I$  und  $B \rightarrow B + \mu I$  reskaliert, wobei  $I$  die Einheitsmatrix bezeichnet und deswegen immer kommutiert.

Diese Annahmen führen zu folgender Fehlerabschätzung für den lokalen Fehler des *Strang-Splitting*-Verfahrens.

**Satz 4.2.1** (Lokaler Fehler).

(a) Mit den Annahmen (4.4) und  $\alpha \geq 0$ ,

$$\|e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} v - e^{(A+B)\tau} v\| \leq C_1 \tau^2 \|(-A)^\alpha v\| \quad \forall v. \quad (4.6)$$

$C_1$  hängt hier nur von  $c_1$  und  $\|B\|$  ab.

(b) Mit (4.4) und (4.5) und  $\beta \geq 1 \geq \alpha$  gilt

$$\|e^{\frac{1}{2}\tau B} e^{\tau A} e^{\frac{1}{2}\tau B} v - e^{(A+B)\tau} v\| \leq C_2 \tau \|(-A)^\beta v\| \quad \forall v, \quad (4.7)$$

wobei  $C_2$  nur von  $c_1, c_2$  und  $\|B\|$  abhängt.

Für den Beweis, der auf dem Prinzip der Variation der Konstanten basiert, verweisen wir auf [11]. Folglich konnten wir den lokalen Fehler einzig durch die Norm des Operators  $A$  beschränken. Mit dem obigen Satz lässt sich zusätzlich die folgende globale Fehlerabschätzung folgern.

**Satz 4.2.2** (Fehler des Strang-Splitting-Verfahrens). *Unter obigen Annahmen mit  $\alpha = 1$  und  $\beta = \frac{2}{3}$  kann der Fehler des Strang-Splittings durch*

$$\|u_n - u(n\tau)\| \leq C \tau^{\frac{2}{3}} \|u_0\| \quad (n \geq 1) \quad (4.8)$$

beschränkt werden.

Dies beschränkt den globalen Fehler und impliziert damit also auch eine Stabilität des Verfahrens.

### 4.3 Anwendung auf die Schrödingergleichung

Das oben beschriebene Verfahren lässt sich gut auf unsere Problemstellung, also die Schrödingergleichung, anwenden. Wir beziehen uns jetzt auf die in Kapitel 3.3 eingeführten Notationen und betrachten das durch die Kollokationsmethode diskretisierte Gitters. Dabei wird eine Differentialgleichung approximativ dadurch gelöst, dass diese in einem endlichdimensionalen Raum auf endlich vielen Punkten gelten muss [14]. Daraus ergibt sich die diskretisierte Wellenfunktion

$$\psi_n(x) = \sum_{|\mathbf{l}| \leq n} \sum_{\mathbf{q} \in I_{\mathbf{l}}} d_{\mathbf{l}\mathbf{q}}(t) \chi_{\mathbf{l}\mathbf{q}}(x) = \sum_{\boldsymbol{\omega} \in S'_n} a_{\boldsymbol{\omega}}(t) e^{i\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{x}}.$$

An dieser Stelle wollen wir nochmal daran erinnern, dass die nodalen Koeffizienten  $a_{\boldsymbol{\omega}}$  des Dünngitters nicht mit den nodalen Koeffizienten  $c_{\mathbf{n}\mathbf{k}}$  auf dem vollen Gitter übereinstimmen.

Für die Wellenfunktion  $\psi$ , die Lösung der Schrödingergleichung, muss

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \psi + V \psi, \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \text{ und } t > 0 \quad (4.9)$$

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = g(\mathbf{x}), \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \quad (4.10)$$

auf den Dünngitterpunkten  $\mathbf{x} \in S_n$  gelten.

Nun müssen wir unsere Schrödingergleichung so umschreiben, dass sie auch auf dem Dünngitter

genau die gewünschte Strang-Splitting-Form besitzt, damit wir das Verfahren anwenden können. Hierzu betrachten wir den Raum

$$\mathbb{V}_n = \text{span}\{e^{i\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{x}}, \boldsymbol{\omega} \in S'_n\}.$$

Wir definieren den Operator  $\mathcal{I}_n : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{V}^n$ , welcher die Interpolation auf den Dünngitterpunkten ausübt. Wir können diesen als eine Komposition aus dem Operator  $\mathcal{R}_n$ , der die Restriktion der Funktion auf die Dünngitterpunkte vornimmt, und dem Operator  $\mathcal{Q}_n$ , der die Dünngitterinterpolation  $\psi_n \in \mathbb{V}_n$  ausführt, verstehen, d.h.  $\mathcal{I}_n = \mathcal{Q}_n \mathcal{R}_n$ .

Demnach lässt sich unser Problem unter Einbeziehung der Ortsdiskretisierung als

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \psi_n + \mathcal{Q}_n \text{diag}(\mathcal{R}_n V) \mathcal{R}_n \psi_n, \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \text{ und } t > 0 \quad (4.11)$$

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \mathcal{I}_n g(\mathbf{x}), \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \quad (4.12)$$

schreiben. Dabei gilt

$$\mathcal{I}_n(V\psi_n) = \mathcal{Q}_n \mathcal{R}_n(V\psi_n) = \mathcal{Q}_n \text{diag}(\mathcal{R}_n V) \mathcal{R}_n \psi_n$$

für das Potential, was einer Beschränkung auf das interpolierte Dünngitter entspricht. Wir bezeichnen jetzt  $\mathcal{V}_n(t) := \text{diag}[(V(\mathbf{x}, t))_{\mathbf{x} \in S'_n}]$  und  $\mathcal{F}_n$  als die diskrete Fouriertransformation auf dem Dünngitter  $S'_n$ . Außerdem bezeichnet  $\hat{\psi}'_n := (a_{\boldsymbol{\omega}})_{\boldsymbol{\omega} \in S'_n}$  den Vektor der Fourierkoeffizienten. Die obige Gleichung (4.11) kann also zu

$$i \hat{\psi}'_n{}' = \frac{1}{2} \mathcal{D}_n^2 \hat{\psi}'_n + \mathcal{W}_n(t) \hat{\psi}'_n, \quad \text{für } t > 0 \quad (4.13)$$

$$\hat{\psi}'_n(0) = \hat{g} \quad (4.14)$$

umgeschrieben werden. Daraus resultiert eine Iteration, deren Implementierung zu einer Lösung führt, die sowohl in der Zeit als auch im Ort diskret ist. Es wird nun nacheinander  $\hat{\psi}_n^m = (a_{\boldsymbol{\omega}})_{\boldsymbol{\omega} \in S'_n}^m$  durch die folgende Iterationsgleichung

$$\hat{\psi}_n^{m+1} = e^{-\frac{i}{2} \tau \mathcal{W}_n(t_{m+1})} e^{-i \frac{\tau \mathcal{D}_n^2}{2}} e^{-\frac{i}{2} \tau \mathcal{W}_n(t_m)} \hat{\psi}_n^m$$

berechnet. Besonders die Möglichkeit auch auf einem Dünngitter eine Fouriertransformation durchführen zu können spielt hier eine Rolle. So lässt sich  $e^{-\frac{i}{2} \tau \mathcal{W}_n(t_m)} = \mathcal{F}_n \text{diag}[e^{-\frac{i}{2} \tau \mathcal{V}(x, t_m)}] \mathcal{F}_n^{-1}$  implementieren, was eine Auswertung von  $\mathcal{V}$  im Realraum ermöglicht. Durch die Rücktransformation bleibt man allerdings im Fourierraum, was die Auswertung des Laplaceoperators erheblich vereinfacht. Die obigen Ergebnisse führen dann auf Algorithmus 3 als Lösung des zeitabhängigen Problems.

---

**Algorithmus 3:** Strang-Splitting

---

In jedem Zeitschritt  $t^n$  wird die errechnete Approximation durch den in  $t^{n+1}$  überschrieben

Multiplizieren:  $\psi_j := e^{-i \frac{\tau}{2} \mathcal{W}(x_j, t_m)} \psi_j$  für  $j \in \{1 - 2^{n-1}, \dots, 2^{n-1}\}$

FFT:  $\psi := \mathcal{F}_K \psi$

Multiplizieren:  $\psi_k := e^{-i \frac{\tau}{2} \mathcal{D}(x_k)} \psi_k$  für  $k \in \{1 - 2^{n-1}, \dots, 2^{n-1}\}$

inverse FFT:  $\psi := \mathcal{F}_K^{-1} \psi$

Multiplizieren:  $\psi_j := e^{-i \frac{\tau}{2} \mathcal{W}(x_j, t_{m+1})} \psi_j$  für  $j \in \{1 - 2^{n-1}, \dots, 2^{n-1}\}$

---

Ein weiterer Vorteil des *Strang-Splitting*-Verfahrens liegt in seiner Zeitreversibilität. Wird zu Anfang  $\psi_{n+1}$  betrachtet und dann mit negativem Zeitschritt  $-\tau$  Algorithmus 3 angewendet, so führt dies wieder auf die vorhergehende Approximation  $\psi_n$ .



## 5 Numerische Ergebnisse

Dieses Kapitel behandelt die Implementierung der bereits erläuterten Ansätze zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung, also eines Eigenwertproblems. Die beschriebene Theorie wird mit Hilfe bereits vorhandener Bibliotheken etabliert. Hierbei ist die am Institut für Numerische Simulation entwickelte HCFFT-Bibliothek [16], welche die effektive Fouriertransformation auf dünnen Gittern bewerkstelligt, entscheidend. Die theoretischen Grundlagen dafür befinden sich in [9], worauf auch unsere Grundlagen zum Dünngitteransatz basieren. Zusätzlich wird zur Lösung des Eigenwertproblems die *SLEPc*-Bibliothek genutzt. Wir betrachten zwei von Jan Hamackers geschriebene Programme [16], welche die Schrödingergleichung auf einem klassischen Dünngitter und einem adaptiven Gitter lösen. Diese werden wir an unsere Problemstellung anpassen und die zeitliche Entwicklung des Strang-Splitting-Verfahrens hinzufügen.

Abschließend werden die verschiedenen Lösungsansätze durch numerische Beispiele ausgewertet, was die theoretischen Ergebnisse verdeutlichen und auf eventuelle Probleme bei der Implementierung anschaulich hinweisen wird. Das wichtigste Ergebnis ist hierbei der Konflikt zwischen einer genauen und einer schnellen Lösung. Schnelligkeit lässt sich im Allgemeinen nur durch eine geringere Genauigkeit der Näherung erreichen. Hierbei ist die wichtigste Aufgabe das Verfahren so zu wählen, dass möglichst hohe Genauigkeit bei angemessenem Rechenaufwand erreicht wird, welcher anhand der Anzahl der Freiheitsgrade bestimmt wird.

Im Folgenden gehen wir sowohl auf zeitunabhängige als auch auf zeitabhängige Potentiale ein und wollen sowohl die Diskretisierung im Ort als auch die zeitliche Entwicklung betrachten.

### 5.1 Implementierung

#### 5.1.1 HCFFT

Die *HCCFT*-Bibliothek (Hyperbolic Cross Fast Fourier Transformation) kann durch die Eingabe bestimmter Parameter, wie der Dimension, dem gewünschten Diskretisierungslevel, der Wahl eines Voll- oder Dünngitters, dieses entsprechend konstruieren und dann eine Funktion auf diesem Dünngitter auswerten. Entscheidend ist hierbei die Möglichkeit, auch auf einem dünnen Gitter eine schnelle Fouriertransformation ausführen zu können. Dieses wird, wie bereits erläutert, mit einer hierarchischen Fourierbasis konstruiert, wodurch alle beschriebenen und benötigten Operationen durch die *HCCFT*-Bibliothek ermöglicht werden.

Außerdem lässt sich unter Verwendung dieser Bibliothek auch ein adaptives Gitter nutzen. Hierbei werden nur diejenigen Koeffizienten bei der Konstruktion des Gitters betrachtet, deren Wert größer als eine gewählte Fehlerschranke  $\epsilon$  ist. Dies ist eine Verbesserung, da nur diejenigen Punkte benutzt werden, welche tatsächlich zu einem relevanten Informationsgewinn führen. Insbesondere wird über eine Reduktion des Gitters in Abhängigkeit des betrachteten Problems entschieden. Dies bedeutet, dass das Gitter keine vordefinierte und ausschließlich vom Level abhängige Form besitzt, sondern sich individuell an das betrachtete Problem anpasst.

### 5.1.2 SLEPc

Um die Schrödingergleichung zu lösen, muss ein Eigenwert und Eigenvektor zu einer Matrix, die aus den Potentialen und der kinetischen Energie gebildet wird, gelöst werden. Dies wurde mithilfe der *SLEPc*-Bibliothek in unserem Programmcode implementiert. *SLEPc*[10], *Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations*, ist eine Bibliothek zum Lösen von großen Eigenwertproblemen dünnbesetzter Matrizen mit Parallelrechnern. SLEPc baut auf den PETSc-Routinen [2] auf. PETSc, Portable Extensive Toolkit for Scientific Computation, ist eine Bibliothek zur Lösung partieller Differentialgleichungen, wobei dies auf MPI, *Message Passing Interface*, eine Bibliothek für parallele Programmierung, zugreift. Das bedeutet, dass die Lösung durch Berechnungen mit Parallelrechner gefunden werden kann.

SLEPc wurde speziell zur Lösung dünnbesetzte Matrizen entwickelt, wobei sowohl hermitesche als auch unhermitesche Matrizen betrachtet werden können.

In einer Vielzahl von Anwendungen ist nur ein bestimmter Eigenwert von Bedeutung, beispielsweise der Kleinste oder der Größte. SLEPc stellt Werkzeuge bereit, so dass nur dieser spezielle Eigenwert und der dazugehörigen Eigenvektor berechnet werden. Somit kann der Rechenaufwand verringert werden. Wir interessieren uns in unserer Anwendung nur für den Realteil des kleinsten Eigenwerts, also eines Energieeigenwerts des betrachteten Systems.

### 5.1.3 Verwendete Programme

Dieser Arbeit liegen zwei von Jan Hamaekers geschriebene Programme [16] zugrunde. Diese wurden zur Lösung der Schrödingergleichung erstellt und greifen hierzu auf die oben bereits beschriebenen Bibliotheken zu. Der Aufbau unterscheidet sich lediglich in dem verschiedenen Gitteraufbau, wobei einmal ein klassisches dünnes- bzw. volles Gitter und bei dem anderen ein adaptives Gitter durch Anwendung von HCFFFT-Routinen erstellt wird. Bei dem anderen Programm hingegen wird ein adaptives Gitter auch mittels der HCFFFT-Bibliothek erstellt. Dies dient als Ortsdiskretisierung der Schrödingergleichung.

Auf dem erstellten Gitter wird anschließend das Potential benutzt und die Schrödingergleichung als Eigenwertproblem durch Anwendung der *SLEPc*-Routinen numerisch berechnet. Als Ergebnis wird sowohl ein Eigenwert als auch der zugehörige Eigenvektor zu dem betrachteten Potential berechnet.

