

Numerische Methoden für dynamische Systeme

**Seminarvortrag über die numerische Lösung
von Randwertproblemen (RWP)**

von Ingmar Schnell

1. Was ist ein RWP (mathematisch)

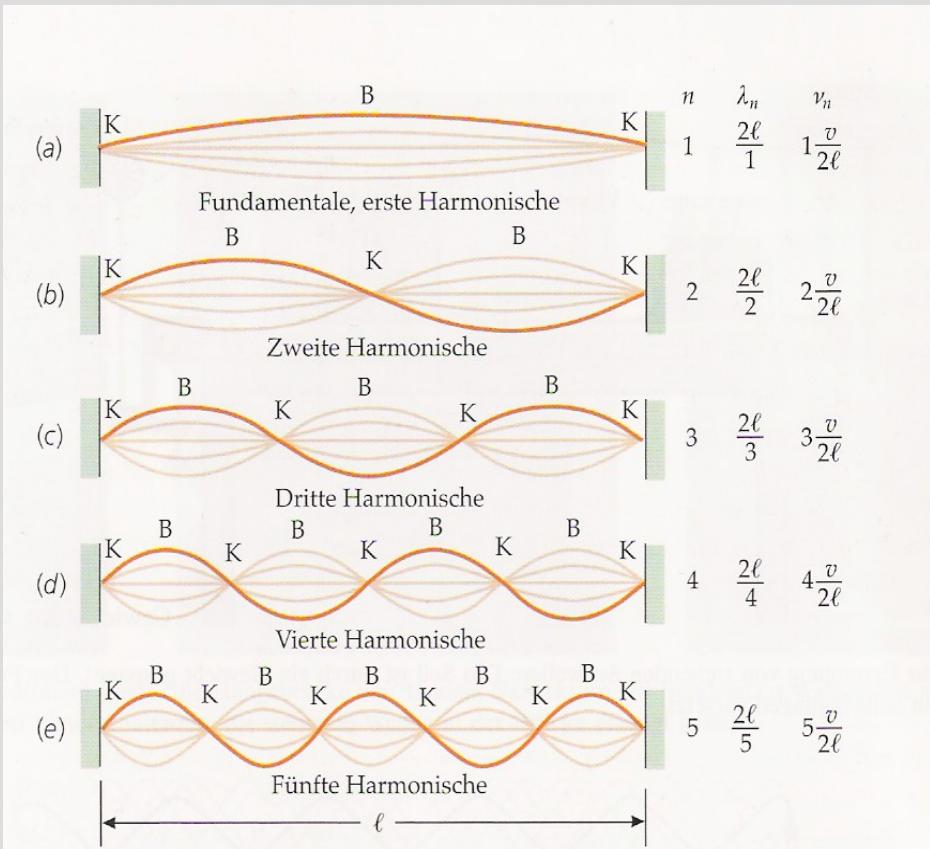
- Randwertprobleme bezeichnen Klasse von Problemstellungen
- Lösung zu einem Systems von Differentialgleichungen gesucht
- Lösung soll auf dem Rand des Definitionsbereiches gegebene Funktionswerte (Randbedingung) annehmen

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(x) \\ \dots \\ \dot{y}_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1(x), \dots, y_n(x)) \\ \dots \\ f_n(x, y_1(x), \dots, y_n(x)) \end{pmatrix}, \quad \vec{y}(x) : M \rightarrow \mathbb{R}^n$$

