Institut für Angewandte Mathematik
der
Universität Bonn

Berechnung von Eigenwerten der stationären Schrödingergleichung mit der Kombinationstechnik

Diplomarbeit

Jochen Garcke

Referent: Prof. Dr. M. Griebel

Bonn, November 1998

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Zahlreiche Phänomene aus den Ingenieur- und Naturwissenschaften können durch partielle Differentialgleichungen beschrieben werden. Für deren numerische Simulation werden die betrachteten Gebiete mit einer Menge von Punkten, dem Diskretisierungsgitter, überzogen und mit Finite-Element oder Finiten-Differenzen-Methoden werden auf diesen approximative Lösungen berechnet. Damit diese Näherungen an die untersuchten Probleme möglichst genau der Realität entsprechen, sind meist sehr viele Diskretisierungspunkte erforderlich, was die Bearbeitung von riesigen Datenmengen zur Folge hat.

Wird ein d-dimensionales Gebiet mit einem äqudistanten Gitter der Maschenweite h diskretisiert, benötigen konventionelle volle Gitter für die Approximation der Lösungsfunktion einer partiellen Differentialgleichung, unter geeigneten Voraussetzungen, $O(h^{-d})$ Punkte für eine Genauigkeit der Näherung von $O(h^2)$. Es ist leicht zu sehen, daß bei höherdimensionalen ($d \geq 3$) Anwendungen die Grenzen heutiger Rechner, und auch absehbarer zukünftiger, erreicht werden, der sogenannte „Fluch der Dimension".

Die von Zenger in [50] vorgestellten dünnen Gitter haben eine deutlich geringere Dimensionsabhängigkeit. Unter ähnlichen Voraussetzungen benötigen sie für eine leicht geringere Genauigkeit von $O(h^2 \log(h^{-1})^{d-1})$ die in höheren Dimensionen deutlich niedrigere Punktanzahl von $O(h^{-1} \log(h^{-1})^{d-1})$.

Griebel et al. führten in [20] mit der Kombinationstechnik ein zweite Möglichkeit zur Bestimmung von Lösungen auf dünnen Gittern ein. Dazu werden die Ergebnisse von Teilproblemen auf vollen Gittern zu einer Dünngitterlösung kombiniert. Die Berechnungen auf den einzelnen Diskretisierungen erfolgen unabhängig voneinander, eine Parallelisierung dieses Verfahrens drängt sich förmlich auf und ist sehr einfach zu realisieren. Ein zweiter Vorteil besteht darin, daß die Punktanzahl der einzelnen Gitter $O(h^{-1})$ beträgt, damit erfolgt während der Berechnung der Teillösungen eine weitere Datenreduktion. Die erwähnten Eigenschaften der Lösung auf dem dünnen Gitter bleiben bei der Kombinationstechnik erhalten.

Anwendungen der Kombinationstechnik wurden bereits für partielle Differentialgleichungen realisiert [21, 24, 36], in dieser Arbeit werden erstmals die Eigenschaften der Kombinationstechnik bei der Lösung von Eigenwertproblemen untersucht. Dabei soll insbesondere die Schrödingergleichung aus der Quantenmechanik betrachtet werden. Die Modellprobleme haben Anwendung in der Astrophysik bei der Untersuchung von starken elektromagnetischen Feldern in der Umgebung von weißen Zwergen und Neutronensternen. Solch große Magnetfelder, wie sie dort existieren, können für physikalische Versuche in Laboratorien nicht erzeugt werden. Die einzige Möglichkeit, die durch starke Magnetfelder verursachten Phänomene zu untersuchen, besteht in der numerischen Simulation.

In dieser Arbeit wird die Schrödingergleichung in der Born-Oppenheimer-Näherung für das Wasserstoffatom und das Heliumatom in drei bzw. sechs Raumdimensionen numerisch behandelt. Die Differenzen der Eigenwerte dieser Gleichungen ermöglichen Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung und die physikalischen Bedingungen in der Sternatmosphäre der erwähnten stellaren Objekte. Eine Reduktion der Anzahl der Dimensionen der Schrödingergleichungen für diese Atome durch weitere Näherungen ist möglich, wird aber in dieser Arbeit bewußt nicht unternommen. Es sollen hier gerade die Möglichkeiten der Kombinationstechnik bei hochdimensionalen Anwendungen untersucht werden. Vergleichsergebnisse von Rechnungen mit anderen Verfahren, in denen Näherungen zur Verringerung der Komplexität benutzt werden, sind zur Beurteilung der Güte der Ergebnisse notwendig. Allerdings werden einige der Eigenschaften, die die Reduzierung der Dimension ermöglichen, in anderer Form benutzt, um den Rechenaufwand zum Teil deutlich zu verringern.

In der vorliegenden Arbeit wird das erste Mal mit Finite-Element-Methoden die Schrödingergleichung für Helium in der Born-Oppenheimer-Näherung in ihren sechs Dimensionen numerisch behandelt. Ohne die Anwendung der Kombinationstechnik wäre die Lösung des dazugehörigen Eigenwertproblems auf heutigen Rechnern nicht realisierbar.

In Kapitel 2 werden die für die Modellprobleme notwendigen (astro-)physikalischen Grundbegriffe eingeführt und die Modellgleichungen beschrieben. Kapitel 3 beinhaltet die numerischen Grundlagen der benutzten Verfahren. Wichtige Punkte der Realisierung der Implementierung im Programm $EigKT$ werden in Kapitel 4 erläutert. Beispielsweise seien hier einige Besonderheiten der numerischen Integration oder die Schwierigkeiten bei der Kombination der Eigenwerte erwähnt. Die numerischen Ergebnisse der Beispielrechnungen werden in Kapitel 5 dargestellt.

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, um mich bei Prof. Dr. M. Griebel für die Überlassung des Themas und die intensive Betreuung meiner Diplomarbeit zu bedanken.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

Die Entdeckung von großen Magnetfeldern in der Umgebung von Weißen Zwergen und Neutronensternen in den späten sechziger Jahren dieses Jahrhunderts führte zur Untersuchung der Strukturen von Materie unter diesen extremen Bedingungen. Die starken Felder verursachen eine drastische Veränderung der atomaren Strukturen, Größen wie Energieniveaus und Wellenlängen mußten und müssen neu bestimmt werden.

Da diese Bedingungen in Laboratorien nicht nachgestellt werden können und da die in der Physik bei dieser Art von Problemen häufig angewandte Störungstheorie auch nicht geeignet ist, wurden und werden numerische Simulationen durchgeführt, um die Eigenschaften von Atomen unter Einfluß von starken äußeren Feldern zu berechnen.

Im folgenden Abschnitt werden einige Grundbegriffe aus der Astrophysik erwähnt, dann werden die benötigten Grundlagen der Quantenmechanik kurz eingeführt und die letztendlich zu berechnenden Problemgleichungen beschrieben.

2.1 Kurzer Einblick in die Physik von Sternen

Die wichtigste Charakteristik eines Sternes ist dessen Spektrum. Aus den daraus resultierenden Wellenlängen kann auf die physikalische Beschaffenheit dieser kosmischen Objekte geschlossen werden.

Atome und Moleküle erzeugen und verschlucken Licht und andere elektromagnetische Strahlung mittels ihrer Elektronen. Wechselt ein Elektron die „Bahn", in diesem Abschnitt bleiben wir bei der nicht ganz korrekten Redeweise von Elektronenbahnen, um die es den Kern umkreist, so absorbiert oder emittiert es dabei Strahlung in Form von vernichteten beziehungsweise erzeugten Photonen. Dabei ist die Energie eines Photons gerade die Differenz der Energieniveaus zweier beteiligter Elektronenbahnen.

Elektronen können nur bestimme Bahnen einnehmen, es findet dabei kein fließender Übergang von einer Elektronenbahn zu einer anderen statt. Die Veränderungen

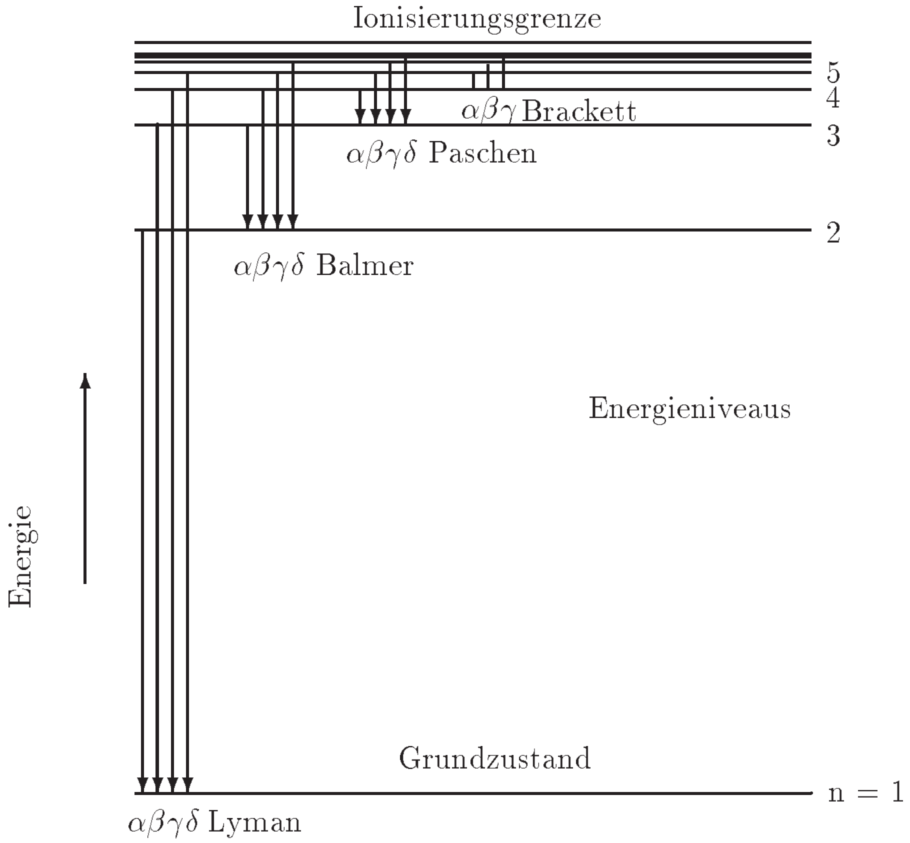


Abbildung 2.1: Grotrian-Diagramm für das Wasserstoffatom. Aufgetragen sind die verschiedenen Energiezustände und die aus ihren Differenzen resultierenden $\alpha, \beta, \ldots$ Linien.

des Aufenthaltsortes eines solchen Teilchens erfolgen in Quanten, d.h. Bahnradien und Energien der Elektronen sind quantisiert. Abbildung 2.1 zeigt exemplarisch die Energiezustände des Wasserstoffatoms, für andere Atome oder Moleküle gibt es entsprechende unverwechselbare Spektren.

Auf Grund dieser Tatsache ist es möglich, aus dem Spektrum eines Sterns auf dessen chemische Zusammensetzung und die physikalischen Bedingungen in der Sternatmosphäre zu schließen. Zu je zwei möglichen Energiezuständen eines Atoms gehört eine charakteristische Wellenlänge im elektromagnetischen Spektrum. Zwischen der Wellenlänge λ eines Photons und seiner Energie E besteht der Zusammenhang durch die Gleichung $E = hc/\lambda$, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist und c die Lichtgeschwindigkeit.

Bei Weißen Zwergen und Neutronensternen, die das Ende der Entwicklung eines Sterns darstellen, existieren extreme physikalische Verhältnisse. Es herrschen riesige Dichten, Drücke und gelegentlich Magnetfelder in Größen von Millionen oder Milliarden von Gauß. Zum Vergleich, das allgemeine Magnetfeld unserer Sonne liegt bei 1 bis 2, das der Erde bei 0,5 Gauß. Durch diese ungewöhnlichen Verhältnisse finden auch gewaltige Veränderungen in den Spektren dieser Objekte statt, es ist also zum

Verständnis des Aufbaus von Sternen in diesen letzten Phasen ihrer Entwicklung wichtig, den Einfluß von starken Magnetfeldern auf Atome zu kennen.

Eine allgemeine Darstellung von Sternen und ihren Spektren findet sich in dem Buch von Kahler [28].

2.2 Einführung in die Quantenmechanik

Die Quantenmechanik ist der mathematische Zugang zur Bestimmung der physikalischen und chemischen Eigenschaften von Objekten auf atomarer Ebene.

Die 1926 von Heisenberg und Schrödinger entwickelte Theorie löst dort die Gesetze der klassischen Mechanik ab, Effekte auf atomarer Ebene, wie das Linien- oder auch das Kontinuumsspektrum strahlender Objekte oder die Stabilität der Atome sind mit klassischer Theorie nicht erklärbar. Der in allen klassischen physikalischen Theorien vorausgesetzte Determinismus und die vorausgesetzte direkte Meßbarkeit aller in den Gesetzen eingehenden bzw. aus ihnen bestimmbaren Größen erwiesen sich damals als nicht geeignet für die Erklärung der Physik auf atomarer Ebene.

Die grundlegende partielle Differentialgleichung der Quantenmechanik ist die sogenannte Schrödingergleichung. Ihre Lösungsfunktionen ψ, meist als Zustandsfunktion oder Wellenfunktion bezeichnet, besitzen ihre physikalische Bedeutung dadurch, daß ihr Betragsquadrat $|\psi|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann. Eine direkte Feststellung des Aufenthaltsort eines betrachteten Teilchens ist hierbei nicht möglich, dies entspricht der Beobachtung, daß für gleichartige Teilchen unterschiedliche Meßergebnisse bei Versuchen festgestellt werden können. Aussagen über einen Zustand können in der Quantenmechanik nur als Wahrscheinlichkeiten angegeben werden.

Für eine umfassende Einführung in die Quantenmechanik sei auf die Lehrbücher [43], [42] und [38] verwiesen.

2.2.1 Die stationäre Schrödingergleichung

Die Quantenmechanik besagt, daß sich die Eigenschaften eines Systems, z.B. eines Atoms oder Moleküls, bestimmen lassen, sofern die Lösung der zugehörigen Schrödingergleichung bekannt ist. Im betrachteten stationären Fall resultiert die Schrödingergleichung in die folgende Eigenwertgleichung

$$H\psi = E\psi.$$

Der sogenannte Hamiltonoperator H ist ein Differentialoperator, er ergibt sich, indem die in der Gleichung der klassischen Mechanik für die Gesamtenergie eines Teilchens der Masse μ auftretenden physikalischen Größen durch Operatoren ersetzt werden. Der Impuls p wird durch den Impulsoperator $-i\hbar\nabla$ und die potentielle Energie durch einen Multiplikationsoperator, der mit der Potentialfunktion U multipliziert, ersetzt. Aus der klassischen Formulierung

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2\mu}p^2 + U$$

ergibt sich damit die quantenmechanische Darstellung

$$H = \frac{1}{2\mu}(-i\hbar\nabla)^2 + U = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U,$$

wobei hier, und im folgenden, ∇ bzw. Δ auf die drei Ortskoordinaten des betrachteten Teilchens wirken.

Für ein Molekül mit K Atomen und N Elektronen erhält man den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{i}^{N} \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \sum_{\alpha}^{K} \frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha \\ &\quad -\sum_{i,\alpha}^{N,K} \frac{eZ_\alpha}{r_{\alpha i}} + \sum_{i<j}^{N} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\alpha<\beta}^{K} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_{\alpha\beta}}. \end{aligned}$$

Die erste Zeile der Gleichung gibt die kinetische Energie der Elektronen bzw. Kerne an, die zweite Zeile enthält die Ausdrücke für die Elektron-Kern-Anziehungskraft und die Abstoßungskraft zwischen Elektron und Elektron bzw. Kern und Kern, jeweils modelliert durch das sogenannte Coulombpotential. Dabei ist Z die Kernladung, M die Masse eines Kerns, m die Elektronenmasse, $r_{\alpha i}$ der Abstand zwischen Kern α und Elektron i, r_{ij} der Abstand zwischen zwei Elektronen und $R_{\alpha\beta}$ der Abstand zwischen zwei Kernen.

Die Berechnung einer Lösung dieses Systems erweist sich immer noch als sehr schwierig, sowohl analytisch als auch numerisch. Die Schrödingergleichung in dieser Form wird in drei Dimensionen pro Teilchen betrachtet, was sowohl analytisch als auch numerisch für größere Moleküle in keinster Weise behandelbar ist. Eine erste Vereinfachung dieser Gleichung erfolgt durch die Born-Oppenheimer-Näherung.

2.2.2 Die Born-Oppenheimer-Näherung

Eine Möglichkeit die Anzahl der Variablen zu reduzieren besteht in der Born-Oppenheimer-Näherung. Da die Atomkerne sich auf Grund ihrer, im Vergleich zu den Elektronen, deutlich größeren Masse viel langsamer bewegen als die Elektronen, geht man in der Born-Oppenheimer-Näherung davon aus, daß sich die Elektronen jeder Bewegung der Kerne sofort anpassen. Es ist also möglich die Bewegung der Elektronen und Kerne voneinander zu trennen. Ist dann für jede Kernanordnung die Elektronenstruktur bekannt, so kann auf dieser Grundlage das Gesamtsystem berechnet werden. In den meisten Fällen ist die Born-Oppenheimer-Näherung sehr gut geeignet, insbesondere wenn nur einzelne Atome betrachtet werden.

Im folgenden fallen also der kinetische Energieterm der Kerne und die Kern-Kern-Wechselwirkungskräfte weg, es bleibt der elektronische Hamiltonoperator übrig, der von den Raumkoordinaten der Elektronen abhängt

$$-\sum_{i}^{N} \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \sum_{i,\alpha}^{N,M} \frac{eZ_\alpha}{r_{\alpha i}} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{r_{ij}}. \tag{2.1}$$

2.2.3 Physikalische Bedeutung der Lösung

Ein quantenmechanisches System existiert in bestimmten diskreten Energiezuständen, zwischen denen kein kontinuierlicher Übergang stattfindet. Die Eigenwerte, mit zugehörigen Eigenfunktionen, des Hamiltonoperators des jeweiliges Systems charakterisieren diese Zustände. Eigenwerte E entsprechen dabei den Energien des Systems, die Eigenfunktionen ψ der Schrödingergleichung können nicht direkt interpretiert werden. Als $|\psi|^2$ betrachtet, besitzt die normierte Wellenfunktion allerdings physikalische Bedeutung, indem sie als Wahrscheinlichkeitsdichte betrachtet wird.

$$\int\limits_{\Omega_1,\ldots,\Omega_n} |\psi(x_1,\ldots,x_N)|^2 dx_1 \ldots dx_N$$

gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß sich ein Elektron in Gebiet Ω_1 aufhält, ein zweites in Ω_2, usw.

Der kleinste Eigenwert beschreibt den energetisch niedrigsten, und damit bevorzugten, Zustand, den sogenannten Grundzustand. Höhere Eigenwerte werden als angereicherte Zustände bezeichnet, sie bilden eine aufsteigende Folge (E_n) von diskreten Werten, die sich bei der Ionisierungsenergie häufen. In Abbildung 2.1 ist das Spektrum das Wasserstoffatoms wiedergegeben.

2.2.4 Spin

Genaue Untersuchung des Wasserstoffspektrums haben gezeigt, daß die Wellenlängen, die nach den bisher eingeführten Gleichungen berechnet werden, geringfügig aber eindeutig von den gemessenen Ergebnissen abweichen. Diese Abweichung ist in erster Linie auf den Eigendrehimpuls des Elektrons zurückzuführen, den sogenannten Spin des Elektrons.

In der klassischen Physik ist für eine Punktmasse ein Eigendrehimpuls nicht erklärbar, daher gibt es für den Spin kein klassisches Analogon. Die Operatoren des Spins können deswegen auch nicht auf die Raumkoordinaten wirken, sie müssen von einer eigenen, der Spinkoordinate, abhängen. Der Spin S, genauer gesagt die Spinquantenzahl des Elektrons, kann nur die zwei Werte $\pm\frac{1}{2}$ annehmen.

Die Größenordnung der Veränderung der Eigenwerte durch den Spin ist bei den von uns betrachteten Problemen ohne äußeres Feld zu vernachlässigen, eine Erweiterung der Schrödingergleichung ist nicht notwendig. Anders sieht dies unter dem Einfluß von elektromagnetischen Feldern aus. Dies soll im nächsten Abschnitt behandelt werden.

2.3 Atomare Systeme in elektromagnetischen Feldern

Betrachten wir ein Teilchen der Masse m und Ladung e in einem Magnetfeld B und einem elektrischen Feld F. Die Darstellung der Felder durch das zugehörige Vektorpotential A und das skalare Potential ϕ

$$F = -\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t} - \nabla\phi, \qquad B = \nabla \times A$$

und durch die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\phi$$

ist aus der klassischen Elektrodynamik bekannt. Durch die Ersetzung von p durch den Impulsoperator erhalten wir die zugehörige Schrödingergleichung

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\phi\right]\psi = E\psi.$$

Ausmultiplizieren ergibt

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\Delta - \frac{\hbar e}{ic}\left(\nabla \cdot A + A \cdot \nabla\right) + \frac{e^2}{c^2}A^2\right) + e\phi\right]\psi = E\psi. \tag{2.2}$$

Der Hamiltonoperator (2.2) enthält nicht die physikalischen Felder sondern deren Potentiale. Diese Potentiale, und somit sowohl der Operator als auch die absoluten Energieeigenwerte, hängen von der konkreten Wahl der Eichung ab. Größen wie Energiedifferenzen oder Übergangswahrscheinlichkeiten sind aber eichunabhängig.

Wir benutzen die Coulomb-Eichung und erhalten damit

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{i\hbar e}{mc}A \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + e\phi\right)\psi = E\psi. \tag{2.3}$$

Im folgenden betrachten wir ein konstantes Magnetfeld B. Dafür gilt

$$A = -\frac{1}{2}[\boldsymbol{x} \times B].$$

Der zweite Term aus (2.3), der einen Teil des Paramagnetismus ausdrückt, erhält damit die Form

$$\frac{i\hbar e}{mc}A \cdot \nabla\psi = \frac{i\hbar e}{mc}(-\frac{1}{2})(\boldsymbol{x} \times B)\nabla\psi.$$

Der dritte Ausdruck, der Diamagnetismus, ergibt sich zu

$$\frac{e^2}{2mc^2}A^2\psi = \frac{e^2}{8mc^2}(\boldsymbol{x} \times B)^2\psi = \frac{e^2}{8mc^2}(\boldsymbol{x}^2B^2 - (\boldsymbol{x} \cdot B)^2)\psi.$$

Oft wird der Zusammenhang noch vereinfacht, indem das Magnetfeld parallel zu einer Koordinatenachse gelegt wird, meist der z-Achse, wobei $\boldsymbol{x} = (x, y, z)$. Damit ergibt sich für (2.3) folgende Darstellung für ein konstantes Magnetfeld B in z-Richtung und einem elektrischen Feld F

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{i\hbar eB_z}{2mc}\begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + \frac{e^2B_z^2}{8mc^2}(x^2 + y^2) + eF \cdot \boldsymbol{x}\right)\psi = E\psi. \tag{2.4}$$

Die Beiträge des Spins können bei der Betrachtung von Elektronen in Magnetfeldern nicht vernachlässigt werden. Bei kleinen Magnetfeldern bezeichnet man die dadurch entstehende Aufspaltung der einzelnen Energieniveaus als Zeemann-Effekt. Ab einer gewissen Magnetfeldstärke ist die Wechselwirkung mit diesem deutlich größer als die Spin-Bahn-Wechselwirkung, die nun festzustellende Entkoppelung von Spin und Bahndrehimpuls bezeichnet man als Paschen-Back-Effekt. Für den kompletten paramagnetischen Anteil muß dann noch ein vom Spin S abhängender Faktor, bei einem konstantes Magnetfeld entlang der z-Achse ist dies $\frac{\hbar e B_z}{2mc} S$, in die Gleichung einbezogen werden.

Die von uns betrachteten Magnetfelder fallen in diesen Bereich. Mit dem zusätzlichen spinabhängigen Term wird aus der Gleichung (2.4) somit

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{i\hbar e B_z}{2mc} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + \frac{\hbar e B_z}{2mc} S + \frac{e^2 B_z^2}{8mc^2}(x^2+y^2) + eF \cdot \boldsymbol{x} \right) \psi = E\psi. \tag{2.5}$$

Magnetfelder können an Hand ihrer Stärke in drei Kategorien eingeteilt werden:

Zum einen gibt es die schwachen Felder. In diesen dominieren die Coulombkräfte und die Magnetfelder können als kleine Störungen betrachtet werden.

Zweitens existieren die intensiven oder riesigen Felder. Dabei können die Coulombkräfte als Störungen der hier dominanten Magnetfelder behandelt werden. Die sogenannten Landau-Zustände bilden dabei die Ausgangsbasis.

Der Bereich zwischen diesen beiden Extremen, meist als starke Magnetfelder bezeichnet, in denen die beiden vorherrschenden Kräfte von vergleichbarer Größe sind, ist am schwierigsten zu behandeln. Die eben erwähnten Störungsansätze können hier nicht mehr angewandt werden. Schwierig erweist sich auch, daß die absolute Größe der Magnetfelder, bei der die beiden Kräfte vergleichbar groß sind, von den betrachten Zuständen abhängt. Der Grundzustand kommt deutlich später in diesen Zwischenbereich und verläßt ihn auch später als höherliegende. Für eine Magnetfeldstärke sind demnach unterschiedliche Effekte bei den verschiedenen Zuständen zu erwarten.

Die in dieser Arbeit behandelten Probleme befinden sich jeweils in diesem Übergangsbereich.

2.4 Behandelte Systeme

In dieser Arbeit werden die kleinsten Eigenwerte von Wasserstoff, dem H_2^+-Ion und Helium sowohl ohne als auch mit äußeren Magnetfeldern betrachtet. Durch die benutzten atomaren Einheiten erhalten wir die folgenden dimensionslosen Schrödingergleichungen.

Für das Wasserstoffatom ergibt sich in atomaren Einheiten, d.h. dem Bohrradius a_0 als Längeneinheit und der Rydbergkonstanten R_∞ als Energieeinheit, nach (2.1) die Gleichung

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}|} \right) \psi = E\psi, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3. \tag{2.6}$$

Die Schrödingergleichung für das H_2^+-Ion in atomaren Einheiten lautet

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{d}|} - \frac{2}{|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}|}\right)\psi = E\psi, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3, \tag{2.7}$$

wobei der Kernabstand $|2\boldsymbol{d}|$ in guter Näherung an gemessene Werte gleich $2a_o$ für den Grundzustand des Ions gesetzt wird.

Beim Heliumatom werden Z-skalierte Einheiten, d.h. von der Kernmasse abhängige Längenheiten und damit auch andere Energieeinheiten, benutzt. Die Energie wird in Z^2R_∞ gemessen und die Längeneinheit ist a_0/Z, mit einer Kernmasse Z von 2 beim Helium. Da das Heliumatom zwei Elektronen besitzt ist die dazugehörige Schrödingergleichung sechsdimensional

$$\left(\sum_{j=1}^{2}\left[-\Delta_j - \frac{2}{|\boldsymbol{x}_j|}\right] + \frac{1}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\right)\psi = E\psi, \quad \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) \in \mathbb{R}^6. \tag{2.8}$$

Für die Berechnung des Spektrums des Wasserstoffatoms in starken Magnet- und elektrischen Feldern kommen wir nach (2.1) und (2.5) mit der Referenzmagnetfeldgröße B_0, elektrischen Feldern in F_0, der Energieeinheit R_∞ und Längenmessung in Bohrradien a_0 zur Gleichung

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}|} - 2i\beta\begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}\cdot\nabla + 4\beta S + \beta^2(x^2+y^2) + F\cdot\boldsymbol{x}\right)\psi = E\psi, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3, \tag{2.9}$$

wobei $\beta = \frac{B_z}{B_0}$ und das Magnetfeld in Richtung der z-Achse liegt.

Die Schrödingergleichung des H_2^+-Ions in einem Magnetfeld in z-Richtung lautet

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{d}|} - \frac{2}{|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}|} - 2i\beta\begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}\cdot\nabla + 4\beta S + \beta^2(x^2+y^2)\right)\psi = E\psi, \ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3. \tag{2.10}$$

Da unter dem Einfluß eines Magnetfeldes sich auch die Kernabstände verändern muß zur Bestimmung seines Grundzustandes das H_2^+-Ion mit variierenden Kernabständen betrachtet werden. Zur mit der Gleichung (2.10) berechneten elektronischen Energie E wird dann der aus den Kern-Kern-Wechselwirkungskräften resultierende Wert $|\boldsymbol{d}|^{-1}$ addiert um die Bindungsenergie des Ions zu bestimmen. Der Kernabstand, der die niedrigste Energie aufweist, ist der Grundzustand.

In Z-skalierten atomaren Einheiten erhalten wir zur Berechnung der Energien eines Heliumatoms in einem Magnetfeld die Gleichung

$$\begin{aligned}\left(\sum_{j=1}^{2}\left[-\Delta_j - \frac{2}{|\boldsymbol{x}_j|} - 2i\beta\begin{pmatrix} y_j \\ -x_j \\ 0 \end{pmatrix}\cdot\nabla + 4\beta S_j + \beta^2(x_j^2+y_j^2)\right]\right. \\ \left. + \frac{1}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\right)\psi &= E\psi,\end{aligned} \tag{2.11}$$

mit $\beta = \frac{B_z}{Z^2\cdot B_0}$ und wiederum $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) \in \mathbb{R}^6$.

Kapitel 3

Numerische Grundlagen

Viele Modelle aus den Natur-, Technik- und Wirtschaftswissenschaften führen zu gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Beispiele für partielle Differentialgleichungen sind die Navier-Stokes-Gleichung der Strömungsmechanik, die Cahn-Hilliard-Gleichung zur Modellierung der Phasentrennung in Metallegierungen, die Ginsburg-Landau-Gleichung zur Beschreibung von Supraleitern oder die in dieser Arbeit behandelte Schrödingergleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Zur numerischen Lösung dieser Probleme werden hauptsächlich Finite Differenzen oder, wie in dieser Arbeit, Finite-Element-Methoden benutzt. Die Grundbegriffe für diese Methode und die Grundlagen der dünnen Gitter und der darauf basierenden Kombinationstechnik werden in diesem Kapitel eingeführt. Der letzte Abschnitt beschäftigt sich mit der Theorie der benutzten Eigenwertlöser.

3.1 Variationsformulierung des Eigenwertproblems

Die von uns betrachteten linearen elliptischen Differentialoperatoren zweiter Ordnung in d unabhängigen Variablen $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_d)$ haben die allgemeine Form

$$Lu(\boldsymbol{x}) := -\sum_{i,j=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(\boldsymbol{x})\frac{\partial u(\boldsymbol{x})}{\partial x_j}\right) + c(\boldsymbol{x})u(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d \tag{3.1}$$

mit $a_{ij} = a_{ji}$ und reellwertigen Funktionen a_{ij}, c und u oder

$$Lu(\boldsymbol{x}) := -\sum_{i,j=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{ij}(\boldsymbol{x})\frac{\partial u(\boldsymbol{x})}{\partial x_j}\right) + \sum_{i=1}^{d} b_i(\boldsymbol{x})\frac{\partial u(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} + c(\boldsymbol{x})u(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d, \tag{3.2}$$

wobei $a_{ij} = a_{ji}$ und a_{ij} und c sind reellwertige bzw. b_i und u sind komplexwertige Funktionen.

Gesucht werden Eigenwerte λ und Eigenfunktionen $u \neq 0$ mit

$$\begin{aligned} Lu(\boldsymbol{x}) &= \lambda u(\boldsymbol{x}) && \text{für } \boldsymbol{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \\ u(\boldsymbol{x}) &= 0 && \text{für } \boldsymbol{x} \in \Gamma = \partial\Omega. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Die in dieser Arbeit behandelte stationäre Schrödingergleichung besteht aus dem Laplaceoperator

$$-\Delta = -\sum_{i=1}^{d} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

und einem ortsabhängigen Potential P mit

$$P : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}.$$

Bei einigen Beispielen haben wir zusätzlich den konvektionsartigen Term $iA \cdot \nabla$ mit einem Vektorpotential A

$$A : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d.$$

Im ersten Fall sind die Lösungsfunktionen u reellwertig, beim zweiten komplexwertig. Auf dem Rand vom Ω gilt die sogenannte homogene Dirichlet-Randbedingung $u(\boldsymbol{x}) = 0$.