Im Zuge dieser Arbeit wurde der Programmcode um die Strang-Splitting-Iteration erweitert. Diese benutzt den bereits gelösten Eigenvektor als Startwert, um dessen Entwicklung in der Zeit mit einer fest gewählten Zeitschrittweite, die Wahl erfolgt hierbei beliebig, zu berechnen.

Die Ergebnisse dieser Programme werden im Folgenden anhand unterschiedlicher numerischer Beispiele analysiert, um die bereits erläuterten theoretischen Ansätze zu veranschaulichen.

## 5.2 Numerische Beispiele

Die bereits beschriebene Theorie lässt sich nun anhand verschiedener Beispiele veranschaulichen. Hierzu betrachten wir das bereits erläuterte Ausgangsproblem (1.1). An dieser Stelle wollen wir nochmal an das betrachtete Potential

$$V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M v_j^{en}(\|x_i - R_j\|) + \sum_{i,j} v^{ee}(\|x_i - x_j\|) + \sum_{i=1}^N V_F(x_i, t)$$

erinnern, wobei die Kernpositionen mit  $R_1, \dots, R_M$  bezeichnet werden. Das Elektron-Kern-Coulomb-Potential wird als

$$v_j^{en}(r) = \frac{Z_j}{\sqrt{r^2 + a_j^2}}$$

und das Elektron-Elektron Coulomb-Potential als

$$v^{ee}(r) = \frac{Z_{ee}}{\sqrt{r^2 + a_e^2}}$$

mit  $Z_{ee} = 1$  gesetzt.  $r$  bezeichnet hier je nach betrachtetem Potential den Kern-Elektron- oder den Elektron-Elektron-Abstand, das bedeutet entweder  $r = \|x_i - R_j\|$  oder  $r = \|x_i - x_j\|$ . Der in dieser Arbeit verfolgte Ansatz zeichnet sich dadurch aus, dass wir statt eines dreidimensionalen Problems ein eindimensionales betrachten, wodurch wir je betrachtetem Partikel zwei Dimensionen sparen und so das Problem des *Fluchs der Dimension* verringern. Allerdings wird auch nur ein modifiziertes Problem gelöst.

Das  $Z_j$ , welches einem Modellparameter für die Kernladung entspricht, wurde dabei mittels einer Minimierung durch eine GSL-Routine so gewählt, dass der errechnete Eigenwert, also die Lösung des eindimensionalen Eigenwertproblems, möglichst demjenigen des dreidimensionalen Problems entspricht, welches durch experimentelle Versuche verifiziert wurde.

Unsere Analyse werden wir hierbei mit einem zeitunabhängigen Potential beginnen, indem wir zunächst den zeitabhängigen Laserterm  $V_F$  vernachlässigen. Zunächst werden die Elektronen als eindimensionale Teilchen betrachtet und wir wenden erst den normalen Vollgitteransatz und dann einen klassischen Dünngitteransatz an. Anschließend wird der klassische Dünngitteransatz auf zwei Dimensionen erweitert. Schließlich werden wir auf das eindimensionale Potential den adaptiven Gitteransatz anwenden. In jedem dieser Beispiele betrachten wir auch die zeitliche Entwicklung der Eigenfunktionen. Dies wird durch eine *Strang-Splitting*-Integration berechnet, wobei die theoretischen Grundlagen bereits im vierten Kapitel eingeführt worden sind. Da wir ein zeitunabhängiges Potential betrachten, darf der Eigenvektor sich prinzipiell nicht verändern, sondern darf aufgrund numerischer Rechenungenauigkeiten nur leicht schwanken. Physikalisch lässt sich dies damit erklären, dass die Betrachtung eines zeitunabhängigen Potentials keine Auswirkung auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen hat, was wir detailliert im Kapitel *Physikalischer Hintergrund* erklärt haben. Um die Genauigkeit unserer Diskretisierung zu veranschaulichen, wollen wir genau diese Überlegung nachprüfen. Zu diesem Zweck soll die Veränderung der aus der simulierten Wellenfunktion resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilung betrachtet werden. Diese entsteht, wenn zu jedem Eintrag des berechneten Eigenvektors, also der Wellenfunktion, das Betragsquadrat gebildet wird. Es wird also  $\psi\bar{\psi}$  betrachtet. Wir werden sehen, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Glockenkurve entspricht. Andererseits wird aber auch die Veränderung der  $H_1$ -Seminorm betrachtet, da auch diese sich bei einem System ohne äußere Auswirkungen nicht verändern darf. Daraus folgt, dass sich Veränderungen, welche sich in beiden Fällen ergeben, auf Ungenauigkeiten in der Diskretisierung zurückführen lassen und dies demnach ein gutes Maß für die Qualität der betrachteten Lösungsansätze ist. Im zweiten Teil dieses Kapitels wollen wir uns die Ergebnisse für ein zeitabhängiges Potential ansehen, indem nun auch der Laserterm betrachtet wird. Dafür werden wir die in dem zeitunabhängigen Absatz entstandenen Ergebnisse nutzen und deswegen eine Zeitintegration nur noch

auf einem Dünngitter und einem adaptiven Gitter betrachten, was besonders Vor- aber auch Nachteile beider Verfahren in den Vordergrund stellt.

### 5.2.1 Zeitunabhängige Potentiale

#### Beispiel 1: Klassischer Vollgitteransatz

Zu diesem Zweck betrachten wir das Heliumatom, welches zwei Elektronen auf den Orbitalen besitzt. Es folgt also nach dem Wasserstoffatom als zweit einfachstes betrachtbares Atom und wir wenden unsere Verfahren beispielhaft darauf an. Diese modellhaften Sachverhalte lassen sich dann für beliebige Atome und Moleküle verallgemeinern.

Im Folgenden sehen wir uns das Verhalten des simulierten Eigenwerts an. Der Energieeigenwert des Heliumatoms beträgt  $\lambda = -2,903693775$ , was in [3] nachgelesen werden kann.

Das Auswertungsmuster des Vollgitters haben wir bereits in Abbildung 3.1 betrachtet und analysiert. Deshalb wollen wir an dieser Stelle lediglich darauf verweisen. Den numerisch simulierten und berechneten Eigenwert setzten wir mit den betrachteten Diskretisierungsleveln und den zugehörigen Freiheitsgraden *DOF* (Degrees Of Freedom) in Zusammenhang. Wir bezeichnen  $\lambda$  als den errechneten Eigenwert und  $\Delta\lambda$  als die Differenz zwischen dem im aktuellen Level berechneten Eigenwert und dem im vorhergehenden Level. Beginnen werden wir nun mit den Berechnungen auf dem vollen Gitter. Dies führt zu den Ergebnissen, die in Abbildung 5.1 aufgeführt sind.

LEVEL	<i>Dof</i>	$\lambda$	$\Delta\lambda$	$\frac{\Delta\lambda^{(n)}}{\Delta\lambda^{(n-1)}}$
1	4	$4.808207 \cdot 10^{-1}$	$4.808207 \cdot 10^{-1}$	$0.000000 \cdot 10^0$
2	16	$6.595883 \cdot 10^{-1}$	$1.787675 \cdot 10^{-1}$	$2.689642 \cdot 10^0$
3	64	$-3.239419 \cdot 10^0$	$3.899007 \cdot 10^0$	$4.584950 \cdot 10^{-2}$
4	256	$-2.927819 \cdot 10^0$	$3.115996 \cdot 10^{-1}$	$1.251288 \cdot 10^1$
5	1 024	$-2.903763 \cdot 10^0$	$2.405680 \cdot 10^{-2}$	$1.295266 \cdot 10^1$
6	4 096	$-2.903721 \cdot 10^0$	$4.187776 \cdot 10^{-5}$	$5.744528 \cdot 10^2$
7	16 384	$-2.903721 \cdot 10^0$	$1.718998 \cdot 10^{-10}$	$2.436172 \cdot 10^5$
8	65 536	$-2.903721 \cdot 10^0$	$1.570566 \cdot 10^{-11}$	$1.094509 \cdot 10^1$
9	262 144	$-2.903721 \cdot 10^0$	$3.009148 \cdot 10^{-12}$	$5.219303 \cdot 10^0$

**Abbildung 5.1:** Ausgabe bei der Berechnung des Energieeigenwerts beim Vollgitter.

Wir sehen, dass beim vollen Gitter bereits bei Level 6 und somit bei 4096 Freiheitsgraden ein sehr genaues Ergebnis erreicht wurde und sich hiernach der berechnete Eigenwert nur noch wenig verändert, nämlich nur ab der fünften Nachkommastelle. Wir betrachten nun die Fehlerentwicklung dieses Beispiels. Hierzu berechnen wir  $\epsilon$ , was sich als Differenz zwischen dem berechneten Eigenwert  $\lambda^{(n)}$  zu einem Level  $n$  und dem Eigenwert auf dem feinsten Gitter  $\lambda^{(max)}$  ergibt, also  $\epsilon = |\lambda^{(n)} - \lambda^{(max)}|$ , was in Abbildung 5.2 graphisch veranschaulicht wurde.

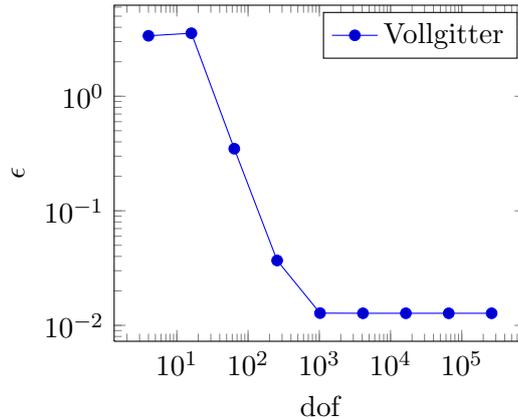


Abbildung 5.2: Fehleranalyse des Energieeigenwerts auf einem Vollgitter.

### Beispiel 2: Klassischer Dünngitteransatz

Die oberen Ergebnisse werden wir in diesem Abschnitt mit den gleichen Rechnungen, also bei Betrachtung des selben Potentials, auf einem klassischen Dünngitter vergleichen, um festzustellen, wieviel weniger Rechenaufwand das dünne Gitter benötigt und wie gut das Ergebnis anschließend noch ist. In Tabelle 5.3 ist schnell ersichtlich, dass für jedes Level viel weniger Freiheitsgrade genutzt werden.

LEVEL	DOF	$\lambda$	$\Delta\lambda$	$\frac{\lambda^{(n)}}{\lambda^{(n-1)}}$
1	3	$-2.060946 \cdot 10^0$	$2.060946 \cdot 10^0$	$0.000000 \cdot 10^0$
2	8	$1.229716 \cdot 10^0$	$3.290662 \cdot 10^0$	$6.263013 \cdot 10^{-1}$
3	20	$9.294377 \cdot 10^{-1}$	$3.002785 \cdot 10^{-1}$	$1.095870 \cdot 10^1$
4	48	$-4.247923 \cdot 10^0$	$5.177361 \cdot 10^0$	$5.799837 \cdot 10^{-2}$
5	112	$-3.520237 \cdot 10^0$	$7.276859 \cdot 10^{-1}$	$7.114829 \cdot 10^0$
6	256	$-3.018276 \cdot 10^0$	$5.019607 \cdot 10^{-1}$	$1.449687 \cdot 10^0$
7	576	$-2.978326 \cdot 10^0$	$3.995056 \cdot 10^{-2}$	$1.256455 \cdot 10^1$
8	1 280	$-2.915330 \cdot 10^0$	$6.299612 \cdot 10^{-2}$	$6.341749 \cdot 10^{-1}$
9	2 816	$-2.905573 \cdot 10^0$	$9.756054 \cdot 10^{-3}$	$6.457131 \cdot 10^0$

Abbildung 5.3: Ausgabe bei der Berechnung des Energieeigenwert beim Dünngitter.

Allerdings wird an diesem Beispiel auch die schlechtere Genauigkeit des Dünngitteransatzes deutlich. Haben wir mit dem vollen Gitter in Level 6 mit 4096 Freiheitsgraden bereits ein sehr gutes Ergebnis erreicht, so haben wir mit dem Dünngitter erst im 9. Level bei 2816 Freiheitsgraden ein vergleichbares Ergebnis, was allerdings immer noch nicht dem auf dem vollen Gitter entspricht. Das bedeutet also, dass trotz sehr hohen Diskretisierungsleveln noch ein merkbarer Fehler bleibt. Hierbei muss angemerkt werden, dass das Vollgitter im Level 6 trotzdem fast doppelt so viele Freiheitsgrade wie das Dünngitter im Level 9 verwendet, um die Funktion auszuwerten. Dies wollen wir anhand des Graphen in Abbildung 5.4 veranschaulichen, wobei hier die Freiheitsgrade gegen den Fehler  $\epsilon$ , welcher wie im vorigen Abschnitt durch  $\epsilon = |\lambda^{(n)} - \lambda^{(max)}|$