$$\vec{y}(a) = \vec{b} = \text{const.}, \quad a \in \partial M$$

1. Was ist ein RWP (Beispiele)

- Stehende Wellen / Hohlraumresonatoren



$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t^2} u(x, t) = 0$$

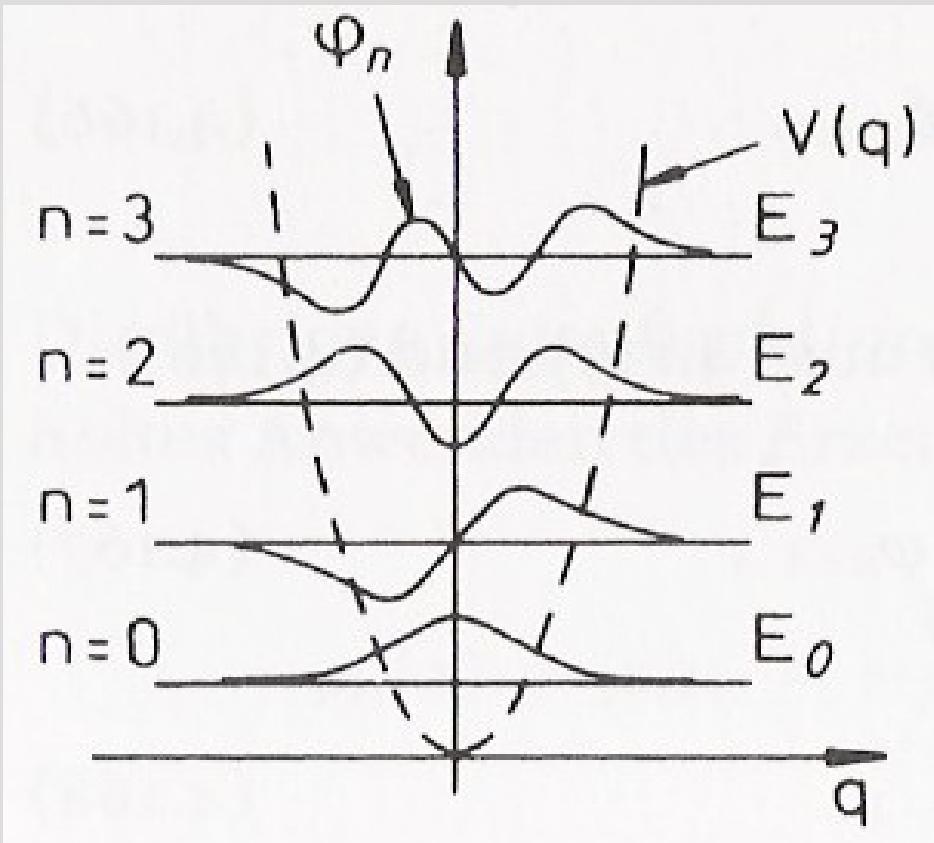
$$u(0, t) = 0 \quad \forall t$$

$$u(l, t) = 0 \quad \forall t$$

$$\Rightarrow u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{\pi}{l} n x\right)$$