Um zur Variationsformulierung zu gelangen, wird dem elliptischen Differentialoperator L eine Bilinearform $a(\cdot,\cdot)$ zugeordnet

$$a(u,v) := (Lu, v)_{0,\Omega},$$

mit dem Skalarprodukt

$$(\cdot,\cdot)_{0,\Omega} := \int_\Omega u \cdot \overline{v}.$$

Die zum Laplaceoperator $-\Delta$ gehörige Bilinearform ist zum Beispiel

$$a(u,v) = (\nabla u, \nabla v)_{0,\Omega}.$$

Die Gleichung

$$\begin{aligned} a(u,\varphi) &= \lambda\,(u,\varphi)_{0,\Omega} && \forall\,\varphi \in V = H_0^1(\Omega), \\ u &= 0 && \text{auf } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.4}$$

die das Lösungspaar $(\lambda, u), \lambda \in \mathbb{R},\ u \in V$ beschreibt, ist die Variationsformulierung der Gleichung (3.3).

Wie üblich definieren wir für eine Bilinearform a:

a ist symmetrisch im reellen Fall bzw. selbstadjungiert im komplexen Fall, g.d.w.

$$a(u,v) = a(v,u) \quad \text{bzw.} \quad a(u,v) = \overline{a(v,u)},$$

a ist stetig, g.d.w.

$$|a(u,v)| \le C_S \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V$$

und a ist V-elliptisch, g.d.w.

$$a(u,u) \ge c_E \|u\|_V^2 \quad \forall u \in V.$$

Satz 1 *Für eine stetige, symmetrische (bzw. selbstadjungierte) und V-elliptische Bilinearform a gilt bezüglich der Existenz und der Charakterisierung der Lösungen des Eigenwertproblems (3.4):*
Es existiert eine aufsteigende Folge $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$, die alle Eigenwerte der Bilinearform a enthält (mit Vielfachheit gezählt). Es gilt

$$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_k \leq \lambda_{k+1} \leq \cdots \text{mit} \lim_{k\to\infty} \lambda_k = \infty.$$

Die dazugehörigen Eigenfunktionen u_k, $k \geq 1$, können so gewählt werden, daß sie ein Orthonormalsystem bilden, d.h. es gilt

$$a(u_k, u_l) = \lambda_k \delta_{kl}, \quad (u_k, u_l)_{0,\Omega} = \delta_{kl}, \quad k, l \geq 1.$$

An Literatur zur Lösung von Eigenwertproblemen resultierend aus partiellen Differentialgleichungen sei hier auf [3] verwiesen.

Die von uns betrachtete Schrödingergleichung kann zwar, abhängig vom Potential P, negative Eigenwerte haben und ist in diesem Fall nicht V-elliptisch. Durch Benutzung des Potentials $\tilde{P} = P + c$, $c > 0$ und der daraus resultierenden Gleichung

$$\begin{aligned} \tilde{a}(u,\varphi) = a(u,\varphi) + c\,(u,\varphi)_{0,\Omega} &= (\lambda + c)(u,\varphi)_{0,\Omega} && \forall\, \varphi \in V = H_0^1(\Omega), \\ u &= 0 && \text{auf } \Gamma, \end{aligned}$$

mit der positiv definiten und damit V-elliptischen Bilinearform $\tilde{a}(u,\varphi)$ gelten aber die Voraussetzungen von Satz 1 und die Lösungspaare (λ, u) dieser modifizierten Gleichung entsprechen den ursprünglichen Lösungen von (3.4).

3.2 Finite Elemente

Ein Weg zur numerischen Behandlung von partiellen Differentialgleichungen besteht in der Methode der Finiten Elemente. Dabei wird die Variationsformulierung des Problems betrachtet. Die gesuchte numerische Lösung u_h wird dann als eine Linearkombination von Funktionen φ_h aus einem endlichdimensionalen diskreten Funktionenraum V_h bestimmt.

Die zu lösende Eigenwertgleichung für die Finite-Element-Approximation in einem diskreten Funktionenraum $V_h \subset H_0^1(\Omega)$ lautet somit

Finde $\lambda_h \in \mathbb{R}$ und $u_h \in V_h \setminus \{0\}$ so, daß

$$a(u_h, \varphi_h) = \lambda_h\,(u_h, \varphi_h)_{0,\Omega} \quad \forall \varphi_h \in V_h. \tag{3.5}$$

Das gesuchte u_h hat die Darstellung

$$u_h = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i,$$

wobei $\{\varphi_i\}_{i=1}^{N}$ eine Basis von V_h ist.

Damit erhalten wir ein Eigenwertproblem in Matrixform

$$Ac = \lambda_h Mc, \tag{3.6}$$

mit $A = [a(\varphi_i, \varphi_j)]_{1 \le i,j \le N}$, $M = [(\varphi_i, \varphi_j)_{0,\Omega}]_{1 \le i,j \le N}$ und $c = (c_1, ..., c_N) \neq 0$, das äquivalent zu (3.5) ist.

Das Gebiet Ω wird in geometrisch einfache Teilgebiete zerlegt, z.B. Dreiecke oder Rechtecke in der Ebene, mit mitunter notwendiger besonderer Randapproximation bei krummlinig berandeten Gebieten. Wir benutzen in allen Dimensionen Quader. Charakterisiert wird diese Zerlegung über die sogenannnten Gitterpunkte. Die Quader lassen sich dann durch ihre Eckpunkte beschreiben. Die Basisfunktionen φ_i werden dann über diese Teilgebiete definiert und ihre Träger sind lokal, sie existieren nur auf einigen Elementen der Zerlegung.

Zur Sicherung globaler Eigenschaften, wie Stetigkeit oder stetige Differenzierbarkeit, werden unter Umständen weitere Bedingungen an die Basisfunktionen, betreffend den Übergang zwischen den Teilgebieten, gestellt.

Eine Einführung in die Methode der Finiten Elemente findet sich z.B. in [9], [22] und [5].

3.3 Kombinationstechnik

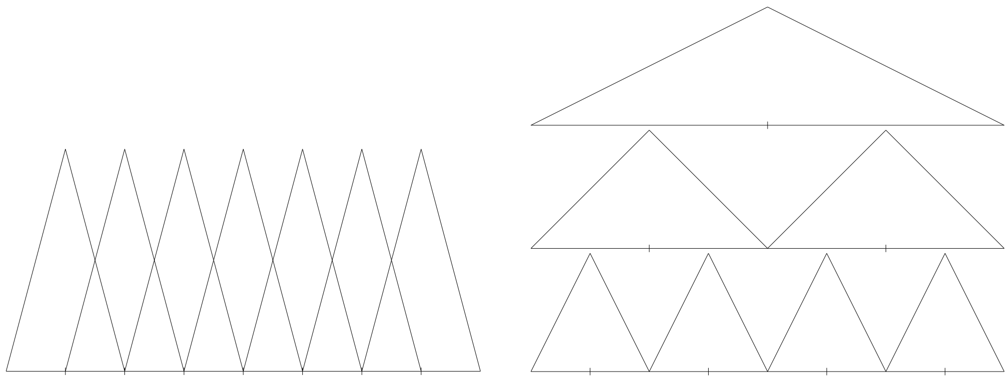
Das in dieser Arbeit zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen benutzte Verfahren ist die auf dem Dünngitterverfahren basierende Kombinationstechnik. Im Gegensatz zu herkömmlichen Methoden erreicht die Dünngittertechnik mit deutlich weniger Punkten annähernd gleiche Genauigkeit bei der Darstellung von Funktionen. Besonders bei hochdimensionalen Problemen kommen bisherige Methoden schnell an die Speichergrenzen heutiger Rechner. Bei der Düngittertechnik ist die Dimensionsabhängigkeit der Punktanzahl deutlich kleiner. Allerdings erfordert die Dünngittertechnik stärkere Voraussetzungen an die Regularität der zu approximierenden Funktion.

3.3.1 Hierarchische Basis

Hierarchische Basen [49] sind eine zu den konventionellen nodalen Basen äquivalente Darstellungsmöglichkeit eines diskreten Funktionenraumes. In diesem Abschnitt werden diese beiden Begriffe erläutert.

Wir betrachten äquidistante Gitter auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [0,1]^d$. $\Omega_{n_1,...,n_d}$ ist das Gitter mit Maschenweite $h_j = 2^{-n_j}$ in der j-ten Raumrichtung. Der Raum $S_{n_1,...,n_d}$ ist der zu dem jeweiligen Gitter gehörende Raum der stückweise multilinearen Funktionen.

Beschränken wir uns zunächst auf den eindimensionalen Fall mit äquidistanten Gittern im Intervall [0,1]. Wir vernachlässigen die Randfunktionen, denn bei den von uns behandelten Problemen haben wir 0-Randwerte, d.h. wir benötigen dementsprechend keine Basisfunktionen für den Rand.



(a) Nodale Basis B_3 (b) Hierarchische Basis H_3

Abbildung 3.1: Nodale und hierarchische Basis der Tiefe 3

Herkömmliche Finite-Element-Ansätze benutzen nodale Basisfunktionen, d.h. die Basisfunktionen φ_i sind am Gitterpunkt x_i gleich Eins, an allen anderen Gitterpunkten Null

$$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}.$$

Bei linearen Ansatzfunktionen in jedem Teilintervall ergibt sich damit für ein Element φ_i der nodalen Basis des Level k, bezeichnet mit B_k, im zugehörigen Trägerintervall die Darstellung

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 1 - \frac{x_i - x}{h} & , \quad x \in [x_i - h, x_i] \\ 1 + \frac{x_i - x}{h} & , \quad x \in [x_i, x_i + h] \end{cases} , \quad 1 \leq i < 2^k$$

mit $x_i = i \cdot 2^{-k}$ und $h = 2^{-k}$, siehe Abbildung 3.1(a) für die Basis B_3. Ansätze mit quadratischen, kubischen, etc. Basiselementen liefern entsprechende Formeln.

Im hierarchischen Ansatz sind die Basisfunktionen nicht mehr nur punktbezogen, sondern weisen zusätzlich eine Level- oder auch Schichtstruktur auf, dieses zeigt sich in den unterschiedlich großen Trägern der Basisfunktionen:

$$\tilde{\varphi}_{i,l}(x) = \begin{cases} 1 - \frac{x_i - x}{h_l} & , \quad x \in [x_i - h_l, x_i] \\ 1 + \frac{x_i - x}{h_l} & , \quad x \in [x_i, x_i + h_l] \end{cases} , \quad 1 \leq i < 2^l, \quad 1 \leq l \leq k$$

mit $x_i = i \cdot 2^{-l}$ und $h_l = 2^{-l}$.

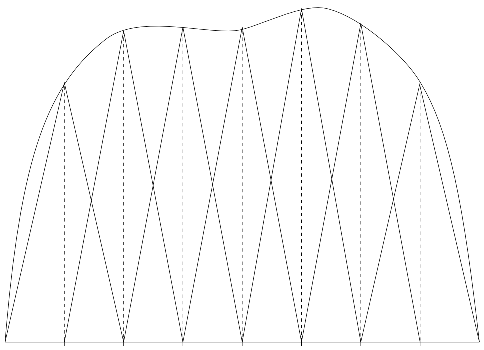
Wir definieren die hierarchische Basis des Level k, bezeichnet mit H_k, wie folgt

$$H_k = \{\tilde{\varphi}_{i,l} | l \leq k \text{ und } i \bmod 2 = 1\},$$

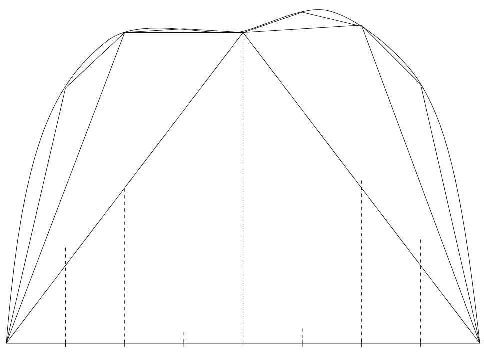
in Abbildung 3.1(b) ist die Basis H_3 dargestellt.

Die entsprechende, d.h. mit gleicher Anzahl von Basisfunktion, nodale Basis wird mit den Basisfunktionen $\tilde{\varphi}_{i,l}$ definiert durch

$$B_k = \{\tilde{\varphi}_{i,l} | l = k\}.$$



(a) Interpolation durch die nodale Basis B_3



(b) Interpolation durch die hierarchische Basis H_3

Abbildung 3.2: Unterschiede bei der Darstellung einer Funktion durch eine nodale bzw. eine hierarchische Basis. Die Größen der Gewichte der Basisfunktionen sind gestrichelt dargestellt.

Zur unterschiedlichen Interpolation einer Funktion durch nodale bzw. hierarchische Basisfunktion sei auf die Abbildungen 3.2 verwiesen.

Als Teilmenge T_k definieren wir die Basisfunktionen von H_k, die in H_{k-1} nicht enthalten sind

$$T_k = \{\tilde{\varphi}_{i,l} | l = k \text{ und } i \bmod 2 = 1\}.$$

Bewegen wir uns nun wieder in den d-dimensionalen Raum, für Rechteckelemente wird nun eine mehrdimensionale hierarchische Basis als Tensorprodukt eindimensionaler Basen definiert durch

$$H_{k_1,\dots,k_d} = H_{k_1} \otimes \dots \otimes H_{k_d}.$$

Analog definieren wir die mehrdimensionale nodale Tensorproduktbasis $B_{k_1,\dots,k_d}$ und die mehrdimensionalen Teilräume $T_{k_1,\dots,k_d}$. Der von $B_{k_1,\dots,k_d}$ und auch $H_{k_1,\dots,k_d}$ aufgespannte diskrete Funktionenraum wird mit $S_{k_1,\dots,k_d}$ bezeichnet.

Die Basisfunktionen der hierarchischen Teilräume $T_{k_1,\dots,k_d}$ sind die Elemente aus $H_{k_1,\dots,k_d}$, die nicht in den Basen $H_{k_1-1,\dots,k_d}$ bis $H_{k_1,\dots,k_d-1}$ enthalten sind. Oder anders gesagt, die Basisfunktionen aus $T_{k_1,\dots,k_d}$ verschwinden auf den Punkten der Gitter $\Omega_{k_1-1,\dots,k_d}$ bis $\Omega_{k_1,\dots,k_d-1}$,

$$T_{k_1,\dots,k_d} = \{u \in H_{k_1,\dots,k_d} | u \notin H_{k_1-1,\dots,k_d} \cup \dots \cup H_{k_1,\dots,k_d-1}\}.$$

Siehe auch Abbildung 3.3 für eine Übersicht der hierarchischen Teilräume des diskreten Funktionenraums $S_{4,4}$.

Die Funktionen aus $T_{k_1,\dots,k_d}$ sind eindeutig beschrieben durch ihre nicht überlappenden Träger. Die Größe des Trägers eines Element in Richtung der x_j Koordinate beträgt $\frac{1}{2^{k_j}}$. Desweiteren gilt per Definition

$$H_{n_1,\dots,n_d} = \bigcup_{k_1=1}^{n_1} \dots \bigcup_{k_d=1}^{n_d} T_{k_1,\dots,k_d}.$$

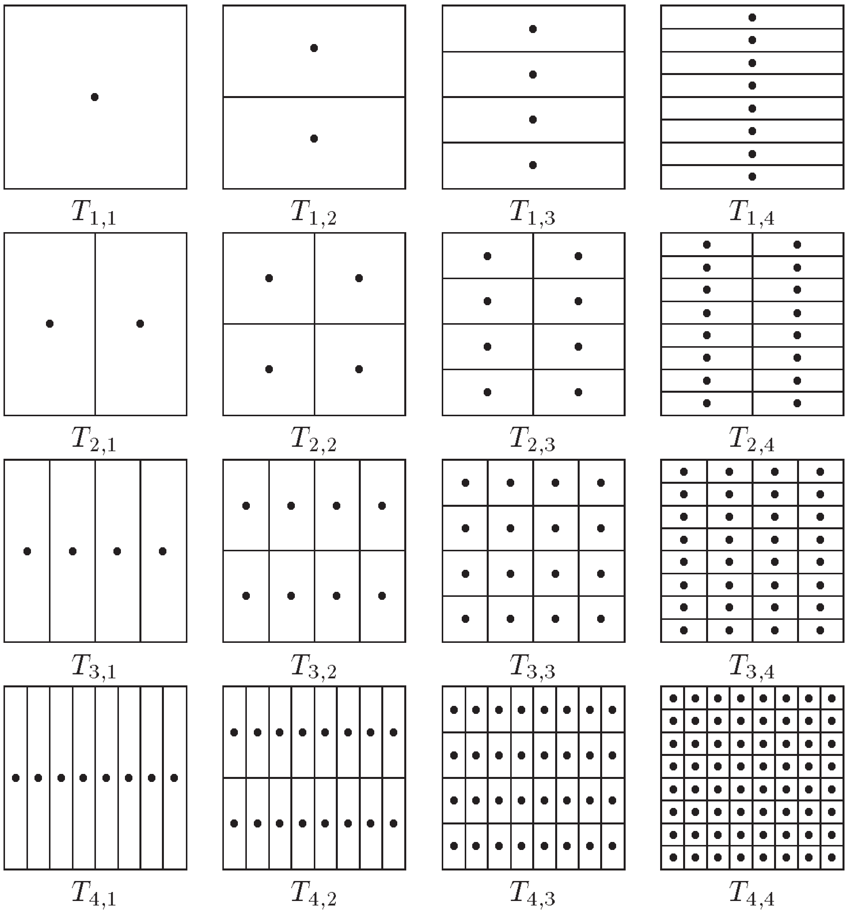


Abbildung 3.3: Träger der hierarchischen Basisfunktionen des Raumes $S_{4,4}$

Für den hierarchischen Interpolanten

$$u_n = \sum_{i_1=1}^{n} \cdots \sum_{i_d=1}^{n} u_{i_1,\ldots,i_d} \in T_{i_1,\ldots,i_d}$$

einer Funktion u wurde in [7] gezeigt, daß, unter bestimmten Glattheitsvoraussetzungen an die darzustellende Funktion, der Anteil einer hierarchischen Basisfunktion an der Approximation durch die Größe des Trägers dieser Basisfunktion nach oben beschränkt ist, d.h. es gilt

$$\|u_{i_1,\ldots,i_d}\|_\infty \leq C(|u|_\infty, d) h_{i_1}^2 \cdot \ldots \cdot h_{i_d}^2$$

mit

$$|u|_\infty := \|\frac{\partial^{2d} u}{\partial x_1^2 \ldots \partial x_d^2}\|_\infty .$$

Entsprechende Aussagen gelten für die $\|\cdot\|_2$ Norm mit analog definierter $|\cdot|_2$ Seminorm.

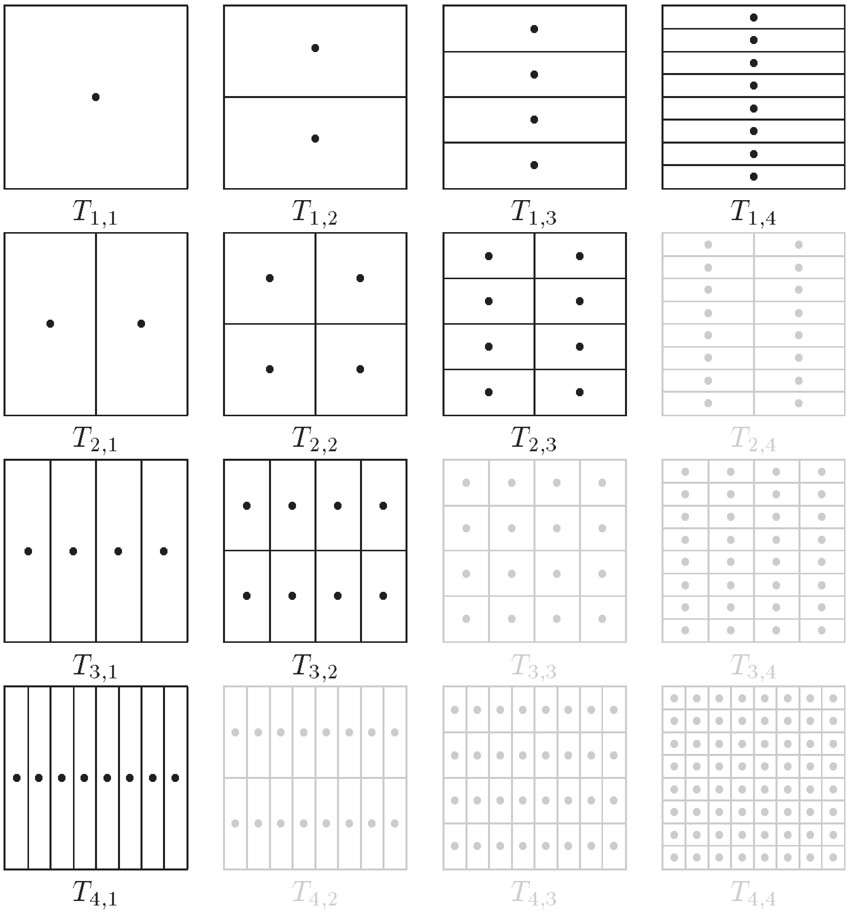


Abbildung 3.4: Hierarchische Basisfunktionen des Dünngitterraumes S_4^S

3.3.2 Dünne Gitter

Zenger zeigte in [50] den Zusammenhang zwischen der Größe des Trägers einer hierarchischen Basisfunktion und dessen Anteil an der Interpolation einer Funktion das erste Mal für den zweidimensionalen Fall. Ausgehend von dieser Erkenntnis wurden dort die sogenannten dünnen Gitter (Sparse Grids) definiert, in denen hierarchische Basisfunktionen mit kleinem Träger nicht mehr zum Ansatzraum gehören.

Ein dünnes Gitter Ω_n^s der Stufe n wird wie folgt definiert:

$$\Omega_n^s = \bigcup_{i_1+\ldots+i_d \leq n+d-1} \Omega_{i_1,\ldots,i_d}.$$

Für eine Funktion u_n^s aus dem zugehörigen Dünngitterfunktionenraum S_n^s gilt die Darstellung

$$u_n^s = \sum_{i_1+\ldots+i_d \leq n+d-1} u_{i_1,\ldots,i_d}, \qquad u_{i_1,\ldots,i_d} \in T_{i_1,\ldots,i_d}.$$

Man betrachte Abbildung 3.4 für die Teilbasen des Raumes S_4^s.

	volles Gitter	dünnes Gitter
Anzahl Punkte	$O(N^d)$	$O(N \log(N)^{d-1})$
Approximationsgüte	$O(N^{-2})$	$O(N^{-2} \log(N)^{d-1})$
Glattheitsvoraussetzungen	$u \in H^2$	$\lvert u \rvert_2 = \lVert \frac{\partial^{2d} u}{\partial x_1^2 \dots \partial x_d^2} \rVert_2 < \infty$

Tabelle 3.1: Vergleich der Eigenschaften dünner Gitter mit denen voller Gitter

Die Anzahl der Punkte für ein dünnes Gitter liegt in $O(N \log(N)^{d-1})$ im Gegensatz zu $O(N^d)$ bei einem vollen Gitter. Hierbei ist $N = 2^n - 1$ die Punktzahl in einer Raumrichtung bei einem vollen Gitter. Für die Genauigkeit der Darstellung gilt die Ordnung $O(N^{-2} \log(N)^{d-1})$ bei einem dünnen Gitter im Gegensatz zu $O(N^{-2})$ bei einem vollen Gitter derselben Tiefe n. Allerdings erfordern dünne Gitter eine höhere Glattheit der zu approximierenden Funktion, die gemischten höheren Ableitungen müssen beschränkt sein. Für volle Gitter gilt die Aussage schon für Funktionen aus H^2, siehe auch Tabelle 3.1 für ein Übersicht der Eigenschaften von dünnen und vollen Gittern.

Bei Problemen, die die Glattheitsvoraussetzungen nicht mehr erfüllen, und damit die Approximationsgüte nicht mehr gegeben ist, kann bei dünnen Gittern, wie bei vollen Gittern, durch Adaptivität die Ordnung der Approximation wieder auf ein akzeptables Niveau gebracht werden.

Ein Nachteil der dünnen Gitter besteht in der Nichtlokalität der hierarchischen Basisfunktionen, daraus resultieren, im Vergleich zum konventionellen Finite-Element-Ansatz, voller besetzte Matrizen, die aber eine kleinere Matrixdimension besitzen. Weiterhin sind zur Verwaltung der Hierarchie spezielle Datenstrukturen notwendig, vorhandene Algorithmen zur Behandlung von konventionellen Gittern können nicht benutzt werden.

3.3.3 Kombinationstechnik

Eine andere Möglichkeit Lösungen auf dünnen Gittern zu erhalten besteht in der Kombinationstechnik, die von Griebel et al. in [20] eingeführt wurde. Dazu werden Lösungen auf vollen Gittern berechnet und diese dann geeignet zusammengefaßt,

$$u_n^c = \sum_{l=0}^{d-1} (-1)^l \binom{d-1}{l} \sum_{i_1+\ldots+i_d=n+(d-1)+l} u_{i_1,\ldots,i_d}, \qquad u_{i_1,\ldots,i_d} \in S_{i_1,\ldots,i_d}. \tag{3.7}$$

In Abbildung 3.5 sind die benötigten vollen Teilgitter der Kombinationstechnik für ein Beispiel in zwei Raumdimensionen dargestellt.

In [20] wurde gezeigt, daß der mit der Kombinationstechnik erhaltene Interpolant u_n^c gleich dem Interpolanten u_n^s im Dünngitterraum S_n^s ist.

Diese Überlegungen legen natürlich nahe auch Lösungen von partiellen Differentialgleichungen auf dünnen Gittern als Kombination von Lösungen von vollen Gittern zu erhalten. Die so erhaltenen Kombinationslösungen entsprechen allerdings i.a. nicht den Lösungsfunktionen aus dem ursprünglichen Dünngitteransatz. Der Fehler der

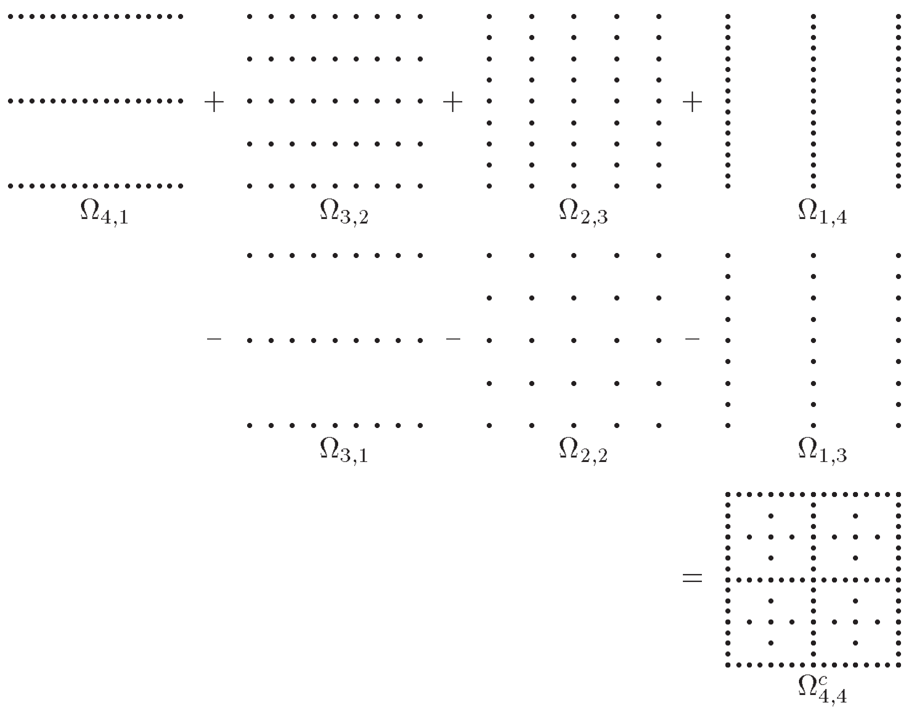


Abbildung 3.5: Kombinationstechnik für ein dünnes Gitter der Stufe 4

Kombinationstechnik bei der Approximation von Lösungen von partiellen Differentialgleichungen ist aber von derselben Ordnung $O(N^{-2}\log(N)^{d-1})$ wie beim normalen Düngitteransatz, siehe ebenfalls [20].

Auch Lösungen von Eigenwertproblemen können mit der Kombinationstechnik berechnet werden. Es ist dabei allerdings zu beachten, daß die Eigenfunktionen sich auf die verschiedenen Teilräume aufspalten und die Eigenwerte, über deren Charakterisierung durch den Rayleigh-Quotienten

$$RQ(u) = \frac{a(u,u)}{(u,u)_{0,\Omega}}, \quad u \in V \setminus \{0\},$$

als Funktional über ihre Eigenfunktionen zu betrachten sind. Dieses Eigenwertfunktional kann nun über die Kombinationsformel (3.7) berechnet werden. Dabei tauchen allerdings prinzipielle Probleme auf, diese werden im Abschnitt 4.7 genauer beschrieben und Ansätze sie zu lösen vorgestellt.

Der entscheidene Vorteil der Kombinationstechnik ist die voneinander unabhängige Berechnung von Lösungen auf relativ kleinen vollen Gittern. Zur Bestimmung der gesuchten Funktionen können existierende Verfahren benutzt werden, allein die letztendliche Kombination der Ergebnisse ist neu zu implementieren. Auch sind die jeweils zu berechnenden vollen Gittern offensichtlich kleiner als das gesamte dünne Gitter. Die Anzahl der Punkte der Teilprobleme liegt in $O(N)$, ein weiteres Mal wird also weniger Speicher während der eigentlichen Lösung eines Problems benötigt.

Der Aufwand zur Berechnung einer Dünngitterlösung erhöht sich allerdings. Zum einen gehören Punkte zu mehreren Gittern. Es werden also mehrmals dort Lösungen berechnet. Zum anderen gibt es viele Gitter mit deutlich unterschiedlicher Punktanzahl in den einzelnen Dimensionen, dadurch verursacht sind stark unterschiedliche Längenverhältnisse in der Diskretisierung. Die Konvergenz dieser stark anisotropen Probleme ist, zum Teil deutlich, schlechter als bei Gittern mit gleichverteilter Punktanzahl in den Dimensionen.

Ein weiterer Nachteil der Kombinationstechnik besteht in der schwierig zu realisierenden Adaptivität der Gitter, es muß auf allen Gittern gleich verfeinert werden, die zugrundeliegende Struktur muß beibehalten werden.

3.3.4 Gradierte Gitter

Um die Genauigkeit einer Lösung einer partiellen Differentialgleichung zu erhöhen ist es notwendig die Gitterweite zu verkleinern. Im allgemeinen ist es aber nicht notwendig überall gleich zu verfeinern, wenn z.B. Singularitäten vorhanden sind, muß in deren Umgebung die Gittermaschenweite besonders klein sein, in anderen Teilen des Problemgebietes, in denen die Lösungsfunktion glatt ist, ist eine solch geringe Gitterfeinheit aber gar nicht notwendig. Es sollte also möglich sein, unterschiedliche Feinheiten des Gitters zur Diskretisierung zu benutzen.

Bei herkömmlichen Finite-Element-Ansätzen und auch bei normalen Dünngitterverfahren wird dafür lokal verfeinert. Durch Fehlerschätzer wird während der Laufzeit des Verfahrens festgestellt wo die Darstellung der Lösung noch zu große Fehler hat und dort werden zusätzliche Punkte eingefügt.

Bei der Kombinationstechnik ist eine solche punktbezogene lokale Adaptivität nicht so einfach möglich. Die Aufteilung des dünnen Gitters auf die Teilprobleme ist bei den entstehenden unstrukturierten Gittern nicht ohne weiteres realisierbar. In [36] wurden zusammengesetzte dünne Gitter eingeführt. Die Verfeinerung besteht darin, ein ganzes dünnes Gitter eines Level lokal einzufügen, dadurch ist auch eine Aufteilung der Verfeinerung auf die einzelnen Kombinationsgitter möglich.

Eine einfache Möglichkeit, vorhandene äquidistante Gitter an die zu bestimmende Funktion anzupassen, besteht in der Gradierung der Gitter. Für die Kombinationstechnik wurde dies in [21] eingeführt. Hierbei wird durch eine Gradierungsfunktion

$$g(x) \mapsto y, \quad x, y \in [a; b]$$

von vornherein vorgeschrieben wie die Positionen der Gitterpunkte zu verändern sind, d.h. jeder Punkt des äquidistanten Ursprungsgitters wird auf einen Punkt des gradierten Gitters mittels der Gradierungsfunktion abgebildet. Dieses geschieht getrennt in den einzelnen Dimensionen, damit die dem Gitter zugrundeliegende Rechteckstruktur beibehalten wird. In den jeweiligen Dimensionen können nach Bedarf auch unterschiedliche Gradierungsfunktionen benutzt werden. Dieser Ansatz wird in der hier vorgestellten Arbeit realisiert.