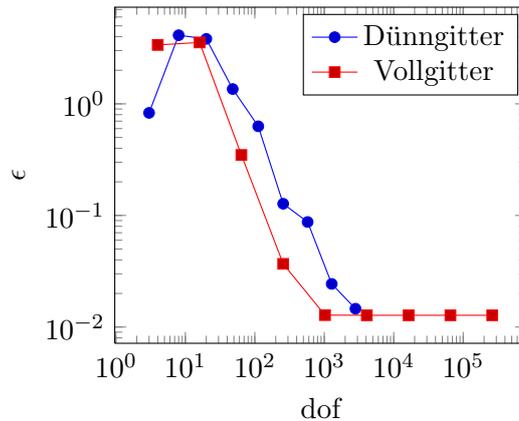


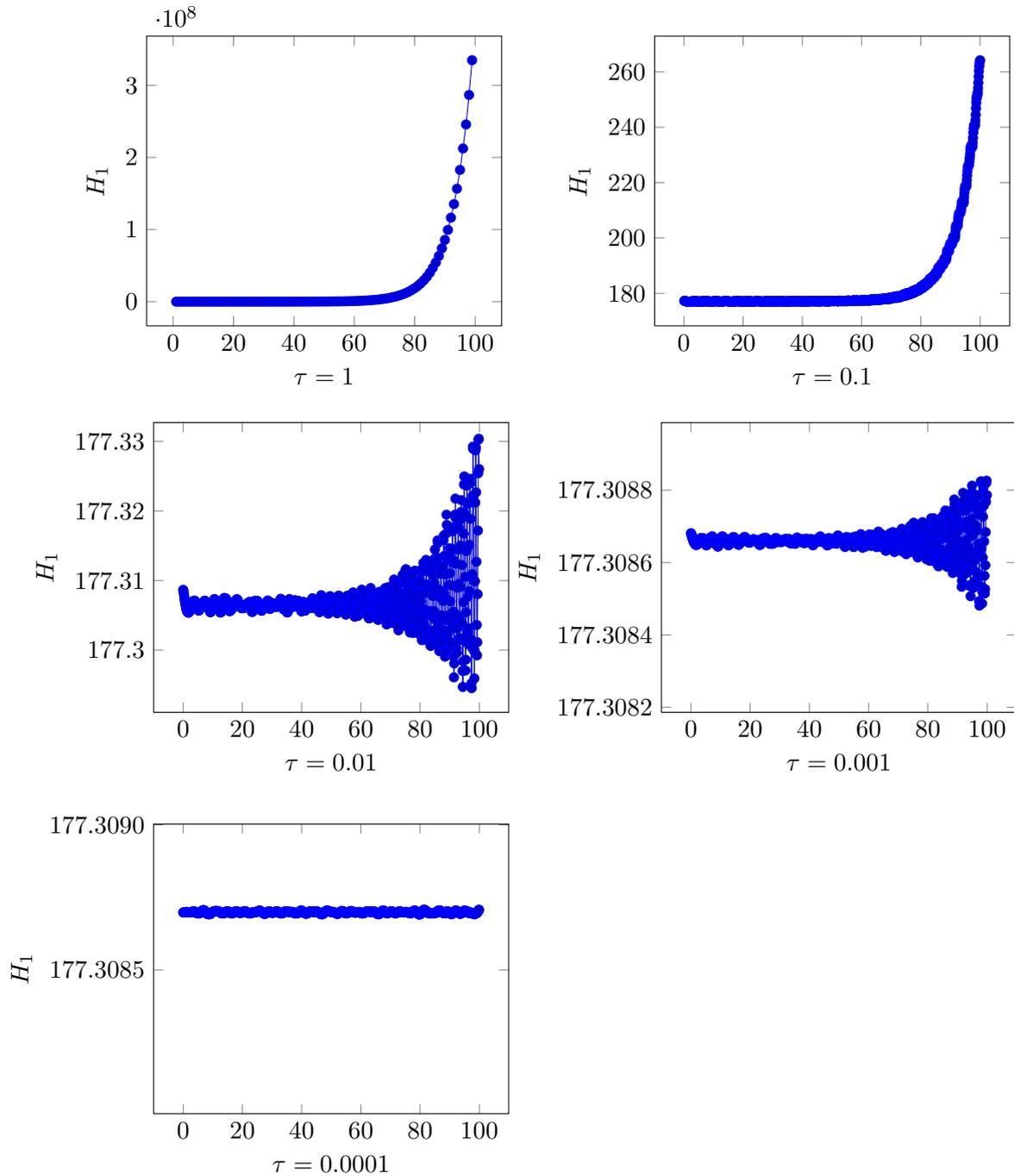
Abbildung 5.4: Fehleranalyse des Energieeigenwerts.

bestimmt wird, sowohl für die Ergebnisse auf dem Dünngitter als auch auf dem Vollgitter abgetragen wurden. Diese Ergebnisse verdeutlichen insbesondere, dass ein Dünngitteransatz nicht für beliebige Problemstellungen sinnvoll ist. Das so entstandene Auswertungsmuster unseres Dünngitters haben wir bereits in Abbildung 3.2 betrachtet.

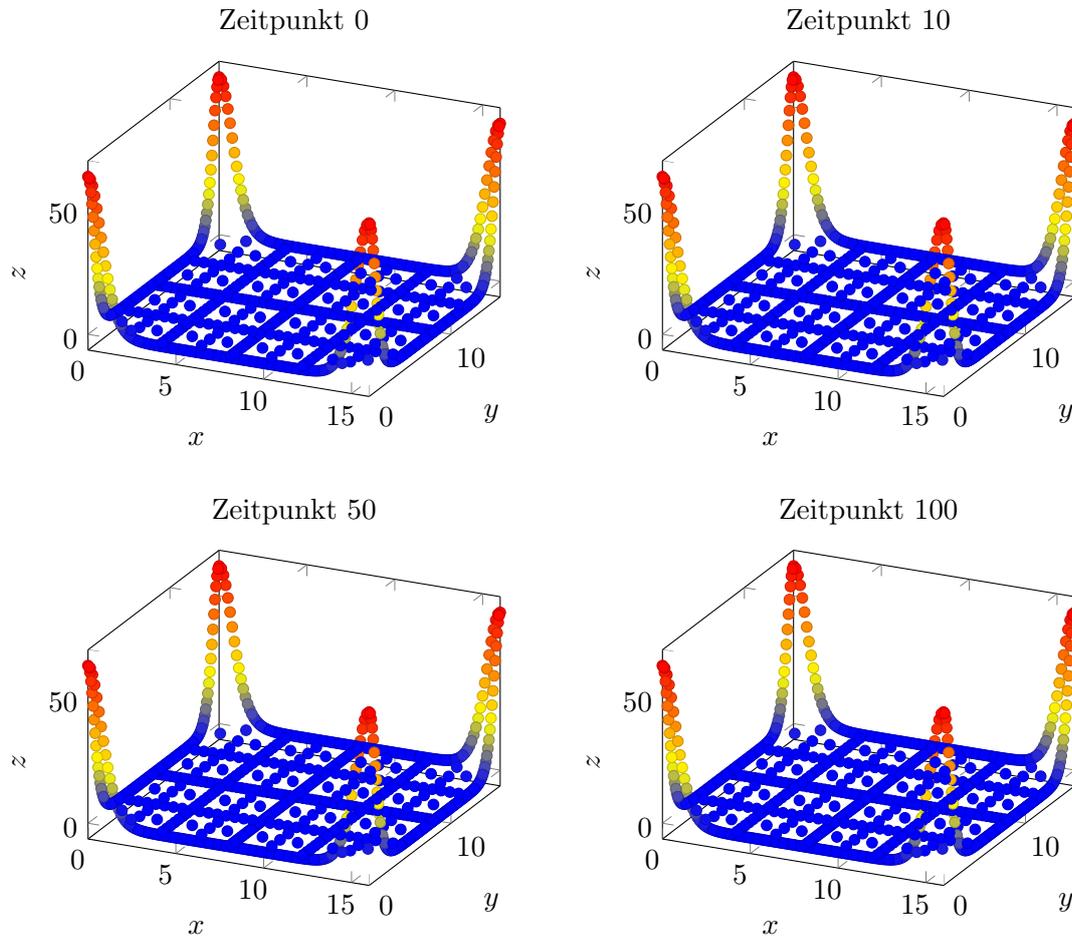
Nun wollen wir auch eine zeitliche Entwicklung für dieses Beispiel betrachten, was durch das Strang-Splitting-Verfahren implementiert wird. Insbesondere soll an diesem Beispiel die Notwendigkeit einer kleinen Zeitschrittweite gezeigt werden. Wir betrachten die Ausgabe, welche aus der Entwicklung des Eigenvektors besteht und das Verhalten der von uns betrachteten Norm. Abb. 5.5 zeigt hierbei das Verhalten der  $H_1$ -Norm im Zeitintervall  $t \in [0, 100]$  für fünf verschiedene Werte von  $\tau$ , wobei  $L = 7$  einheitlich als Referenzlevel gewählt wurde.

Abbildung 5.5 zeigt das Verhalten der  $H_1$ -Norm für  $t = 0, \dots, 100$  zu verschiedenen Zeitschrittweiten. Hier wird die Notwendigkeit einer kleinen Zeitschrittweite  $\tau$  zur Verkleinerung des numerischen Fehlers verdeutlicht, da bei einem großen  $\tau$  ein exponentieller Anstieg der  $H_1$ -Norm, also des numerischen Fehlers, erfolgt. Wie klein die Zeitschrittweite  $\tau$  tatsächlich gewählt werden muss, hängt allerdings von der Genauigkeit des betrachteten Verfahrens ab. Bei einer Zeitintegration auf einem klassischen Dünngitter ist die Wahl der Zeitschrittweite sehr klein, da hier auch der numerische Fehler vergleichsweise groß wird. Besonders bei den groben Zeitschritten von  $\tau = 1$ ,  $\tau = 0.1$  sehen wir in den ersten Bildern der Abbildung 5.5 einen starken exponentiellen Anstieg der Norm, also auch des numerisch erzeugten Fehlers. Dies geschieht bereits nach wenigen Iterationen. Bei den feineren Zeitschritten  $\tau = 0.01$  und  $\tau = 0.001$  sehen wir, dass für die ersten Iterationen kleinere beziehungsweise kaum numerische Fehler entstehen, jedoch nach einer gewissen Zeit auch diese exponentiell ansteigen beziehungsweise stark oszillieren. Einzig beim sehr kleinen Zeitschritt von  $\tau = 0.0001$  können wir von einem stabilen Verfahren sprechen, bei dem der numerische Fehler sehr klein bleibt. Aus diesem Grund wollen wir für die restlichen Simulationen eben diese Zeitschrittweite verwenden, was sowohl für die Visualisierung des Eigenvektors in Abb. 5.6 als auch im nächsten Abschnitt für die Betrachtung des zeitabhängigen Potentials auf einem regulären Dünngitter gilt. Allerdings dürfen wir in diesem Zusammenhang nicht vergessen, dass der numerische Fehler vor allem von dem gewählten Diskretisierungslevel, dadurch also von der Anzahl der DOF, abhängt und wir diesen für die Betrachtung der Auswirkungen der anderen Parameter fest als  $L = 7$  wählen.

Außerdem wollen wir die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeitsverteilung betrachten.



**Abbildung 5.5:** Norm im eindimensionalen Fall betrachtet für ein reguläres Dünnes Gitter mit verschiedenen Werten für  $\tau$ .

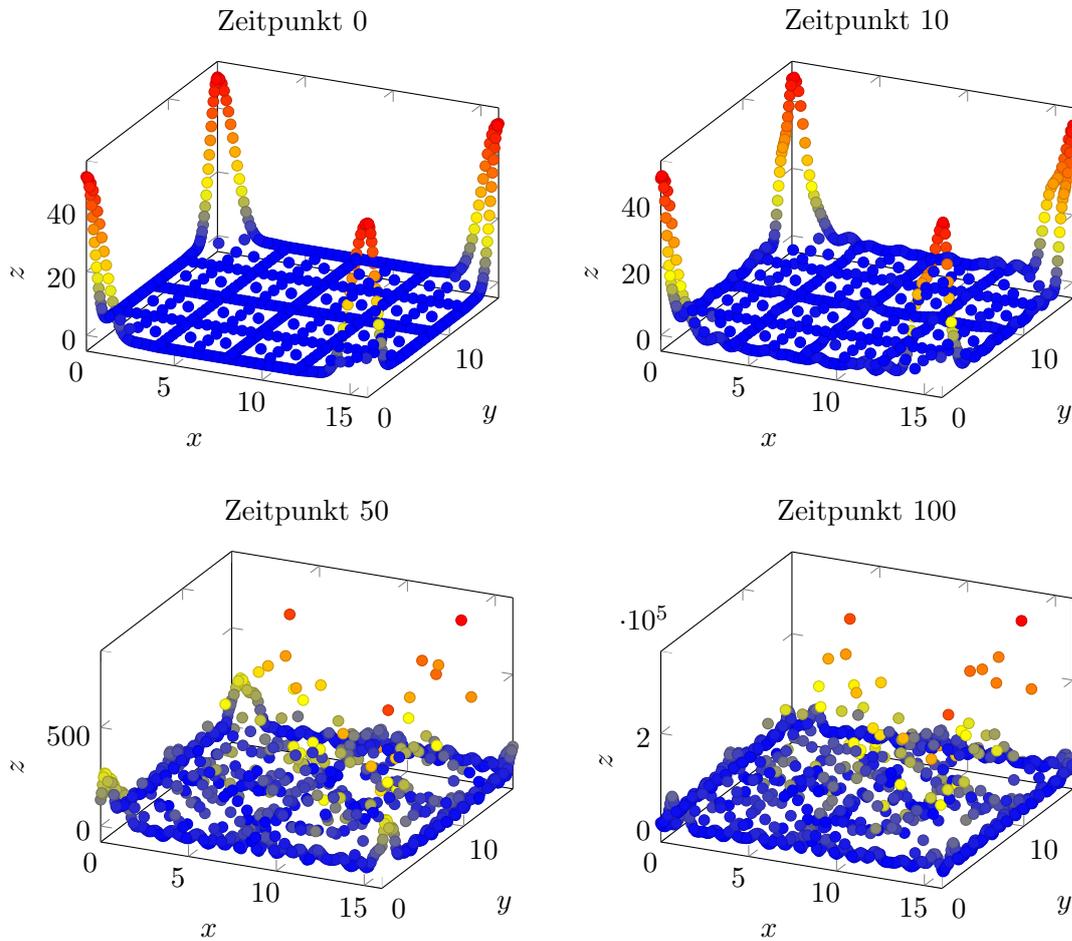


**Abbildung 5.6:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem klassischen Dünngitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.0001$ .

Dies ist in Abbildung 5.6 dargestellt, wobei wir davon ausgehen, dass sich unsere Kernposition im Koordinatenursprung befindet. Hierbei wurde ein periodisches Gitter verwendet, was die Maxima an den vier Eckpunkten erklärt. Aus dem Betragsquadrat des Eigenvektors ergibt sich demnach eine Glockenkurve.

Abbildung 5.6 verdeutlicht, dass sich nicht nur die Norm, sondern auch das Betragsquadrat des Eigenvektors, also die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen, bei einem so kleinen Zeitschritt nicht merklich verändern, was die Ergebnisse, die wir uns im Zusammenhang der  $H_1$ -Norm angesehen haben, unterstreicht. Hierzu betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung zu vier verschiedenen Zeitpunkten, nämlich  $t = 0$ ,  $t = 10$ ,  $t = 50$  und  $t = 100$ .

Um nochmals auf die Notwendigkeit einer kleinen Zeitschrittweite hinzuweisen, wollen wir uns die gleichen Ergebnisse mit einer Zeitschrittweite von  $\tau = 1$  in Abbildung 5.7 ansehen. Bereits nach 10 Iterationsschritten, also zum Zeitpunkt  $t = 10$ , lässt sich eine Oszillation feststellen. Diese ist in diesem Zusammenhang hauptsächlich auf die zu große Zeitschrittweite zurückzuführen, da wir die anderen Parameter im Vergleich zum stabilen Verfahren aus Abbildung 5.6 nicht verändert haben. Dies lässt auf einen signifikanten numerischen Fehler schließen. Nach 50 Itera-



**Abbildung 5.7:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem klassischen Dünngitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 1$ .

tionen, ist die ursprüngliche Form einer Glockenkurve nicht mehr zu erkennen. Dies zeigt, wie wichtig eine gute Anpassung der Diskretisierungsparameter ist. Dabei muss allerdings immer bedacht werden, dass eine höhere Genauigkeit nur auf Kosten der Rechengeschwindigkeit erfüllt werden kann.