1. Was ist ein RWP (Beispiele)

- Schrödinger-Gleichung / Wellenfunktionen



$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$

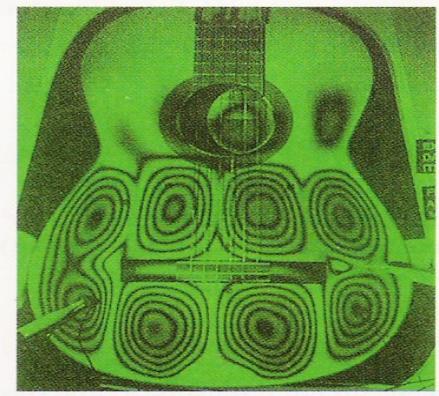
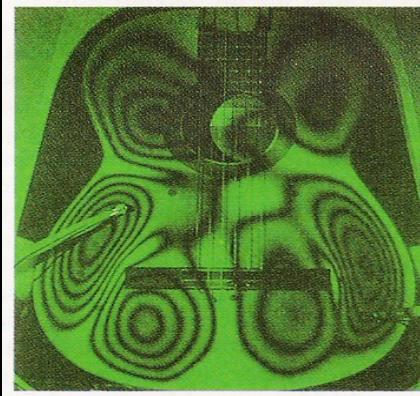
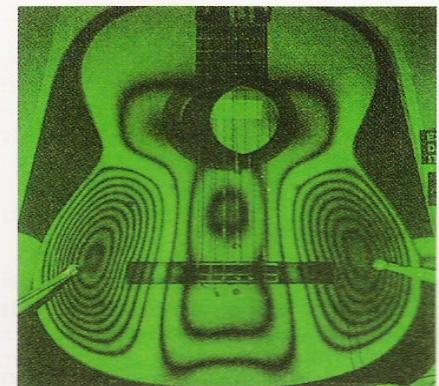
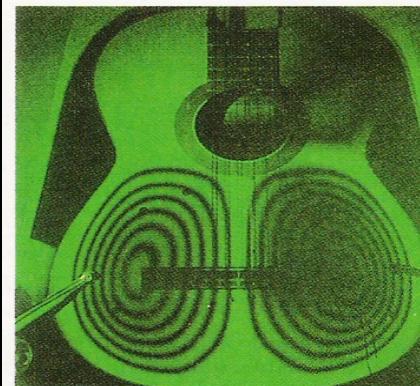
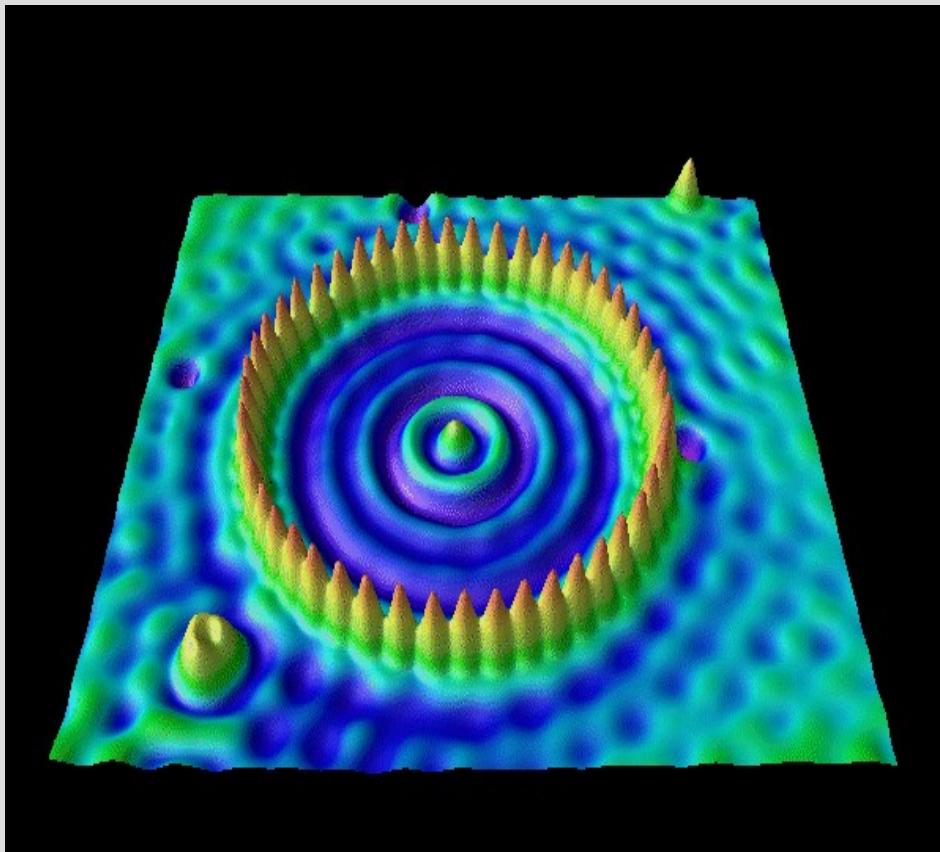
$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \varphi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \varphi_n(x) = c_1 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

$$c_1 = \left(\frac{n\omega}{\hbar\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \left(n! 2^n \right)^{-\frac{1}{2}}$$