In Abbildung 3.6 ist ein Beispielgraph einer Gradierungsfunktion und der daraus resultierenden Veränderung des Gitters dargestellt. Ein Beispiel für ein durch die

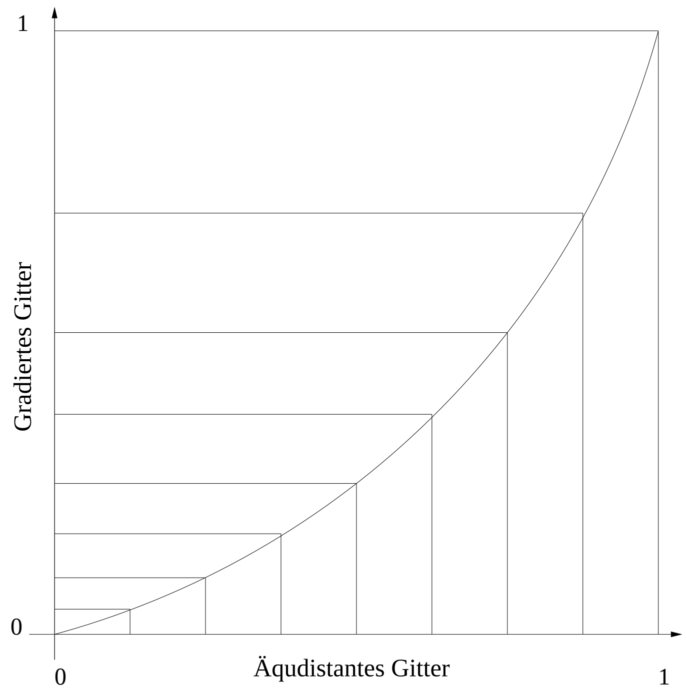


Abbildung 3.6: Die Punkte eines äquidistanten Gitters werden auf gradierte Gitter abgebildet. Dargestellt ist der Graph der Gradierungsfunktion und die daraus resultierende Transformation des äquidistanten Gitters.

Kombinationstechnik mit gradierten Gittern erhaltenes dünnes Gitter befindet sich in Abbildung 3.7.

3.3.5 Parallelisierung der Kombinationstechnik

Die Lösung der einzelnen Teilprobleme der Kombinationstechnik sind voneinander unabhängig. Ihre Berechnung kann parallel erfolgen. Nach der Bestimmung aller Teillösungen werden diese dann zur eigentlichen Kombinationslösung zusammengefaßt.

Die Kombinationstechnik eignet sich somit sehr gut zur Nutzung von parallelen Rechenkapazitäten. Sie ist mit äußerst geringen Aufwand auf einem hohen und kommunikationsarmen Parallelisierungsniveau implementierbar.

3.4 Numerische Behandlung von Eigenwertproblemen

Aus der Problemstellung erhalten wir ein allgemeines Eigenwertproblem der Form

$$Ax = \lambda Mx \tag{3.8}$$

mit den $n \times n$ Matrizen A, M. Dabei hat A komplexe Einträge und ist selbstadjungiert, M hat reelle Einträge und ist symmetrisch und positiv definit, x ist ein

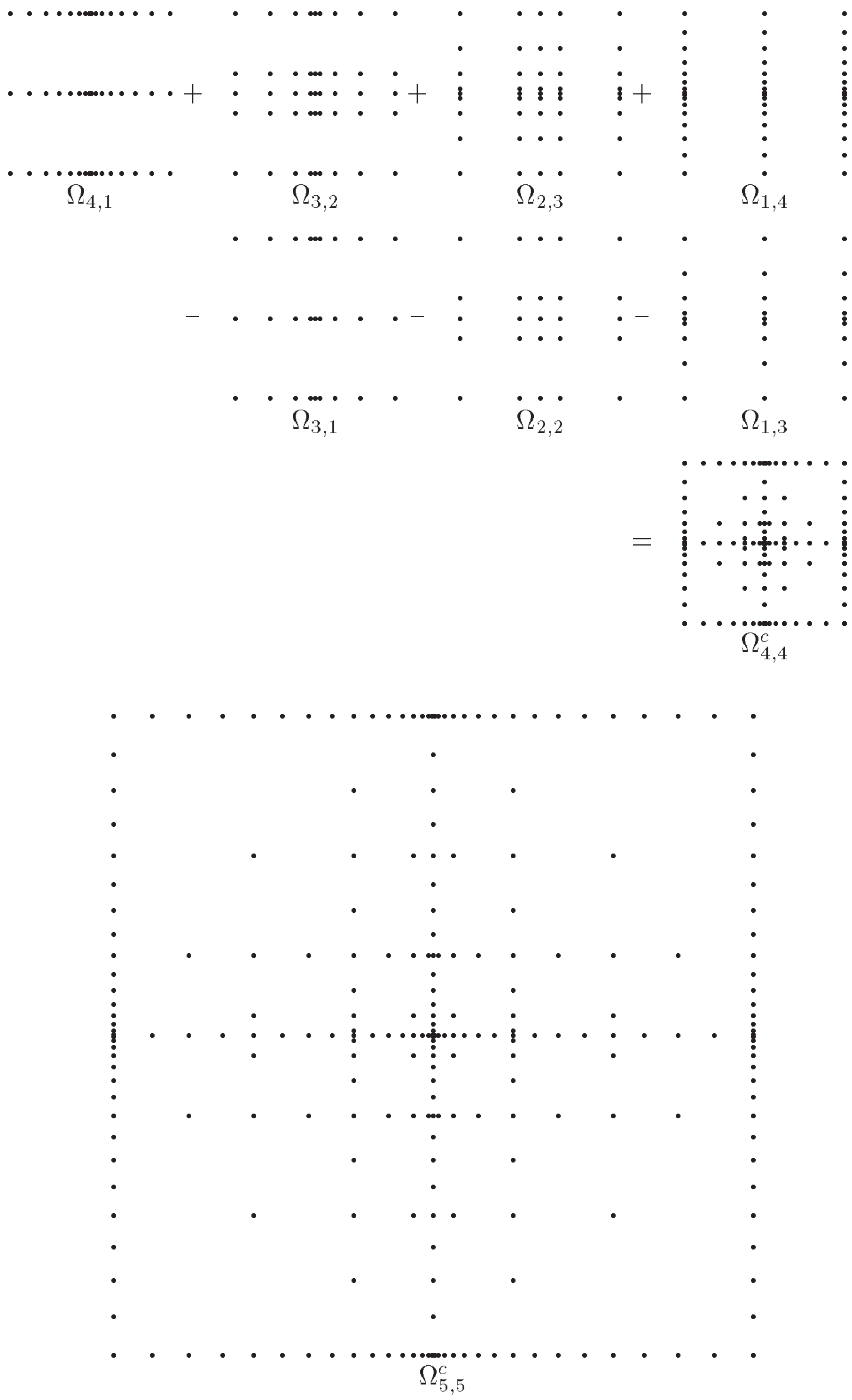


Abbildung 3.7: Kombinationstechnik für ein gradiertes dünnes Gitter

komplexer Vektor und λ ist bei einer selbstadjungierten Matrix A zwangsläufig reell. Gesucht werden einige der kleinsten der Eigenwerte $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_p$ dieses System. Eine Formulierung in Matrixschreibweise für p gesuchte Eigenwerte lautet

$$AX = MX\Lambda, \tag{3.9}$$

mit A und M wie in (3.8), X einer $p \times n$ Matrix mit den Spaltenvektoren $x_1, ...x_p$ und Λ einer $p \times p$ Diagonalmatrix mit $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_p)$.

Im folgenden benutzen wir die Notation

$$(X \vdots Y) = (x_1, ..., x_p, y_1, ..., y_p)$$

für eine aus den zwei $p \times n$ Matrizen X, Y resultierende $2p \times n$ Matrix.

Wir betrachten im weiteren nur ein reelles Eigenwertproblem, d.h. A ist selbstadjungiert mit reellen Matrixeinträgen und x ein Vektor im $\mathbb{R}^n$. Komplexe Eigenwertprobleme mit selbstadjungierten Matrizen können wie folgt auf ein reelles reduziert werden [47]:

Sei

$$\begin{aligned} A &= A_{re} + iA_{im} \\ {A_{re}}^T &= A_{re} \\ {A_{im}}^T &= -A_{im} \end{aligned}$$

mit den reellen Matrizen A_{re} und A_{im}. Sei λ ein beliebiger (zwangsläufig reeller) Eigenwert von A und $x = x_{re} + ix_{im}$ der entsprechende Eigenvektor. Damit gilt

$$(A_{re} + iA_{im})(x_{re} + ix_{im}) = \lambda M(x_{re} + ix_{im})$$

oder

$$\begin{aligned} A_{re}x_{re} - A_{im}x_{im} &= \lambda M x_{re} \\ A_{im}x_{re} + A_{re}x_{im} &= \lambda M x_{im}. \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem

$$\hat{A}\hat{x} = \begin{bmatrix} A_{re} & -A_{im} \\ A_{im} & A_{re} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{re} \\ x_{im} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} Mx_{re} \\ Mx_{im} \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

hat mit dem Eigenvektor $\left[\begin{smallmatrix} x_{re} \\ x_{im} \end{smallmatrix}\right]$ auch $\left[\begin{smallmatrix} -x_{im} \\ x_{re} \end{smallmatrix}\right]$ als Eigenvektor zum damit zweifachen Eigenwert λ. Die zusammengesetzte Matrix $\hat{A}$ ist offensichtlich reell und selbstadjungiert und hat als Eigenwerte die Eigenwerte von A in doppelter Vielfachheit.

Einfache Löser das Problems (3.8), wie die inverse Vektoriteration, bestehen im wesentlichen aus einer äußeren Schleife über einem linearen Gleichungssystem. In den Löser dieses linearen Gleichungssystems können die bekannten Konvergenzbeschleuniger wie Vorkonditionierer oder Mehrgitterverfahren eingebaut werden. Zur Bestimmung des kleinsten Eigenwertes sind diese Verfahren durchaus geeignet. Zur Berechnung mehrerer Eigenwerte benötigen diese Verfahren allerdings recht viele äußere Iterationsschritte. Bei Clustern von Eigenwerten, d.h. eng beieinanderliegenden oder mehrfachen Eigenwerten, ist die Konvergenz dieser Verfahren i.a. nicht gegeben.

Zur Lösung von Eigenwertproblemen des Typs (3.9) haben sich zwei Klassen von Verfahren bewährt, zum einem die Verfahren des Arnoldi bzw. Lanczos Typs in der modernen Version des implizit neustartenden Lanczos (IRL). Zum anderen Methoden die auf der Minimierung des Rayleigh-Quotienten durch Gradientenverfahren basieren. Die letztere Methode wird im folgenden genauer vorgestellt und auch im Programm *EigKT* in zwei Varianten benutzt.

3.4.1 Rayleigh-Quotient Minimierung mit Gradientenverfahren

In [10] wurde das Minimum-Prinzip für die Charakterisierung von Eigenwerten durch den Rayleigh-Quotienten

$$RQ(x) = \frac{x^T Ax}{x^T Mx}, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad x \neq 0$$

und den Minimierungsbedingungen

$$\lambda_1 = RQ(x_1) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} RQ(x) \tag{3.11}$$

$$\lambda_k = RQ(x_k) = \min_{\substack{x \in \mathbb{R}^n \\ x^T Ax_i = 0 \\ i=1,\ldots,k-1}} RQ(x), \quad k = 2, ..., p \tag{3.12}$$

aufgestellt.

Betrachten wir aber zunächst nur die Bestimmung des kleinsten Eigenwertes, dazu ist die Minimierungsaufgabe

$$\lambda(x) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{x^T Ax}{x^T Mx}$$

zu lösen.

Daraus leitet sich folgende Vorgehensweise ab:

$$RQ(x + \alpha s) = \min_{\tilde{\alpha} \in \mathbb{R}} \frac{(x + \tilde{\alpha}s)^T A(x + \tilde{\alpha}s)}{(x + \tilde{\alpha}s)^T M(x + \tilde{\alpha}s)},$$

d.h. der Rayleigh-Quotient wird in Richtung des Vektors s minimiert. Die Suchrichtungen werden als konjugierte Gradienten ausgewählt, α kann als Ergebnis einer quadratischen Gleichung explizit bestimmt werden.

Dafür betrachten wir die erste Ableitung an der Minimalstelle

$$0 = \frac{\partial}{\partial \alpha} RQ(x + \alpha s).$$

Nach der Berechnung der partiellen Ableitung und einigen Umformungen ergibt sich für α

$$p\alpha^2 + q\alpha + r = 0,$$

mit

$$\begin{aligned} p &= s^T Mx \cdot s^T As - s^T Ms \cdot x^T As, \\ q &= x^T Mx \cdot s^T As - s^T Ms \cdot x^T Ax, \\ r &= x^T Mx \cdot x^T As - s^T Mx \cdot x^T Ax. \end{aligned}$$

Aufgelöst erhalten wir für α die Formel

$$\alpha_{\pm} = \frac{-q \pm \sqrt{q^2 - 4pr}}{2p}, \tag{3.13}$$

in [32] wurde gezeigt, daß α_+ immer das Minimum ergibt.

In [4] wurde das Prinzip der konjugierten Gradienten auf die Minimierung des Rayleigh-Quotienten angewandt. Als Gradienten des Rayleigh-Quotienten ergibt sich

$$g = \nabla RQ(x) = \frac{2}{x^T Mx}[Ax - RQ(x)Mx],$$

mit den bekannten Ansatz der konjugierten Gradienten lautet die jeweils neue Suchrichtung damit

$$s_n = g_n - \frac{(g_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})} s_{n-1}.$$

Somit erhalten wir das folgende Verfahren zur Bestimmung des kleinsten Eigenwertes

- Initialisierung

  Gegeben sei der Vektor x_0

  Setze $s_0 = g_0 = \frac{2}{x_0^T M x_0} (Ax_0 - RQ(x_0)Mx_0)$

- Iteration

  Minimiere $RQ(x_{i-1} + \alpha s_{i-1})$ durch Bestimmung von α nach 3.13

  $x_i = x_{i-1} + \alpha s_{i-1}$

  $g_i = \frac{2}{x_i^T M x_i} (Ax_i - RQ(x_i)Mx_i)$

  $s_i = g_i - \frac{(g_i, g_i)}{(g_{i-1}, g_{i-1})} s_{i-1}$

3.4.2 Berechnung mehrerer Eigenwerte

Für die Erweiterung auf die Berechnung von mehreren Eigenwerten gibt es mehrere Ansätze. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden zwei realisiert.

Zum einen das Verfahren SIRQIT-CG (simultaneous Rayleigh-quotient iterative minimization method with conjugate-gradient searchdirections), das in [32] eingeführt wurde. Dabei wird zur Berechnung von mehreren Eigenwerten für jeden Eigenwert einzeln der Rayleigh-Quotient minimiert und auch die konjugierten Gradienten werden auf den einzelnen Vektor bezogen gebildet. Der Charakterisierung höherer Eigenwerte (3.12) wird damit noch nicht Rechnung getragen, um diese Bedingung einzuhalten muß eine Ritzprojektion durchgeführt werden

$$\lambda_k = RQ\left(\sum_{l=1}^{p} \sigma_l x_l\right) = \min_{\substack{(\sigma_1,\ldots,\sigma_p)\neq 0 \\ (\sum \sigma_l x_l, x_i)=0 \\ i=1,\ldots,k-1}} RQ\left(\sum_{l=1}^{p} \sigma_l x_l\right), \quad k = 1, ..., p.$$

Die Bedingungen dieses Ritzschrittes entsprechen der Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix $\tilde{A}$

$$\tilde{A} = X^T AX, \quad \text{wobei } X^T MX = I_p,$$

mit dem zugehörigen Eigenwertproblem

$$\tilde{A}Q = Q\tilde{\Lambda} = \text{diag}(\tilde{\lambda}_1, ..., \tilde{\lambda}_p).$$

Mit der Lösungsmatrix Q wird dann das projizierte $\tilde{X}$ bestimmt:

$$\tilde{X} = XQ.$$

Wird die Ritzprojektion jeden Schritt durchgeführt, können die konjugierten Gradienten nicht benutzt werden, denn bei der Ritzprojektion werden i.a. die einzelnen Vektoren untereinander vermischt. Die vektorenorientierte Bildung der konjugierten Gradienten liefert dann keine zufriedenstellenden Ergebnisse mehr. Wird die Ritzprojektion zu selten durchgeführt, ist eine Konvergenz gegen die gesuchte Lösung nicht zu erwarten, da die Bedingung (3.12) nicht korrekt berücksichtigt wird. Numerisch haben sich bis zu 5 Iterationsschritte ohne Ritzprojektion als geeignet erwiesen.

Es ergibt sich somit folgender Algorithmus $SIRQIT - CG$

- Initialisierung

  Gegeben sei die $n \times p$ Matrix $X_0 = (x_{0,1}, ..., x_{0,p})$ mit

  $$\begin{aligned} {X_0}^T MX_0 &= I_p \\ {X_0}^T AX_0 &= \Lambda_0 = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_p) \end{aligned}$$

  Setze $S_0 = G_0 = AX_0 - MX_0\Lambda_0$

- Iteration

  Für $1 \leq j \leq p$

  Minimiere $RQ(x_{i-1,j} + \alpha s_{i-1,j})$ durch Bestimmung von α nach 3.13

  $x_{i,j} = x_{i-1,j} + \alpha s_{i-1,j}$

  Orthogonalisiere X_i, so daß ${X_i}^T MX_i = I_p$

  Falls Ritzschritt

  $\tilde{A} = {X_i}^T AX_i$

  Löse $\tilde{A}Q = Q\Lambda_i$

  Setze $X_i = X_iQ$

  $S_i = G_i = AX_i - MX_i\Lambda_i$

  sonst

  Für $1 \leq j \leq p$

  $g_{i,j} = Ax_{i,j} - RQ(x_{i,j})Mx_{i,j}$

  $s_{i,j} = g_{i,j} - \frac{(g_{i,j}, g_{i,j})}{(g_{i-1,j}, g_{i-1,j})} s_{i-1,j}$

Als zweites Verfahren wurde der in [13] vorgestellte Algorithmus implementiert. Dort wird die Berechnung der Eigenwerte nicht einzeln per Minimierung eines Rayleigh-Quotienten mittels konjugiert gradierten Suchrichtungen realisiert, stattdessen betrachtet man den Operator

$$F(X) = (X^T MX)^{-1} X^T AX$$

wobei X als Spalten die linear unabhängigen Vektoren $x_1, ..., x_p$ besitzt. Es wird dann zu einem verallgemeinerten Rayleigh-Quotienten übergegangen

$$GRQ(X) = \mathrm{tr}(F(X))$$

In [13] wird folgender Satz bewiesen

Ist $\Lambda^{(p)} = \mathrm{diag}(\lambda^{(1)}, ..., \lambda^{(p)})$ *die Diagonalmatrix der* p *kleinsten Eigenwerte und* $X^{(p)} = (x^{(1)}, ..., x^{(p)})$ *eine zugehörige Eigenvektormatrix des Problems* (3.8), *so gilt*

$$\min GRQ(X) = GRQ(X^{(p)}) = \mathrm{tr}(\Lambda^{(p)}).$$

Es gilt nun also dieses Funktional zu minimieren. Dazu betrachten wir zunächst die Iterationsvorschrift

$$\min GRQ(\tilde{X}) = \min GRQ(X + \alpha S) \tag{3.14}$$

mit dem Skalar α und der Suchrichtungsmatrix S. Für S gilt in Verallgemeinerung des Verfahrens der konjugierten Gradienten der Ansatz

$$S = G + WT, \text{ mit } G = AX - MX\Lambda_X,$$

wobei G gleich dem Residuum gesetzt wird. Die Matrix $T \in \mathbb{R}^{p \times p}$ ist bei gegebenen Matrizen $G, W \in \mathbb{R}^{n \times p}$ so zu bestimmen, das eine für die Minimierung des Funktionals $GRQ(\tilde{X})$ günstige Suchrichtung entsteht.

Für die Matrizen X und W wird, um die Herleitung einer expliziten Formel für T zu ermöglichen, vorausgesetzt, daß sie die Gleichungen

$$\begin{aligned} (X \vdots W)^T A (X \vdots W) &= (\Lambda_X \vdots \Lambda_W), \\ (X \vdots W)^T M (X \vdots W) &= I_{2p} \end{aligned}$$

mit den Diagonalmatrizen $\Lambda_X = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_p)$ und $\Lambda_W = \mathrm{diag}(\lambda_{p+1}, ..., \lambda_{2p})$ erfüllen. Hiermit ergibt sich für T die Formel

$$W^T AG - WTMG\Lambda_X + \Lambda_W T - T\Lambda_X = 0,$$

bzw. explizit für die Matrixeinträge

$$T_{ij} = -\frac{g_j^T A w_i - \lambda_j g_j^T M w_i}{\lambda_{p+i} - \lambda_j} \quad (i, j = 1, ..., p). \tag{3.15}$$

Damit sind nun die Matrizen X und S bekannt. Für die Bestimmung der verbesserten Iterierten $\tilde{X}$ wäre noch der skalare Faktor α zu berechnen. Dafür wird allerdings zu einem Ritzansatz für das Problem (3.8) mit den linear unabhängingen Spaltenvektoren der Matrizen X und S übergegangen. Es ist dann ein $(2p)$-dimensionales Eigenwertproblem

$$\tilde{A} = \tilde{M}Q\tilde{\Lambda} \tag{3.16}$$

mit den Matrizen

$$\begin{aligned}\tilde{A} &= (X \vdots S)^T A (X \vdots S)\\ \tilde{M} &= (X \vdots S)^T M (X \vdots S)\end{aligned}$$

zu lösen.

Die Lösung von (3.16) sei so normiert, daß

$$\begin{aligned}Q^T\tilde{A}Q &= \Lambda\\ Q^T\tilde{M}Q &= I_{2p}\end{aligned}$$

mit $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_{2p}) = \mathrm{diag}(\Lambda_X, \Lambda_W)$ der Diagonalmatrix der Eigenwerte.

Die verbesserte Näherung $\tilde{X}$ aus (3.14) ist nun, ebenso wie $\tilde{W}$, ein Teil der Suchrichtung im nächsten Iterationsschritt, nach [13] optimal bestimmt durch die Vorschrift

$$(\tilde{X} \vdots \tilde{W}) = (X \vdots S)Q.$$

Damit sind nun alle Teile des Algorithmus $DÖHLER - CG$ zusammengetragen, hier nun noch einmal im Überblick:

- Initialisierung

  Gegeben sei die $n \times p$ Matrix $X_0 = (x_{0,1}, ..., x_{0,p})$ mit

  $$\begin{aligned}X_0{}^T M X_0 &= I_p\\ X_0{}^T A X_0 &= \Lambda_{X_0} = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_p)\end{aligned}$$

  Setze $S_0 = G_0 = AX_0 - MX_0\Lambda_{X_0}$

- Iteration

  Bestimme Q_i und $\Lambda_i = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_{2p}) = \mathrm{diag}(\Lambda_{X_i}, \Lambda_{W_i})$ nach (3.16)

  $(X_i \vdots W_i) = (X_{i-1} \vdots S_{i-1})Q_i$

  $G_i = AX_i - MX_i\Lambda_{X_i}$

  Bestimme T_i nach (3.15)

  $S_i = G_i + W_iT_i$

Kapitel 4

Aspekte der Implementierung

Nachdem in den letzten beiden Kapiteln die Grundlagen des Verfahrens und der betrachteten physikalischen Gleichung gelegt wurden, werden in diesem Kapitel einige wichtige Punkte der Implementierung des Verfahrens beschrieben. So betrachten wir die weitestgehend dimensionsunabhängige Aufstellung der benötigten Matrizen, die unter Umständen notwendigen potentialabhängigen Integrationsroutinen, das Verfahren zur Identifizierung der Eigenfunktionen bei Berechnung von mehreren Eigenwerten und die Parallelisierung des Verfahrens.

4.1 Variationsproblem

Der folgenden Schrödingergleichung für ein Potential P

$$-\Delta u + P\,u = E\,u \tag{4.1}$$

entspricht in schwacher Form die Gleichung

$$\int_{\mathbb{R}^d} (\nabla u, \nabla \varphi)\,d\boldsymbol{x} + \int_{\mathbb{R}^d} P\,u\,\varphi\,d\boldsymbol{x} = E \int_{\mathbb{R}^d} u\,\varphi\,d\boldsymbol{x} \qquad \forall \varphi \in V. \tag{4.2}$$

Als Randbedingung der Schrödingergleichung ergeben sich aus der physikalischen Deutung

$$u(\boldsymbol{x}) \to 0 \quad \text{für} \quad \boldsymbol{x} \to \infty,$$

da nennenswerte Aufenthaltswahrscheinlichkeiten nur in einem endlichen Gebiet sinnvoll sind. Da auch davon auszugehen ist, daß ab einer gewissen Entfernung vom „Geschehen“ der Gleichung die Wellenfunktionen stark abfallen, kann numerisch auf einem endlichen Gebiet Ω mit Dirichlet-0-Randwerten gerechnet werden, d.h.

$$u(\boldsymbol{x}) = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega.$$

Allerdings muß darauf geachtet werden, daß der Fehler, der durch die Abschneidung des Gebiets entsteht, kleiner als der numerische Fehler der Approximation ist. Die Genauigkeit der Randbehandlung kann allerdings jederzeit durch eine Vergrößerung des Gebietes erhöht werden.

Die kontinuierliche Lösungsfunktion $u(\boldsymbol{x})$ wird nun durch die numerische Approximation $u_n(\boldsymbol{x})$

$$u_n(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} u_j \cdot \varphi_j(\boldsymbol{x}),$$

in (4.2) ersetzt, mit $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ einer Basis von S_n.

Für die numerische Lösungsfunktion muß nun gelten:

$$\int_\Omega (\nabla u_n, \nabla\varphi)\, d\boldsymbol{x} + \int_\Omega P\, u_n\, \varphi\, d\boldsymbol{x} = \lambda \int_\Omega u_n\, \varphi\, d\boldsymbol{x} \qquad \forall\varphi \in V. \tag{4.3}$$

Hierdurch erhalten wir ein Eigenwertproblem der Form

$$(A + P) \cdot \tilde{u} = \lambda \cdot M\tilde{u} \tag{4.4}$$

mit

$$\begin{aligned}
A_{ij} &= \int_\Omega (\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j)\, d\boldsymbol{x}, && \text{den Einträgen der Steifigkeitsmatrix,} && (4.5)\\
P_{ij} &= \int_\Omega P(\boldsymbol{x})\, \varphi_i\, \varphi_j\, d\boldsymbol{x}, && \text{den Einträgen der Potentialmatrix,} && (4.6)\\
M_{ij} &= \int_\Omega \varphi_i\, \varphi_j\, d\boldsymbol{x}, && \text{den Einträgen der Massenmatrix,} && (4.7)\\
\tilde{u} &= (u_1, ..., u_N) \in \mathbb{R}^N, && \text{dem Lösungsvektor,} && (4.8)
\end{aligned}$$

wobei $1 \leq i, j \leq N$. Im Programm werden A und P in einer Matrixstruktur gespeichert.

Bei der Betrachtung von Wasserstoff (2.9), H_2^+ (2.10), oder Helium (2.11) in Magnetfeldern kommen vom Magnetfeld abhängige Terme hinzu

$$-2i\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + 4\beta S + \beta^2(x^2 + y^2) \tag{4.9}$$

und die Rechnung muß mit komplexen Zahlen, d.h. $\tilde{u} \in \mathbb{C}^N$, durchgeführt werden.

Der zweite Term, $4\beta S$, von (4.9) ist, da nur vom Spin S abhängig, für die eigentliche numerische Berechnung nicht relevant, denn er wirkt nicht auf die Raumkoordinaten. Er kann nachträglich für die beiden Spinzustände auf die erhaltenen Eigenwerte addiert werden.

Der dritte Ausdruck wird beim Aufstellen der Potentialmatrix mitbehandelt, d.h. das jeweilige Potential wird um $\beta^2(x^2 + y^2)$ erweitert. Falls zusätzlich ein äußeres elektrisches Feld F betrachtet wird, kommt das daraus resultierende Potential $\phi = F \cdot \boldsymbol{x}$ noch hinzu. Es gilt somit

$$P_{ij} = \int_\Omega \big(P(\boldsymbol{x}) + \beta^2(x^2 + y^2) + F \cdot \boldsymbol{x}\big)\, \varphi_i\, \varphi_j\, d\boldsymbol{x}. \tag{4.10}$$

Der erste Term von (4.9) erfordert eine besondere Behandlung bei Problemen mit Magnetfeldern. Durch den Faktor i ist der Ausdruck imaginär, die Rechnungen müssen also komplexwertig durchgeführt werden. Dies wird mit reellen Vektoren und Matrizen realisiert, allerdings mit Vektoren der doppelten Matrixdimension. Zwischen dem Speicheraufwand dieses Ansatzes und eines voll komplexen Verfahrens besteht allerdings kein Unterschied.

Es kommt eine zweite Matrix, die Magnetfeldmatrix I mit den Einträgen

$$I_{ij} = \int_\Omega -2\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla\varphi_i \, \varphi_j \, d\boldsymbol{x}, \quad 1 \le i, j \le N, \tag{4.11}$$

auf der linken Seite hinzu. Diese muß gesondert gespeichert werden.

Damit haben wir bei einer Rechnung mit Magnetfeld das komplexe Eigenwertproblem

$$(A + P + iI) \cdot u = E \cdot Mu, \quad u(= u_r + iu_i) \in \mathbb{C}^N. \tag{4.12}$$

zu lösen, welches, wie bereits gezeigt (3.10), zu folgendem reellen Eigenwertproblem wird

$$\begin{bmatrix} A+P & -I \\ I & A+P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_r \\ u_i \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u_r \\ u_i \end{bmatrix}. \tag{4.13}$$

4.2 Beschränkung der Varianz der zu kombinierenden Lösungen

Stark anisotrope Gitter, d.h solche mit extremen Unterschieden in der Anzahl von Diskretisierungspunkten pro Raumdimension, müssen unter Umständen ausgeschlossen werden. Dies ist notwendig, falls die Approximations- und Konvergenzeigenschaften für diese Teilprobleme zu schlecht sind. Auch zur Berechnung von mehreren Eigenwerten muß eine Mindestanzahl von Punkten pro Dimension vorhanden sein. Wenn nur ein innerer Punkt zur Auflösung einer Raumrichtung verwendet wird, ist in dieser Dimension keine Varianz in den Eigenwertanteilen mehr möglich. Höhere Eigenwerte des eigentlich berechneten dünnen Gitter nehmen dann unter Umständen auf den Teilproblemen der Kombinationstechnik eine deutlich niedrigere Position in der Reihenfolge der Eigenwerte ein. Die gesuchten kleinsten p Eigenwerte des Kombinationsgitters werden somit in den Spektren der Teilgitter nach oben geschoben. Das würde die Berechnung von mehr Eigenwerten pro Gitter als eigentlich gewünscht bedeuten und die Konvergenz des Eigenwertlösers würde dadurch deutlich schlechter werden. Auf Gittern mit nur einem inneren Punkt in einer Raumrichtung ist bei der Berechnung von mehreren Eigenwerten z.T. auch keine Konvergenz des Eigenwertlösers festgestellt worden. Auch die Identifizierung der Eigenvektoren wird erschwert. Mehr zu diesem Thema ist in Abschnitt 4.7 zu finden.

Die benutzte Routine für den Durchlauf aller benötigen Teilgitter der modifizierten Kombinationsformel (3.7) lautet

```
DIM = Dimensionen des Problems
GROBGITTER = mindestens 2 hoch GROBGITTER Punkte pro DIM
DICKE = Verdickungsfaktor des duennen Gitters
```

```
kombi_schleife(dim,
               schleifenende,
               faktor)
{
  if (dim < DIM){
    for (i=1+GROBGITTER;i<=schleifenende;i++){
      punkte[dim] = pow(2,i+DICKE)+1;
      kombi_schleife(dim+1,schleifenende-(i-1),faktor);
    }
  }
  else {
    i = schleifenende;
    punkte[dim] = pow(2,i+DICKE+GROBGITTER)+1;
    loese_problem(punkte);
  }
}

kombi_init()
{
  vorzeichen = 1;
  for (j=1;j<=DIM;j++){
    faktor = fakul(DIM-1)/(fakul(j)*fakul(DIM-1-j));
    kombi_schleife(1,Level-j-GROBGITTER-DICKE,vorzeichen*faktor);
    vorzeichen *= -1;
  }
}
```

Die Variable GROBGITTER sorgt dafür, daß nur die Teilprobleme berechnet werden, deren minimale Punktanzahl in einer Dimension größer als $2^{\mathrm{GROBGITTER}}$ ist. Sofern GROBGITTER > 0 ist, werden weniger Gitter berechnet als bei der normalen Kombinationstechnik. Die modifizierte Kombinationsformel hierfür lautet

$$u_n^c = \sum_{l=0}^{d-1} (-1)^l \binom{d-1}{l} \sum_{\substack{i_1+\ldots+i_d=n+(d-1)+l \\ i_j \geq \mathrm{GROBGITTER}+1}} u_{i_1,\ldots,i_d} \text{ mit } u_{i_1,\ldots,i_d} \in S_{i_1,\ldots,i_d}.$$

Ähnliches erreicht die Variable DICKE, eingeführt in anderer Bezeichnung in [24], sie bewirkt eine Verdickung des Gitters. Falls DICKE = Level - 1 haben wir ein volles Gitter der entsprechenden Tiefe, mit DICKE = 0 das normale dünne Gitter dieser Verfeinerungsstufe. Auch hierfür läßt sich eine modifizierte Kombinationsformel angeben

$$u_n^c = \sum_{l=0}^{d-1} (-1)^l \binom{d-1}{l} \sum_{i_1+\ldots+i_d=n+(d-1)+l-\mathrm{DICKE}} u_{i_1,\ldots,i_d} \text{ mit } u_{i_1,\ldots,i_d} \in S_{i_1,\ldots,i_d},$$

wobei hier $h_{i_k} = 2^{-(i_k+\mathrm{DICKE})}$.