### Beispiel 3: Zweidimensionales Potential

In diesem Abschnitt wird ein verändertes Potential betrachtet, statt eines eindimensionalen Potentials wird hier ein Zweidimensionales betrachtet. Um dennoch bei einem zweidimensionalen Problem zu verbleiben, ersetzen wir das Heliumatoms durch ein Wasserstoffatom, was nur ein Elektron besitzt. Anschaulich bedeutet dies, dass wir statt zwei Elektronen mit einer Dimension, ein Elektron mit zwei Dimensionen betrachten. Da wir nur noch ein Elektron betrachten fällt ein Teil des Potentials  $V$  weg und es bleibt  $V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M v_j^{en}(\|x_i - R_j\|)$  übrig, da wir den Laserterm vernachlässigen. Analog zu den bisherigen Auswertungen, betrachten wir nun auch die Ergebnisse für dieses Beispiel.

<i>Level</i>	<i>Dof</i>	$\lambda$	$\Delta\lambda$	$\frac{\Delta\lambda^{(n)}}{\Delta\lambda^{(n-1)}}$
1	4	$-1.083122 \cdot 10^{-1}$	$1.083122 \cdot 10^{-1}$	$0.000000 \cdot 10^0$
2	16	$2.701247 \cdot 10^{-1}$	$3.784369 \cdot 10^{-1}$	$2.862094 \cdot 10^{-1}$
3	64	$-1.751725 \cdot 10^0$	$2.021850 \cdot 10^0$	$1.871736 \cdot 10^{-1}$
4	256	$-1.379822 \cdot 10^0$	$3.719029 \cdot 10^{-1}$	$5.436500 \cdot 10^0$
5	1 024	$-1.363872 \cdot 10^0$	$1.595001 \cdot 10^{-2}$	$2.331678 \cdot 10^1$
6	4 096	$-1.363855 \cdot 10^0$	$1.715065 \cdot 10^{-5}$	$9.299944 \cdot 10^2$
7	16 384	$-1.363855 \cdot 10^0$	$2.704192 \cdot 10^{-11}$	$6.342244 \cdot 10^5$
8	65 536	$-1.363855 \cdot 10^0$	$7.569501 \cdot 10^{-13}$	$3.572485 \cdot 10^1$
9	262 144	$-1.363855 \cdot 10^0$	$1.133715 \cdot 10^{-11}$	$6.676721 \cdot 10^{-2}$

**Abbildung 5.8:** Ausgabe bei der Berechnung des zweidimensionalen Energieeigenwerts beim Dünngitter.

Wir erhalten mit dem oben beschriebenen Problem ein Vollgitter, da sich der Dünngittereffekt bei einem zweidimensionalen Problem in der Kopplung der Vollgitter zeigt. Da wir aber einzig ein Elektron betrachten haben wir nur ein einziges Vollgitter.

Wir sehen, dass dieser Ansatz stabil ist und bereits in Level 6 eine Konvergenz liefert. Wir wollen nun die zeitliche Entwicklung dieser Funktion betrachten.

Analog zum regulären Dünngitter betrachten wir auch bei diesem Beispiel das Verhalten der  $H_1$ -Seminorm mit verschiedenen Werten für den Parameter  $\tau$ , wobei wir die gleichen Werte hierfür wie bei dem klassischen Dünngitteransatz wählen.

Dies wird in Abbildung 5.9 dargestellt. Wieder wird die erhöhte Genauigkeit dieses Verfahrens deutlich. Es findet bei keiner Zeitschrittweite ein exponentielles Wachstum der  $H_1$ -Seminorm wie beim klassischen Dünngitter bei den Zeitschrittweiten  $\tau = 1$  und  $\tau = 0.01$  statt. Im Gegenteil schwankt der Wert der  $H_1$ -Norm schon bei  $\tau = 0.1$  nur im Nachkommabereich, wodurch dieser Parameterwert bereits für das Verfahren denkbar ist.

Auch bei diesem Beispiel wollen wir das Betragsquadrat des Eigenvektors betrachten. Hierbei betrachten wir allerdings neben  $\tau = 1$  auch  $\tau = 0.1$ .

Abbildung 5.11 zeigt, dass auch mit einer im Vergleich zum Dünngitter großen Zeitschrittweite von  $\tau = 0.1$  das Ergebnis ähnlich gut ist, wie bei einem klassischen Dünngitter mit einer Zeitschrittweite von  $\tau = 0.0001$ . Allerdings sollte nicht vergessen werden, dass das zweidimensionale Dünngitterverfahren, welches aus einem Vollgitter besteht, einen viel höheren Rechenaufwand hat als das klassische Dünngitter in einer Dimension. Wieder wird der Konflikt zwischen Schnelligkeit und Genauigkeit verdeutlicht, was das zentrale Problem dieser Arbeit darstellt. Je besser die Diskretisierung, das Diskretisierungslevel oder der Zeitschritt gewählt werden, desto genauer werden auch die von uns berechneten Ergebnisse für unser Problem. Andererseits wird dadurch der Rechenaufwand zur Lösung stark erhöht. Das Ziel ist es demnach, ein Verfahren zu ermitteln, welches beide Seiten berücksichtigt. Das bedeutet, dass das Lösungsverfahren sowohl möglichst schnell als auch hinreichend genau sein muss.

In Abbildung 5.11 sehen wir, dass im Vergleich zum klassischen Dünngitter aus Beispiel 2 bei gleichem Zeitschritt  $\tau = 1$  das simulierte Ergebnis mit dem zweidimensionalen Ansatz genauer ist und es zwar bei Zeitschritt  $t = 100$  zu leichten Oszillationen kommt, die grobe Form sich

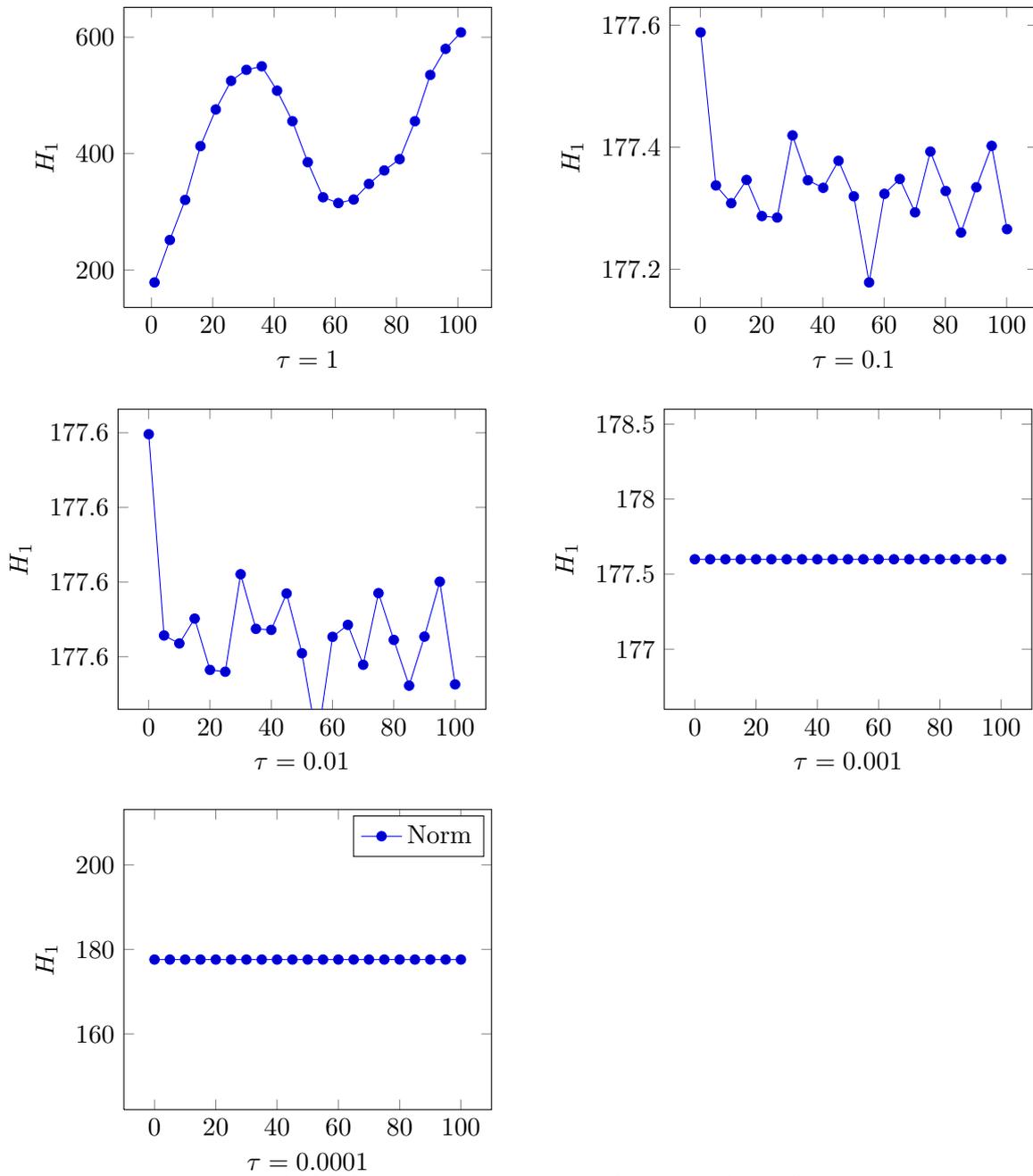
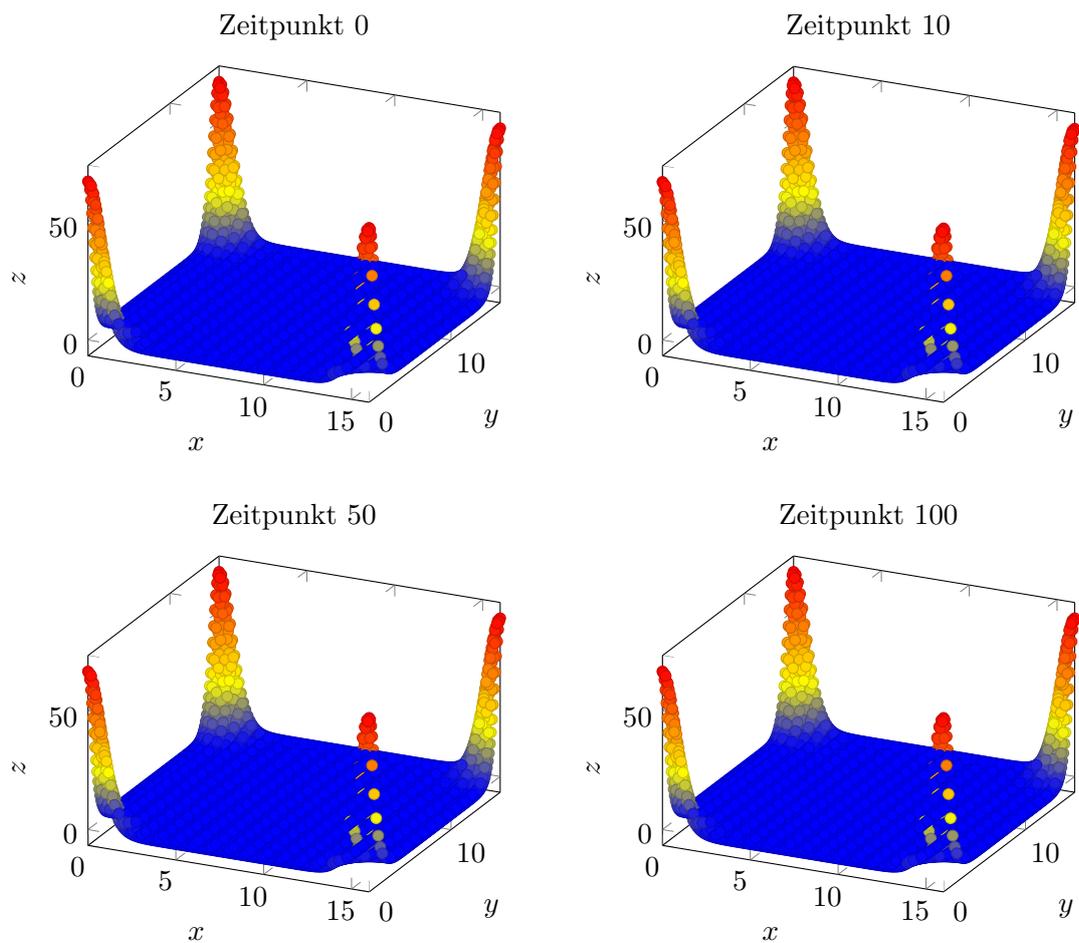
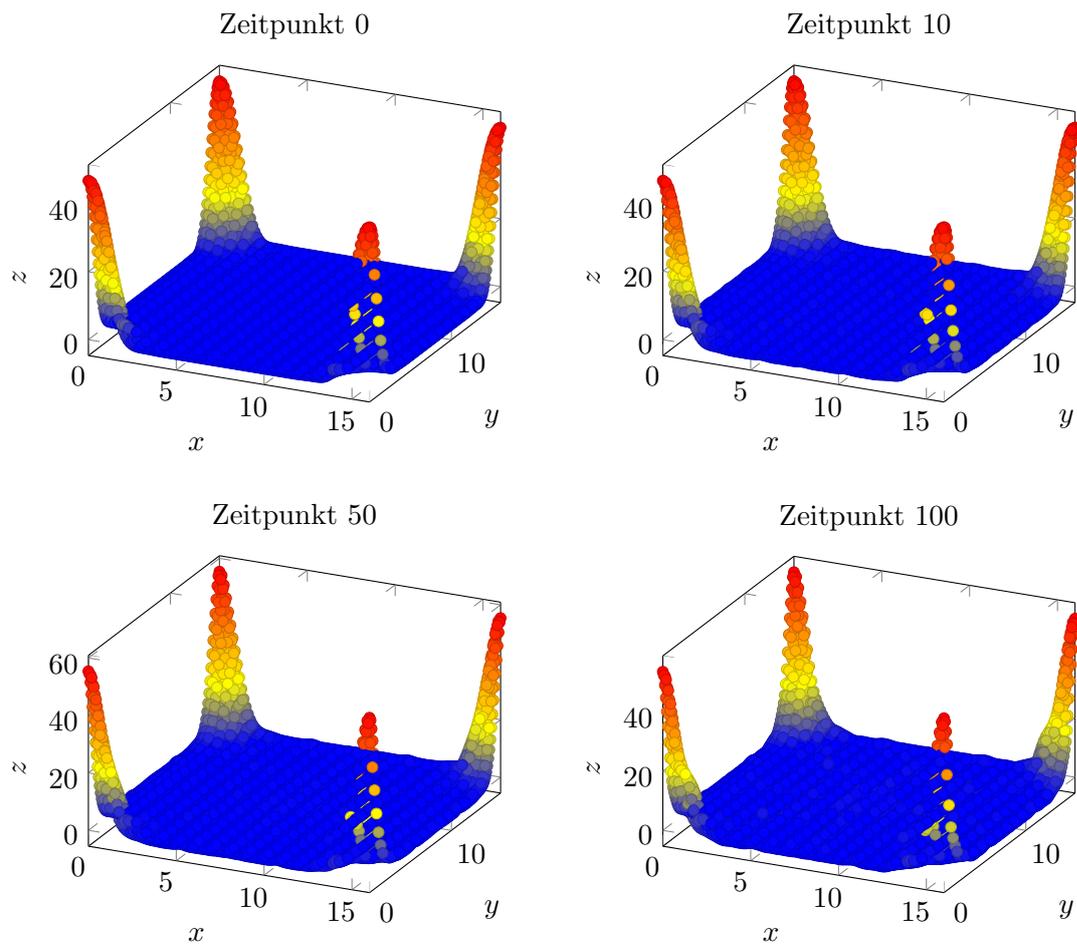