1. Was ist ein RWP (Beispiele)

- Beispiele in höheren Dimensionen



1. Was ist ein RWP (wichtige Punkte)

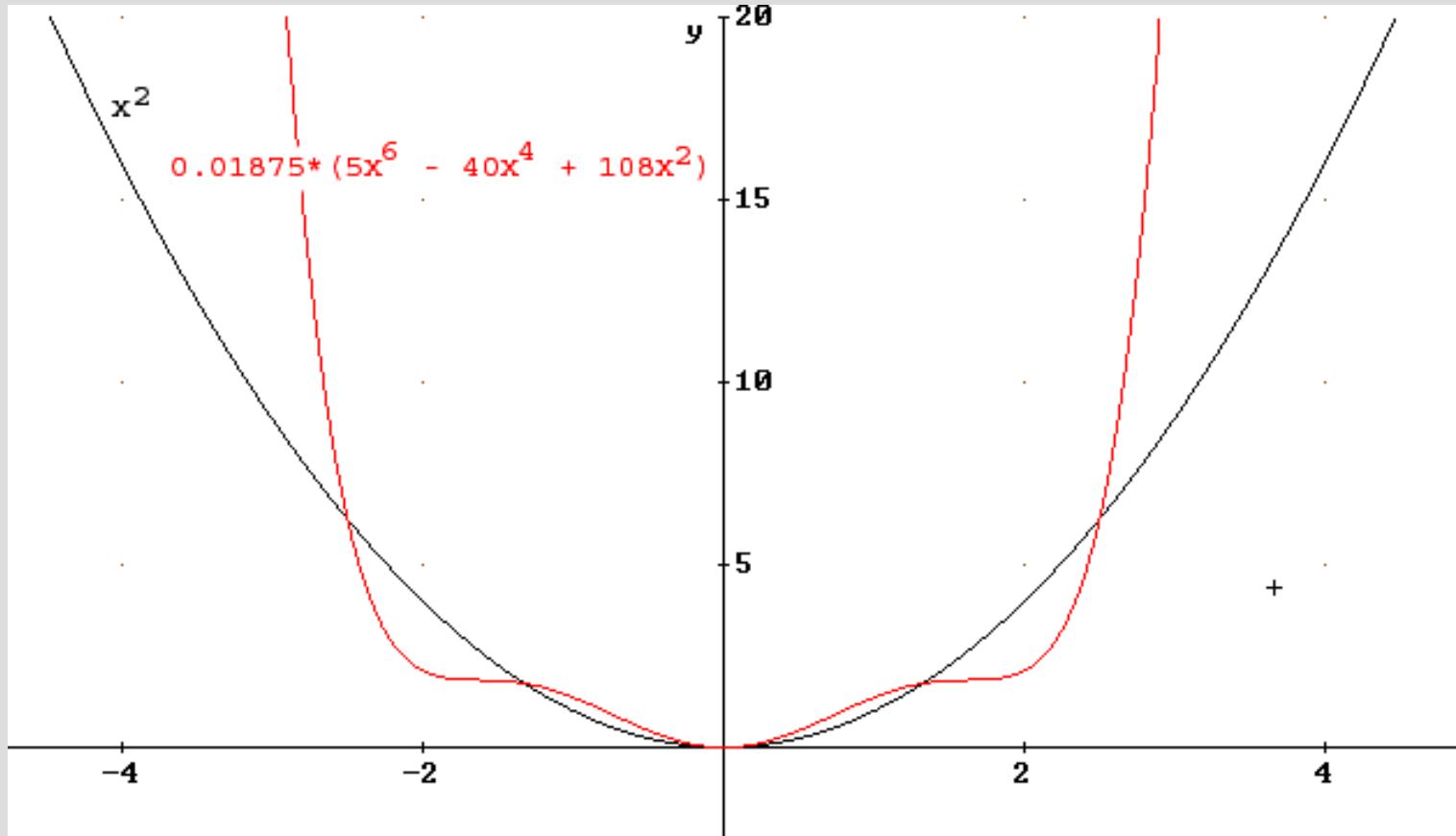
- Jede DGL n-ter Ordnung lässt sich in ein System aus n DGLs 1. Ordnung überführen.
- Eindeutig lösbar, wenn n Randbedingungen (RB) bzw. Anfangswerte (AW) gegeben sind.
- Für $n=1$ kann man AWP und RWP nicht unterscheidbar.
- Liegen Randbedingungen innerhalb eines Intervalls, kann dieser aufgeteilt werden.

2. Warum numerische Methoden

- Wenn keine analytische Lösung existiert
- Wenn analytische Lösung zu zeitaufwändig ist.
- Übertragbarkeit auf andere Problemstellungen.

2. Warum numerische Methoden

- Beispiel (gestörtes quantenmechanisches Potential)