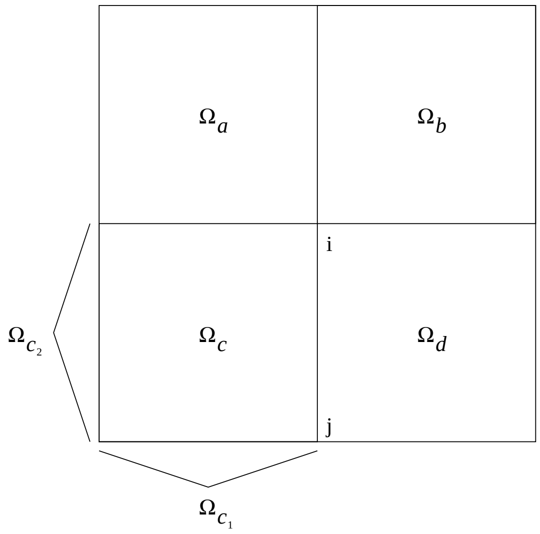


Abbildung 4.1: Die zum Punkt i und zum Träger der Basisfunktion φ_i gehörigen Quader $\Omega_{a\ldots d}$

Die durch diese beiden Optionen erzeugten Gitter entsprechen sich. Lediglich der jeweilige Level, dem sie zugeordnet werden, ist unterschiedlich.

4.3 Aufstellung der Matrizen

Zur Aufstellung der Matrizen wird im Programm über alle Quader des Gitters gelaufen und dort werden jeweils die Matrixanteile der in diesem Quader von Null verschieden Basisfunktionen berechnet (vgl. Abbildung 4.1).

Das Durchlaufen der Quader erledigt eine über die Dimensionen rekursive Funktion. Die Abarbeitung aller auf den einzelnen Quadern zu betrachtenden Zweierkombinationen von Basisfunktionen kann dimensionsunabhängig über eine Bitkodierung der einzelnen Basisfunktionen φ_i, φ_j erfolgen. Dabei steht das k-te Bit dafür, ob die Komponente in der k-ten Raumdimension der betrachteten Basisfunktion Eins auf dem Intervallanfang oder dem Intervallende der jeweiligen Dimension ist. Damit kann dann jeweils die gesamte d-dimensionale Basisfunktionen zusammengebaut werden.

4.3.1 Massenmatrix, Steifigkeitsmatrix

Die zu berechnenden Integrale für die Massenmatrix M (4.7) zerfallen in ein Produkt von eindimensionalen Integralen

$$M_{ij} = \int_{\Omega} \varphi_i \, \varphi_j \, d\boldsymbol{x} = \sum_{\substack{\Omega_a \cap \sup(\varphi_i) \cap \sup(\varphi_j) \\ \neq \emptyset}} \prod_{l=1}^{d} \int_{\Omega_{a_l}} \varphi_{i_l}(x_l) \varphi_{j_l}(x_l) dx_l \tag{4.14}$$

die die Werte

$$\int_{\Omega_{a_l}} \varphi_{i_l}(x_l)\varphi_{j_l}(x_l)dx_l = \begin{cases} \frac{1}{3}\Omega_{a_l} & i = j \\ \frac{1}{6}\Omega_{a_l} & i \neq j \end{cases} \tag{4.15}$$

haben. Hierbei, und im folgenden, gilt die Notation $\Omega_a = \Omega_{a_1} \otimes ... \otimes \Omega_{a_d}$ (siehe Abbildung 4.1).

Die Einträge der Steifigkeitsmatrix A (4.5) lauten

$$A_{ij} = \int_\Omega (\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j)\, d\boldsymbol{x} = \sum_{\substack{\Omega_a \cap \sup(\varphi_i) \cap \sup(\varphi_j) \\ \neq \emptyset}} \int_{\Omega_a} (\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j)\, d\boldsymbol{x}. \tag{4.16}$$

Diese Integrale können jeweils in d eindimensionale Integrale aufgespalten werden

$$\int_{\Omega_a} (\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j)\, d\boldsymbol{x} = \sum_{l=1}^{d} \int_{\Omega_{a_l}} \partial_l\varphi_{i_l}\, \partial_l\varphi_{j_l} dx_l \sum_{k \neq l} \int_{\Omega_{a_k}} \varphi_{i_k}\varphi_{j_k} dx_k. \tag{4.17}$$

Wobei für das erste Integral gilt

$$\int_{\Omega_{a_l}} \partial_l\varphi_{i_l}\, \partial_l\varphi_{j_l} dx_l = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_{a_l}|} & i = j \\ \frac{-1}{|\Omega_{a_l}|} & i \neq j \end{cases} \tag{4.18}$$

und das zweite Integral (4.15) entspricht.

Die Berechnung dieser Ausdrücke ist durch einfache Schleifen über die Dimensionen zu erreichen.

4.3.2 Potentialmatrix, Magnetfeldmatrix

Die Berechnung der zur Aufstellung der Potentialmatrix (4.6) benötigten Integrale

$$P_{ij} = \int_\Omega P(\boldsymbol{x})\, \varphi_i\, \varphi_j\, d\boldsymbol{x} = \sum_{\substack{\Omega_a \cap \sup(\varphi_i) \cap \sup(\varphi_j) \\ \neq \emptyset}} \int_{\Omega_a} P(\boldsymbol{x})\, \varphi_i\, \varphi_j\, d\boldsymbol{x} \tag{4.19}$$

erfordert deutlich mehr Aufwand, sowohl bei der Implementierung als auch beim Programmlauf.

Eine Reduzierung auf einfach bestimmbare eindimensionale Integrale ist hier i.a. nicht möglich, es muß d-dimensional numerisch integriert werden. Dies geschieht entweder durch normale Gauß-Quadratur oder, vor allem in höheren Dimensionen, durch Dünngitterquadraturformeln. Zu dieser Methode sei auf [19] verwiesen.

Die Magnetfeldmatrix I (4.11) wird durch Integrationsroutinen mit wenigen Stützstellen berechnet. Auszuwerten ist an jedem Quadraturpunkt bei einem Magnetfeld in z-Richtung

$$-2\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla\varphi_i\, \varphi_j = -2\beta \left(y\, \partial_x\varphi_i\, \varphi_j - x\, \partial_y\varphi_i\, \varphi_j \right), \tag{4.20}$$

eine Separation auf voneinander unabhängige eindimensionale Integrale ist nicht machbar, da (4.20) ortsabhängig ist.

```
Schleife A über die Integrationspunkte
    Schleife B über die Dimensionen ab der Dimension mit Änderungen
        Berechnen der Auswertungstellen dieser Dimension
        Berechnen des Gesamtgewichts bis zu dieser Dimension
        Berechnen der Werte der Basisfunktionen bis zu dieser
            Dimension
    Ende Schleife B
    Auswertung des Potentials
    Aufaddieren des Produkts von Gewicht, Wert der Basisfunktionen
        und Wert des Potentials zum Zwischenergebnis
    Feststellung der Dimensionen, ab der die Stützstellen sich beim
        nächsten Quadraturpunkt ändern
Ende Schleife A
Rückgabe des Ergebnis
```

Abbildung 4.2: Pseudocode der Integrationsroutine

4.4 Numerische Integration

Die Integrationsroutine kann so programmiert werden, daß eine Routine die Berechnung der Integrale für alle möglichen Dimensionen unternimmt. So wird bei der normalen Gauß-Quadratur zum einen über die Gesamtzahl der Integrationspunkte gelaufen, innerhalb dieser Schleife gibt es eine zweite über die Dimensionen. Da sich von einem Auswertungspunkt zum anderen nicht immer in allen Dimensionen die jeweiligen Stützstellen ändern, nutzt man dies zur Rechenzeitersparnis aus. So werden zu jeder Dimension die aufgesammelten Gewichte und die aufmultiplizierten Ergebnisse der Auswertungen der Teilbasisfunktionen an den Stützstellen der einzelnen Dimensionen gespeichert, so daß diese nicht unnötigerweise mehrmals berechnet werden. Es muß dann in jedem Integrationspunkt nur noch der Wert des Potentials wirklich berechnet werden. Das Gewicht und der Wert der Basisfunktionen für diese Stützstelle können zu Teilen wiederbenutzt werden. In Abbildung 4.2 sind die Grundprinzipien der Routine abgedruckt.

Da diese Integrationsroutine auf einem Quader Ω_a für mehrere Basisfunktionkombinationen aufgerufen wird, ist es zudem sinnvoll, die Werte des Potentials an den einzelnen Quadraturpunkten zwischenzuspeichern, um sie nur einmal für alle Aufrufe innerhalb eines Quaders des Gebiets berechnen zu müssen.

Damit die Berechnung der Einträge der Potentialmatrix genau genug erfolgt, ist eine recht hohe Anzahl von Stützstellen notwendig. Dies ist begründet durch die z.T. großen Träger der Basisfunktionen, aus denen große Integrationsgebiete resultieren. Diese großen Gebiete haben auch einen starken Einfluß auf die Lösungsfunktion, was eine hohe Genauigkeit der numerischen Integration erfordert. Außerdem gibt es Singularitäten in den Potentialen, die eine hohe Quadraturformel, d.h. mit vielen Stützstellen, bedingen.

4.4.1 Duffy-Trick für das Coulombpotential

Bei der Integration des Coulombpotential $|\boldsymbol{x}|^{-1}$ ergeben sich numerische Schwierigkeiten am Nullpunkt, da dort eine Singularität vorliegt. Diese erfordert eine hohe Anzahl von Stützstellen, um eine geeignete Genauigkeit zu erreichen. Wir benutzen bis zu 15 Punkte pro Raumdimension, in drei Raumdimensionen sind dies 3375 Auswertungspunkte.

Aber auch diese recht hohe Anzahl von Integrationspunkten liefert an der Singularität nicht die gewünschte Fehlerordnung. Es kann allerdings mit Hilfe des Duffy-Tricks [14] die Genauigkeit erhöht werden.

Ein dreidimensionales Integral auf einem Quader wird dazu auf den Einheitswürfel transformiert und dort in drei Integrale über Pyramiden wie folgt aufgeteilt

$$
\begin{aligned}
\int_0^1\int_0^1\int_0^1 F(x,y,z)dzdydx &= \int_0^1\int_0^x\int_0^x F(x,y,z)dzdydx \\
&\quad + \int_0^1\int_0^y\int_0^y F(x,y,z)dxdzdy \\
&\quad + \int_0^1\int_0^z\int_0^z F(x,y,z)dydxdz \\
&= \int_0^1\int_0^x\int_0^x f(x,y,z)dzdydx, \\
f(x,y,z) &= F(x,y,z)+F(y,z,x)+F(z,x,y).
\end{aligned}
$$

Ein solches Integral kann nun mit dem eigentlichen Duffy-Trick regularisiert werden. Mit der Transformation

$$y = xu, \quad z = xw \tag{4.21}$$

gilt

$$\int_0^1\int_0^x\int_0^x f(x,y,z)dzdydx = \int_0^1\int_0^1\int_0^1 x^2 f(x,xu,xw)dwdudx. \tag{4.22}$$

Bei dem von uns zu integrierenden Potential haben wir nach der Aufspaltung des eigentlichen Integrals über einen Quader in drei Integrale über Pyramiden ein f der Form

$$f(x,y,z) = \frac{b(x,y,z)}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}. \tag{4.23}$$

Nach der Anwendung des Duffy-Tricks erhalten wir somit

$$
\begin{aligned}
\int_0^1\int_0^x\int_0^x \frac{b(x,y,z)}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}dxdydz &= \int_0^1\int_0^1\int_0^1 \frac{x^2\, b(x,xu,xw)}{\sqrt{x^2+(xu)^2+(xw)^2}}dxdudw \\
&= \int_0^1\int_0^1\int_0^1 \frac{x\, b(x,xu,xw)}{\sqrt{1+u^2+w^2}}dxdudw. \qquad (4.24)
\end{aligned}
$$

Dieser Ausdruck hat nun an der Nullstelle keine Singularität mehr und ist damit numerisch besser zu integrieren.

4.4.2 Integration des Elektron-Elektron-Wechselwirkungterms

Bei der Integration des Elektron-Elektron-Wechselwirkungterms treten weitere numerische Schwierigkeiten auf. Zum einen ist das Integral in 6D, eine normale numerische Quadratur überschreitet da die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechenzeit. Der Aufwand kann allerdings durch Dünngitterquadraturformeln entscheidend reduziert werden.

Sehr viel größere Probleme bereitet die vorliegende dreidimensionale Flächensingularität

$$\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{\varphi_i \varphi_j}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|} d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2 = \int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{\varphi_i \varphi_j}{\sqrt{\sum_{k=1}^{3} (x_{1_k} - x_{2_k})^2}} d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2. \tag{4.25}$$

Dieses Integral ist mit numerischen Quadraturformeln dort nicht berechenbar, wo sich die Integrationsgebiete aller drei Paare x_{1_i} und x_{2_i} überschneiden. Aufbauend auf Rekursionsformeln für die Stammfunktionen von

$$\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l u^r v^s}{|(x,y)-(u,v)|} dx dy du dw \qquad \text{und} \tag{4.26}$$

$$\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)|} dx dy dz \tag{4.27}$$

nach [34] kann für Integrale der Form

$$\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m u^r v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz du dv dw \tag{4.28}$$

eine analytische Darstellung der Stammfunktionen gefunden werden, die eine Berechnung der Integrale ermöglicht. Zur Bestimmung der eigentlichen Matrixeinträge werden die Werte dieser Integrale für alle Kombinationen der Exponenten mit $0 \leq k,l,m,r,s,t \leq 2$ benötigt, d.h. den bei zwei Basisfunktionen im Zähler auftretenden Exponenten.

Die Berechnung erfolgt mittels der folgenden parameterabhängigen Integrale

$$\begin{aligned}
F_{klmrst}(x,y,z,u,v,w) &:= \int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m u^r v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz du dv dw, \\
E_{klmst}(x,y,z,v,w;u) &:= \int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz dv dw, \\
D_{klmt}(x,y,z,w;u,v) &:= \int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz dw, \\
C_{klm}(x,y,z;u,v,w) &:= \int\!\!\int\!\!\int \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz, \\
B_{kl}(x,y;u,v,a^2) &:= \int\!\!\int \frac{x^k y^l}{\sqrt{(x-u)^2+(y-v)^2+a^2}} dx dy, \\
b_{kl}(x,y;u,v,a^2) &:= \int\!\!\int \frac{x^k y^l}{((x-u)^2+(y-v)^2+a^2)^{3/2}} dx dy \text{ und} \\
A_k(x,u;a^2) &:= \int \frac{x^k}{\sqrt{(x-u)^2+a^2}} dx.
\end{aligned}$$

Die aus ihnen aufgebauten Rekursionsformeln, die dann die Berechnung von Integralen des Typs (4.28) erlauben, sind im Anhang A beschrieben.

Bei der Implementierung dieser Funktionen ist zu beachten das die einzelnen Routinen bei der Berechnung unzählige Male aufgerufen werden und oft Werte berechnen, die sie schon einmal berechnet haben. Es ist unumgänglich Zwischenergebnisse abzuspeichern, um unnötige Vielfachaufrufe von Unterroutinen zu verhindern.

Damit kann die Rechenzeit für die Berechnung der Integrale über die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen um den Faktor 40000 gesenkt werden. So wird z.B. für die Auswertung des Integrals mit den höchsten Exponenten, das für die Bestimmung der Matrixeinträge notwendig ist

$$\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{x^2y^2z^2u^2v^2w^2}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dxdydzdudvdw, \tag{4.29}$$

statt über fünf Stunden weniger als eine halbe Sekunde benötigt.

4.5 Ausnutzung von Potentialsymmetrien

Die Ausnutzung der Symmetrie der vorhandenen Potentiale entspricht der theoretisch möglichen Reduktion der Dimension der Gleichungen. Die Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom z.B. kann auf eine eindimensionale radialsymmetrische Gleichung reduziert werden. Die Gleichung für dieses Atom in einem Magnetfeld kann als eine zweidimensionale Differentialgleichung formuliert werden.

4.5.1 Reduktion des Aufwands beim Aufbau der Matrizen

Erhebliche Rechenzeitersparnisse können realisiert werden, indem beim Aufbau der Matrizen Symmetrien der betrachteten Potentiale ausgenutzt werden.

Das Coulombpotential $|\boldsymbol{x}|^{-1}$ z.B. hängt nicht vom eigentlichen Ort eines Punktes ab, sondern vom Abstand dieses Punktes zum Nullpunkt, es ist also spiegelsymmetrisch zum Nullpunkt. Die von uns beim Coulombpotential benutzten gradierten Gitter weisen ebenfalls eine spiegelsymmetrische Struktur entlang einer Koordinatenachse auf. Diese beiden Fakten können ausgenutzt werden.

Mit den Bezeichnungen aus Abbildung 4.3 gilt

$$\begin{aligned}
\int_{-a}^{-a+h_x}\int_{-b}^{-b+h_y}\frac{\varphi_i(x,y)\varphi_j(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} &= \int_{a}^{a-h_x}\int_{-b}^{-b+h_y} -\frac{\varphi_i(-x,y)\varphi_j(-x,y)}{\sqrt{(-x)^2+y^2}} \\
&= \int_{a-h_x}^{a}\int_{-b}^{-b+h_y}\frac{\varphi_i(-x,y)\varphi_j(-x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} \\
&= \int_{a-h_x}^{a}\int_{-b}^{-b+h_y}\frac{\varphi_k(x,y)\varphi_l(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}}.
\end{aligned}$$

Viele Integrale, die zur Bestimmung der Matrixeinträge benötigt werden, brauchen also nicht berechnet zu werden, wenn die Ergebnisse eines Teilgebiets entsprechend mehrfach verwertet werden.

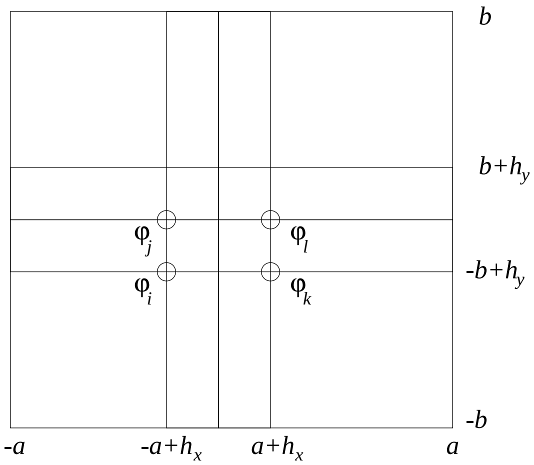


Abbildung 4.3: Ausnutzung der Symmetrien im Gitter und im Potential

Dieses gilt natürlich in allen Dimensionen und auch der gleichzeitige Tausch in mehreren Dimensionen ist ebenfalls möglich. Dieses reduziert den Aufwand für das Aufstellen der Potentialmatrix in 3D um den Faktor 8, in 6D sogar um den Faktor 64, sofern das aus dem Modell resultierende Potential dies erlaubt, d.h. die ausgenutzten Symmetrien vorhanden sind.

Beim Helium, das auf das betrachtete 6D-Problem führt, haben wir allerdings außer dem Coulombpotential noch das Potential der Elektron-Elektron-Wechselwirkungskräfte

$$\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int\!\!\int \frac{\varphi_i \, \varphi_j}{\sqrt{\sum_{k=1}^{3}(x_{1_k} - x_{2_k})^2}} d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2 .$$

Eine Spiegelsymmetrie in allen Richtungen ist bei diesem Potential nicht nutzbar. Allerdings ist eine andere Art von Symmetrie vorhanden. Es können jeweils die Dimensionen miteinander vertauscht werden, die beim Potential miteinander wechselwirken, d.h. x_{1_k} und x_{2_k}. Physikalisch entspricht dies die Ununterscheidbarkeit der Elektronen. Dadurch ist eine Reduzierung des Aufwands um den Faktor 8 bei der Aufstellung dieses Teils der Potentialmatrix möglich.

Allerdings bleibt die Aufstellung der Potentialmatrix für die Elektron-Elektron-Wechselwirkungskräfte immer noch der zeitaufwendigste Programmteil bei der Berechnung der Eigenwerte des Heliums.

4.5.2 Einsparung durch nicht zu berechnende Teilprobleme der Kombinationstechnik

Die Symmetrien der Potentiale ermöglichen auch eine Reduktion der Anzahl der tatsächlich berechneten Teilprobleme. So sind z.B. beim Wasserstoffatom die Eigenwerte für das Gitter mit den Punkten (x, y, z) in den drei Dimensionen auf Grund der Symmetrie des Coulombpotentials identisch mit den Eigenwerten der Diskretisierung mit den Punkten (z, y, x). Beide Gitter werden für die Kombinationslösung benötigt, nur eines muß berechnet werden. Die zugehörigen Eigenvektoren erfordern eine Transformation von der berechneten auf die symmetrische Diskretisierung. Mit diesem Ansatz kann die Zahl der wirklich berechneten Teilprobleme erheblich reduziert werden. Beim Wasserstoff ist nur ein Problem mit den Punkten (x, y, z) zu berechnen. Alle anderen fünf Permutationen dieser Punkte ergeben zu diesem Gitter symmetrische Strukturen, so daß die Ergebnisse übertragen werden können.

Bei anderen betrachteten Modellproblemen sind ähnliche Einsparungen möglich. Sie hängen natürlich immer von der betrachteten Gleichung ab. So ist z.B. beim Wasserstoffatom unter dem Einfluß eines äußeren Magnetfeldes die Spiegelsymmetrie der Lösungen am Nullpunkt nur noch in zwei Dimensionen vorhanden. In einer Dimension wurde sie durch den Einfluß des Magnetfeldes aufgehoben. Die Eigenwerte eines Gitters können nur einer anderen Diskretisierung entsprechen.

4.6 Berechnung der Eigenwerte

Die Algorithmen der benutzten Eigenwertlöser wurden bereits in Abschnitt 3.4 präsentiert. Die Implementierung erfolgt direkt nach diesen Darstellungen. Die Lösung der benötigten p bzw. $2p$ dimensionalen Eigenwertprobleme können mit Routinen aus [37] oder [2] berechnet werden.

Der im Algorithmus $SIRQIT - CG$ notwendige Orthogonalisierungsschritt, damit $X^T MX = I_P$ gilt, per einfachem Gram-Schmidt-Ortogonalisierungsverfahren in der durch M gegeben Metrik erweist sich als instabil. Es ist notwendig das Orthogonalisierungsverfahren zu modifizieren, damit auch numerisch die M-Orthogonalität der Vektoren erreicht wird. Die Modifizierung besteht aus der wiederholten Anwendung des Ortogonalisierungsschritts für die einzelnen Vektoren.

Obwohl das zweite implementierte Verfahren $DÖHLER - CG$ die deutlich bessere theoretische Fundierung besitzt, erweist es sich für die Lösung der auftretenden Eigenwertprobleme nicht als das numerisch bessere Verfahren. Auf Gittern mit ähnlicher Punktanzahl in den Raumdimensionen werden, wie erwartet, weniger Iterationen für die Lösung des resultierenden Eigenwertproblems benötigt als mit $SIRQIT - CG$. Bei stark anisotropen Diskretisierungen ist die Konvergenz des Verfahrens aber deutlich schlechter, z.T. wird die Abbruchbedingung gar nicht erfüllt. Das Verfahren $SIRQIT - CG$ benötigt zwar unter Umständen äußerst viele Iterationsschritte, aber es konvergiert bei allen betrachteten Problemen.

4.7 Identifizierung der Eigenvektoren

Ein großes Problem bei der Lösung von Eigenproblem mit der Kombinationstechnik besteht in der Zusammenfassung der berechneten Lösungen der einzelnen Gitter. Die Eigenwertlöser berechnen für jedes Teilproblem die Reihenfolge der Eigenwerte mit dazugehörigen Eigenvektoren. Allerdings ist es nicht gegeben, daß die Reihenfolge der Eigenwerte für ein Teilproblem der Reihenfolge der Eigenwerte eines anderen Gitters entspricht (siehe Abbildung 4.4). Es muß verglichen werden, welcher Eigenvektor einer Diskretisierung zu welchem Eigenvektor eines anderen Gitters der Kombinationstechnik paßt.

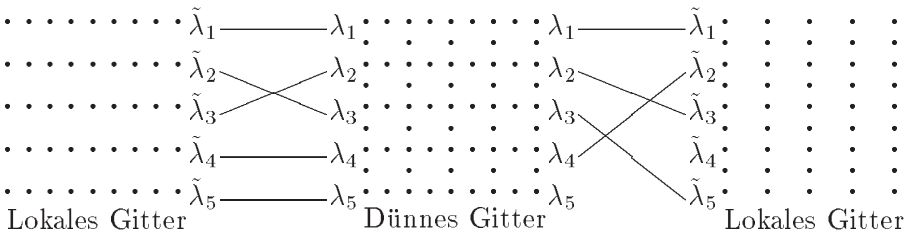


Abbildung 4.4: Die Reihenfolge der Eigenwerte auf dem dünnen Gitter muß nicht der Reihenfolge auf den Teilgittern der Kombinationstechnik entsprechen

Allerdings ist bisher nicht geklärt, ob es immer die Möglichkeit gibt eine eindeutige Identifizierung der Vektoren zu erhalten. Man muß bedenken, daß bei der Kombinationstechnik Diskretisierungen mit extremen Unterschieden in der Punktanzahl pro Raumdimension häufig auftreten und die Raumrichtung mit vielen Punkten einen großen Einfluß auf die Lösungsfunktion dieses Gitters hat. Das kann dazu führen, daß eigentlich vorhandene signifikante Unterschiede zwischen verschiedenen Eigenvektoren eines Gitters sich verkleinern bzw. verändern und im Vergleich zu Vektoren eines anderen eine Identifizierung nicht mehr erlauben.

Die Unterschiede der Eigenvektoren und deren Veränderung durch Approximationsfehler auf verschiedenen Gittern stellen ein großes Problem für deren Identifizierung dar, das in dieser Arbeit nicht wirklich gelöst wird.

Ein zweites Problem der Identifizierung taucht bei mehrfachen Eigenwerten auf. Die Eigenvektoren zu diesen Eigenwerten bilden einen mehrdimensionalen Vektorraum. Da innerhalb dieses Eigenraumes die Eigenvektoren nicht eindeutig charakterisiert werden können, ist eine Identifizierung von Eigenvektoren von verschiedenen Gittern in einem solchen Fall nicht möglich. Fügt man aber geeignete kleine Störungen ein, kann man dieses Problem einfach lösen. Man hebt dadurch die Mehrfachheit des Eigenwertes auf. Die verursachten Fehler haben allerdings Einfluß auf die Genauigkeit der Eigenwerte und Eigenfunktion. In den erfolgten Berechnungen genügte es immer, die Gebietsgrenzen, die von der betrachteten Gleichung her eigentlich identisch sind, leicht zu verschieben. Die Veränderungen der Eigenwerte dadurch waren deutlich geringer als die Approximationsgenauigkeit, aber eine Identifizierung der Eigenvektoren zu mehrfachen Eigenwerten ist möglich geworden.

Im Programm *EigKT* werden die Lösungsfunktionen eines Gitters mit den Lösungsfunktionen eines vorher berechneten Gitters verglichen, indem diese auf das aktuelle Gitter linear interpoliert werden. Es werden die Normen der Differenzvektoren, d.h. der Abstand, aller Paare von Lösungen dieser zwei Gitter gebildet und dann jedem Eigenvektor des aktuellen Gitters der Eigenvektor das vorherigen Gitters mit dem geringstem Abstand zugeordnet, sofern dieser geringste Abstand klein genug ist. Dabei muß natürlich darauf geachtet werden, daß die Eigenvektoren alle auf eins normiert sind. Bei der Auswahl des Gitters mit dem verglichen wird ist zu beachten, daß möglichst wenig Unterschiede in der Anzahl der Punkte je Raumdimension vorhanden sind. Es wird nicht immer das direkt vorher berechnete als Vergleichsgitter genommen, sondern unter Umständen schon „ältere“ Gitter, die ähnlichere

Punktanzahlen haben. Bei zu verschiedenen Strukturen der verglichenen Gitter ist häufiger eine Fehlidentifizierung festzustellen.

So folgt z.B. im Durchlauf der Teilprobleme das Gitter mit der Anzahl von Punkten $(9, 5, 65)$ in den drei Dimension dem mit den Punkten $(5, 129, 5)$. Diese beiden Diskretisierungen stellen die Eigenfunktionen natürlich sehr unterschiedlich dar. Im Programm wird deswegen das Gitter $(9, 5, 65)$ mit dem ebenfalls schon berechneten Gitter $(5, 5, 129)$ verglichen. Diese weist eine deutlich ähnlichere Struktur auf und liefert bessere Vergleichsergebnisse.

Es ist natürlich auch möglich, die Vektoren zweier zu vergleichender Gitter auf ein festes Referenzgitter zu interpolieren und dort die Identifizierung der Eigenfunktion ablaufen zu lassen. Dies erweist sich in der Praxis aber als fehlerträchtiger als das erste vorgeschlagene Verfahren.

Als Normen für die Berechnung der Abstände zweier Eigenfunktionen sind die euklidische Vektornorm, die L_2-Norm und die H_1-Norm implementiert, mit keinen erkennbaren Vorteilen für eine von diesen Normen. Benutzt wird normalerweise die Vektornorm, da diese am schnellsten zu berechnen ist.

Ein weiteres Problem stellt die Verifizierung der Ergebnisse der numerischen Vergleiche dar. Den Eigenwerten ist nicht anzusehen, ob sie richtig sind. Nur bei mehrfachen Eigenwerten kann man überprüfen, ob sie nur die erwarteten leichten Abweichungen auf Grund der, künstlich eingeführten, Störungen haben. Den Eigenvektoren kann man unter Umständen bei der späteren graphischen Betrachtung ansehen, ob sie ein „korrektes" Aussehen haben. Eine hinreichende Verifizierung ist dies natürlich nicht, ein „korrektes" Aussehen der Eigenfunktionen ist aber eine notwendige Bedingung.

Ein Möglichkeit zur Erhöhung der Sicherheit der Ergebnisse besteht darin, die Vergleiche mit allen drei Normen durchlaufen zu lassen. Bei Eigenwerten, wo sie gleiche Ergebnisse liefern, kann man sich sicherer sein, daß die Identifizierung korrekt ist.

Zusammenfassend gesagt ist die Identifizierung der Eigenvektoren von der Theorie her nicht geklärt und in der Praxis sehr vom Problem und dem Problemverständnis des Benutzers abhängig. Vor weiteren Anwendungen der Kombinationstechnik für Eigenwertprobleme muß dieser Themenkomplex umfassend behandelt werden.

4.8 Parallelisierung des Verfahrens

Die Parallelisierung der Kombinationstechnik ist sehr einfach mit einem Steuerprozeß (Host) und mehreren Rechenprozessen zu realisieren. Bei der Berechnung von höheren Eigenwerten wird wegen der dann notwendigen Identifizierung der Eigenvektoren noch ein weiterer gestartet, der sich um die Vergleiche der Lösungsvektoren kümmert. Dieser Prozeß, und auch der Host, benötigen, im Vergleich zu den rechnenden, keine nennenswerte Rechenzeit. Sie können ohne Probleme zusammen mit einem Rechenprozeß auf einem Prozessor laufen.

Der Steuerprozeß startet die gewünschte Anzahl von Prozessen auf den gewünschten Maschinen und schickt diesen die Daten der jeweils zu berechnenden Teilprobleme. Nach der Berechnung eines solchen schicken die Rechenprozesse die Ergebnisse an den Host und gegebenfalls an den Vergleichsprozeß und warten auf neue Problemdaten vom Host. Der Vergleichsprozeß muß als einzige Erweiterung zur seriellen Version darauf achten, daß beide zum Vergleich benötigten Gitter schon berechnet sind. Auf Grund von unterschiedlichen Berechnungszeiten für einzelne Teilprobleme, ist natürlich nicht gegeben, daß die Gitter in der gewünschten Reihenfolge eintreffen. Die Ergebnisse müssen gespeichert werden bis sie benötigt werden.