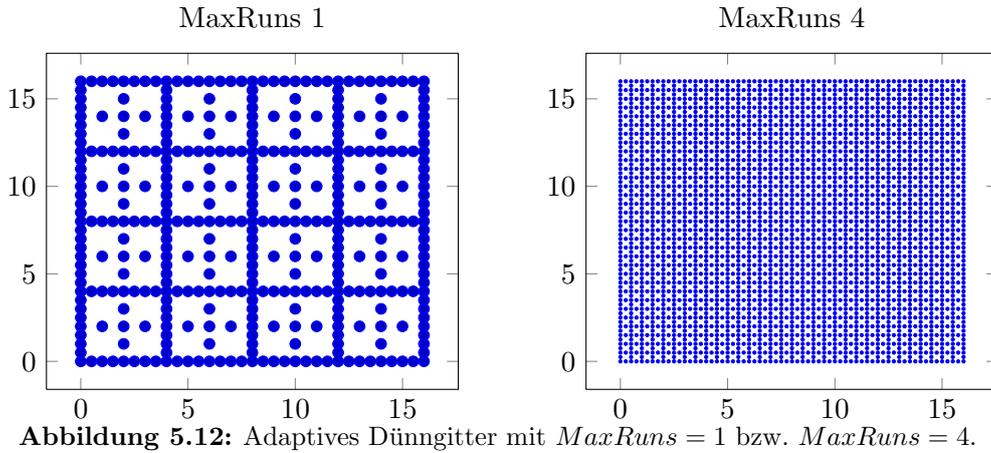
Abbildung 5.9: Norm im zweidimensionalen Fall.



**Abbildung 5.10:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem zweidimensionalen Gitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.1$ .



**Abbildung 5.11:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem zweidimensionalen Gitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 1$ .



allerdings nicht verändert.

**Beispiel 4: Adaptives Gitter**

In diesem Beispiel betrachten wir wieder die gleiche eindimensionale Problemstellung wie in Beispiel 1 und 2. Diesmal verwenden wir allerdings ein adaptives Gitter, wobei die theoretischen Grundlagen bereits in dem entsprechenden Kapitel 3.4 behandelt worden sind. Zusätzlich wird ein Parameter  $MaxRuns$  angegeben, welcher entscheidet, wie oft das Verfahren angewendet wird, wobei nach jedem Durchlauf die Fehlerschranke  $\epsilon$  mit sich selbst multipliziert wird, was zu einer höheren Genauigkeit führt.

Das bedeutet, dass das Gitter dem betrachteten Problem angepasst wird und die Freiheitsgrade nicht einzig von der Wahl des Diskretisierungslevels und davon, ob ein Dünn- oder Vollgitteransatz verwendet wird, abhängen. Koeffizienten, welche einen vergleichsweise kleinen Beitrag leisten, werden gemäß des Abschneidewerts  $\epsilon$  vernachlässigt. Dies wird anhand der Fourierkoeffizienten entschieden. Für unser Problem betrachten wir das durch diesen Ansatz entstandene Gitter in Abbildung 5.12, wobei wieder  $L = 7$  als Diskretisierungslevel gewählt wurde. Hierbei wurde als Fehlerschranke  $\epsilon = 0.1$  gesetzt. Dieses Beispiel unterstreicht insbesondere den Effekt des  $MaxRuns$ -Parameters. Dies wird in dem zweiten Bild der Abbildung 5.12 dargestellt. Außerdem wird hier gut der Unterschied zwischen der Konstruktion eines Dünngitters und dem adaptiven Gitter deutlich. Die Effekte hiervon wollen wir jetzt analog zu den obigen Beispielen analysieren. Wir wählen hierzu wieder  $\epsilon = 0.1$  und wollen das Verhalten sowohl für  $MaxRuns = 1$  als auch für  $MaxRuns = 4$  besprechen.

Offensichtlich verbessert eine Erhöhung des  $MaxRuns$ -Parameters deutlich die Genauigkeit der Lösung. Allerdings wird hierdurch auch durch die gesteigerte Anzahl an benötigten Freiheitsgraden der Rechenaufwand vervielfacht. Außerdem sehen wir, dass sich nach einem bestimmten Level die Anzahl der Freiheitsgrade nicht mehr verändert, auch wenn ein höheres Level gewählt wird. In unserem Beispiel ist dies bei Level 5 mit 320 Freiheitsgraden bei  $MaxRuns = 1$  und bei Level 6 mit 3072 bei  $MaxRuns = 4$ . Dies lässt sich damit erklären, dass hier bereits die durch  $\epsilon$  und  $MaxRuns$  vorgeschriebene Genauigkeit erreicht wurde und eine Erhöhung des Levels heuristisch nicht mehr nötig ist.

MaxRuns 1			MaxRuns 4		
<i>Level</i>	<i>Dof</i>	$\lambda$	<i>Level</i>	<i>Dof</i>	$\lambda$
1	4	$4.827376 \cdot 10^{-1}$	1	4	$4.827376 \cdot 10^{-1}$
2	16	$6.598580 \cdot 10^{-1}$	2	16	$6.598580 \cdot 10^{-1}$
3	64	$-3.224946 \cdot 10^0$	3	64	$-3.224946 \cdot 10^0$
4	192	$-2.933450 \cdot 10^0$	4	256	$-2.914899 \cdot 10^0$
5	320	$-2.915728 \cdot 10^0$	5	1024	$-2.891013 \cdot 10^0$
6	320	$-2.915728 \cdot 10^0$	6	3072	$-2.890973 \cdot 10^0$
7	320	$-2.915728 \cdot 10^0$	7	3072	$-2.890973 \cdot 10^0$
8	320	$-2.915728 \cdot 10^0$	8	3072	$-2.890973 \cdot 10^0$
9	320	$-2.915728 \cdot 10^0$	9	3072	$-2.890973 \cdot 10^0$

Abbildung 5.13: Ausgabe bei der Berechnung des Energieeigenwerts beim adaptiven Gitter mit  $\epsilon = 0.1$ .

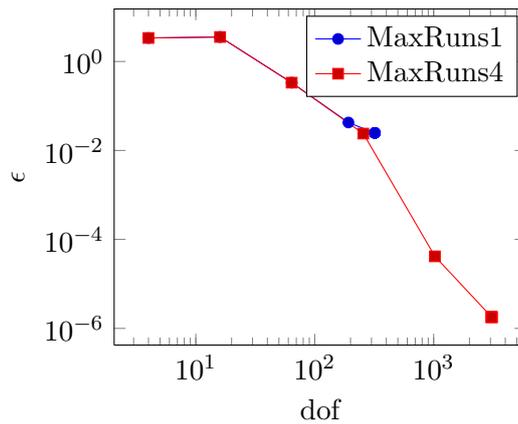


Abbildung 5.14: Fehleranalyse des Energieeigenwerts auf einem adaptiven Gitter.

Im Vergleich zum Dünn- aber auch zum Vollgitterverfahren sehen wir, dass bereits mit viel weniger Freiheitsgraden ein genaues Ergebnis erreicht werden kann. So ist das Ergebnis mit dem Parameter  $MaxRuns = 1$  bei 320 Freiheitsgraden und Level 5 vergleichbar genau wie das Ergebnis auf dem Dünn- gitter zwischen Level 7 und 8 bei 576 bis 1280 Freiheitsgraden. Bei  $MaxRuns = 4$  lässt sich nach Level 6 mit 3072 Freiheitsgraden erst nach der sechsten Nachkommastelle ein Unterschied zum größten Eigenwert auf dem Vollgitter feststellen, welcher 262144 Freiheitsgrade für die Berechnung benötigt.

Nun wollen wir analog zu den oben bereits betrachteten Beispielen das Verhalten der zeitlichen Entwicklung durch die  $H_1$ -Seminorm für das adaptive Gitter betrachten. Hierzu benutzen wir die oben bereits erwähnten Beispiele.

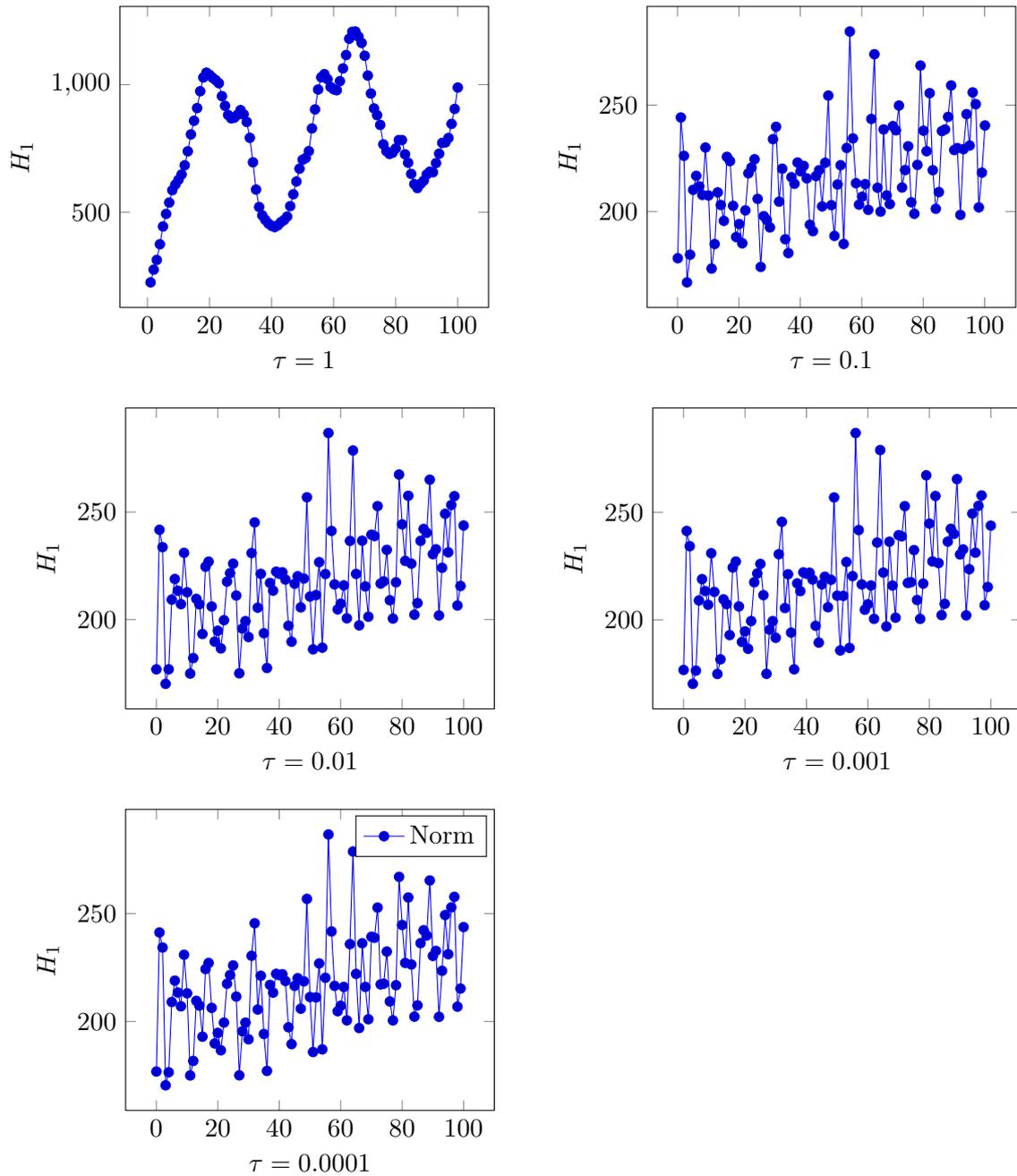


Abbildung 5.15: Norm im adaptiven Gitter mit  $\epsilon = 0.1$  und  $MaxRuns = 1$ .

Abbildung 5.15 zeigt, dass bereits bei dem kleinen Gitter von 320 Freiheitsgraden kein exponentielles Wachstum auftritt, was gegensätzlich zum regulären Dünngitter ist. Allerdings wird selbst bei sehr kleiner Zeitschrittweite keine Stabilität erreicht und die Norm schwankt in einer Größenordnung von 100. Auffällig ist außerdem, dass sich das Verhalten der Norm nach einer Zeitschrittweite von  $\tau = 0.1$  nicht mehr wesentlich verbessern lässt. Selbst eine Verminderung der Zeitschrittweite auf  $\tau = 0.0001$  führt zu keiner Verbesserung des Verhaltens der Seminorm.