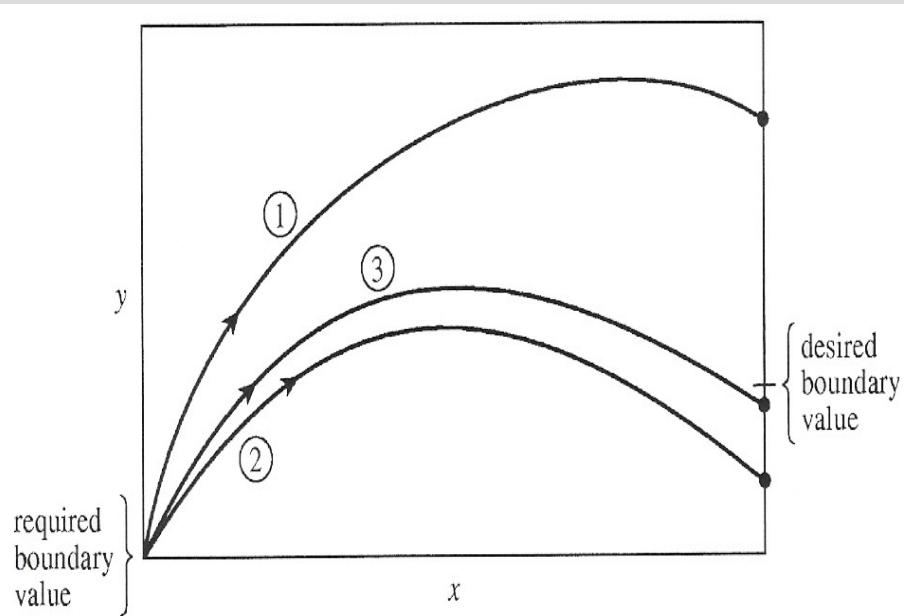
3. Lösungsansätze

- Es existieren Zahlreiche Lösungsansätze
 - Schießverfahren (Shooting-method)
 - (Einfaches) Schießverfahren mit linearem RWP
 - (Einfaches) Schießverfahren mit nichtlinearem RWP
 - Variationsverfahren
 - ...
 - Relaxationsverfahren (Relaxation-method)
 - Differenzenverfahren
 - Gauß-Seidel-Verfahren, Jacobi-Relaxationsverfahren
(Zurück geführt auf Lösung eines linearen Gleichungssystems)
 - ...

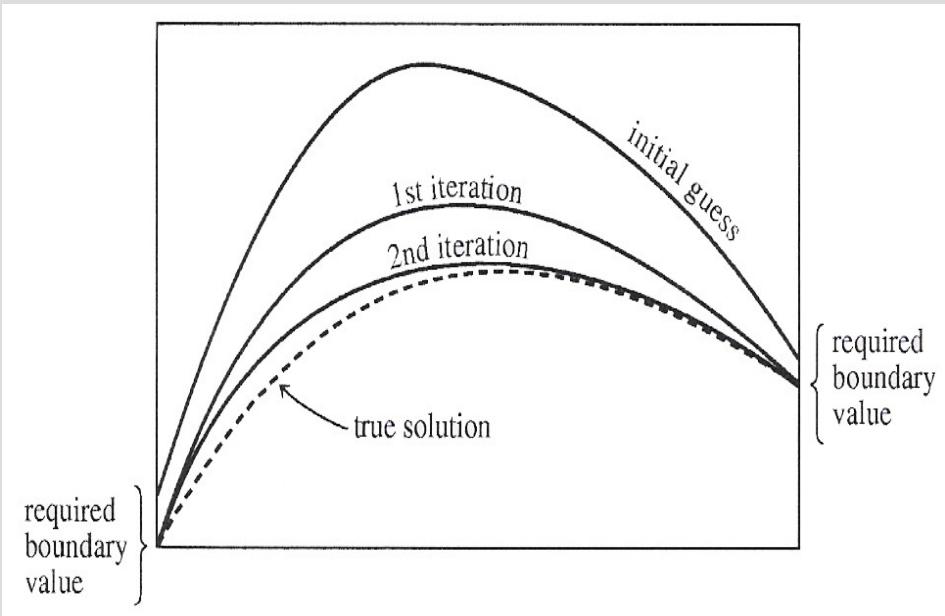
3. Lösungsansätze

- Unterschied zwischen Shooting und Relaxation?

Shooting-method



Relaxation-method



3. Lösungsansätze

Shooting:

- Iteration durch variieren von Parametern
- Intervalle werden schrittweise durchlaufen.
- Rechenintensiv
- In seltenen Fällen bzgl. der Randbedingungen instabil
- schneller

Relaxation:

- Iteration durch Vergleich alter Funktionswerte
- Nutzt in der Regel Matrizen
- Speicher intensiv
- Empfindlich vom initial guess abhängig
- Genauer (initial guess)

Was ist „besser“?