Die Gitter werden in absteigender Größe verteilt. Die von einem Rechenprozeß zu bearbeitenden Aufgaben werden ihm dynamisch, und nicht von vornherein, zugeteilt. Dadurch wird sichergestellt, daß Unterschiede in den benötigten Rechenzeiten zur Lösung eines Problems keine schlechte Lastbalancierung der Parallelisierung verursachen. Die benutzte Rechenzeit nimmt bei kleineren Gittern deutlich ab, so daß Prozesse die größere Probleme vergleichsweise schnell abgearbeitet haben dementsprechend mehr kleinere Probleme bearbeiten als die Rechenprozesse, die mehr Rechenaufwand bei der Lösung von größeren Problemen hatten. Bei nicht zu extremen Rechenzeitdifferenzen ist damit sehr einfach eine gute Lastbalancierung zu erhalten.

Wie zu sehen ist, ist die Parallelisierung der Kombinationstechnik sehr einfach und mit äußerst wenig Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessen zu realisieren. Während der eigentlichen Berechnung eines Teilproblems der Kombinationstechnik tritt keinerlei Kommunikation zwischen einzelnen Prozessen auf. Auch eine gute Lastbalancierung ergibt sich in einfacher Weise aus der Formulierung der Kombinationstechnik.

Realisiert wurde die Parallelisierung mit dem Softwarepaket PVM [18] auf einem Netz von SGI Workstations.

4.9 Visualisierung der Eigenvektoren

Die im nächsten Kapitel präsentierten Darstellungen der Eigenfunktionen werden mit den Graphikpaket GRAPE [45] erzeugt. Die auf Eins normierten Lösungsfunktionen der einzelnen Teilgitter werden dazu auf ein volles Gitter vorgegebener Größe interpoliert und dort nach der Kombinationsformel (3.7) zusammengefaßt. Dabei spielt es keine Rolle mit welcher Norm gearbeitet wird, oder ob auf dem Teilgitter oder dem Kombinationsgitter normiert wird.

Es wird auf diese Weise natürlich mehr Speicher für die Lösungsvektoren benutzt als notwendig. Allerdings ist es so nicht erforderlich die ansonsten benötigten speziellen Datenstrukturen für dünne Gitter zu implementieren. Sofern sie überhaupt visualisiert werden sollen, werden die Eigenfunktionen auf dem Kombinationsgitter erst nach der eigentlichen Berechnung der Lösung gebildet. Die Eigenwerte sind meist die relevanteren Ergebnisse.

Für die Visualisierung werden die Eigenvektoren auf dem vollen Gitter auf eine Maximumsnorm von eins gebracht und zusammen mit den Daten des Gitters in einer Datei ausgegeben, die von dem Visualisierungsprogramm eingelesen werden kann.

Kapitel 5

Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel betrachten wir die Eigenschaften der Kombinationstechnik bei einigen Beispielproblemen. Zuerst wird das Standardmodellproblem für Eigenwertgleichungen dieser Art, der harmonische Oszillator, behandelt. Dann die numerisch schon deutlich schwieriger zu behandelnden Schrödingergleichungen für das Wasserstoffatom und das H_2^+-Ion Diese beiden Objekte werden auch unter dem Einfluß von starken äußeren Magnetfeldern untersucht. Zum Abschluß wird dann die Schrödingergleichung für das Heliumatom betrachtet. Diese Rechnung in sechs Dimenensionen zeigt die Möglichkeiten der Kombinationstechnik für hochdimensionale Anwendungen.

Im folgenden bezeichnen wir mit λ_n die numerisch berechneten Eigenwerte der Vertiefungsstufe n. $e_n = |E - \lambda_n|$ ist der Fehler eines numerisch bestimmten Eigenwertes λ_n im Vergleich zum exakten Eigenwert E bzw. Ergebnissen aus anderen Arbeiten, die als Referenzeigenwert E benutzt werden. $\delta\lambda_n = |\lambda_n - \lambda_{n-1}|$ wiederum gibt die Veränderung der numerischen Eigenwerte von einer Vertiefungsstufe zur nächsten an.

5.1 Harmonischer Oszillator

Eines des Standardtestprobleme bei der numerischen Behandlung der stationären Schrödingergleichung ist der harmonische Oszillator. Wir betrachten den sogenannten anisotropen Oszillator mit Potentialen P der Form

$$P(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{D} \beta_j^2 x_j^2, \qquad \boldsymbol{x} \in [-a; a]^D,$$

wobei β_j die Anisotropiefaktoren sind. Damit erhalten wir die Schrödingergleichung

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{D} \beta_j^2 x_j^2 u(\boldsymbol{x}) = E u(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in [-a; a]^D.$$

Für dieses einfache Modellproblem sind, da es in eindimensionale Oszillatorprobleme separiert werden kann, analytische Lösungsfunktionen bekannt. Die Eigenfunktion

u kann als Produkt von eindimensionalen Funktionen dargestellt werden

$$u_I(\boldsymbol{x}) = \prod_{j=1}^{D} u_{i_j}(x_j), \qquad I = (i_1, ..., i_d), \tag{5.1}$$

wobei

$$u_{i_j}(x_j) = e^{-\frac{1}{2}\beta_j x_j^2} H_{i_j}(x_j)$$

mit den Hermiteschen Polynomen H_{n_j}.

Die zugehörigen Eigenwerte sind bestimmt durch

$$E_N = \sum_{j=1}^{D} E_{i_j} = 2\sum_{j=1}^{D} \beta_j (i_j + \frac{1}{2}). \tag{5.2}$$

Der niedrigste Eigenwert ergibt sich offensichtlich bei $I = (0, ..., 0)$, die Reihenfolge der höheren Eigenwerte hängt von den Koeffizienten β_j ab.

5.1.1 Randfehler

Die Rechnungen werden auf einem festen Gebiet Ω mit Dirichlet-0-Randwerten unternommen. Wie aber an der Darstellung der exakten Lösung des harmonischen Oszillators (5.1) gesehen werden kann, gehen die Lösungen im Unendlichen gegen Null. Da die Rechnungen aber nicht auf einem unendlich großen Gebiet durchgeführt werden können, gibt es immer einen Randfehler.

Der maximale Fehler tritt nun bei den Randpunkten auf, die den geringsten Abstand vom Nullpunkt haben, also den Punkten der Form $(a, 0, ..., 0)$. Dort ist, bei geeigneter Normierung, auch eine Darstellung des Randfehlers möglich. Es ergibt sich

$$\delta_R u \approx e^{-\frac{a^2}{2}},$$

wobei hier von Anisotropiefaktoren nahe bei eins ausgegangen wird und wir die Tatsache ausnutzen, daß $H_{n_j} = O(1)$ für nicht zu großes n_j. Je größer also das Gebiet gewählt wird, desto kleiner ist bei den durchgeführten Rechnungen der Randfehler.

Durch die nicht ganz korrekte Randbehandlung treten natürlich auch Fehler im Inneren des Gebietes auf. Auch Auswirkungen auf die Eigenwerte müssen berücksichtigt werden.

5.1.2 Harmonischer Oszillator in 3 Dimensionen

Wir betrachten nun einige Eigenwertresultate des dreidimensionalen harmonischen anisotropen Oszillators mit dem Potential

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) + 1\, x_1^2 + 1.2^2 x_2^2 + 1.3^2 x_3^2 = E u(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in [-6; 6]^3. \tag{5.3}$$

Die Anisotropiefaktoren sind in Anlehnung an [1] gewählt. Nach (5.2) beträgt der Wert des exakten ersten Eigenwerts E 3.5.

Level n	Punkte	λ_n	$e_n = \|E - \lambda_n\|$	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$
4	111	3.6437578009	$4.1074 \cdot 10^{-2}$	-
5	351	3.5361938991	$1.0341 \cdot 10^{-2}$	3.9719
6	1023	3.5090679150	$2.5908 \cdot 10^{-3}$	3.9914
7	2815	3.5022682486	$6.4807 \cdot 10^{-4}$	3.9978
8	7423	3.5005671424	$1.6204 \cdot 10^{-4}$	3.9994
9	18943	3.5001417906	$4.0512 \cdot 10^{-5}$	3.9999
10	47103	3.5000354480	$1.0128 \cdot 10^{-5}$	4.0000
11	114687	3.5000088678	$2.5337 \cdot 10^{-6}$	3.9974
12	274431	3.5000022354	$6.3867 \cdot 10^{-7}$	3.9671
13	647167	3.5000054022	$1.5435 \cdot 10^{-6}$	0.4138
14	1507327	3.5000121881	$3.4823 \cdot 10^{-6}$	0.4432
Extrapoliert		3.5000005943	$1.6979 \cdot 10^{-7}$	

Tabelle 5.1: Erster Eigenwert des betrachteten dreidimensionalen anisotropen harmonischen Oszillators (5.3). Der extrapolierte Eigenwert wurde mit MATLAB-Routinen aus den Ergebnissen bis Level 12 errechnet.

Ansatzfunktionen	Matrixdimension	λ_n	e_n
linear	92987	3.5022425	$6.407 \cdot 10^{-4}$
quadratisch	152116	3.5000106	$3.040 \cdot 10^{-6}$
kubisch	113325	3.5000009	$2.571 \cdot 10^{-7}$
quartisch	95921	3.5000001	$2.857 \cdot 10^{-8}$
quintisch	130326	3.5000000	$< 5 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 5.2: Eigenwertergebnisse des betrachteten dreidimensionalen anisotropen harmonischen Oszillators aus [1]

In der Tabelle 5.1 sieht man das Konvergenzverhalten unseres Verfahrens für den ersten Eigenwert dieses Beispielproblems. Deutlich ist das optimale Konvergenzverhalten zu sehen, ebenso deutlich allerdings auch der Einfluß des Randfehlers ab Level 13.

Im Vergleich zu den in [1] präsentierten Ergebnissen (siehe Tabelle 5.2) fällt auf, daß die dort benutzte Adaptivität und die höheren Ansatzfunktionen erst ab kubischen Basisfunktionen bessere Ergebnisse bei vergleichbarer Matrixgröße bzw. Punktanzahl liefern. Bei linearen Ansatzfaktoren ist die Kombinationstechnik bei vergleichbarer Punktanzahl zwei Größenordnungen, d.h. um 10^{-2}, besser.

Man sieht ebenfalls, daß trotz des Randfehlers die numerischen Eigenwerte immer über dem tatsächlichen Eigenwert liegen. Dieses Verhalten ist durch die Variationsformulierung auch vorgeschrieben. Das bedeutet allerdings auch, daß Randfehler und Approximationsfehler unterschiedliche Vorzeichen haben.

Betrachten wir dieses Oszillatorpotential auf größeren Gebieten (Abbildung 5.1) so ist deutlich zu erkennen, daß der Randfehler auf den größeren Gebieten erst bei höheren Level in den Bereich der Diskretisierungsfehler gelangt. Andererseits sind

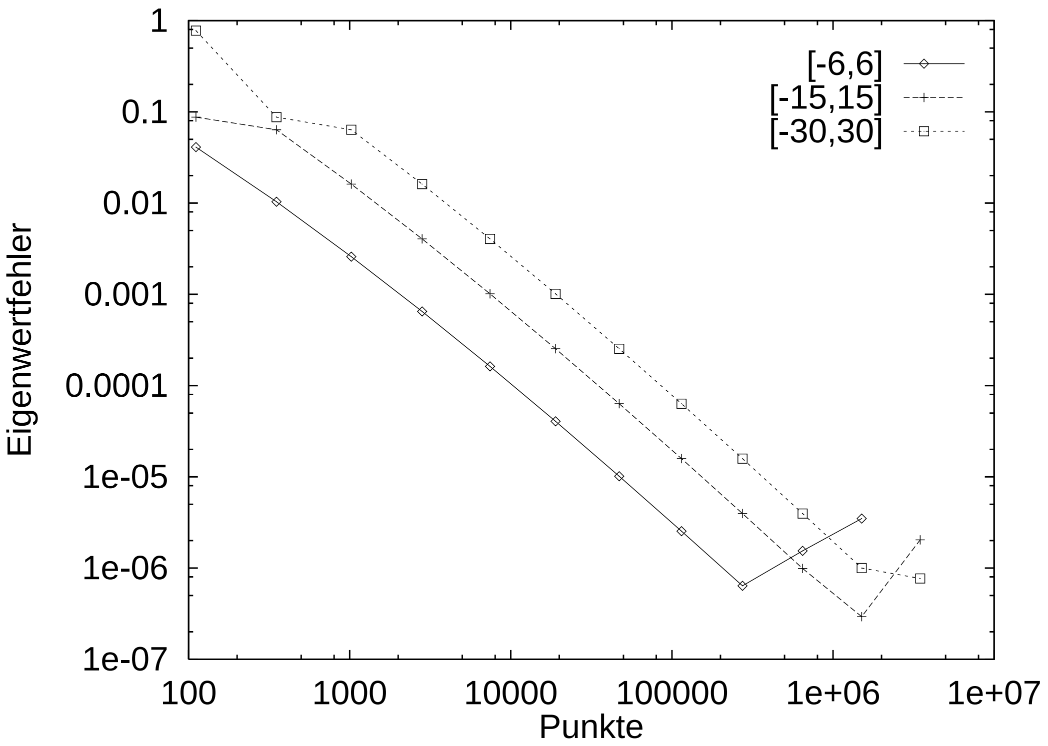


Abbildung 5.1: Fehler e_n des ersten Eigenwertes des harmonischen Oszillators (5.3) auf unterschiedlich großen Gebieten

aber auf jedem Diskretisierungslevel, sofern die Randfehler sich noch nicht bemerkbar machen, die Eigenwerte auf den kleineren Gebieten deutlich besser. Es ist also ein Kompromiß zwischen dem benötigten Rechenaufwand für eine gewünschte Genauigkeit der Eigenwertlösung und dem Einfluß der Randfehler zu suchen.

Ein Vergleich mit anderen Dünngitterrechnungen [23] (siehe Abbildung 5.2) zeigt eine bessere Konvergenz des von uns benutzten Verfahrens. Die Genauigkeit des in dieser Arbeit benutzten Kombinationsansatz für reguläre dünne Gitter ist sogar besser als die unter Benutzung von adaptiven Dünngittern erzielten Ergebnisse. Diese Beobachtung läßt sich dadurch erklären, daß dort die Integration des Potentials nicht genau genug durchgeführt wurde.

Weiterhin ist zu bemerken, daß die numerischen Eigenwerte in [23] sich nicht von oben sondern von unten dem exakten Eigenwert genähert haben. Eine Beobachtung, die nicht mit der erwarteten Konvergenz von oben übereinstimmt, die durch die dort ebenfalls benutzte Variationsformulierung vorgegeben ist.

Zusammenfassend läßt sich festzustellen, daß die Kombinationstechnik für Eigenwertprobleme mit glatten Eigenfunktionen, sowohl im Vergleich mit adaptiven Dünngitterimplementierungen, als auch mit adaptiven FE-Implementierungen höherer Ordnung, Ergebnisse vergleichbarer, wenn nicht sogar besserer Güte liefert. Die von uns bei diesem Beispiel nicht benutzte Gradierung der Gitter oder auch die prinzipiell mögliche Benutzung von höheren Ansatzfunktionen würde das Konvergenzverhalten der Kombinationstechnik noch weiter verbessern.

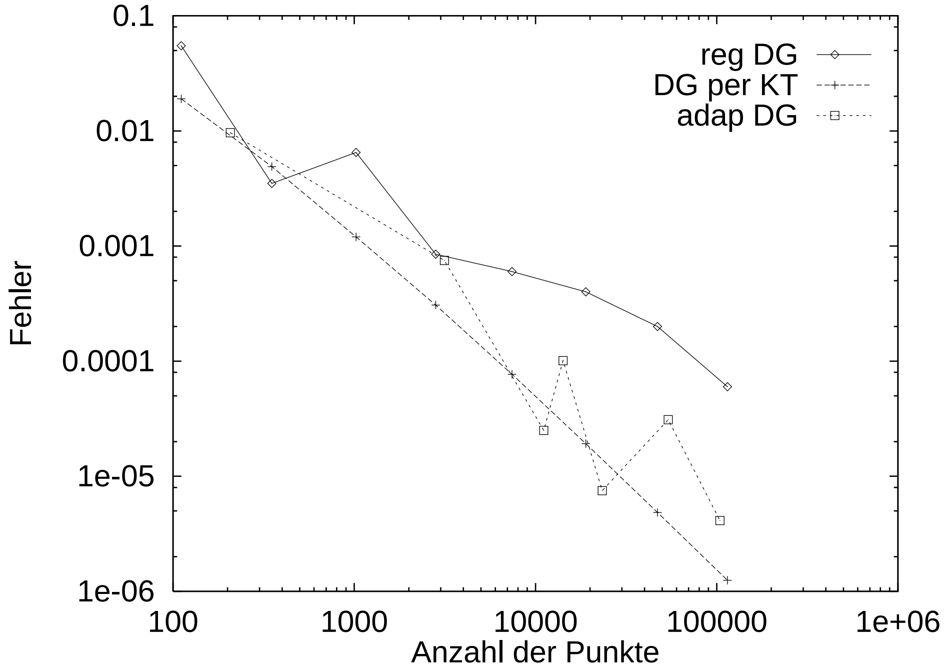


Abbildung 5.2: Fehler e_n des ersten Eigenwertes von (5.3) im Vergleich zu den Ergebnissen aus [23]

Dim.	Level n	Punkte DG	Punkte gbG	λ_n	e_n
3	11	114687	6975	3.00000644	$2.147 \cdot 10^{-6}$
4	10	178177	5145	4.00003433	$8.583 \cdot 10^{-6}$
5	9	187903	3087	5.00017166	$3.433 \cdot 10^{-5}$
6	8	141569	1701	6.00082394	$1.373 \cdot 10^{-4}$

Tabelle 5.3: Erster Eigenwert des isotropen harmonischen Oszillator (5.4). DG = Dünnes Gitter, gbG = größtes berechnetes Gitter der Kombinationstechnik

5.1.3 Isotroper harmonischer Oszillator in höheren Dimensionen

Um die Möglichkeiten der dünnen Gitter für hochdimensionale Rechnungen zu demonstrieren, sind einige Rechnungen für isotrope harmonischen Oszillatoren unternommen wurden (vgl. Tabelle 5.3). Die zugehörige Schrödingergleichung dazu lautet:

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{D} x_j^2 u(\boldsymbol{x}) = E u(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in [-6;6]^D. \tag{5.4}$$

Als kleinster Eigenwert E ergibt sich jeweils D. Man sieht, daß mit der Kombinationstechnik bei diesen numerischen Beispielen auch in höheren Dimension gute Ergebnisse erreicht werden können. Mit herkömmlichen Finite-Element Rechnungen wären Resultate in den höheren Dimensionen aus Speicherplatzgründen nicht mehr möglich.

5.2 Das Wasserstoffatom

Wie in Kapitel 2 erläutert, erhalten wir für die Beschreibung der Energiezustände des Wasserstoffatoms die folgende Schrödingergleichung in der Born-Oppenheimer-Näherung

$$-\Delta u(\boldsymbol{x}) - \frac{2}{|\boldsymbol{x}|}u(\boldsymbol{x}) = Eu(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in [-a;a]^3. \tag{5.5}$$

Dieses Problem läßt sich auf eine eindimensionale Gleichung in radialen Variablen reduzieren, die analytisch lösbar ist. Aus diesem Grund eignet sich dieses Eigenwertproblem sehr gut zum Test von numerischen Verfahren zur Lösung der stationären Schrödingergleichung. Es ist numerisch anspruchsvoll und die Eigenwerte und Eigenvektoren sind analytisch bekannt.

Die Eigenwerte lauten

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, \tag{5.6}$$

wobei der n-te Eigenwert die Vielfachheit n^2 besitzt.

Die Eigenfunktionen u_{nlm} zu den Eigenwerten E_n haben in Polarkoordinaten die Darstellung

$$u_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = C(n,l,m)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)r^l e^{-r} L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right),$$

mit den Kugelfunktionen Y_{lm}, den Laguerrepolynomen L_{n+1}^{2l+1} und einer Normierungskonstanten C, abhängig von den Quantenzahlen n, l und m.

Die Energieeigenwerte sind nur von der Hauptquantenzahl n abhängig und die Quantenzahlen l und m sorgen für eine Entartung, d.h. eine Vielfachheit der Eigenwerte. Dabei gibt l das Orbital an, den Quantenzahlen $l = 0, 1, 2, 3$ entsprechen die s, p, d, f Orbitale, und die Quantenzahl m gibt eine weitere Entartung innerhalb des Orbitals an.

Numerische Probleme bereitet bei diesem Problem das Coulombpotential. Im Nullpunkt des Gebiets existiert eine Punktsingularität, die sowohl bei der Aufstellung der Matrix, d.h. beim Integrieren der Potentialausdrücke, als auch bei der Wahl des benutzten Gitters, d.h. der Gradierungsfunktion, zu beachten ist.

Für die Integration das Potentials an der Singularität wird zum einem die Anzahl der Stützstellen hochgeschraubt, zum anderen wird direkt an der Nullstelle der Duffy-Trick, Abschnitt 4.4.1, angewandt. Die Rechnungen wurden mit 15 Stützstellen je Raumdimension, d.h. insgesamt 3375 Stützstellen durchgeführt.

5.2.1 Berechnung des ersten Eigenwertes

In Tabelle 5.4 sehen wir das Konvergenzverhalten des Verfahrens für die Berechnung des ersten Eigenwertes des Wasserstoffatoms. Wie zu erwarten ist die Approximationsgenauigkeit und die Konvergenz auf den benutzten äquidistanten Gittern nicht zufriedenstellend.

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	-0.80444935270	$1.9555 \cdot 10^{-1}$	-	-	-
5	-0.86589531562	$1.3410 \cdot 10^{-1}$	1.4582	$6.1446 \cdot 10^{-2}$	-
6	-0.91121483452	$8.8785 \cdot 10^{-2}$	1.5104	$4.5320 \cdot 10^{-2}$	1.3558
7	-0.94231051252	$5.7689 \cdot 10^{-2}$	1.5390	$3.1096 \cdot 10^{-2}$	1.4574
8	-0.96337278799	$3.6627 \cdot 10^{-2}$	1.5750	$2.1062 \cdot 10^{-2}$	1.4764
9	-0.97854008253	$2.1460 \cdot 10^{-2}$	1.7068	$1.5167 \cdot 10^{-2}$	1.3887
10	-0.98731613271	$1.2684 \cdot 10^{-2}$	1.6919	$8.7761 \cdot 10^{-3}$	1.7283
11	-0.99279441524	$7.2056 \cdot 10^{-3}$	1.7603	$5.4783 \cdot 10^{-3}$	1.6020
12	-0.99608286602	$3.9171 \cdot 10^{-3}$	1.8395	$3.2885 \cdot 10^{-3}$	1.6659
Extrapoliert	-0.998289	$1.7106 \cdot 10^{-3}$			

Tabelle 5.4: Erster Eigenwert des Wasserstoffatoms, Standardgitter auf $[-7,5;7,5]^3$. Extrapoliert mit MATLAB-Routinen aus den Level 9-12.

n	Punkte	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	111	-0.8648233	$1.3518 \cdot 10^{-1}$	-	-	-
5	351	-0.9222590	$7.7741 \cdot 10^{-2}$	1.7388	$5.7436 \cdot 10^{-2}$	-
6	1023	-0.9693483	$3.0652 \cdot 10^{-2}$	2.5363	$4.7089 \cdot 10^{-2}$	1.2197
7	2815	-0.9829150	$1.7085 \cdot 10^{-2}$	1.7941	$1.3567 \cdot 10^{-2}$	3.4709
8	7423	-0.9931012	$6.8988 \cdot 10^{-3}$	2.4765	$1.0186 \cdot 10^{-2}$	1.3319
9	18943	-0.9964721	$3.5279 \cdot 10^{-3}$	1.9555	$3.3709 \cdot 10^{-3}$	3.0218
10	47103	-0.9985468	$1.4532 \cdot 10^{-3}$	2.4276	$2.0747 \cdot 10^{-3}$	1.6248
11	114687	-0.9995987	$4.0133 \cdot 10^{-4}$	3.6211	$1.0519 \cdot 10^{-3}$	1.9723
Extrapoliert		-0.999901	$9.8800 \cdot 10^{-5}$			

Tabelle 5.5: Erster Eigenwert des Wasserstoffatoms auf $[-7,5;-7,5]^3$. Gradierungsfunktion ist $\frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$

Deswegen werden die in Abschnitt 3.3.4 eingeführten gradierten Gitter für dieses Problem benutzt. Als Gradierungsfunktion hat sich $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ bewährt, siehe auch Abbildung 3.7 für das daraus resultierende dünne Gitter in zwei Dimensionen. Andere Gradierungsfunktionen wie z.B. $x \mapsto \frac{x^3}{a^2}$ liefern zwar auf niedrigeren Level bessere Ergebnisse, allerdings ist mit diesen die Konvergenz der Eigenwertlöser auf stark anisotropen Gittern höherer Level sehr schlecht. Mit der Gradierungsfunktion $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)|x|^{2.5}}{a^{1.5}}$ liefern die Eigenwertlöser bei der Berechnung mehrerer Eigenwerte sogar falsche Ergebnisse. Der erste Eigenwert wird richtig bestimmt, die höheren aber falsch.

In Tabelle 5.5 ist eine deutlich bessere Konvergenz im Vergleich zu äquidistanten Gittern erkennbar. Die Genauigkeit der Lösung auf einem solchen des Level 12 wird beim gradierten Gitter bereits bei der Verfeinerungstiefe 9 erreicht. Allerdings könnte die Konvergenzgeschwindigkeit durchaus noch höher sein. Von allen getesteten Funktionen hat sich $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ als die numerisch geeigneteste erwiesen. Es ist aber zu

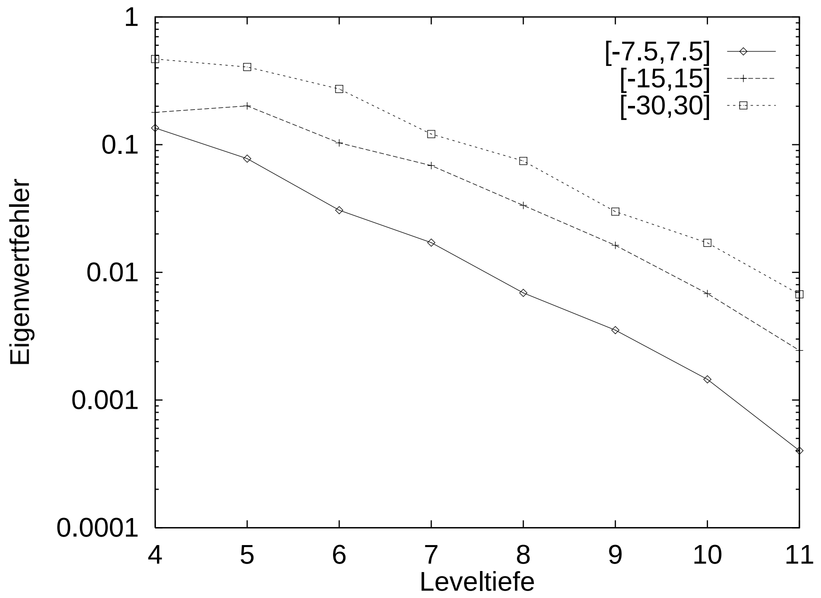


Abbildung 5.3: Fehler e_n des ersten Eigenwertes des Wasserstoffatoms auf verschieden großen Gebieten

erwarten, daß eine andere Wahl der Gradierungsfunktion zu einem besseren Konvergenzverhalten führt. Zur Bestimmung der idealen Gradierungsfunktion wäre eine genaue Analyse der Lösung erforderlich. Zu bedenken ist auch, daß eine optimale Anpassung der Diskretisierung an das Coulombpotential mit einer Rechteckstruktur gar nicht erreicht werden kann. Das Potential hängt letztendlich nur vom Abstand eines Punktes vom Ursprung ab. Die Punkte müßten demnach kugelsymmetrisch um diesen angeordnet werden, was mit den benutzten rechteckigen Gittern nicht realisierbar ist.

In Abbildung 5.3 sind die Eigenwertfehler von, für verschiedene Gebietsgrößen, durchgeführten Rechnungen mit gradierten Gittern aufgetragen. Die Eigenwertfehler sind bei dem kleinsten Gebiet, mit dem eigentlich zu erwartenden größten Randfehler, am geringsten. Wenn wir dieses Ergebnis mit den Beobachtungen aus dem vorherigen Abschnitt über harmonische Oszillatoren vergleichen, ist das Verhalten nicht unerwartet. Der Randfehler ist bei den betrachteten Level noch nicht in den Größenbereich des Fehlers der Approximation vorgedrungen. Die Rechnungen können also durchaus auf den kleinen Gebieten durchgeführt werden. Ebenfalls zu bedenken ist die Tatsache, daß die Gradierungsfunktion $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ nicht genug auf die Größe des Gebietes eingeht. Im wichtigen Bereich um das Coulombpotential liegen mit zunehmender Größe des Gebietes somit weniger Punkte. Dies hat negative Auswirkungen auf die Approximation.

Abbildung 5.4 stellt die erste Eigenfunktion dar und die Abbildungen 5.5 und 5.6 geben den Fehler der ersten Eigenfunktion für zwei verschiedene Leveltiefen wieder. Dargestellt wird ein Schnitt durch die $(z = 0)$-Ebene. Deutlich ist zu erkennen, daß der größte Fehler im Ursprung des Gebietes beim Kern des Wasserstoffatoms liegt. Die Singularität wird aber, vor allem beim feinsten Gitter, recht gut isoliert. Die

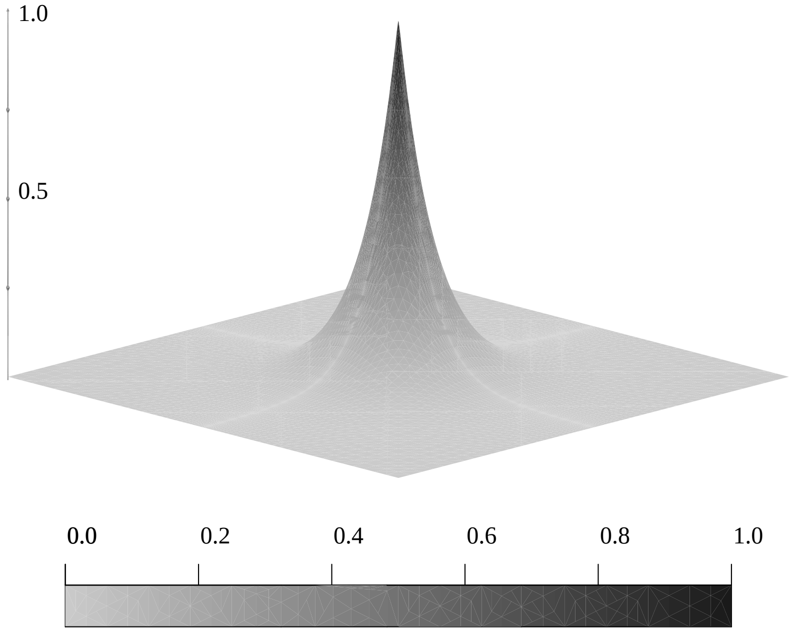


Abbildung 5.4: Erste Eigenfunktion von Wasserstoff auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-7,5;7,5]^3$

Fehlerfunktion verhält sich ebenso symmetrisch wie das Coulombpotential und wird mit wachsender Entfernung vom Zentrum schnell klein. Am Rand wiederum ist der durch das Abschneiden des Gebietes verursachte Randfehler deutlich zu beobachten, mit zunehmender Leveltiefe steigt dessen relativer Einfluß zum Gesamtfehler.

Die in [23] durchgeführten Berechnungen der Eigenwerte für das Wasserstoffatom wurden für den ersten Eigenwert auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-7,5;7,5]^3$ unternommen. Am Ursprung wurde das Coulombpotential in dieser Vergleichsarbeit durch Abschneiden des Wertes oder Verschieben des Potentialortes gegenüber den Gitterpunkten regularisiert. Die dadurch verursachten Fehler in den Ergebnissen wurden in der Arbeit selbst als möglicherweise sehr groß dargestellt, so daß Vergleiche mit dem dort per Dünngitterrechnung erhaltenen ersten Eigenwert mit Vorsicht zu bewerten sind. Der mögliche Fehler ist deutlich größer als der gemessene Fehler.