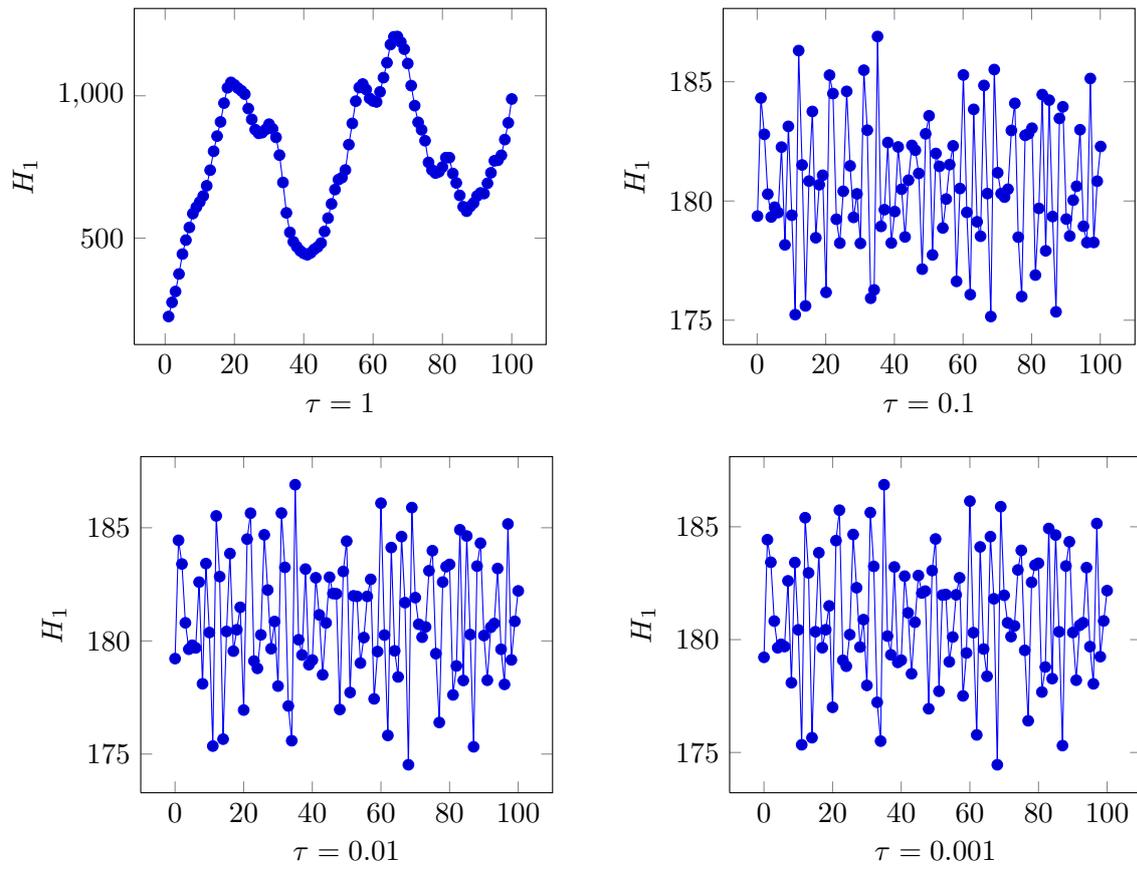
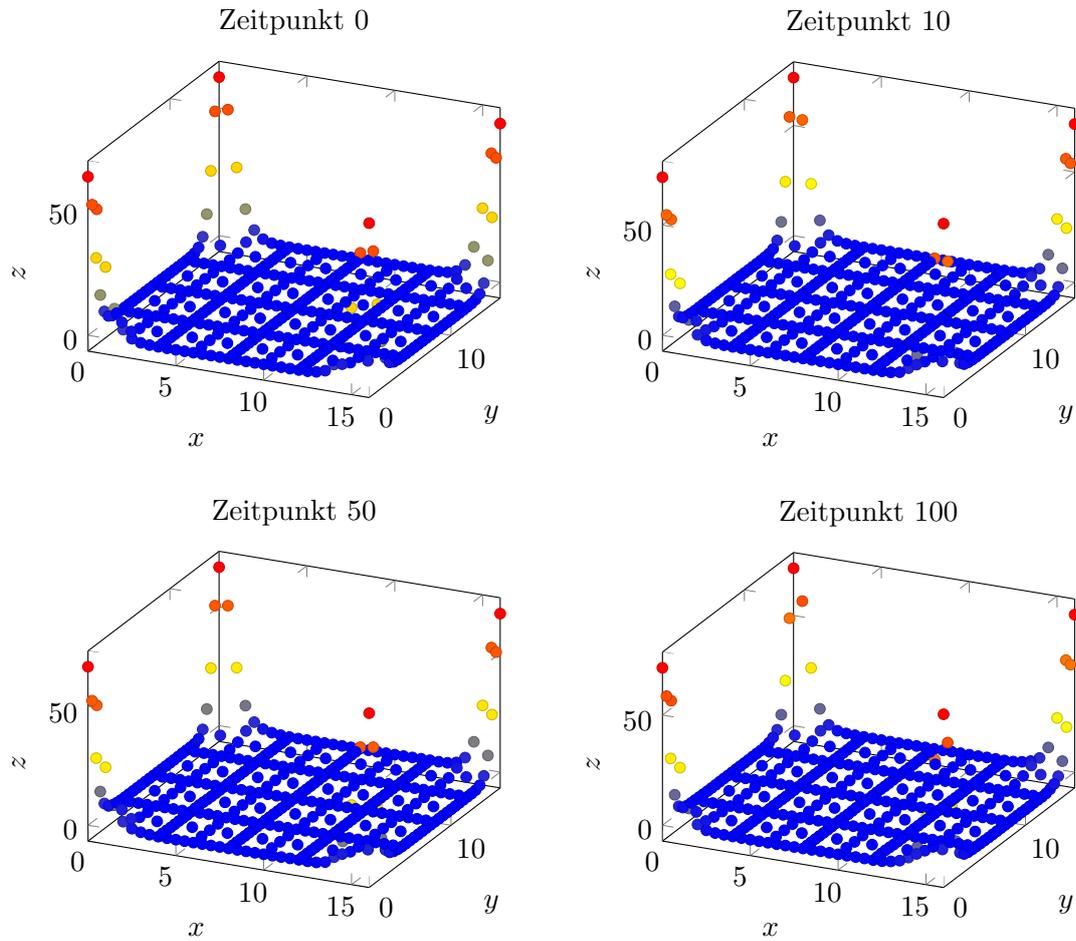


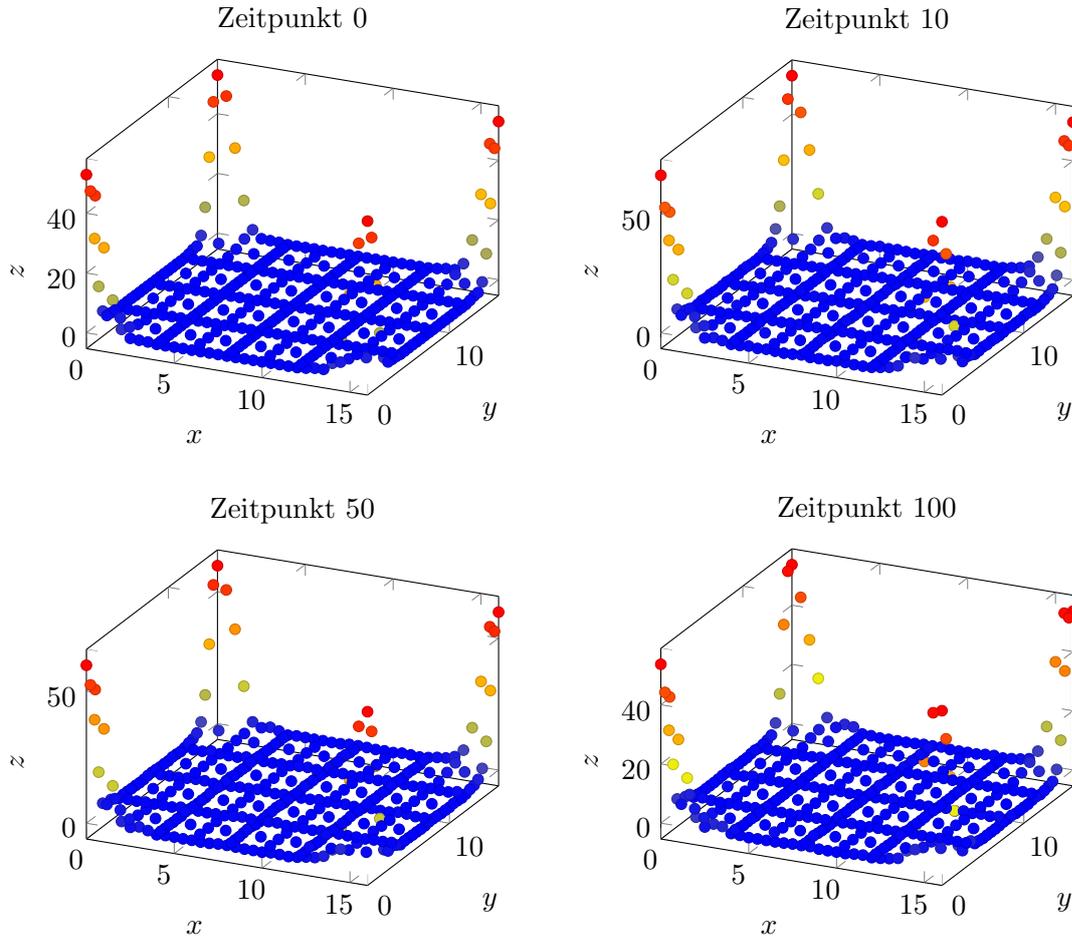
Abbildung 5.16: Norm im adaptiven Gitter mit  $\epsilon = 0.1$  und  $MaxRuns = 4$ .



**Abbildung 5.17:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem adaptiven Dünngitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.1$  und  $MaxRuns = 1$ .

In Abbildung 5.16 betrachten wir die  $H_1$ -Seminorm nach einer Erhöhung von  $MaxRuns$  auf 4. Wieder stellen wir den gleichen Effekt fest wie bei  $MaxRuns = 1$ , wobei hier der Schwankungsbereich von 100 auf 10 eingegrenzt wurde. Wieder bringt eine Erhöhung von  $\tau = 0.1$  auf eine feinere Zeitschrittweite keine Verbesserung der Stabilität. In beiden Fällen entsteht zwar eine starke Oszillation, jedoch kommt es trotz vergleichsweise großer Zeitschrittweite zu keinem exponentiellen Wachstum.

Abbildung 5.17 verdeutlicht das Verhalten des Betragsquadrats des Eigenvektors im Fall  $\tau = 0.1$  und  $MaxRuns = 1$ . An diesem Beispiel wird besonders der Vorteil des adaptiven im Vergleich zum klassischen Dünngitter deutlich. Trotz kleineren Schwankungen bleibt das Betragsquadrat des simulierten Eigenvektors stabil, obwohl wir nur knapp über die Hälfte der Freiheitsgrade des klassischen Dünngitters zur Darstellung verwendet haben und eine 1000-fach höhere Zeitschrittweite. Dies zeigt, dass die Schwankungen in der  $H_1$ -Seminorm keine großen Auswirkungen auf die Simulation des Eigenvektors ausüben. Zusätzlich zeigt Abbildung 5.18, dass selbst eine Erhöhung der Zeitschrittweite auf  $\tau = 1$  zwar zu stärkeren Schwankungen führt, allerdings wird die Glockenform nicht zerstört im Gegensatz zum klassischen Dünngitterverfahren, vgl.



**Abbildung 5.18:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem adaptiven Dünngitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 1$  und  $MaxRuns = 1$ .

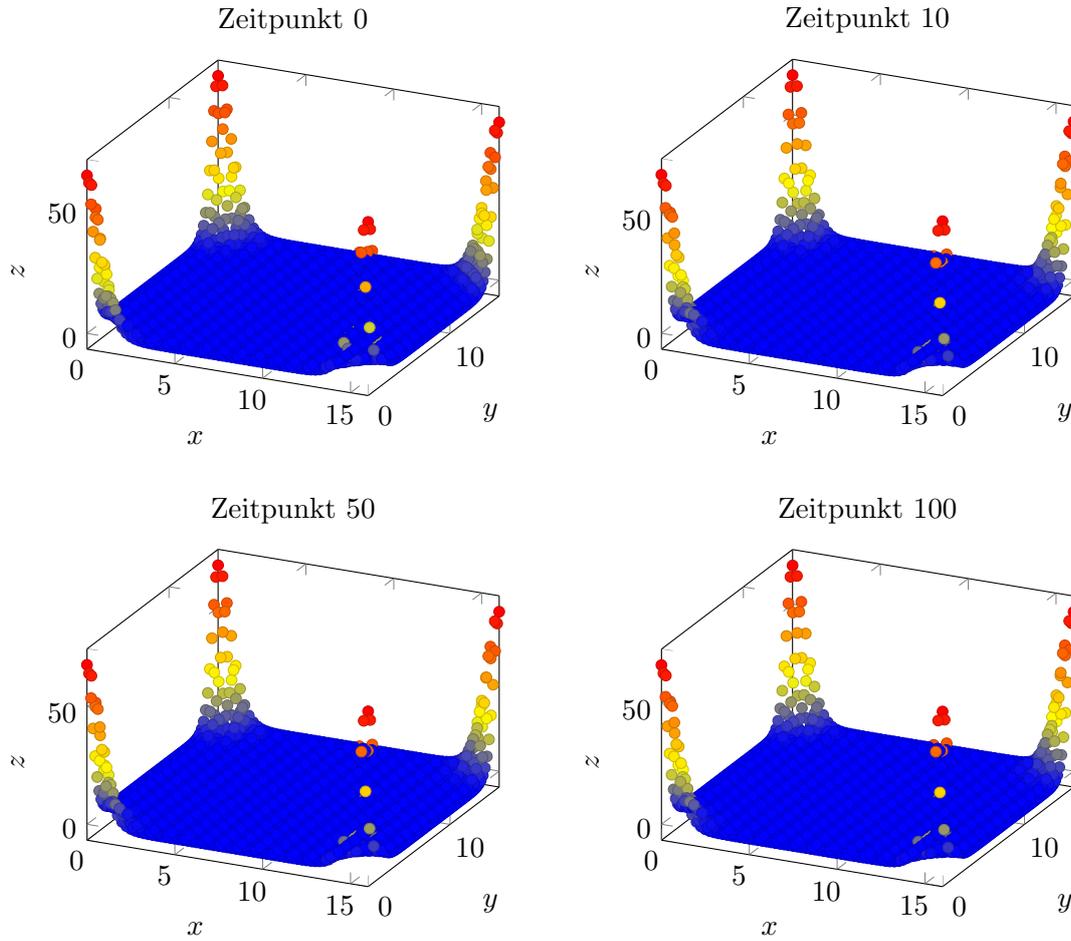
Abb.5.7.

In Abbildung 5.19 betrachten wir nun die Auswirkung einer Verfeinerung des Gitter durch die Erhöhung von  $MaxLevel = 1$  auf  $MaxLevel = 4$  auf die simulierte Wahrscheinlichkeitsverteilung. Offensichtlich ist die Darstellung genauer geworden und die Schwankungen haben sich verringert. Die betrachteten Schwankungen in der  $H_1$ -Seminorm sind hierbei nicht zu bemerken. Insgesamt sieht man anhand dieses Beispiels besonders gut den Vorteil des adaptiven Gitters im Vergleich zum regulären Dünngitter, da es mit viel weniger Funktionsauswertungen zu einem Ergebnis führt, welches vergleichbar gut ist.

### 5.2.2 Zeitabhängige Potentiale

Abschließend wollen wir uns mit der Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung beschäftigen, welche wir durch die Betrachtung des bereits erwähnten zeitabhängigen Potentialterms  $V_F$  erhalten. Es wird

$$V_F(x, t) = E \sin\left(\frac{2\pi\mu \cdot x}{B}\right) e^{-c(t-T_0)^2} \cos(2\pi\omega t) \quad (5.1)$$



**Abbildung 5.19:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem adaptiven Gitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.1$  und  $MaxRuns = 4$ .

angenommen, wobei wir  $w = 3c$  und den Startzeitpunkt  $T_0 = 0$  betrachten. Es bezeichnet außerdem  $t$  den aktuellen Zeitpunkt. Hierbei kann durch die Wahl der Parameter  $E$  und  $c$  die Stärke des Lasers variiert werden. Die Ausrichtung des Lasers hängt von der Wahl von  $\mu$  ab, wobei  $\mu$  ein Vektor ist und je nach Wahl die Richtung, in welche der Laser im betrachteten Vektorfeld wirkt, verändert. Falls dies im Folgenden nicht anders angegeben wird, so setzen wir  $E = c = 1$ ,  $\mu = (1, 0)^T$  und betrachten die daraus resultierenden Ergebnisse anhand der Entwicklung der  $H_1$ -Norm und des Betragsquadrats des Eigenvektors, wobei wir wieder  $t \in [0, 100]$  betrachten.

Wir werden die zeitliche Entwicklung des zeitabhängigen Potentials, sowohl für den Dünngitter als auch für den adaptiven Gitteransatz, betrachten. Für die Wahl der Diskretisierungsparameter werden wir die Ergebnisse des stationären Falls benutzen. Wir werden für das zeitabhängige Potential allerdings weder den Vollgitter- noch den zweidimensionalen Ansatz betrachten, da diese unzureichend gegen den *Fluch der Dimensionen* wirken, welcher als das zentrale Problem dieser Arbeit anzusehen ist.

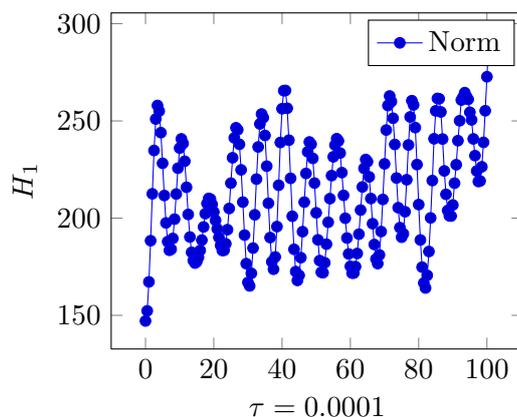


Abbildung 5.20: Norm auf einem klassischen Dünngitter mit  $\tau = 0.0001$ .

### Beispiel 5: Zeitabhängiges Potential auf einem klassischen Dünngitter

Wir betrachten die Auswirkungen der Addition eines zeitabhängigen Potentials auf das von uns bereits betrachtete stationäre Potential zunächst mithilfe des Dünngitteransatzes. Wie bei den obigen Betrachtungen, werden wir für unsere Problemstellung das Level  $L = 7$  und für die zeitliche Entwicklung die Zeitschrittweite  $\tau = 0.0001$  wählen. Diese beiden Parameter wollen wir nun auch für die Entwicklung des zeitabhängigen Potentials nutzen. Da durch die obige Analyse verdeutlicht wurde, dass diese Wahl eine gute Approximation für unser stationäres Problem liefert, wollen wir nun die Analyse der Qualität dieser Approximation für das zeitabhängige Problem durchführen.

Abbildung 5.20 zeigt zunächst die Entwicklung der  $H_1$ -Seminorm, wobei wir feststellen, dass im Gegensatz zum stationären Fall die Norm nicht mehr konstant bleibt sondern stark oszilliert.

Anschließend betrachten wir in Abbildung 5.21 die Auswirkungen des Laserterms auf die zeitliche Entwicklung unserer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  gilt  $V_F(x, 0) = E \sin(\frac{2\pi\mu \cdot x}{B})$ . Da wir  $E = 1$  angenommen haben, wirkt einzig der *Sinus-Term* des Potentials auf das System, wodurch es zu einer Verschiebung der Glockenkurve kommt. Im zeitlichen Verlauf sehen wir, dass sich die Form des simulierten Eigenvektors verändert und dieser während des betrachteten Intervalls in keine Ruheposition gelangt.

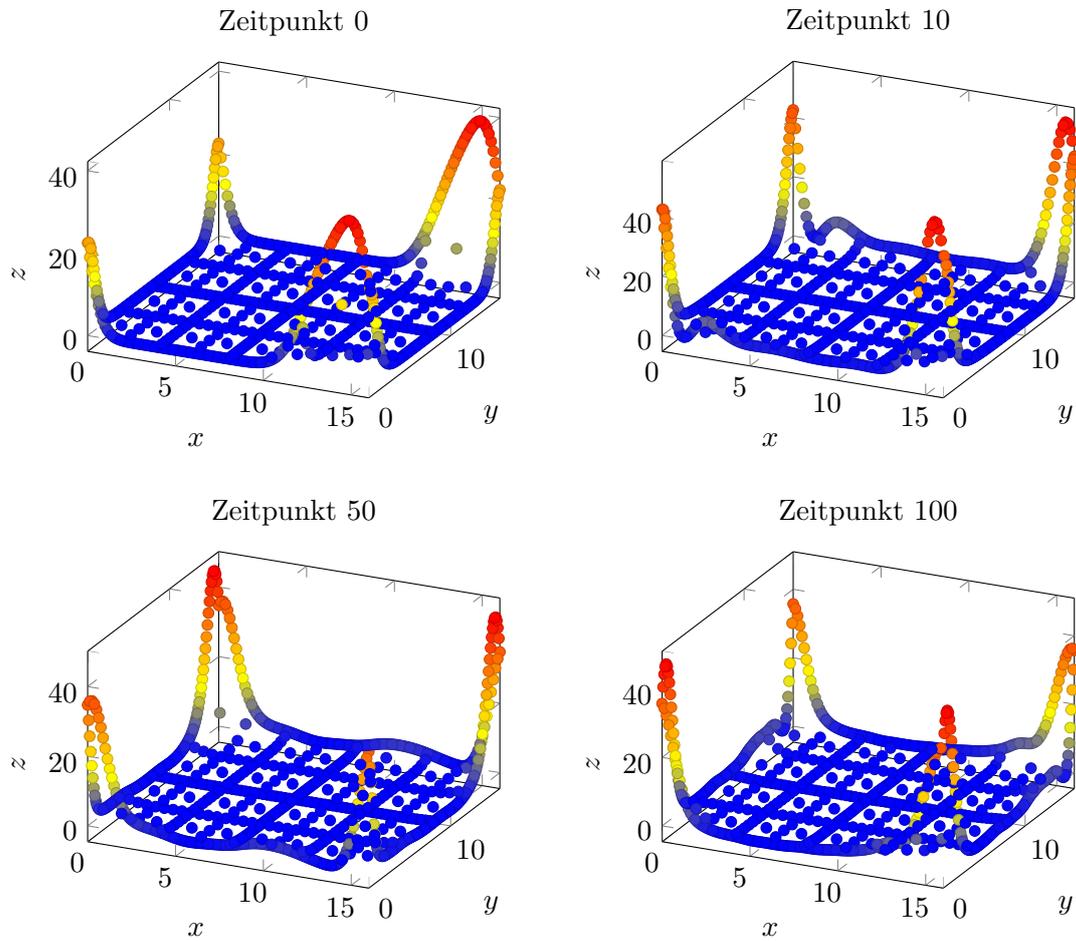


Abbildung 5.21: Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem adaptiven Gitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.0001$ .

### Beispiel 6: Zeitabhängiges Potential auf einem adaptiven Gitter

Nun wollen wir das oben bereits beschriebene Problem auf einem adaptiven Gitter betrachten. Für den stationären Fall haben wir gesehen, dass bereits eine Fehlerschranke von  $\epsilon = 0.1$  und  $MaxRuns = 1$  ausreicht, um das Problem vergleichsweise genau zu lösen. Diese Parameter wollen wir nun auch für den zeitabhängigen Fall anwenden. Der Vorteil der Adaptivität wird hierbei besonders ersichtlich. Dadurch, dass wir ein anderes Potential als im stationären Fall betrachten, erhalten wir auch ein anderes Gitter, was die sehr gute Anpassung der Adaptivität auf die Problemstellung verdeutlicht. Dieses Gitter ist in Abbildung 5.22 abgebildet. Der Vorteil liegt hierbei darin, dass nur noch 192 Freiheitsgrade, also Funktionsauswertungen, verwendet werden müssen, wodurch sich der Rechenaufwand erheblich verringern lässt.

Die Genauigkeit dieser Diskretisierung wird nun anhand eines Vergleichs mit dem klassischen Dünn-gitter bewerkstelligt. In diesem Zusammenhang werden wir allerdings nicht das Verhalten der  $H_1$ -Seminorm analysieren, da wir bereits im stationären Fall gesehen haben, dass dieses nicht stabil ist und sich deswegen kein Rückschluss auf die Diskretisierung des zeitabhängigen Falls schließen lassen.

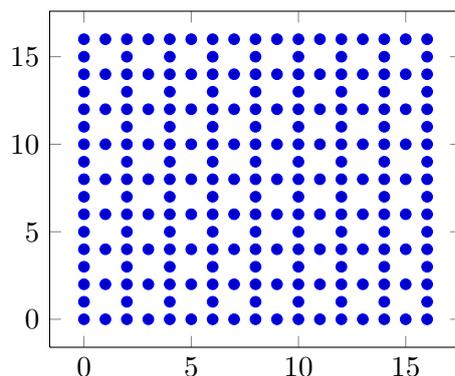


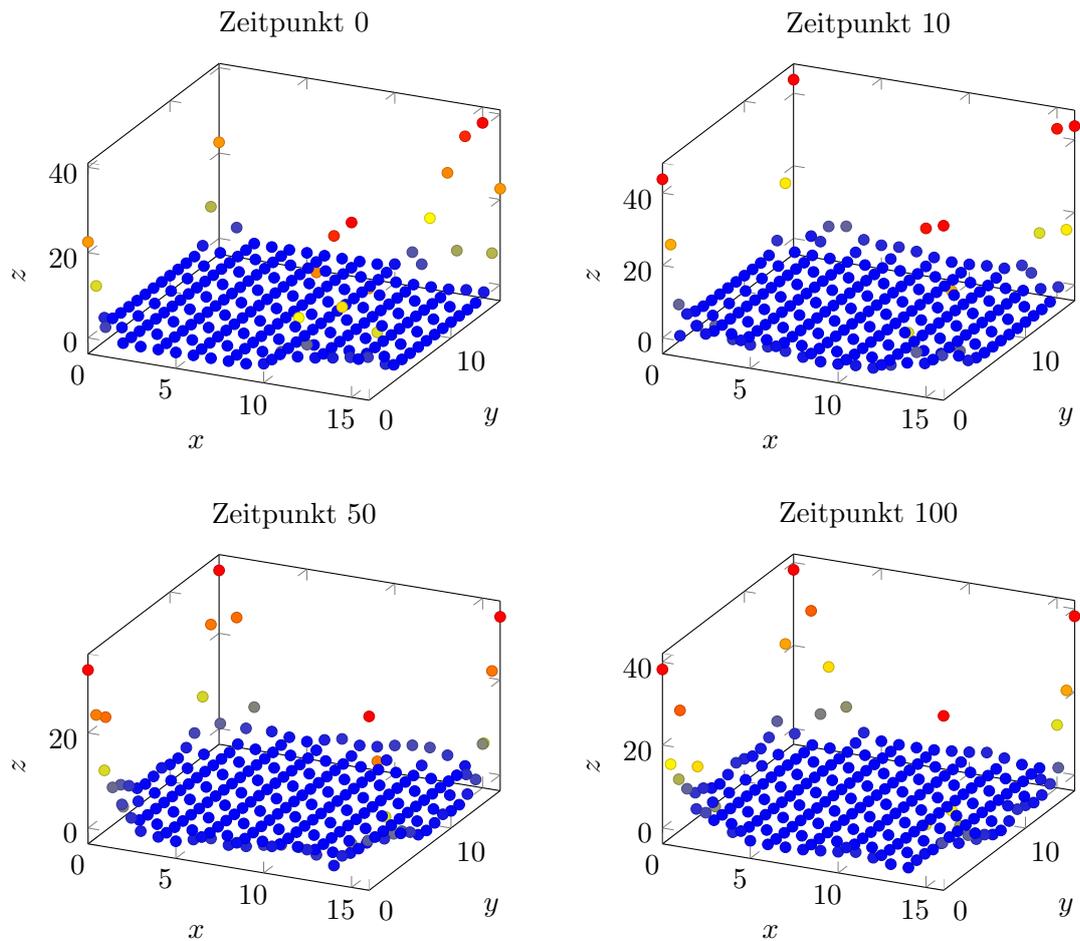
Abbildung 5.22: Adaptives Gitter mit zeitabhängigem Potential.

Das gleiche Ergebnis erschließt sich auch bei der Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsverteilung in Abbildung 5.23. Trotz einer viel kleineren Anzahl an Auswertungspunkten zeigt die Wahrscheinlichkeitsverteilung sowohl auf dem adaptiven als auch auf dem klassischen Dünngitter das gleiche Verhalten, wobei natürlich auf dem adaptiven Gitter die Darstellung ungenauer ist.

Allerdings muss beachtet werden, dass das adaptive Gitter für den Startpunkt  $t = 0$  generiert wird. Hiernach wird die zeitliche Integration einzig durch eine Iteration auf dem Anfangsgitter durchgeführt. Das bedeutet demnach, dass sich das Gitter nicht mit der Iteration verändert, was zu einem Verlust der adaptiven Eigenschaft führen kann. Die bei dem adaptiven Gitter erreichte Fehlerschranke ist also durch die Iteration nicht mehr gegeben. Wir sehen allerdings anhand des betrachteten Beispiels, dass trotzdem auch auf einem solchen adaptiven Gitter ein sehr gutes Ergebnis mit viel weniger Funktionsauswertungen erreicht wird.

Abschließend wollen wir den Vorteil des adaptiven Gitteransatzes in den Vordergrund stellen. Der klassische Dünngitteransatz ist bereits eine sehr effektive Methode um dem *Fluch der Dimension* entgegen zu wirken. Dies geschieht durch die Nutzung eines Gitters, welches bestimmte Gitterpunkte weglässt, im Gegensatz zu einem äquidistanten Gitter. Der Nachteil besteht hierbei allerdings darin, dass bei einem Problem, welches nicht ausreichend glatt ist, ein sehr hohes Level benötigt wird um eine angemessene Diskretisierung zu erhalten. In diesen Fällen kann sogar ein Vollgitter bei einem viel kleineren Level und zum Teil mit einer kleineren Anzahl an Freiheitsgraden der sinnvollere Ansatz sein.

Hier bietet das adaptive Gitter eine gute Alternative. Dieses generiert passend zum betrachteten Problem ein Gitter und kann dabei die verschiedenen Dimensionen verschieden fein diskretisieren, was zu einer Verbesserung der Genauigkeit durch eine gewählte Fehlerschranke und zu einer Verminderung des Rechenaufwands führt.



**Abbildung 5.23:** Wahrscheinlichkeitsverteilung auf einem adaptiven Gitter mit Zeitschrittweite  $\tau = 0.1$  und  $MaxRuns = 1$ .