Bei einem adaptiven dünnen Gitter mit 72468 Knoten betrug dort der relative Fehler des Eigenwertes $-6.65 \cdot 10^{-4}$. Bei einem gradierten Gitter mit vergleichbarer Knotenzahl ist in dieser Arbeit ein ähnlicher Fehler festzustellen (siehe Tabelle 5.5). In der Arbeit [23] wird ein Abschirmgitter eingeführt, dabei wird in direkter Nähe der Singularität ein volles Gitter benutzt, ansonsten ein adaptives dünnes Gitter. Mit 37087 Punkten wurde ein relativer Fehler von $-3.94 \cdot 10^{-4}$ festgestellt. Eine Fehlerordnung die wir erst mit dreimal mehr Punkten erreichen, allerdings auf einem gradierten dünnem Gitter.

Im Vergleich zu adaptiven Dünngitterrechnungen erhalten wir demnach vergleichbare Fehlerordnungen. Ein Abschirmgitter, d.h. die Mischstruktur aus vollen und dünnen Gittern, liefert aber bessere Ergebnisse.

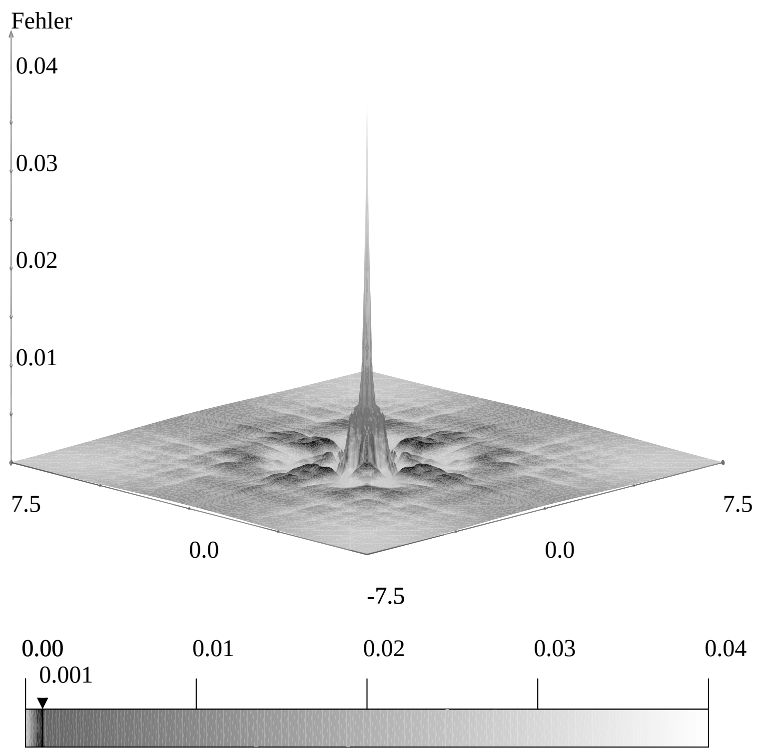


Abbildung 5.5: Fehler der ersten Eigenfunktion von Wasserstoff bei Level 8

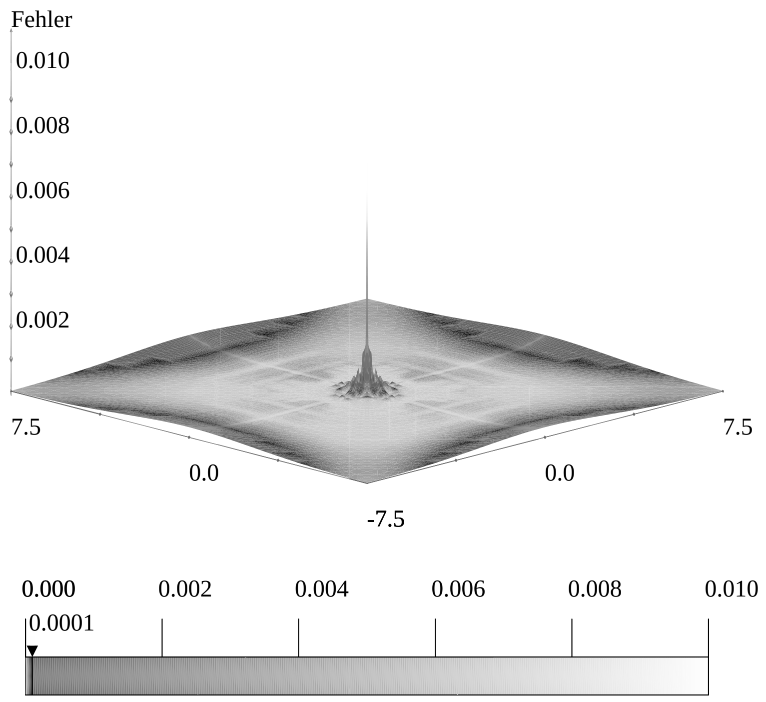


Abbildung 5.6: Fehler der ersten Eigenfunktion von Wasserstoff bei Level 11

5.2.2 Berechnung mehrerer Eigenwerte

Bei der Berechnungen von mehreren Eigenwerten ist, wie schon in Abschnitt 4.7 beschrieben, auf Grund der Vielfachheit der höheren Eigenwerte das Gebiet leicht zu stören, um die Mehrdimensionalität des Eigenraumes aufzuheben und die notwendige Identifizierung der Eigenvektoren zu ermöglichen. Statt auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-a; a]^3$ rechnen wir auf dem $[-a; a] \times [-a + \epsilon; a - \epsilon] \times [-a - \epsilon; a + \epsilon]$ mit ϵ kleiner als der Approximationsgenauigkeit.

Die Mindestanzahl der Diskretisierungspunkte der einzelnen Teilgitter pro Dimension muß erhöht werden, die in 4.2 eingeführte Variable GROBGITTER wird dazu auf 1 gesetzt. Somit sind mindestens drei innere Punkte pro Dimension vorhanden, dadurch halten sich die Verschiebungen innerhalb der Spektren der einzelnen Gitter in Grenzen. Zur Berechnung der ersten fünf Eigenwerte reicht es fünf Eigenwerte bei jedem Teilproblem zu berechnen. Es macht allerdings keinen Sinn, mit weniger als fünf Eigenwerten zu rechnen. Durch die Verschiebungen würde nur der erste Eigenwert auf dem Kombinationsgitter bestimmt. Bei den anderen fehlen auf den Teilgittern die zugehörigen Eigenfunktionen. Die Eigenwerte zwei bis fünf haben analytisch den gleichen Wert. Numerisch sind Unterschiede vorhanden, da zwei Typen von Eigenfunktionen vorhanden sind. Physikalisch gibt es einen $2s$ Zustand und drei verschiedene $2p$ Zustände. Die $2p$ Zustände lassen sich durch Drehungen ineinander überführen und die zugehörigen Eigenwerte haben numerisch denselben Wert. Die zur nötigen Aufhebung der Mehrfachheit dieses Eigenwertes eingeführten kleinen Randstörungen verursachen numerische Unterschiede. Diese sind aber deutlich kleiner als die Rechengenauigkeit.

Die Berechnung auf dem kleinen Gebiet $\overline{\Omega} = [-7,5; 7,5]^3$ erweist sich bei der Bestimmung von mehreren Eigenwerten als Nachteil, denn die Genauigkeit der höheren Eigenwerte ist deutlich schlechter als die des ersten. Beim mittleren Gebiet $\overline{\Omega} = [-15; 15]^3$ gelingt die Approximation der höheren Eigenwerte besser (vgl. Tabelle 5.6). Die Unterschiede in den numerischen Ergebnissen für die drei $2p$ Eigenwerte, verursacht durch die eingeführten Störungen zur Aufhebung der Mehrfachheit des Eigenwertes, sind mindestens zwei Größenordnungen kleiner als die beobachteten Diskretisierungsfehler.

Die zu beobachtenden unterschiedlichen Konvergenzraten der einzelnen Eigenwerte sind mit den verschiedenen Formen der Eigenfunktionen zu erklären. Wie in den Abbildungen zu sehen ist, ist die $2p$ (Abb. 5.7) Eigenfunktion glatter als die $1s$ (Abb. 5.4) bzw. $2s$ (Abb. 5.8) und hat eine deutlich andere Struktur.

Auf Grund dieser unterschiedlichen Gestalt der Eigenfunktionen können die Gitter nicht für alle gleich gut gradiert werden. Die einzelnen Eigenfunktionen bedürfen eigentlich verschiedener Gradierungen, was aber nicht zu realisieren ist. Dieses Problem tritt auch auf adaptiven dünnen bzw. vollen Gittern bei der Berechnung von mehreren Eigenwerten auf. Eine Gradierung oder Adaptierung, die für alle Eigenwerte gleichartig gelten soll, liefert schlechtere Konvergenzergebnisse als speziell auf eine Eigenfunktion zugeschnittene Diskretisierungen. Wobei dabei allerdings nur die betrachtete Eigenfunktion gut approximiert wird [31].

n	Punkte	Typ	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	27	$1s$	-0.753764418	$2.4624 \cdot 10^{-1}$	-	-	-
		$2s$	-0.198318213	$2.0673 \cdot 10^{-1}$	-	-	-
		$2p$	-0.173648240	$3.0541 \cdot 10^{-1}$	-	-	-
5	135	$1s$	-0.771198604	$2.2880 \cdot 10^{-1}$	1.0762	$1.7434 \cdot 10^{-2}$	-
		$2s$	-0.202557705	$1.8977 \cdot 10^{-1}$	1.0894	$4.2395 \cdot 10^{-3}$	-
		$2p$	-0.209598632	$1.6161 \cdot 10^{-1}$	1.8898	$3.5950 \cdot 10^{-2}$	-
6	495	$1s$	-0.889383111	$1.1106 \cdot 10^{-1}$	2.0684	$1.1818 \cdot 10^{-1}$	0.1475
		$2s$	-0.224425861	$1.0230 \cdot 10^{-1}$	1.8598	$2.2187 \cdot 10^{-2}$	0.1939
		$2p$	-0.232569890	$6.9720 \cdot 10^{-2}$	2.3179	$2.2971 \cdot 10^{-2}$	1.5650
7	1567	$1s$	-0.929329177	$7.0670 \cdot 10^{-2}$	1.5652	$3.9946 \cdot 10^{-2}$	2.9586
		$2s$	-0.235769630	$5.6921 \cdot 10^{-2}$	1.7972	$1.1344 \cdot 10^{-2}$	1.9278
		$2p$	-0.243516549	$2.5934 \cdot 10^{-2}$	2.6884	$1.0947 \cdot 10^{-2}$	2.0985
8	4543	$1s$	-0.965953483	$3.4047 \cdot 10^{-2}$	2.0757	$3.6624 \cdot 10^{-2}$	1.0907
		$2s$	-0.242819744	$2.8721 \cdot 10^{-2}$	1.9819	$7.0501 \cdot 10^{-3}$	1.6090
		$2p$	-0.247536758	$9.8530 \cdot 10^{-3}$	2.6321	$4.0202 \cdot 10^{-3}$	2.7229
9	12415	$1s$	-0.983786419	$1.6214 \cdot 10^{-2}$	2.0998	$1.7833 \cdot 10^{-2}$	2.0537
		$2s$	-0.246508048	$1.3968 \cdot 10^{-2}$	2.0562	$3.6883 \cdot 10^{-3}$	1.9115
		$2p$	-0.249049404	$3.8023 \cdot 10^{-3}$	2.5913	$1.5126 \cdot 10^{-3}$	2.6577
10	32511	$1s$	-0.993213014	$6.7870 \cdot 10^{-3}$	2.3889	$9.4266 \cdot 10^{-3}$	1.8918
		$2s$	-0.248416256	$6.3350 \cdot 10^{-3}$	2.2049	$1.9082 \cdot 10^{-3}$	1.9329
		$2p$	-0.249585754	$1.6570 \cdot 10^{-3}$	2.2948	$5.3635 \cdot 10^{-4}$	2.8203
11	82431	$1s$	-0.997414730	$2.5853 \cdot 10^{-3}$	2.6253	$4.2017 \cdot 10^{-3}$	2.2435
		$2s$	-0.249232028	$3.0719 \cdot 10^{-3}$	2.0622	$8.1577 \cdot 10^{-4}$	2.3391
		$2p$	-0.249776037	$8.9596 \cdot 10^{-4}$	1.8496	$1.9028 \cdot 10^{-4}$	2.8187
Extrapoliert		$1s$	-0.99957303	$4.270 \cdot 10^{-4}$	-	-	-
		$2s$	-0.24964302	$1.428 \cdot 10^{-3}$	-	-	-
		$2p$	-0.25002522	$1.009 \cdot 10^{-4}$	-	-	-
Exakt (5.6)		$1s$	-1.0	-	-	-	-
		$2s$	-0.25	-	-	-	-
		$2p$	-0.25	-	-	-	-

Tabelle 5.6: Die ersten Eigenwerte von Wasserstoff auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-15; 15]^3$, berechnet auf einem gradierten Gitter, GROBGITTER ist auf 1 gesetzt. Analytisch hat der zweite Eigenwert die Vielfachheit Vier. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind in zwei Typen unterteilbar, deswegen auch die numerischen Unterschiede in den Eigenwerten. Die extrapolierten Ergebnisse wurden mit MATLAB-Routinen aus den Eigenwerten der größeren Level berechnet.

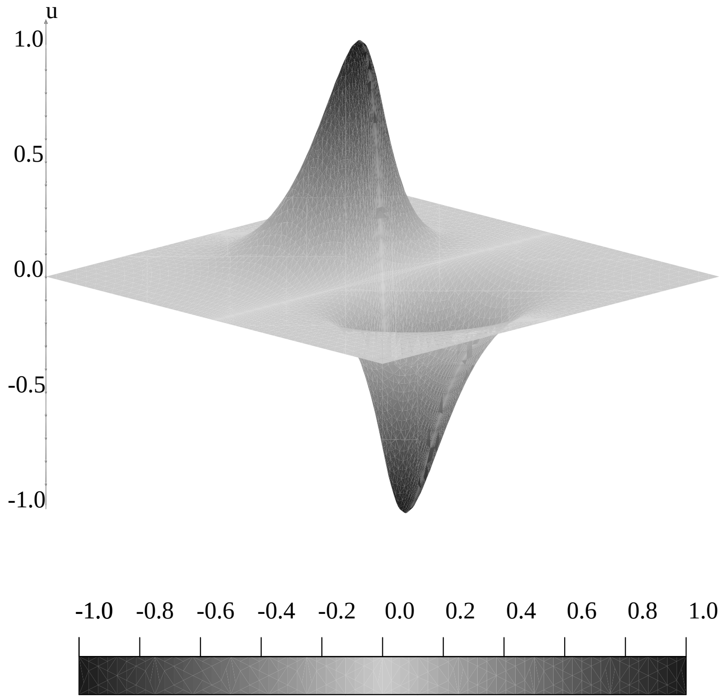


Abbildung 5.7: Eigenfunktion des $2p$-Zustands von Wasserstoff

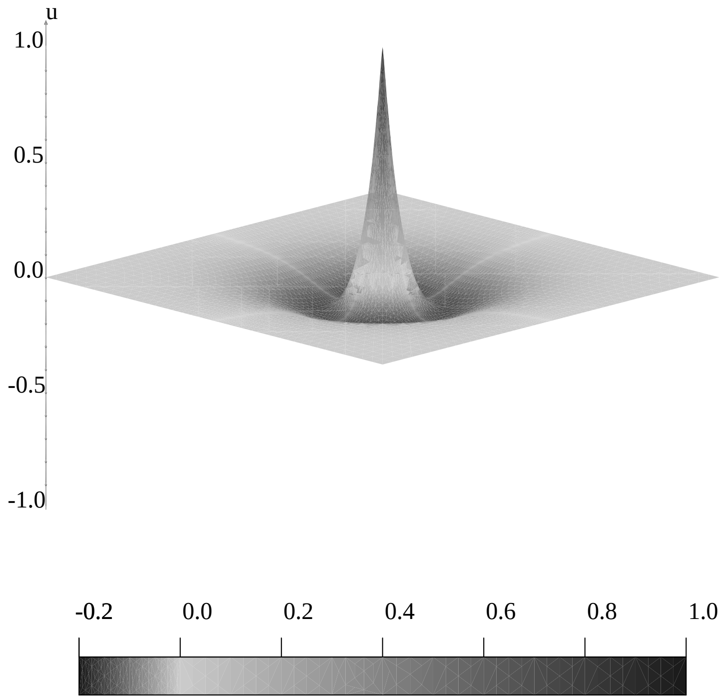


Abbildung 5.8: Eigenfunktion des $2s$-Zustands von Wasserstoff

5.3 Wasserstoff in starken Magnetfeldern

Die Berechnung der Spektren des Wasserstoffatoms in großen Magnetfeldern wurde von Ruder et al. in [39] für die in der Astrophysik interessanten Größen durchgeführt. Der grundlegende Ansatz besteht dort in einer Darstellung der Funktionen durch eine aus schwachen bzw. riesigen Magnetfeldern motivierte Basis aus Kugelfunktionen bzw. Landau-Zuständen. Durch Ausnutzung von Symmetrien kann die Schrödingergleichung zu einem System von gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen umformuliert werden. Diese werden in den jeweiligen Basen mit Hartree-Fock-artigen oder Coupled-Channels-artigen Methoden gelöst. Im Übergangsbereich der starken Magnetfelder werden mit beiden Ansätzen, d.h. Kugelfunktionen oder Landau-Zuständen als Basis, meist annähernd gleiche Ergebnisse erzielt. Allerdings nicht für alle Zustände, in bestimmten Magnetfeldbereichen erweist sich die Darstellung der Lösungsfunktionen durch eine größere Basis aus Kugelfunktionen und Laguerrepolynomen, motiviert aus der Darstellung der exakten Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom, als am besten geeignet. Allerdings resultieren aus dieser Darstellung z.T. sehr große Matrizen, die die Lösung des zugehörigen Eigenwertproblems sehr aufwendig werden lassen.

Die in [39] erzielten Ergebnisse werden bei den hier erfolgten Untersuchungen als Referenzeigenwerte benutzt.

Zu lösen ist die Eigenwertgleichung

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}|} - 2i\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + 4\beta S + \beta^2 (x^2 + y^2) \right) \psi = E\psi, \qquad \boldsymbol{x} \in [-a; a]^3.$$

Aus dieser komplexen Gleichung resultiert, wie im Abschnitt 3.10 beschrieben, ein reelles Eigenwertproblem mit Eigenwerten in doppelter Vielfachheit. Nach der Berechnung wird natürlich nur jeweils ein Eigenwert weiterverarbeitet und geht in die Kombinationsformel ein. Mit den komplexen Eigenfunktionen wäre keine Identifizierung in der jetzigen Form möglich, da physikalisch aber ihr Betragsquadrat relevant ist, wird dieses nach der Lösung auf den Teildiskretisierungen gebildet und damit erfolgt die Identifizierung der Eigenfunktionen auf den einzelnen Kombinationsgittern.

Die Berechnungen erfolgen auf dem Rechengebiet $[-15; 15]^3$, die Variable GROBGITTER ist auf 1 gesetzt und es wird die Gradierungsfunktion $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ aus dem vorherigen Abschnitt benutzt. Diese Einstellungen haben sich numerisch als gut geeignet erwiesen.

Die Genauigkeiten und Konvergenzraten für die Berechnung des ersten Eigenwertes des Wasserstoffatoms unter dem Einfluß eines Magnetfeldes sind in der Asymptotik ähnlich zu den erzielten Ergebnissen bei der Berechnung des ersten Eigenwertes des Wasserstoffatoms ohne Magnetfeld auf einem Gebiet dieser Größe, siehe Tabelle 5.7 für ein Beispielproblem. Zu erwähnen ist, daß die erfolgte Extrapolation bei den zitierten anderen Arbeiten nicht möglich ist. Eine Ordnung der Ergebnisse in Vertiefungsstufen und eine Konvergenzanalyse ist mit den dort benutzten Methoden so nicht machbar.

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	-1.0451447	$3.7128{\cdot}10^{-1}$	-	-	-
5	-1.1005116	$3.3797{\cdot}10^{-1}$	1.0985	$5.5367{\cdot}10^{-2}$	-
6	-1.4457099	$1.3032{\cdot}10^{-1}$	2.5935	$3.4520{\cdot}10^{-1}$	0.1604
7	-1.5923373	$4.2110{\cdot}10^{-2}$	3.0947	$1.4663{\cdot}10^{-1}$	2.3543
8	-1.6293423	$1.9849{\cdot}10^{-2}$	2.1215	$3.7001{\cdot}10^{-2}$	3.9624
9	-1.6467572	$9.3728{\cdot}10^{-3}$	2.1177	$1.7415{\cdot}10^{-2}$	2.1249
10	-1.6555076	$4.1089{\cdot}10^{-3}$	2.2811	$8.7504{\cdot}10^{-3}$	1.9902
11	-1.6596830	$1.5971{\cdot}10^{-3}$	2.5727	$4.1754{\cdot}10^{-3}$	2.0957
Extrapoliert	-1.663373	$6.2262{\cdot}10^{-4}$	-	-	-
e_n im Vergleich mit -1.662338 nach [39]					

Tabelle 5.7: Erster Eigenwert des Wasserstoffatoms in einem Magnetfeld der Größe $\beta = 0.5$. Die Extrapolation in MATLAB wurde mit den Level 8 bis 11 durchgeführt.

Schwierigkeiten treten bei der Berechnung mehrerer Eigenwerte auf. Die durch das Magnetfeld verursachten Veränderungen des Spektrums des Wasserstoffatoms wirken sich verstärkt auf die Kombinationstechnik aus. Die Reihenfolge der Eigenwerte auf den einzelnen Teilgittern verschiebt sich stärker als bei den Rechnungen ohne Magnetfeld. So können die ersten fünf Eigenwerte nicht mehr berechnet werden, indem auf jedem Gitter der Kombinationstechnik fünf Eigenwerte berechnet werden. Durch die dadurch notwendig gewordene Berechnung von mehr Eigenwerten als gewünscht ist auch die Identifikation der Eigenvektoren schwieriger geworden. Je mehr Eigenvektoren vorhanden sind, desto eher können ähnliche Funktionen auftauchen und fehlinterpretiert werden. Es ist auch nicht von vornherein klar, wieviel Eigenwerte berechnet werden müssen, um die gewünschten p unteren zu bestimmen. Unter Umständen können Identifizierungen von Eigenvektoren erfolgen, die erst bei Berechnung von zusätzlichen Eigenwerten als falsch erkannt werden.

Bei Magnetfeldern mit $\beta \geq 0.1$ ist eine Identifizierung von mehr als fünf Eigenwerten bei der Berechnung von zehn Eigenwerten pro Teilgitter nicht gelungen. Da Rechnungen mit mehr als zehn Eigenvektoren nicht erfolgten, ist es unklar, ob dies durch die Identifizierungsprobleme begründet ist oder nicht genügend Eigenwerte berechnet worden sind.

Die Zahl der Iterationsschritte der Lösungsroutinen nimmt mit der Anzahl der gesuchten Eigenwerte zu. Es ist also durchaus Ziel, bei der Berechnung von p Eigenwerten möglichst wenig zusätzliche Eigenwerte zu bestimmen. Besonders auf den stark anisotropen Teilgittern ist die Zahl der von den Eigenwertlösern benötigten Iterationsschritte schon bei wenigen gesuchten Eigenwerten sehr hoch und gerade dort ist aber auch die Verschiebung in den Spektren im Vergleich zum Kombinationsgitter sehr groß. Die numerischen Schwierigkeiten häufen sich bei diesen Teilaufgaben.

Rechnungen wurden für verschiedene $\beta \in [0.01; 2.0]$ durchgeführt. Bemerkenswerte Unterschiede der Genauigkeiten und Konvergenzraten wurden nicht festgestellt. In Tabelle 5.8 sind die Konvergenzresultate für drei niedrige Eigenwerte angegeben. Im Vergleich zu den erzielten Ergebnissen für Wasserstoff ohne Magnetfeld

n	Punkte	Typ	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	27	$1s$	-0.773402599	$2.4161{\cdot}10^{-1}$	-	-	-
		$2s$	-0.213277147	$2.0195{\cdot}10^{-1}$	-	-	-
		$2p_0$	-0.189790833	$2.9397{\cdot}10^{-1}$	-	-	-
5	135	$1s$	-0.790824208	$2.2453{\cdot}10^{-1}$	1.0761	$1.7422{\cdot}10^{-2}$	-
		$2s$	-0.218562862	$1.8217{\cdot}10^{-1}$	1.1086	$5.2857{\cdot}10^{-3}$	-
		$2p_0$	-0.228297249	$1.5072{\cdot}10^{-1}$	1.9504	$3.8506{\cdot}10^{-2}$	-
6	495	$1s$	-0.909131575	$1.0852{\cdot}10^{-1}$	2.0690	$1.1831{\cdot}10^{-1}$	0.1473
		$2s$	-0.240927275	$9.8489{\cdot}10^{-2}$	1.8497	$2.2364{\cdot}10^{-2}$	0.2363
		$2p_0$	-0.251506842	$6.4380{\cdot}10^{-2}$	2.3411	$2.3210{\cdot}10^{-2}$	1.6501
7	1567	$1s$	-0.949112069	$6.9315{\cdot}10^{-2}$	1.5656	$3.9980{\cdot}10^{-2}$	2.9591
		$2s$	-0.252844166	$5.3898{\cdot}10^{-2}$	1.8273	$1.1917{\cdot}10^{-2}$	1.8767
		$2p_0$	-0.262416815	$2.3794{\cdot}10^{-2}$	2.7057	$1.0910{\cdot}10^{-2}$	2.1274
8	4543	$1s$	-0.985747725	$3.3391{\cdot}10^{-2}$	2.0759	$3.6636{\cdot}10^{-2}$	1.0913
		$2s$	-0.260076456	$2.6836{\cdot}10^{-2}$	2.0084	$7.2323{\cdot}10^{-3}$	1.6477
		$2p_0$	-0.266383432	$9.0378{\cdot}10^{-3}$	2.6327	$3.9667{\cdot}10^{-3}$	2.7504
9	12415	$1s$	-1.003585047	$1.5900{\cdot}10^{-2}$	2.1001	$1.7837{\cdot}10^{-2}$	2.0539
		$2s$	-0.263804882	$1.2885{\cdot}10^{-2}$	2.0827	$3.7284{\cdot}10^{-3}$	1.9398
		$2p_0$	-0.267880066	$3.3702{\cdot}10^{-3}$	2.6044	$1.4966{\cdot}10^{-3}$	2.6504
10	32511	$1s$	-1.013012647	$6.6556{\cdot}10^{-3}$	2.3890	$9.4276{\cdot}10^{-3}$	1.8920
		$2s$	-0.265713779	$5.7423{\cdot}10^{-3}$	2.2439	$1.9089{\cdot}10^{-3}$	1.9532
		$2p_0$	-0.268410986	$1.4951{\cdot}10^{-3}$	2.3210	$5.3092{\cdot}10^{-4}$	2.8189
11	82431	$1s$	-1.017214747	$2.5351{\cdot}10^{-3}$	2.6254	$4.2021{\cdot}10^{-3}$	2.2435
		$2s$	-0.266528513	$2.6937{\cdot}10^{-3}$	2.1318	$8.1473{\cdot}10^{-4}$	2.3430
		$2p_0$	-0.268599611	$7.9345{\cdot}10^{-4}$	1.8844	$1.8862{\cdot}10^{-4}$	2.8147
Extrapoliert		$1s$	-1.0193756	$4.162\ {\cdot}10^{-4}$	-	-	-
		$2s$	-0.2667347	$1.922\ {\cdot}10^{-3}$	-	-	-
		$2p_0$	-0.2688491	$1.348\ {\cdot}10^{-4}$	-	-	-
Referenzwerte aus [39]		$1s$	-1.019800	-	-	-	-
		$2s$	-0.267248	-	-	-	-
		$2p_0$	-0.268813	-	-	-	-

Tabelle 5.8: Niedrige Eigenwerte von Wasserstoff unter dem Einfluß eines Magnetfeldes der Größe $\beta = 0.01$ auf $[-15;15]^3$, berechnet mit einem gradierten Gitter, GROBGITTER ist auf 1 gesetzt. Die Ergebnisse der größeren Level wurden mit MATLAB-Routinen extrapoliert.

(siehe Tabelle 5.6) fallen die sehr ähnlichen Konvergenzraten auf. Das Erweitern der Schrödingergleichung um die Terme zur Behandlung des Magnetfeldes verändert das Konvergenzverhalten des Verfahrens kaum. Für sehr große Magnetfelder, $\beta \geq 2.0$, scheint eine Gradierungsfunktion mit Berücksichtigung des Einflusses des Magnetfeldes sinnvoll. Rechnungen dazu wurden allerdings nicht durchgeführt.

In Abbildung 5.9 sind die Isoflächen über $|\psi|^2$, d.h. dem Betragsquadrat der Wellenfunktion, der $2p$-Zustände für verschiedene Magnetfeldstärken dargestellt. Sehr schön ist die Veränderung der Elektronenbahn entlang des Magnetfeldes zu sehen.

5.4 Wasserstoff in starken magnetischen und elektrischen Feldern

Die Betrachtung von Problemen mit einem zusätzlichen elektrischen Feld F

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}|} - 2i\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + 4\beta S + \beta^2(x^2+y^2) + F \cdot \boldsymbol{x} \right) \psi = E\psi,$$

bedeutet für das benutzte Verfahren keinen grundlegenden weiteren algorithmischen Aufwand. Bei der Aufstellung der Potentialmatrix ist nur ein weiterer Term, das Potential $\phi = F \cdot \boldsymbol{x}$ des elektrischen Feldes, zu berücksichtigen.

Andere Verfahren zur Bestimmung der Eigenwerte eines Wasserstoffatoms in einem starken Magnetfeld können meist nicht für die Behandlung eines zusätzlichen elektrischen Feldes erweitert werden. Durch die Richtung das Magnetfeldes und die zusätzliche Richtung des elektrischen Feldes sind die, in den Verfahren der anderen Arbeiten, erfolgten Ausnutzungen von Symmetrien des Problems nicht mehr möglich. Auch die Anzahl der Dimensionen des Problems läßt sich nicht reduzieren. So hat z.B. die Arbeitsgruppe aus Tübingen von [39], deren Ergebnisse wir im letzten Abschnitt als Referenz benutzt haben, eine andere Methode zur Bestimmung der Energien dieses Objektes in [16, 17] benutzt.

Bei der Betrachtung dieses Problems sind demnach als Parameter nicht nur die Größen des Magnetfeldes bzw. des elektrischen Feldes zu behandeln, auch der Winkel zwischen diesen beiden Feldern ist von Relevanz. Zur ausführlichen physikalischen Untersuchung von Wasserstoffatomen in solchen Feldern sind somit Rechnungen mit Variationen in diesen drei Parametern erforderlich.

Bei der Berechnung von höheren Eigenwerten tauchen wiederum die schon beschriebenen Identifizierungsprobleme auf. In der Testrechnung mit einem Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.01$ und einem dazu parallelen elektrischen Feld von $10^8 V/m = 1.9455252 \cdot 10^{-4} F_0$ wurde mit fünf Eigenwerten gerechnet, drei konnten identifiziert werden. Wiederum wurde auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-15; 15]^3$, mit der Gradierungsfunktion $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ und GROBGITTER gleich 1 gerechnet. Es wurden keine prinzipiellen Unterschiede im Vergleich zu Rechnungen mit nur einem Magnetfeld beobachtet.

In Tabelle 5.9 sind Konvergenzergebnisse für den zweiten Eigenwert aufgetragen. Die Veränderung der Genauigkeit von Level zu Level, $\delta\lambda_n$, entspricht dem Verhalten bei

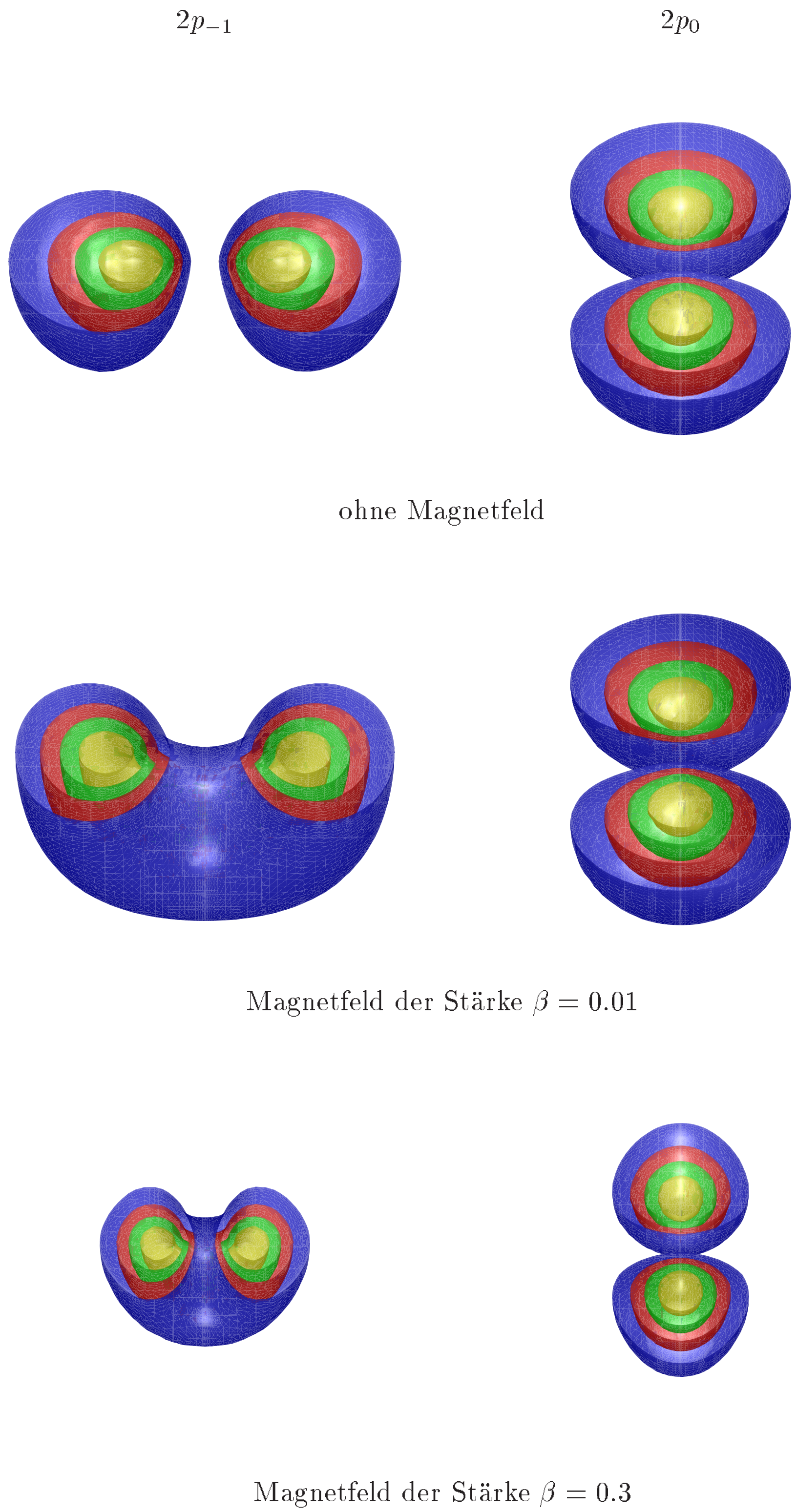


Abbildung 5.9: Die zweiten Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms für verschiedene Magnetfeldstärken. Dargestellt sind die Isoflächen der Wellenfunktion $|\psi|^2$ für 0.2, 0.4, 0.6 und 0.8 (von außen nach innen). Das Magnetfeld liegt in senkrechter Richtung, die Isoflächen sind in der Mitte aufgeschnitten.

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	-0.1908852	$2.9156{\cdot}10^{-1}$	-	-	-
5	-0.2292617	$1.4914{\cdot}10^{-1}$	1.9550	$3.8377{\cdot}10^{-2}$	-
6	-0.2522837	$6.3695{\cdot}10^{-2}$	2.3414	$2.3022{\cdot}10^{-2}$	1.6670
7	-0.2631517	$2.3360{\cdot}10^{-2}$	2.7266	$1.0868{\cdot}10^{-2}$	2.1183
8	-0.2671102	$8.6689{\cdot}10^{-3}$	2.6947	$3.9585{\cdot}10^{-3}$	2.7455
9	-0.2686045	$3.1231{\cdot}10^{-3}$	2.7758	$1.4943{\cdot}10^{-3}$	2.6490
10	-0.2691349	$1.1546{\cdot}10^{-3}$	2.7049	$5.3039{\cdot}10^{-4}$	2.8174
11	-0.2693234	$4.5501{\cdot}10^{-4}$	2.5375	$1.8848{\cdot}10^{-4}$	2.8140
Extrapoliert	-0.269572	$4.6920{\cdot}10^{-4}$	-	-	-
Vergleichswert für e_n ist -0.269446 nach [16]					

Tabelle 5.9: Zweiter Eigenwert des Wasserstoffatoms in einem Magnetfeld der Größe $\beta = 0.01$ und einem dazu parallelen elektrischen Feld der Größe $1.9455252 \cdot 10^{-4}\, F_0$. Die Extrapolation in MATLAB wurde mit den Level 7 bis 11 durchgeführt.

der Bestimmung des entsprechenden Eigenwertes $2p_0$ bei der Rechnung für die betrachtete Magnetfeldstärke ohne zusätzlichem elektrischem Feld (siehe Tabelle 5.8). Beim zugehörigen Fehler e_n zum Referenzwert ist ein anderes Verhalten festzustellen. Dies läßt vermuten, daß in diesem Fall die Genauigkeit des von uns berechneten extrapolierten Eigenwertes besser ist als die des Referenzwertes.

5.5 Das H_2^+-Ion

Um das Verfahren für nicht kugelsymmetrische Potentiale zu testen, betrachten wir das H_2^+-Ion. Dieses Ion hat nur eine Symmetrie in zwei Dimensionen. Sofern die beiden Kerne, auf eine Koordinatenachse gelegt werden ergibt sich

$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{d}|} - \frac{2}{|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}|}\right)\psi = E\psi \qquad \boldsymbol{x} \in [-a;a]^3,$$

mit $\boldsymbol{d} = (d, 0, 0)$. Dabei wird d in guter Näherung an gemessene und berechnete Werte auf Eins gesetzt.

In den Dimensionen Zwei und Drei benutzen wir die zur Berechnung der Eigenwerte des Wasserstoffatoms eingeführte Gradierungsfunktion $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$. In der ersten Dimension wird eine an die Kerne angepaßte Diskretisierung erzeugt (vgl. Abbildung 5.10).

In Vergleichsarbeiten wurden Rechnungen für das H_2^+-Ion auf dem Gebiet mit den Grenzen $[-5;5]^3$ unternommen. Mit der Kombinationstechnik ergibt sich bei einer Rechnung der Tiefe 10 mit 47103 inneren Punkten ein Eigenwertfehler von $5.27 \cdot 10^{-4}$ (siehe Tabelle 5.10). Im Vergleich zu $6.32 \cdot 10{-}4$ bei 52755 Punkten eines adaptiven dünnen Gitters aus [23]. Wie auch bei den bisherigen Rechnungen erzielen beide Dünngitterarbeiten vergleichbare Ergebnisse. Hier mit leichten Vorteilen für die Kombinationstechnik.

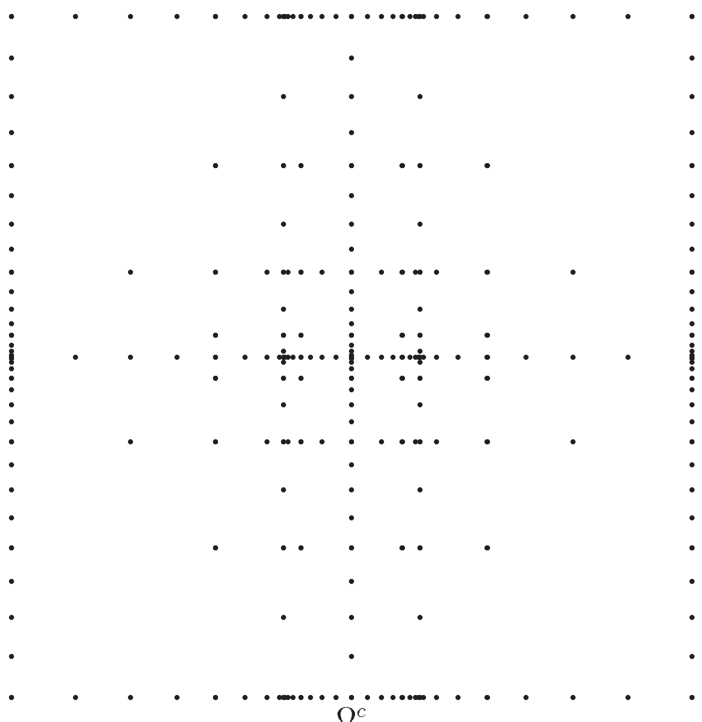


Abbildung 5.10: Gradiertes dünnes Gitter für H_2^+ auf dem Gebiet $[-5;5]^3$. Die beiden Kerne liegen in der Horizontalen.

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
4	-1.9934259	$9.6062\cdot10^{-2}$	-	-	-
5	-2.1227375	$3.7424\cdot10^{-2}$	2.5668	$1.2931\cdot10^{-1}$	-
6	-2.1678521	$1.6967\cdot10^{-2}$	2.2057	$4.5115\cdot10^{-2}$	2.8663
7	-2.1912078	$6.3759\cdot10^{-3}$	2.6611	$2.3356\cdot10^{-2}$	1.9316
8	-2.1991159	$2.7899\cdot10^{-3}$	2.2854	$7.9082\cdot10^{-3}$	2.9534
9	-2.2027218	$1.1548\cdot10^{-3}$	2.4160	$3.6059\cdot10^{-3}$	2.1931
10	-2.2041054	$5.2737\cdot10^{-4}$	2.1896	$1.3836\cdot10^{-3}$	2.6062
11	-2.2046422	$2.8397\cdot10^{-4}$	1.8572	$5.3677\cdot10^{-4}$	2.5776
Extrapoliert	-2.205179	$4.0539\cdot10^{-5}$	-	-	-
Vergleichswert ist -2.2052684					

Tabelle 5.10: Elektronische Energie des Grundzustandes des H_2^+-Ion berechnet auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-5;5]^3$

5.6 H_2^+ in starken Magnetfeldern

Im interessanten Bereich der starken Magnetfelder wurde das H_2^+-Ion in [48] über eine größere Bandbreite an Werten behandelt. Dabei wurde eine Basis von Hylleraas Funktionen benutzt um die Hamiltonmatrix zu bestimmen und deren Eigenwerte wurden dann numerisch berechnet. In [29, 30] wurde eine in [41] eingeführte Basis aus speziellen atomaren Orbitalfunktionen benutzt, um das H_2^+-Ion in starken Magnetfeldern zu berechnen. In [33] wurden wiederum andere spezielle Testfunktion benutzt um den Grundzustand des Ions zu bestimmen. Die Betrachtung des H_2^+-Ions in Magnetfeldern ist noch nicht endgültig in allen Konfigurationen in der gewünschten Genauigkeit erfolgt. Zum größten Teil ist die Untersuchung dieses Systems aber abgeschlossen.

Die Schrödingergleichung in der Born-Oppenheimer-Näherung für H_2^+ in starken Magnetfeldern ist hier für ein Magnetfeld in z-Richtung angegeben

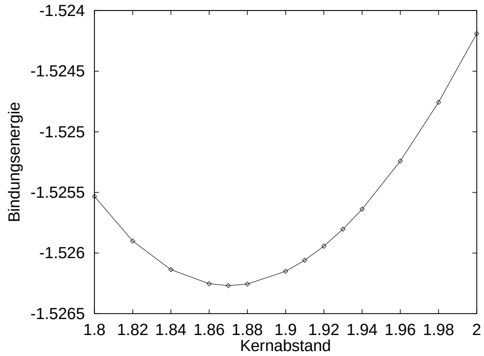
$$\left(-\Delta - \frac{2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{d}|} - \frac{2}{|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}|} - 2i\beta \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \nabla + 4\beta S + \beta^2(x^2+y^2)\right)\psi = E\psi,$$

$\boldsymbol{d} = (d, 0, 0)$. Die Richtung des Magnetfeldes ist aber nicht mehr ohne Einfluß auf die Ergebnisse, denn das H_2^+-Ion ist nicht rotationssymmetrisch. Es sind unterschiedliche Energieniveaus für Magnetfelder in x-Richtung oder z-Richtung zu erwarten. Magnetfelder nur mit einer y-Komponente entsprechen denen mit nur der z-Komponente. Auch Magnetfelder, die nicht auf einer Koordinatenachse liegen, sind zu betrachten. Analog zu einer Änderung des Feldes können auch die Positionen der Kerne verändert werden, so daß z.B. die Richtung des Magnetfeldes und die Atomkerne sich auf einer Koordinatenachse befinden.

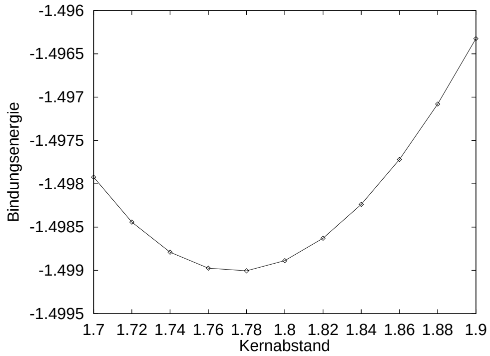
Für die Berechnung des Grundzustandes des H_2^+-Ions in starken Magnetfeldern muß auch der Kernabstand berücksichtigt werden. Dieser verändert sich in Abhängigkeit von Stärke und Richtung des Magnetfeldes. Der damit jeweils unterschiedliche Energiebeitrag der Kern-Kern-Wechselwirkungskräfte ($|\boldsymbol{d}|^{-1}$) ist zur Grundzustandsenergie hinzuzuaddieren um den Kernabstand mit kleinster Energie zu bestimmen.

In Abbildung 5.11 sind die Bindungsenergien des H_2^+-Ions unter dem Einfluß eines Magnetfeldes der Größe 1 MG ($\beta = 0.21272$) für unterschiedliche Konstellation dargestellt. Man sieht, daß die Randbehandlung, d.h. das Abschneiden des diskreten Raumes, bei diesem Problem einen weiteren Einfluß auf die Ergebnisse hat. Der energetisch günstige Grundzustand des Ions wird auf den unterschiedich großen Gebieten für jeweils andere Kernabständen errechnet. Er nähert sich mit zunehmender Größe des Gebietes dem in der Literatur [33] angegeben Wert an. Bei der Betrachtung das H_2^+-Ions ohne Magnetfeld ist dieser Effekt nicht aufgetreten. Da auf größeren Gebieten die Genauigkeit des Verfahrens erst bei hohen Level in einen akzeptablen Bereich kommt, sind sinnvolle Aussagen über die Genauigkeit der Eigenwerte im Vergleich mit anderen Arbeiten somit nicht möglich.

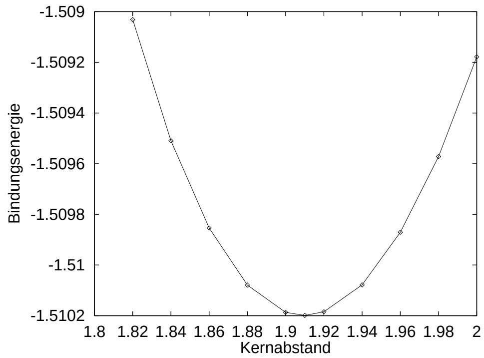
Anstatt der Eigenwerte betrachten wir deshalb bei diesem Beispiel die Eigenfunktionen etwas genauer. Abbildung 5.12 zeigt die Wellenfunktion $|\psi|^2$ des Grundzustandes



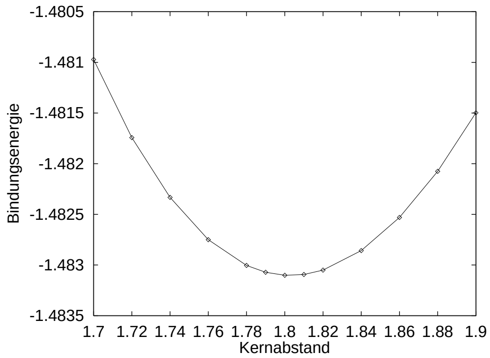
(a) Magnetfeld parallel zur Kernachse, Gebiet $(-5;5)^3$



(b) Magnetfeld senkrecht zur Kernachse, Gebiet $(-5;5)^3$

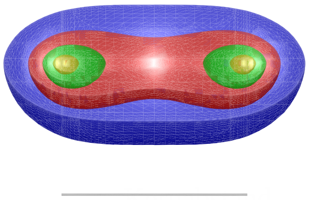


(c) Magnetfeld parallel zur Kernachse, Gebiet $(-30;30)^3$

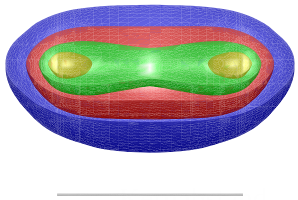


(d) Magnetfeld senkrecht zur Kernachse, Gebiet $(-30;30)^3$

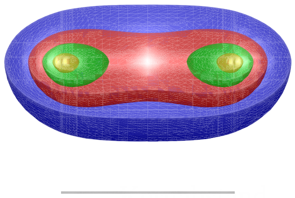
Abbildung 5.11: Bindungsenergie die H_2^+-Ions für verschiedene Kernabstände unter dem Einfluß eines Magnetfeldes der Größe 1 MG ($\beta = 0.21272$) in Richtungen parallel und senkrecht zur Kernachse auf zwei unterschiedlich großen Gebieten. Für den parallelen Fall ist in der Literatur [33] ein Kernabstand von 1.9233 a_0 als Ergebnis angegeben.



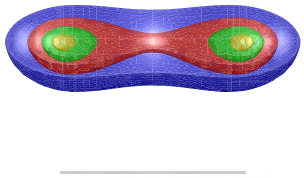
(a) ohne Magnetfeld



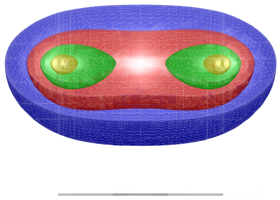
(b) Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.5$ senkrecht zur Kernachse



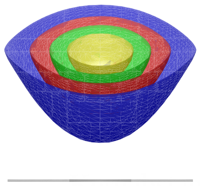
(c) Magnetfeld der Stärke 1 MG ($\beta = 0.21272$) parallel zur Kernachse, der Kernabstand ist 1.87 a_0



(d) Magnetfeld der Stärke $\beta = 2.0$ parallel zur Kernachse

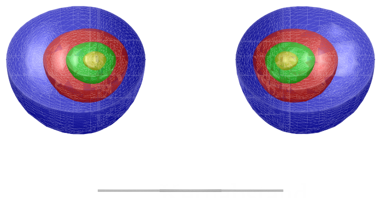


(e) Magnetfeld der Stärke 1 MG ($\beta = 0.21272$) senkrecht zur Kernachse, der Kernabstand ist 1.78 a_0.

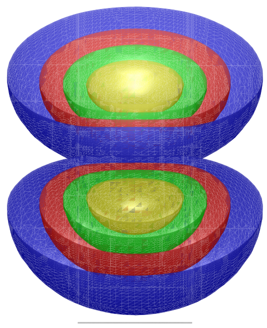


(f) Magnetfeld der Stärke $\beta = 2.0$ senkrecht zur Kernachse

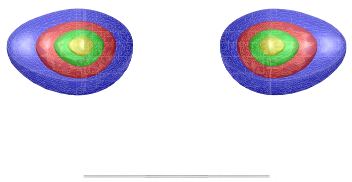
Abbildung 5.12: Grundzustand $1\sigma_g$ des H_2^+-Ions für verschiedene Konfigurationen auf dem Gebiet $[-5;5]^3$, dargestellt sind die in der Mitte aufgeschnittenen Isoflächen der Wellenfunktion $|\psi|^2$ für 0.2, 0.4, 0.6 und 0.8 (von außen nach innen), der unter ihnen abgebildete Balken gibt jeweils den Kernabstand an. Sofern nicht extra bemerkt beträgt dieser $2a_0$.



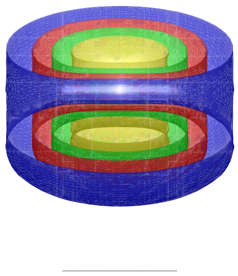
(a) ohne Magnetfeld



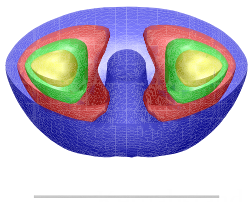
(b) ohne Magnetfeld



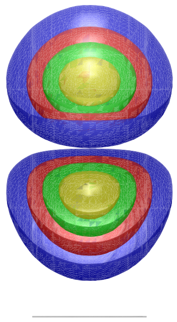
(c) Magnetfeld der Stärke $\beta = 2.0$ parallel zur Kernachse



(d) Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.5$ parallel zur Kernachse



(e) Magnetfeld der Stärke $\beta = 2.0$ senkrecht zur Kernachse



(f) Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.5$ senkrecht zur Kernachse

Abbildung 5.13: Angereicherte Zustände, links $1\sigma_u$, rechts $1\pi_u$, des H_2^+-Ions für verschiedene Konfigurationen auf dem Gebiet $\overline{\Omega} = [-5; 5]^3$. Dargestellt sind die in der Mitte aufgeschnittenen Isoflächen der Wellenfunktion $|\psi|^2$ für 0.2, 0.4, 0.6 und 0.8 (von außen nach innen). Der unter ihnen abgebildete Balken gibt jeweils den Kernabstand $2a_0$ an.

$1\sigma_g$ des betrachteten Ions für verschiedene Konstellation. Die Eigenfunktionen wurden auf $[-5;5]^3$ berechnet, d.h. die Energiewerte zu diesen Eigenfunktionen sind nicht korrekt berechnet. Auch sind die in den Abbildungen 5.12(c) und 5.12(e) benutzten Kernabstände auf Grund der angesprochenen Fehler nicht die wirklich zu betrachtenden. Allerdings ergeben sich auf den größeren Gebieten keine prinzipiell anderen Ergebnisse, die Visualisierung liefert aber auf dem kleineren bessere Bilder. In Abbildung 5.13 sind die beiden nächsthöheren angereicherten Zustände dargestellt. Zu beachten ist der Einfluß der Richtung des Magnetfeldes auf die Wellenfunktionen. Bei großen Magnetfeldern sind sehr deutliche Unterschiede zu erkennen, je nachdem ob sie parallel oder senkrecht zur Kernachse wirken.

5.7 Das Heliumatom

Die Berechnung des Heliumatoms in der Born-Oppenheimer-Näherung

$$\left(\sum_{j=1}^{2}\left[-\Delta_j - \frac{2}{|\boldsymbol{x}_j|}\right] + \frac{1}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}\right)\psi = E\psi, \quad \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) \in [-a;a]^6.$$

erfordert die Lösung einer Eigenwertaufgabe in sechs Raumdimensionen. Dies ist somit ein geeignetes Problem um die Möglichkeiten der Kombinationstechnik für höherdimensionale Rechnungen zu untersuchen.

Die zur Aufstellung der Potentialmatrix notwendige Berechnung des Integrals über die beiden Coulombpotentiale kann jeweils in zwei dreidimensionale Integrale wie folgt aufgeteilt werden:

$$\iiiiiint \frac{\varphi_i\,\varphi_j}{|\boldsymbol{x}_1|} d\boldsymbol{x}_1 d\boldsymbol{x}_2 = \iiint \frac{(\varphi_i)_1\,(\varphi_j)_1}{|\boldsymbol{x}_1|} d\boldsymbol{x}_1 \cdot \iiint (\varphi_i)_2\,(\varphi_j)_2 d\boldsymbol{x}_2,$$

wobei $(\varphi_j)_k$ jeweils die im Tensorproduktansatz vorhandenen Basisfunktionen aus den k-ten drei Dimensionen sind.

Als Gradierungsfunktion wird wieder $x \mapsto \frac{\mathrm{sign}(x)x^2}{a}$ benutzt, die Rechnungen erfolgen auf $[-15;15]^6$ und werden mit GROBGITTER gleich 1 durchgeführt, d.h. Gitter mit nur einem inneren Punkt in einer Raumdimension werden nicht berücksichtigt. Die Rechnungen in denen sie benutzt werden liefern falsche Eigenwertergebnisse. Ursache dieses Verhaltens könnte die Flächensingularität, ausgelöst durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkungskräfte, sein. Wenn diese nur mit einem inneren Punkt in einer Richtung aufgelöst wird, ist der Einfluß dieses Punktes womöglich zu stark.

Obwohl die Anzahl der Gitterpunkte der Teilprobleme der Kombinationstechnik von der Größenordnung $O(h^{-1})$ ist, stößt man bei diesen Rechnungen in sechs Dimensionen an die Speichergrenzen der benutzten Rechner. Ein Punkt eines Gitters hat 728 Nachbarn, sofern darunter keine Randpunkte sind hat die zugehörige Zeile in den aufgestellten Matrizen demnach 729 Einträge, im Vergleich zu 27 bei Problemen in drei Dimensionen. Allerdings haben die benötigten Teildiskretisierungen relativ viel randnahe Punkte. So hat im Level 11 die größte benötigte Matrix der Kombinationstechnik 6 385 729 Matrixeinträge, allein deren Speicherung benötigt ca. 100

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
7	-1.0811176	$2.5536\cdot 10^{-1}$	-	-	-
8	-1.1366323	$2.1712\cdot 10^{-1}$	1.1761	$5.5515\cdot 10^{-2}$	-
9	-1.3102990	$9.7502\cdot 10^{-2}$	2.2268	$1.7367\cdot 10^{-1}$	0.3197
10	-1.3696518	$5.6621\cdot 10^{-2}$	1.7220	$5.9353\cdot 10^{-2}$	2.9251
11	-1.4192451	$2.2463\cdot 10^{-2}$	2.5207	$4.9593\cdot 10^{-2}$	1.1968
Extrapoliert	-1.459079	$4.97 \cdot 10^{-3}$	-	-	-
e_n im Vergleich mit dem Referenzwert -1.4518580					

Tabelle 5.11: Erster Eigenwert von Helium. Gradiertes Gitter, GROBGITTER 1

MB. Das dünne Gitter mit Tiefe 11, GROBGITTER 1 in den sechs Dimensionen hat 695169 innere Punkte, das größte berechnete Gitter in der Kombinationstechnik hierfür hat 21609 innere Punkte.

Die serielle Rechenzeit für die nötigen Rechnungen zur Aufstellung der Konvergenztabelle 5.11 beträgt mehr als eine Woche auf einer SGI Workstation mit R10000 Prozessor. Genaue Zahlen können nicht angegeben werden, da die Programme im Hintergrund mit niedrigster Priorität liefen und oft komplett aus dem Speicher geswapt waren. Auch liefen die benutzten Rechner nicht die ganze Zeit ohne Störungen, so daß Programmabbrüche die Folge waren. Für die Verfeinerungsstufe 11 mit GROBGITTER 1 sind die Lösungen von 210 Teilprobleme zu bestimmen, auf Grund der Symmetrie des Potentials brauchen davon letztendlich nur 57 berechnet zu werden, siehe Abschnitt (4.5.2).

Die Genauigkeit der Ergebnisse erreicht nicht ganz die erhoffte Güte. Ein Level mehr wäre wünschenswert, ist aber mit den z.Z. vorhandenen Maschinen aus Speicherplatzgründen nicht realisierbar, auch würde die Rechnung die Maschinen zu lange belegen. Da in der Konvergenz das asymptotische Verhalten noch nicht erreicht wird, erfolgt die Extrapolation mit schwächeren Daten, der mit MATLAB extrapolierte Eigenwert ist aber im erwarteten Bereich.

Um den Effekt der Parallelisierung zu zeigen sind für den Level 7 mit GROBGITTER 0 Rechnungen[1] auf einem Workstationnetz mit 14 SGI R5000 Maschinen durchgeführt worden. Die Anzahl der Teilgitter der Kombinationstechnik beträgt hierbei 923. Davon sind aber aus Symmetriegründen nur 252 zu berechnen. In Abbildung 5.14 sind die benötigten Rechenzeiten, der Speedup

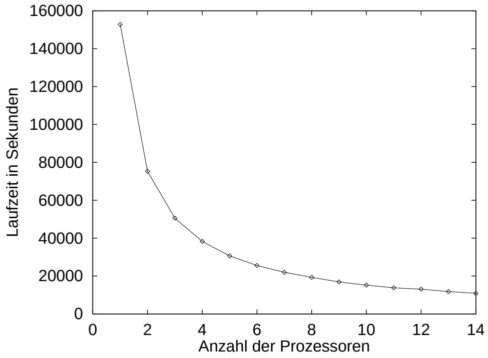
$$\text{Speedup}(P) := \frac{\text{Laufzeit des Verfahrens auf 1 Prozessor}}{\text{Laufzeit des Verfahrens auf } P \text{ Prozessoren}}$$

und die Effizienz

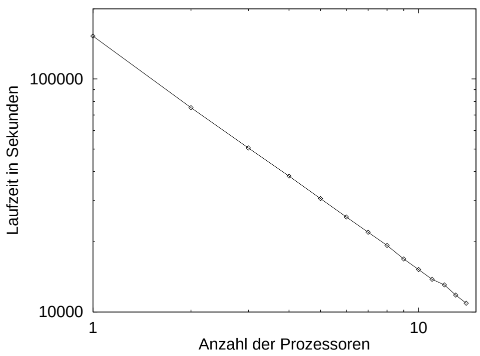
$$\text{Effizienz}(P) := \frac{\text{Speedup}(P)}{P}$$

aufgetragen. Deutlich ist das optimale Parallelisierungsverhalten zu sehen, d.h. der Speedup steigt linear mit der Anzahl der Prozessoren und die Effizienz ist bei 1.

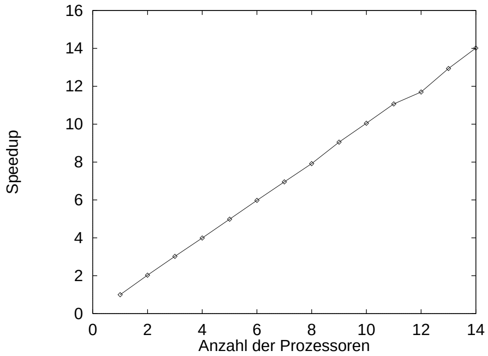
[1] Als diese Testrechnungen durchgeführt wurden, war noch nicht klar, daß höhere Level mit GROBGITTER 0 falsche Ergebnisse liefern würden. Bei Level 7 und GROBGITTER 0 waren die Eigenwerte nicht so offensichtlich falsch.



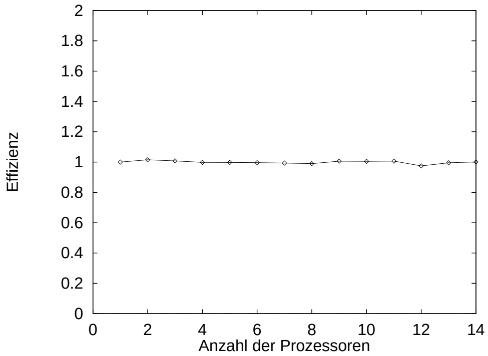
(a) Laufzeit der parallel durchgeführten Rechnung



(b) Laufzeit der parallel durchgeführten Rechnung in log-log-Skalierung



(c) Speedup der Parallelisierung



(d) Effizienz der Parallelisierung

Abbildung 5.14: Laufzeitverhalten der parallelen Kombinationstechnik bei der Berechnung des ersten Eigenwertes des Heliumatoms für Level 7

Dieses ist allerdings nur dann gegeben, wenn deutlich mehr Teilprobleme der Kombinationstechnik zu berechnen sind als Prozessoren zur Verfügung stehen und die Rechenzeiten für die einzelnen Gitter, insbesondere auf den stark anisotropen, nicht zu sehr variieren. Das erste ist bei Rechnungen in höheren Dimensionen gegeben, die Unterschiede in den benötigten Laufzeiten für die Teilaufgaben der Kombinationstechnik hängen vom jeweils betrachteten Problem ab.

n	λ_n	e_n	$\frac{e_{n-1}}{e_n}$	$\delta\lambda_n$	$\frac{\delta\lambda_{n-1}}{\delta\lambda_n}$
7	-1.0521588	$2.6748\cdot10^{-1}$	-	-	-
8	-1.1114353	$2.2621\cdot10^{-1}$	1.1824	$5.9276\cdot10^{-2}$	-
9	-1.2937951	$9.9246\cdot10^{-2}$	2.2792	$1.8236\cdot10^{-1}$	0.3251
10	-1.3525565	$5.8336\cdot10^{-2}$	1.7013	$5.8761\cdot10^{-2}$	3.1034
11	-1.4032721	$2.3027\cdot10^{-2}$	2.5333	$5.0716\cdot10^{-2}$	1.1586
Extrapoliert	-1.44594	$6.68\ \cdot10^{-3}$	-	-	-
[25]	-1.4155				
e_n im Vergleich mit -1.4363474 aus [6]					

Tabelle 5.12: Erster Eigenwert von Helium in einem Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.05$. Gradiertes Gitter, GROBGITTER 1

5.8 Helium in starken Magnetfeldern

Erste Rechnungen für Helium in starken Magnetfeldern

$$\left(\sum_{j=1}^{2}\left[-\Delta_j - \frac{2}{|\boldsymbol{x}_j|} - 2i\beta\begin{pmatrix} y_j \\ -x_j \\ 0 \end{pmatrix}\cdot\nabla + 4\beta S_j + \beta^2(x_j^2+y_j^2)\right] + \frac{1}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\right)\psi = E\psi,$$

wurden erst in den letzten Jahren durchgeführt. Zum einem gibt es Hartree-Fock Ansätze [46, 25], Darstellungen durch eine komplette Basis [44] oder große Monte-Carlo Rechnungen [26]. In [6] wurden die bisher genauesten Ergebnisse veröffentlicht, sie wurden durch eine Kombination aus der Finite-Element-Methode mit quintischen Basisfunktionen und dem Hyperspherical Close Coupling Ansatz basierend auf der adiabatischen Approximation erzielt. All diesen Arbeiten gemeinsam ist die Reduktion der Dimension der Gleichung auf 3 Dimensionen.