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

### Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die numerische Implementierung und Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung. Die starke Dimensionsabhängigkeit, also der *Fluch der Dimension*, stellte dabei das größte Problem dar. Diesem wirkten wir zunächst durch eine Vereinfachung des betrachteten Potentials entgegen. Hierzu sahen wir uns anstatt dreidimensionalen Teilchen nur noch eindimensionale an, wodurch sich der Rechenaufwand stark verringern ließ.

Zunächst führten wir die Diskretisierung der Schrödingergleichung im Ort durch, wozu wir einen Gitteransatz mit Fourier-Basen wählten, da diese besonders für die Berechnung des Laplace-Operators sinnvoll sind. Aus einem kontinuierlichen Problem wurde dadurch ein im Ort diskretes Problem. Zu diesem Zweck betrachteten wir verschiedene Gitteransätze. Um weniger Funktionsauswertungen als im klassischen, äquidistanten Vollgitter zu benötigen, führten wir das Dünngitter ein. Dies wird dadurch erreicht, dass gewisse Punkte, die einen vergleichsweise kleinen Einfluss auf das gesamte Potential haben, vernachlässigt werden. Allerdings ist dies einzig von dem gewählten Diskretisierungslevel abhängig, also nicht von dem zugrunde liegenden Problem. Aus diesem Grund betrachteten wir das adaptive Gitter, welches eine Verbesserung gegenüber dem Dünngitter darstellt. Hierbei wird das Auswertungsmuster individuell in Abhängigkeit des betrachteten Potentials generiert, indem jede Dimension einzeln gemäß einer gewählten Fehlerschranke unterschiedlich genau diskretisiert wird. Damit werden Probleme, welche sich in ihrer Glattheit in den verschiedenen Dimensionen stark unterscheiden, besser approximiert, was zu einem verringerten Rechenaufwand führt. Durch Verwendung der unterschiedlichen Gitter entstand ein ortsdiskretisiertes Eigenwertproblem, welches wir anschließend lösen mussten. Wir erhielten so den Energieeigenwert und den dazugehörigen Eigenvektor des Grundzustandes.

Da ein zeitabhängiges Potential betrachtet wurde, brauchten wir ein Verfahren, welches die Zeitintegration bewerkstelligte. Hierzu wandten wir das *Strang-Splitting*-Verfahren an, da dieses im Vergleich zu anderen Verfahren sehr wenige Voraussetzungen an das Potential stellt. Als Startwert wurde der in dem ortsdiskretisierten System berechnete Eigenvektor benutzt. Damit wurde dann entsprechend der Zeitschrittweite eine zeitliche Iteration durchgeführt.

Die bisherigen Teile dienten der Einführung der genutzten Theorie zur Orts- und Zeitdiskretisierung, welche wir abschließend durch numerische Beispiele anwandten. Damit die Verfahren der Orts- und Zeitdiskretisierung als solche beurteilt werden konnten, betrachteten wir zunächst ein zeitunabhängiges Potential, da wir dafür das Verhalten der Wellenfunktion kennen. Hierzu verglichen wir zunächst die Ergebnisse auf dem Voll- und Dünngitter und stellten fest, dass auf dem Dünngitter die Lösung zwar ungenauer war, allerdings wurden auch viel weniger Freiheitsgrade benötigt. Dies wurde besonders im Vergleich zum Vollgitter deutlich, da dort der Eigenwert eindeutig konvergierte und sich dieser auf den höchsten betrachteten Leveln nur noch minimal veränderte. Im Gegensatz dazu veränderte sich der Eigenwert auf dem Dünngitter noch im letzten betrachteten Schritt und führte nicht zu genau dem gleichen Eigenwert wie auf dem Vollgitter. Die zeitliche Integration zeigte allerdings, dass die erreichte Genauigkeit für die Simu-

lation genügte und das Ergebnis hinreichend genau für eine stabile zeitliche Entwicklung war. Wir betrachteten das Heliumatom, welches zwei Elektronen auf den Orbitalen besitzt und erhielten durch die Einschränkung unseres Potentials auf den eindimensionalen Fall ein zweidimensionales Problem. Anschließend analysierten wir den Effekt einer Erhöhung der Dimension des Potentials auf zwei Dimensionen. Weiterhin sollte das Problem zweidimensional bleiben, weswegen wir das Wasserstoffatom, welches nur ein Elektron auf den Orbitalen besitzt, wählten. Allerdings stellte sich noch kein Dünngittereffekt ein, da dieser erst bei der Kopplung der einzelnen Gitter eintritt. Bei einem zweidimensionalen Potential wird pro Elektron ein Vollgitter betrachtet und bei einer Analyse mehrerer Elektronen werden die Vollgitter durch Dünngitter miteinander in Verbindung gesetzt. Deswegen wurde bei diesem Beispiel nur ein Vollgitter mit einem veränderten Potential betrachtet. Zwar veränderte sich dadurch der Lösungseigenwert, da ein anderes Atom betrachtet wurde, allerdings ist der Rechenaufwand genauso hoch wie bei einem Vollgitteransatz für das eindimensionale Potential.

Die Auswertung anhand numerischer Beispiele stellte den Vorteil des adaptiven Gitters in den Vordergrund. Hierbei wurden zur Realisierung einer ähnlichen Genauigkeit wie bei Voll- bzw. Dünngittern jeweils weniger als halb so viele Freiheitsgrade im Vergleich zu dem entsprechenden Gitter benötigt.

Schließlich erweiterten wir das Potential um einen zeitabhängigen Faktor und benutzten für die Lösung sowohl den Dünngitter- als auch den adaptiven Gitteransatz, um schließlich das Strang-Splitting-Verfahren als Zeitintegration anzuwenden. Wieder wurde der Vorteil des adaptiven Gitters verdeutlicht, da durch das veränderte Potential ein anderes Gitter als im zeitunabhängigen Fall generiert wurde, welches nochmals weniger Freiheitsgrade benötigte. Trotz beträchtlich weniger Freiheitsgrade des adaptiven Gitters stellte dieses den gleichen zeitlichen Verlauf wie das Dünngitter dar, obwohl das adaptive Gitter nur für den Anfangswert generiert wurde, also durch den zeitlichen Verlauf nicht mehr auf das sich verändernde Problem angepasst wurde.

Zusammenfassend konnten wir sowohl durch die Verwendung eines eindimensionalen statt dreidimensionalen Potentials und eines nicht-äquidistanten Gitters den *Fluch der Dimension* eindämmen, wodurch sich der Rechenaufwand stark verringerte. Trotzdem erhielten wir ein gutes approximatives Ergebnis sowohl für ein zeitunabhängiges als auch für ein zeitabhängiges Potential. Wir wurden dabei oft mit dem Problem, dass höhere Genauigkeit nur auf Kosten von mehr Rechenaufwand realisierbar ist, konfrontiert. Als besonders nützlich stellte sich in diesem Zusammenhang das adaptive Gitter heraus. Der Vorteil davon im Vergleich zu dem klassischen Dünngitter war die individuelle, vom Problem abhängige Generierung des Gitters, was zu einer starken Verminderung des Rechenaufwands führte.

### Ausblick

Es verbleiben noch einige interessante Ansätze für weitere Arbeiten. Zunächst wäre eine Erweiterung der von uns betrachteten numerischen Verfahren auf komplexere Beispiele denkbar. Dazu müsste sowohl die Anzahl der betrachteten Atome als auch ihre Elektronen erhöht werden und in diesem Zuge würde das dieser Arbeit zugrunde liegende Programm erweitert werden. Außerdem könnte eine Analyse für unterschiedliche Atomabstände getätigt werden. Um eine bessere Aussage über die Qualität der Approximation zu treffen, würden zusätzlich die von uns berechneten Ergebnisse mit bekannten Ergebnissen aus der Quantenmechanik beziehungsweise

---

der Moleküldynamik verglichen werden.

Außerdem wurde in dieser Arbeit nur ein Fall des Laserterms betrachtet. Deshalb wäre noch das Ausprobieren verschiedener Kombinationen der gewählten Parameter denkbar, um die Auswirkungen unterschiedlicher Ausrichtungen des Lasers im Ort analysieren zu können. Dabei könnte durch verschiedene Wahlen des betrachteten Einheitsvektors  $\mu$  die Richtung, in welche der Laser wirkt, variiert werden. In dieser Arbeit wurde lediglich  $(1, 0)^T$  betrachtet, was bedeutet, dass der Laser einzig parallel zur  $x$ -Achse wirkt. Entlang des betrachteten Feldes kann dieser beliebig gewählt werden und somit ist eine Analyse dieser Effekte denkbar. Zusätzlich führt eine Veränderung der Parameter zu einem Unterschied der Einflüsse der einzelnen Terme. Aus einer Veränderung des sin-Terms folgt eine andere Frequenz im Ort und aus einer anderen Wahl für die Parameter in dem cos-Term kann die Frequenz in der Zeit verändert werden. Je nach Ausmaß der Veränderung wäre es interessant, die Auswirkungen auf das gesamte System zu betrachten, um besonders das Zusammenspiel der einzelnen Komponenten analysieren zu können und ihren Einfluss auf die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion zu beobachten.

Die Amplitude wurde durch die vorangestellte Konstante  $E$  und durch den Exponentialterm bestimmt. Eine Veränderung dieser wäre auch eine interessante Anwendung. In diesem Zusammenhang wäre eine Betrachtung der Auswirkung des Exponentialterms besonders aufschlussreich. Da im Exponenten die Zeit mit einem negativen Vorzeichen steht, läuft dieser Ausdruck folglich gegen Null. Wissenswert wäre hierbei, ob sich damit auch der Einfluss des Laserterms vermindert und ob das System gegen den stationären Fall konvergiert.

Folglich verbleiben noch viele interessante Fragestellungen für weitere Arbeiten.



## Abbildungsverzeichnis

2.1	Elektronen-Doppelspalt schematisch aus: <a href="http://www.physik-theologie.de/kapitel_i.physikalische_grundlagen.html">http://www.physik-theologie.de/kapitel_i.physikalische_grundlagen.html</a> am 9.07.2011 um 12 Uhr . . . . .	7
2.2	Elektronen-Doppelspalt aus: <a href="http://www.physik-theologie.de/kapitel_i.physikalische_grundlagen.html">http://www.physik-theologie.de/kapitel_i.physikalische_grundlagen.html</a> am 9.07.2011 um 12 Uhr . . . . .	7
3.1	Vollgitter Frequenzraum und Realraum . . . . .	21
3.2	Dünngitter Frequenzraum und Realraum . . . . .	21
3.3	Schematische Darstellung der Indexgenerierung bei dem adaptiven Gitter . . . . .	23
5.1	Ausgabe Eigenwerts Vollgitter . . . . .	34
5.2	Fehleranalyse des Eigenwerts auf einem Vollgitter . . . . .	35
5.3	Ausgabe Eigenwerts Dünngitter . . . . .	35
5.4	Fehleranalyse des Eigenwerts . . . . .	36
5.5	Norm Dünngitter . . . . .	37
5.6	Dünngitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.0001$ . . . . .	38
5.7	Dünngitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 1$ . . . . .	39
5.8	Ausgabe Eigenwerts Dünngitter zweidimensional . . . . .	40
5.9	Norm im zweidimensionalen Fall . . . . .	41
5.10	Gitter in 2D Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.1$ . . . . .	42
5.11	Dünngitter in 2D Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 1$ . . . . .	43
5.12	Adaptives Dünngitter . . . . .	44
5.13	Ausgabe Eigenwerts adaptiven Dünngitters . . . . .	45
5.14	Fehleranalyse des Eigenwerts auf einem adaptiven Gitter . . . . .	45
5.15	Norm adaptiv MaxRuns1 . . . . .	46
5.16	Norm adaptiv MaxRuns4 . . . . .	47
5.17	Adaptives Dünngitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.1$ . . . . .	48
5.18	Adaptives Dünngitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 1$ . . . . .	49
5.19	Adaptives Gitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.1$ mit <i>MaxRuns</i> = 4 . . . . .	50
5.20	Norm Dünngitter mit zeitabhängigem Potential . . . . .	51
5.21	Klassisches Dünngitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.0001$ . . . . .	52
5.22	Adaptives Gitter mit zeitabhängigem Potential . . . . .	53
5.23	Adaptives Gitter Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $\tau = 0.1$ . . . . .	54



## Literaturverzeichnis

- [1] M. Bader. *Robuste, parallele Mehrgitterverfahren für die Konvektions-Diffusions-Gleichung*. Herbert Utz Verlag, 2001.
- [2] Satish Balay, Jed Brown, , Kris Buschelman, Victor Eijkhout, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Barry F. Smith, and Hong Zhang. PETSc users manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 3.1, Argonne National Laboratory, 2010.
- [3] Ernest R. Davidson, Stanley A. Hagstrom, Subhas J. Chakravorty, Verena Meiser Umar, and Charlotte Froese Fischer. Ground-state correlation energies for two- to ten-electron atomic ions. *Phys. Rev. A*, 44:7071–7083, Dec 1991.
- [4] S. Fjær. Multidimensional Fourier Transform on Sparse Grids. 2009.
- [5] J. Garcke. Berechnung von Eigenwerten der stationären Schrödingergleichung mit der Kombinationstechnik. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn, 1998.
- [6] T. Gerstner and M. Griebel. Dimension-Adaptive Tensor-Product Quadrature. *Computing*, 71(1):65–87, 2003.
- [7] V. Gradinaru. Fourier Transform on Sparse Grids: Code design and the time dependent Schrödinger equation. *Computing*, 80(1):1–22, 2007.
- [8] V. Gradinaru. Strang Splitting for the time dependent Schrödinger equation on Sparse Grids. *Siam J. Numer. Anal.*, 46:103–123, 2007.
- [9] K. Hallatschek. Fouriertransformation auf dünnen gittern mit hierarchischen Basen. *Numerische Mathematik*, 63(1):83–97, 1992.
- [10] Vicente Hernandez, Jose E. Roman, and Vicente Vidal. SLEPc: A Scalable and Flexible Toolkit for the Solution of Eigenvalue Problems. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 31(3):351–362, September 2005.
- [11] T. Jahnke and C. Lubich. Error bounds for exponential operator splittings. *BIT Numerical Mathematics*, 40(4):735–744, 2000.
- [12] K. Königsberger. *Analysis 1*. Springer, 2004.
- [13] K. Königsberger. *Analysis 2*. Springer, 2004.
- [14] S. Larsson and V. Thomée. *Partielle Differentialgleichungen und numerische Methoden*, volume 45. Springer, 2005.

- [15] C. Lubich. *From quantum to classical molecular dynamics: reduced models and numerical analysis*. European Mathematical Society, 2008.
- [16] M.Griebel and J. Hamaekers. HCFFT: An implementation of the fast Fourier transformation on optimized tensor product spaces of arbitrary dimension. in preperation.
- [17] Franz Schwable. *Quantenmechanik*. Springer, 2002.