In [27] wurden erste Ergebnisse aus Rechnungen basierend auf den atomaren Orbitalfunktionen aus [41] benutzt, um Beweise für das Vorhandensein von Helium im Weißen Zwerg GD 229 zu liefern. Die eigentliche Arbeit über das benutzte Verfahren und mit den numerischen Ergebnissen ist bisher noch nicht erschienen.

Die erfolgte Testrechnung für ein Magnetfeld der Stärke $\beta = 0.05$ liefert, wenn wir die Differenz $\delta\lambda_n$ der Eigenwerte von Level zu Level betrachten, mit den Ergebnissen für das Heliumatom vergleichbare Zahlen (siehe Tabelle 5.12). Da die Fehler e_n zum exakten Wert sich entsprechend verhalten müssen, spricht einiges dafür, daß die in [6] präsentierten Ergebnisse gute Genauigkeiten haben, denn die Vergleiche mit ihnen liefern Zahlen wie bei unseren Heliumrechnungen ohne Magnetfeld im Vergleich zum dort bekannten exakten Wert. Wir erreichen mit der Kombinationstechnik also mit anderen Verfahren durchaus vergleichbare Resultate.

Kapitel 6

Schlußbemerkungen und Ausblick

Die Ergebnisse des vorherigen Kapitels zeigen die Möglichkeiten der Kombinationstechnik für Eigenwertprobleme. Bei glatten Lösungen sind sehr gute Ergebnisse zu erzielen, bei Eigenproblemen mit Singularitäten sind die Ergebnisse in drei Dimensionen zwar schlechter, aber noch in einem brauchbaren Rahmen. Bei dem hochdimensionalen Problem des Heliumatoms in einem Magnetfeld erreicht die Genauigkeit zwar nicht ganz die benötigte Ordnung, aber es zeigt sich, daß mit der Kombinationstechnik sechsdimensionale harte Anwendungen gelöst werden können. Die noch vorhandenen Speicherplatzprobleme sind bei der derzeitigen Entwicklung der Hardware in absehbarer Zeit nicht mehr existent. Bisherige Ergebnisse mit anderen Methoden für dieses System konnten nur mit dreidimensionalen Näherungen der Schrödingergleichung erzielt werden. Allerdings kommt die Genauigkeit der Ergebnisse noch nicht in den dadurch verursachten Fehlerbereich. Mit Finite-Element-Methoden auf vollen Gittern wäre eine Behandlung dieser 6D Gleichung überhaupt nicht möglich. Auch mit normalen dünnen Gitter ist die Rechnung auf heutigen Rechenmaschinen nicht durchführbar, da der benötigte Speicher zu groß ist. Es ist aber mittelfristig möglich, den benötigten Hauptspeicher zur Verfügung zu haben.

Die große ungeklärte und wichtige Frage bei der Behandlung von Eigenwertproblemen mit der Kombinationstechnik ist die notwendige Identifizierung der Eigenfunktionen auf den verschiedenen Teilgittern. Dazu muß das Approximationsverhalten der auftretenden Diskretisierungen, insbesondere der stark anisotropen, untersucht werden. Es werden sowohl theoretische, d.h. kann eine Identifizierung immer erfolgen, als auch praktische, d.h. wie ist diese zu realisieren, Ergebnisse benötigt.

Für die Verbesserung der Kombinationstechnik gibt es mehrere Möglichkeiten. Die Gradierungsfunktionen können besser gewählt werden. Hier kann auf Arbeiten aus dem Finite-Elemente-Bereich zurückgegriffen werden. Auch die in [36] vorgestellte Adaption der Kombinationstechnik, realisiert durch zusammengesetzte Gitter, könnte die Genauigkeit in den gewünschten Bereich bringen. Ebenso ist ein Mischung dieser beiden Methoden, d.h. gradierte zusammengesetzte Gitter, vorstellbar. In [8] sind Ansatzfunktionen mit höherem Polynomgrad für dünne Gitter eingeführt und untersucht worden. Für die Kombinationstechnik steht dies noch aus.

Der benutzte Eigenwertlöser hat, vor allem auf den stark anisotropen Teilproblemen der schwierigeren Probleme, keine annehmbare Konvergenzgeschwindigkeit. Es ist zu testen, ob Lanczos-Verfahren für diese Probleme besser geeignet sind. Die Realisierung des konjugierten Gradientenverfahrens für die Berechnung mehrerer Eigenwerte, d.h. für die Minimierung des verallgemeinerten Rayleigh-Quotienten, ist allerdings auch noch nicht ideal [15]. Verbesserungen sind dort möglich. Generell können auch Vorkonditionierung und Multilevelverfahren, wie sie zur Erhöhung der Konvergenzgeschwindigkeit bei partiellen Differentialgleichungen angewandt werden, bei den vorliegenden Eigenwertproblemen benutzt werden. Hierbei stellt sich allerdings auch die Frage, wie diese Ansätze sich auf den stark anisotropen Gittern verhalten.

Bei den betrachteten Modellproblemen hat sich die Randbehandlung, insbesondere beim H_2^+-Ion, als problematisch erwiesen. Das ursprünglich unendlich große Gebiet, mit Dirichlet-0-Randwerten, wird künstlich abgeschnitten. Die Frage ist, wie die Lösungen auf diesem endlichen Gebiet die auf dem unendlichen möglichst gut approximieren. Wir haben Dirichlet-0-Randwerte benutzt. Andere Möglichkeiten, die zu prüfen wären, sind Neumann-Randwerte oder gemischte Dirichlet-Neumann-Randbedingungen.

Ohne viel weiteren Implementierungsaufwand zu betrachtende atomare Systeme, die in der Astrophysik relevant sind, wären z.B. das H_2-Molekül in einem Magnetfeld [12, 11]. Dies ist wiederum ein System mit zwei Elektronen, so daß die Schrödingergleichung in der Born-Oppenheimer-Näherung dafür sechs Raumdimension ergibt. Interessant wäre es wohl auch das H_2^+-Ion in einer 6D-Darstellung zu betrachten, d.h. nicht die Born-Oppenheimer-Näherung zu benutzen, sondern das Elektron festzuhalten und die Kernpositionen als Variablen zu nehmen, oder einen Kern festzuhalten und den zweiten und das Elektron in sechs Dimensionen aufzulösen. Auch können ohne nennenswerte Programmierarbeit sämtliche betrachteten Systeme mit zusätzlichen großen elektrischen Feldern untersucht werden.

Anhang A

Integration des Elektron-Elektron-Wechselwirkungspotentials

Die Berechnung des Integrals über die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen

$$\iiiint\!\!\iint \frac{\varphi_k \, \varphi_j}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz du dv dw$$

erfolgt durch die Aufspaltung des Produkts von φ_k und φ_j in eine Summe über die Exponenten in den einzelnen Variablen

$$\varphi_k \cdot \varphi_j = \sum_{I=(0,0,0,0,0,0)}^{I=(2,2,2,2,2,2)} C_I(\varphi_k, \varphi_j) \, x^{i_1} y^{i_2} z^{i_3} u^{i_4} v^{i_5} w^{i_6},$$

mit von den jeweiligen Basisfunktionen abhängigen Faktoren C_I.

Die dann notwendige Berechnung der Integrale der Form

$$\iiiint\!\!\iint \frac{x^k y^l z^m u^r v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz du dv dw, \quad 0 \leq k, l, m, r, s, t \leq 2,$$

erfolgt mittels Rekursion über die folgenden parameterabhängigen Integrale

$$F_{klmrst}(x,y,z,u,v,w) := \iiiint\!\!\iint \frac{x^k y^l z^m u^r v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz du dv dw,$$

$$E_{klmst}(x,y,z,v,w;u) := \iiiint\!\!\int \frac{x^k y^l z^m v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz dv dw,$$

$$D_{klmt}(x,y,z,w;u,v) := \iiiint \frac{x^k y^l z^m w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz dw,$$

$$C_{klm}(x,y,z;u,v,w) := \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} dx dy dz,$$

$$B_{kl}(x,y;u,v,a^2) := \iint \frac{x^k y^l}{\sqrt{(x-u)^2+(y-v)^2+a^2}} dx dy,$$

$$\begin{aligned}
b_{kl}(x,y;u,v,a^2) &:= \iint \frac{x^k y^l}{((x-u)^2+(y-v)^2+a^2)^{3/2}} dxdy, \\
A_k(x,u;a^2) &:= \int \frac{x^k}{\sqrt{(x-u)^2+a^2}} dx.
\end{aligned}$$

Zur Notation ist zu bemerken, daß die Funktionen nur von den Variablen hinter dem Semikolon abhängen. Aus Übersichtsgründen werden die anderen Variablen allerdings mitgeführt.

Es ergibt sich für die betrachteten Integrale die folgende rekursive Darstellung

$$\begin{aligned}
F_{klmrst}(x,y,z,u,v,w) &= \tfrac{1}{r+1} && \Big(u^{r+1} E_{klmst}(x,y,z,v,w;u) \\
& && +x^k E_{r+1,s,t,l,m}(u,v,w,y,z;x) \qquad \text{(A.1)} \\
& && -k\, F_{k-1,l,m,r+1,s,t}(x,y,z,u,v,w)\Big), \\
E_{klmst}(x,y,z,v,w;u) &= \tfrac{1}{s+1} && \Big(v^{s+1} D_{klmt}(x,y,z,w;u,v) \\
& && +y^l D_{s+1,k,m,t}(v,x,z,w;y,u) \qquad \text{(A.2)} \\
& && -l\, E_{k,l-1,m,s+1,t}(x,y,z,v,w;u)\Big), \\
D_{klmt}(x,y,z,w;u,v) &= \tfrac{1}{t+1} && \Big(w^{t+1} C_{klm}(x,y,z;u,v,w) \\
& && +z^m C_{k,l,t+1}(x,y,w;u,v,z) \qquad \text{(A.3)} \\
& && -m\, D_{k,l,m-1,t+1}(x,y,z,w;u,v)\Big), \\
C_{klm}(x,y,z;u,v,w) &= \tfrac{1}{k+l+m+2} && \Big(x^k (x-u)\, B_{lm}(y,z;v,w;(x-u)^2) \\
& && \quad +k\, u\, C_{k-1,l,m}(x,y,z;u,v,w) \\
& && +y^l (y-v)\, B_{km}(x,z;u,w;(y-v)^2) \\
& && \quad +l\, v\, C_{l-1,k,m}(y,x,z;v,u,w) \qquad \text{(A.4)} \\
& && +z^m (z-w)\, B_{kl}(x,y;u,v;(z-w)^2) \\
& && \quad +m\, w\, C_{m-1,k,l}(z,x,y;w,u,v)\Big), \\
B_{kl}(x,y;u,v;a^2) &= \tfrac{1}{k+l+1} && \Big(x^k (x-u) A_l(y,v;(x-u)^2+a^2) \\
& && \quad +k\, u\, B_{k-1,l}(x,v;u,v;a^2) \\
& && +y^l (y-v) A_k(x,u;(y-v)^2+a^2) \\
& && \quad +l\, v\, B_{l-1,k}(y,x;v,u;a^2) \qquad \text{(A.5)} \\
& && -a^2\, b_{kl}(x,y;u,v;a^2)\Big),
\end{aligned}$$

$$b_{00}(x,y;u,v;a^2) = \frac{\operatorname{sign}((x-u)(y-v)a)}{2a} \cdot \qquad \text{(A.6)}$$
$$\cdot \arccos \frac{2(x-u)^2 a^2 - ((x-u)^2-a^2)((y-v)^2+a^2)}{((x-u)^2+a^2)((y-v)^2+a^2)},$$

$$b_{01}(x,y;u,v;a^2) = -A_0(x,u;(y-v)^2+a^2) + v\, b_{00}(x,y;u,v;a^2), \qquad \text{(A.7)}$$

$$
\begin{aligned}
b_{0l}(x,y;u,v;a^2) &= (x-u)A_{l-2}(y,v;(x-u)^2+a^2) && \text{(A.8)}\\
&\quad +2v\, b_{0,l-1}(x,y;u,v;a^2)\\
&\quad -(v^2+a^2)b_{0,l-2}(x,y;u,v;a^2),\\
b_{1l}(x,y;u,v;a^2) &= -A_l(y,v;(x-u)^2+a^2)+u\, b_{0,l}(x,y;u,v;a^2), && \text{(A.9)}\\
b_{2l}(x,y;u,v;a^2) &= u\, b_{1,l}(x,y;u,v;a^2) - x\, A_l(y,v;(x-w)^2+a^2) && \text{(A.10)}\\
&\quad + B_{0l}(x,y;u,v;a^2),\\
b_{kl}(x,y;u,v;a^2) &= \frac{1}{k-2}\Bigg(x^{k-1}A_l(y,v;(x-u)^2+a^2)\\
&\quad +2u\left(k-\frac{3}{2}\right) b_{k-1,l}(x,y;u,v;a^2) && \text{(A.11)}\\
&\quad -(k-1)\Big[u^2+v^2+a^2)b_{k-2,m}(x,y;u,v;a^2)\\
&\qquad -2v\, b_{k-2,l+1}(x,y;u,v;a^2)\\
&\qquad +b_{k-2,m+2}(x,y;u,v;a^2)\Big]\Bigg),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
A_0(x,u;a^2) &= \log\left(x-u+\sqrt{(x-u)^2+a^2}\right), && \text{(A.12)}\\
A_k(x,u;a^2) &= \frac{1}{k}\Big(x^{k-1}\sqrt{(x-u)^2+a^2}+(2k-1)uA_{k-1}(x,u;a^2)\\
&\quad -(k-1)(u^2+a^2)A_{k-2}(x,u;a^2)\Big). && \text{(A.13)}
\end{aligned}
$$

Betrachten wir die Beweise für diese Rekursionsformeln.

Zunächst beweisen wir (A.1) mittels partieller Integration:

$$
\begin{aligned}
u^{r+1}E_{klmst}(x,y,z,v,w;u) &= u^{r+1}\iiiint\!\!\int \frac{x^k y^l z^m v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dxdydzdvdw\\
&= \int (r+1)u^r \iiiint\!\!\int \frac{x^k y^l z^m v^s w^t}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}d\boldsymbol{x}\\
&\quad + \iiiint\!\!\iint u^{r+1}\frac{-x^k y^l z^m v^s w^t\,(u-x)}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}d\boldsymbol{x}\\
&= (r+1)F_{klmrst}(x,y,z,u,v,w) && \text{(A.14)}\\
&\quad + \iiiint\!\!\iint \frac{x^k y^l z^m u^{r+1} v^s w^t\,(x-u)}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}d\boldsymbol{x},\\
x^k E_{r+1,s,t,l,m}(u,v,w,y,z;x) &= x^k\iiiint\!\!\int \frac{u^{r+1}v^s w^t y^l z^m}{|(u,v,w)-(x,y,z)|}dudvdwdydz\\
&= \int kx^{k-1}\iiiint\!\!\int \frac{u^{r+1}v^s w^t y^l z^m}{|(u,v,w)-(x,y,z)|}d\boldsymbol{x}\\
&\quad + \iiiint\!\!\iint x^k\frac{-u^{r+1}v^s w^t y^l z^m\,(x-u)}{|(u,v,w)-(x,y,z)|}d\boldsymbol{x}\\
&= kF_{k-1,l,m,r+1,s,t}(x,y,z,u,v,w) && \text{(A.15)}
\end{aligned}
$$

$$+\iiiiiint \frac{-x^k y^l z^m u^{r+1} v^s w^t (x-u)}{|(x,y,z)-(u,v,w)|} d\boldsymbol{x}.$$

Da in (A.14) und (A.15) der zweite Integralausdruck jeweils mit anderem Vorzeichen auftaucht, erhalten wir (A.1) durch einfaches aufaddieren der beiden Gleichungen.

Mit einem analogen Schema laufen die Beweise für (A.2) und (A.3).

Der Beweis zu (A.4) benutzt auch partielle Integration, es ergeben sich allerdings kleine Unterschiede im Beweisablauf

$$\begin{aligned}
x^k(x-u)\,B_{lm}(y,z;v,w;(x-u)^2) &= x^k(x-u)\iint \frac{y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dydz \\
&= \int (k+1)x^k - kx^{k-1}u \iint \frac{y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dxdydz \\
&\quad + \iiint x^k(x-u)\frac{-y^l z^m (x-u)}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz \\
&= (k+1)\,C_{klm}(x,y,z;u,v,w) - k\,u\,C_{k-1,l,m}(x,y,z;u,v,w) \\
&\quad -(x-u)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz, \qquad \text{(A.16)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y^l(y-v)\,B_{km}(x,z;u,w;(y-v)^2) &= y^l(y-v)\iint \frac{x^k z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dxdz \\
&= (l+1)\,C_{klm}(x,y,z;u,v,w) - l\,v\,C_{l-1,k,m}(y,x,z;v,u,w) \\
&\quad -(y-v)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz, \qquad \text{(A.17)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z^m(z-w)\,B_{kl}(x,y;u,v;(z-w)^2) &= z^m(z-w)\iint \frac{x^k y^l}{|(x,y,z)-(u,v,w)|}dxdy \\
&= (m+1)\,C_{klm}(x,y,z;u,v,w) - m\,w\,C_{m-1,k,l}(z,x,y;w,u,v) \\
&\quad -(z-w)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz. \qquad \text{(A.18)}
\end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned}
& -(x-u)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz \\
& -(y-v)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz \\
& -(z-w)^2 \iiint \frac{x^k y^l z^m}{|(x,y,z)-(u,v,w)|^3}dxdydz \\
= & -\iiint \frac{x^k y^l z^m \left((x-u)^2+(y-v)^2+(z-w)^2\right)}{\left((x-u)^2+(y-v)^2+(z-w)^2\right)^{\frac{3}{2}}}dxdydz \\
= & -C_{klm}(x,y,z;u,v,w) \qquad \text{(A.19)}
\end{aligned}$$

ergibt sich durch Aufaddieren der Gleichungen (A.16),(A.17) und (A.18) die Gültigkeit von (A.4).

Im Beweis von (A.5) tauchen entsprechende Gleichungen und Terme auf, nur verschwindet die Summe über die Terme mit $\sqrt{}^{\frac{3}{2}}$ im Nenner nicht durch die aus der partiellen Integration vorhandenen Ausdrücke, sondern muß gesondert behandelt werden. Es ergibt sich

$$
\begin{aligned}
x^k(x-u)A_l(y,v;(x-u)^2+a^2) &= x^k(x-u)\int \frac{y^l}{\sqrt{(y-v)^2+(x-u)^2+a^2}}dy \\
&= \int (k+1)x^k - kx^{k-1}u\int \frac{y^l}{\sqrt{(y-v)^2+(x-u)^2+a^2}}dxdy \\
&\quad + \iint x^k(x-u)\frac{-y^l(x-u)}{\sqrt{(y-v)^2+(x-u)^2+a^2}^3}dxdy \\
&= (k+1)B_{kl}(x,y;u,v;a^2) - k\,u\,B_{k-1,l}(x,y;u,v;a^2) \\
&\quad -(x-u)^2\,b_{kl}(x,y;u,v;a^2),
\end{aligned}
\tag{A.20}
$$

$$
\begin{aligned}
y^l(y-v)A_k(x,u;(y-v)^2+a^2) &= y^l(y-v)\int \frac{x^k}{\sqrt{(x-u)^2+(y-v)^2+a^2}}dx \\
&= (l+1)B_{kl}(x,y;u,v;a^2) - l\,v\,B_{l-1,k}(y,x;v,u;a^2) \\
&\quad -(y-v)^2\,b_{kl}(x,y;u,v;a^2).
\end{aligned}
\tag{A.21}
$$

Unter Beachtung von

$$
\begin{aligned}
&-(x-u)^2\,b_{kl}(x,y;u,v;a^2) \\
&-(y-v)^2\,b_{kl}(x,y;u,v;a^2) \\
&-a^2\,b_{kl}(x,y;u,v;a^2) \\
=\ & \iint -\frac{x^ky^l\left((x-u)^2+(y-v)^2+a^2\right)}{((x-u)^2+(y-v)^2+-a^2)^{3/2}}dxdy \\
=\ & -B_{kl}(x,y;u,v;a^2)
\end{aligned}
\tag{A.22}
$$

folgt aus (A.20), (A.21) und (A.22) somit (A.5).

Die Aussagen (A.6),(A.7) und (A.8) sind in dieser Form in [34] bewiesen, dort ist $b_{kl} = G_{kl}^{-3/2}$. (A.9), (A.10) und (A.11) sind dort in allgemeiner Form bewiesen. Aussage (A.10) ist in dem in [34] angegeben Beweis nicht als Spezialfall mit erforderlicher Sonderbehandlung erwähnt. Allerdings ist in der Arbeit vorher ein für diese Fälle benutzbarer alternativer Weg angegeben.

Ebenso sind (A.12) und (A.13) dort bewiesen, wir benutzen allerdings die numerisch günstigere Darstellung

$$A_0(x,u;a^2) = \log\left(x-u+\sqrt{(x-u)^2+a^2}\right)$$

anstatt von

$$A_0(x,u;a^2) = \operatorname{arcsinh}\frac{y-x}{|a|}$$

□

Anhang B

Bezeichnungen, Symbole und Einheiten

Physikalische Größen und Einheiten

eV	Elektronenvolt	$1.602\,177\,33 \cdot 10^{-19}$ J
E_h	Hartree Energie	$27.211\,396\,1$ eV
E_h	Hartree Energie	$4.359\,748\,2 \cdot 10^{-18}$ J
R_∞	Rydbergkonstante	$13.605\,698\,1$ eV
h	Plancksches Wirkungsquantum	$6.626\,075\,5 \cdot 10^{-34}$ J s
$\hbar = h/2\pi$	Plancksches Wirkungsquantum über 2π	$1.054\,572\,66 \cdot 10^{-34}$ J s
c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$2.997\,924\,58 \cdot 10^{8}$ m/s
e	Elementarladung	$1.6022 \cdot 10^{-19}$ C
α	Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 7.297\,353\,08 \cdot 10^{-3}$
a_0	Bohrradius	$0.529\,177\,249 \cdot 10^{-10}$ m
T	Magnetfeldstärke Tesla	kg s^{2}A^{-1}
G	Magnetfeldstärke Gauß	0.0001 T
Å	Ångstrom	10^{-10} m
B_0	Referenzmagnetfeldgröße	$\frac{2\alpha^2 m_e^2 c_2}{e\hbar} = 4.70107 \cdot 10^{5}$ T
F_0	Referenzgröße des elektrischen Feldes	$\frac{\alpha^3 m_e^2 c^3}{e\hbar} = 5.14 \cdot 10^{11} \frac{V}{m}$

Benutzte Bezeichnungen und Symbole

$\boldsymbol{x}$	mehrdimensionale Ortsvariable
x, y, z	skalare Komponenten der Ortsvariablen $\boldsymbol{x}$ falls $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$
$x_1, ..., x_d$	skalare Komponenten der Ortsvariablen $\boldsymbol{x}$
Ω	betrachtetes Gebiet
$B_{k_1,...,k_d}$	nodale Basis
$H_{k_1,...,k_d}$	hierarchische Basis
$T_{k_1,...,k_d}$	Teilräume der hierarchischen Basis
$S_{k_1,...,k_d}$	diskreter Funktionenraum zu den Basen $B_{k_1,...,k_d}$ bzw. $H_{k_1,...,k_d}$
$S^s_{k_1,...,k_d}$	Düngitterraum
$\Omega_{k_1,...,k_d}$	Diskretisierungsgitter
E	Exakter Eigenwert
λ_n	numerischer Eigenwert des Vertiefungsstufe n
e_n	relativer Fehler des numerischen Eigenwertes $\frac{\vert E-\lambda_n\vert}{\vert E\vert}$
$\delta\lambda_n$	Differenz der numerischen Eigenwerte $\vert\lambda_n - \lambda_{n-1}\vert$

Literaturverzeichnis

[1] J. Ackermann, B. Erdmann, and R. Roitzsch. A self-adaptive multilevel finite element method for the stationary Schrödinger equation in three space dimensions. *J. Chem. Phys.*, 101(9):7643–7650, 1994.

[2] E. Anderson et al. *LAPACK Users' Guide - Release 2.0.* SIAM, 1995.

[3] I. Babuška and J. Osborn. Eigenvalue problems. In P.G. Ciarlet and J.L. Lions, editors, *Finite Element Methods (Part 1)*, volume II of *Handbook of Numerical Analysis*. North Holland, 1991.

[4] W. W. Bradbury and R. Fletcher. New iterative methods for the solution of the eigenproblem. *Numer. Math*, 9:259–267, 1966.

[5] D. Braess. *Finite Elemente.* Springer, 1992.

[6] M. Braun, W. Schweizer, and H. Elster. Hyperspherical close coupling calculations for Helium in a strong magnetic field. *Phys. Rev. A*, 57:3739ff., 1998.

[7] H.-J. Bungartz. *Dünne Gitter und deren Anwendung bei der adaptiven Lösung der dreidimensionalen Poisson-Gleichung.* Dissertation, Institut für Informatik, Technische Universität München, 1992.

[8] H.-J. Bungartz. *Finite Elements of Higher Order on Sparse Grids.* Habilitation, Institut für Informatik, Technische Universität München, 1998.

[9] P.G. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems.* North-Holland, 1978.

[10] R. Courant and D. Hilbert. *Methoden der Mathematischen Physik, Band 1.* Springer Verlag, 1930.

[11] T. Detmer, P. Schmelcher, and L.S. Cederbaum. The hydrogen molecule in a magnetic field: The lowest states of the Π manifold and the global ground state of the parallel configuration. *Phys. Rev. A*, 57:1767ff., 1998.

[12] T. Detmer, P. Schmelcher, F.K. Diakonos, and L.S. Cederbaum. The hydrogen molecule in magnetic fields: The ground states of the Sigma manifold of the parallel configuration. *Phys. Rev. A*, 56:1825–1838, 1997.

[13] B. Döhler. Ein neues Gradientenverfahren zur simultanen Berechnung der kleinsten oder größten Eigenwerte des allgemeinen Eigenwertproblems. *Numer. Math.*, 40:79–91, 1982.

[14] M. Duffy. Quadrature over a pyramid or cube of integrands with a singularity at a vertex. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19(6):1260–1262, 1982.

[15] A. Edelman, T. Arias, and S.T. Smith. The geometry of algorithms with orthogonality constraints. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:303–353, 1998.

[16] P. Faßbinder and W. Schweizer. The Hydrogen Atom in very strong magnetic and electric fields. *Phys. Rev. A*, 53:2135ff., 1996.

[17] P. Faßbinder and W. Schweizer. The discrete variable method for non-integrable quantum systems. *SFB382 Report Nr. 72*, 1997.

[18] A. Geist, A. Beguelin, J. Dongarra, R. Manchek, W. Jiang, and V. Sunderam. *PVM: A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing.* MIT Press, 1994.

[19] T. Gerstner and M. Griebel. Numerical integration using sparse grids. Numerical Algorithms, submitted, also as SFB 256 report, Universität Bonn, 1998.

[20] M. Griebel, M. Schneider, and C. Zenger. A combination technique for the solution of sparse grid problems. In R. Beauwens and P. de Groen, editors, *Iterative Methods In Linear Algebra.* Elsevier, 1992.

[21] M. Griebel and V. Thurner. The efficient solution of fluid dynamics problems by the combination technique. *Int. J. Num. Meth. for Heat and Fluid Flow*, 5(3):254–269, 1995.

[22] Ch. Großmann and H.-G. Roos. *Numerik partieller Differentialgleichungen.* Teubner, 1994.

[23] S. Hilgenfeldt. *Numerische Lösung der stationären Schrödingergleichung mit Finite-Element-Methoden auf dünnen Gittern.* Diplomarbeit, Technische Universität München, 1994.

[24] W. Huber. *Turbelenzsimulation mit der Kombinationsmethode auf Workstation-Netzen und Parallelrechnern.* Dissertation, Institut für Informatik, Technische Universität München, 1996.

[25] M.D. Jones, G. Ortiz, and D.M. Ceperley. Hartree-Fock studies of atoms in strong magnetic fields. *Phys. Rev. A*, 54:219–231, 1996.

[26] M.D. Jones, G. Ortiz, and D.M. Ceperley. Released-phase quantum Monte Carlo method. *Phys. Rev. E*, 55:6202–6210, 1997.

[27] S. Jordan, P. Schmelcher, W. Becken, and W. Schweizer. Evidence for helium in the magnetic white dwarf GD 229. *Astron. Astrophys. 336*, page L33, 1998.

[28] J. B. Kahler. *Sterne und ihre Spektren.* Spektrum Akademischer Verlag, 1994.

[29] U. Kappes and P. Schmelcher. Influence of a strong magnetic field on the chemical bond of the excited H_2^+ ion. *Phys. Rev. A*, 50:3775–3781, 1994.

[30] U. Kappes and P. Schmelcher. Electronic bond structure of the H_2^+ ion in a strong magnetic field: A study of the parallel configuration. *Phys. Rev. A*, 51:4542–4557, 1995.

[31] P. Leinen, W. Lembach, and K. Neymeyr. An adaptive subspace method for elliptic eigenproblems with hierarchical basis preconditioning. *SFB382 Report Nr. 68*, 1997.

[32] D.E. Longsine and S.F. McCormick. Simultaneous Rayleigh-quotient minimization method for $Ax = \lambda Bx$. *Linear Algebra and its Applications*, 34:195–234, 1980.

[33] J.C. Lopez, P. Hess, and A. Turbiner. H_2^+ ion in strong magnetic field: A variational study. to be published in Phys. Rev. A.

[34] M. Maischak. *hp-Methoden für Randintegralgleichungen bei 3D-Problemen, Theorie und Implementierung.* Dissertation, Universität Hannover, 1995.

[35] V.S. Melezhik. Three-dimensional hydrogen atom in crossed magnetic and electric fields. *Phys. Rev. A*, 48:4528–4538, 1993.

[36] C. Pflaum. *Diskretisierung elliptischer Differentialgleichungen mit dünnen Gittern.* Dissertation, Institut für Mathematik, Technische Universität München, 1996.

[37] William H. Press et al. *Numerical recipes in C.* Cambridge University Press, 1992.

[38] H. Rollnick. *Quantentheorie.* Vieweg, 1995.

[39] H. Ruder, G. Wunner, H. Herold, and F. Geyer. *Atoms in Strong Magnetic Fields.* Springer Verlag, 1994.

[40] L.I. Schiff and H. Snyder. Theory of the quadratic Zeeman effect. *Phys. Rev.*, 55:59ff., 1939.

[41] P. Schmelcher and L.S. Cederbaum. Molecules in strong magnetic fields: Properties of atomic orbitals. *Phys. Rev. A*, 37:672–681, 1988.

[42] M. Schubert and G. Weber. *Quantentheorie.* Spektrum Akademischer Verlag, 1993.

[43] F. Schwabl. *Quantenmechanik.* Springer Verlag, 1993.

[44] A. Scrinzi. Helium in a cylindrically symmetric field. *J. Phys. B*, 29:6055–6068, 1996.

[45] Sonderforschungsbereich 256, Universität Bonn. *GRAPE, Graphics Programming Environment*, 5.3 edition.

[46] G. Thurner, H. Körbel, M. Braun, H. Herold, H. Ruder, and G. Wunner. Hartree-Fock calculations for excited states of two-electron systems in strong magnetic fields. *J. Phys. B*, 26:4719–4750, 1993.

[47] J.H. Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem.* Oxford University Press, 1965.

[48] U. Wille. Magnetically dressed one-electron molecular orbitals. *Phys. Rev. A*, 38:3210–3235, 1988.

[49] H. Yserentant. On the multi-level splitting of finite element spaces. *Numerische Mathematik*, 49:379–412, 1986.

[50] C. Zenger. Sparse grids. In W. Hackbusch, editor, *Parallel Algorithms for Partial Differential Equations, Proceedings of the Sixth GAMM-Seminar, Kiel, 1990.* Vieweg-Verlag, 1991.