3. Lösungsansätze

**"Until you have enough experience to make your own judgement between the two methods, you might wish to follow the advice of your authors, who are notorious computer gunslingers:
We always shoot first and only then relax."**

Nummerical Recipes (Cambridge University Press)

4. Das Schießverfahren

- **Funktionsweise des Schießverfahrens: System von n-DGL 1. Ordnung gegeben**

$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1(x) \\ \dots \\ \dot{y}_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1(x), \dots, y_n(x)) \\ \dots \\ f_n(x, y_1(x), \dots, y_n(x)) \end{pmatrix}$$

- Insgesamt n Randbedingungen
- Davon am n_1 Startpunkt, n_2 am Endpunkt
- Im Startpunkt werden beliebige V_1, \dots, V_{n_2} Bedingungen ergänzt

4. Das Schießverfahren

- Mit den beliebig gewählten Anfangsbedingungen ist System aus Differentialgleichungen lösbar
- Iteration der Form:

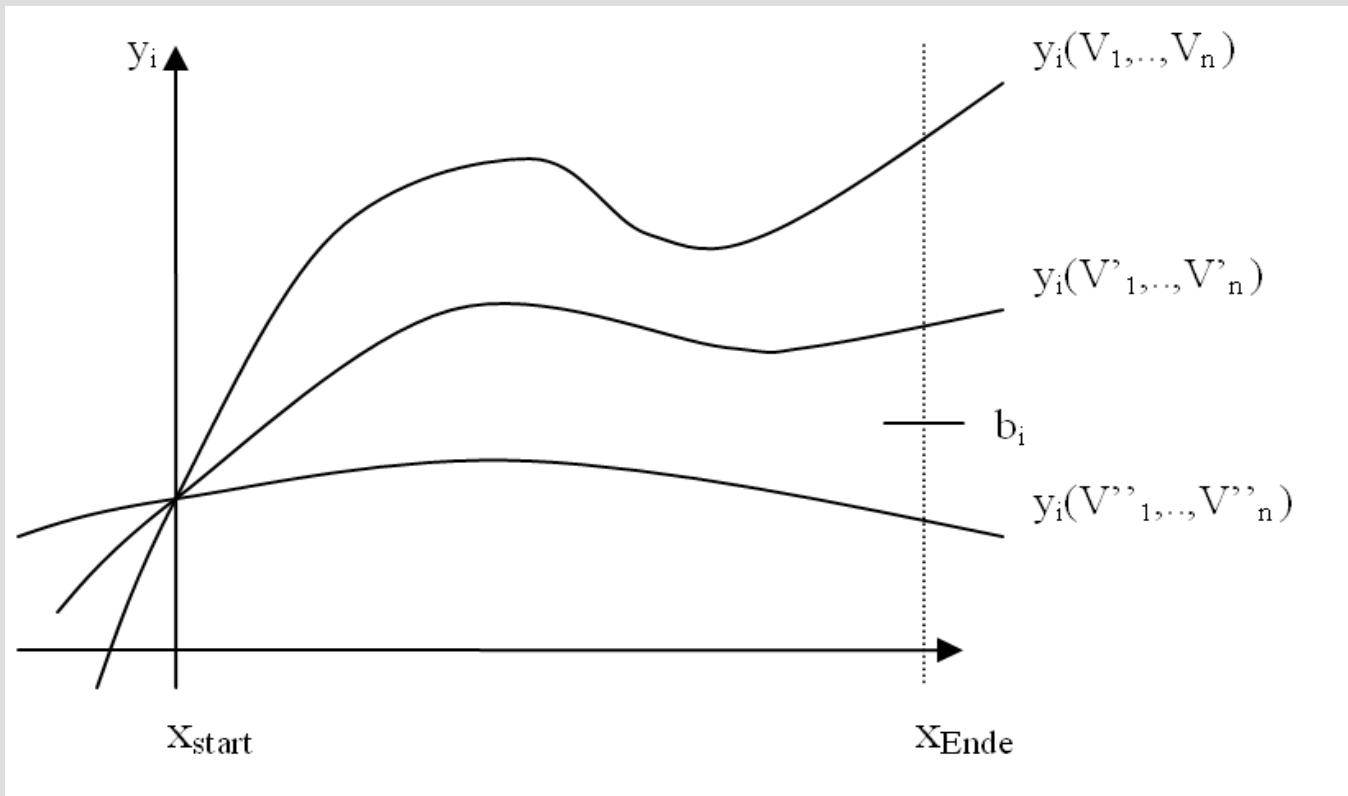
$$\begin{pmatrix} x_{neu} \\ y_{1,neu} \\ \dots \\ y_{n,neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{alt} + h \\ y_{1,alt} + h \cdot g_1(x_{alt}, y_{1,alt}, \dots, y_{n,alt}) \\ \dots \\ y_{n,alt} + h \cdot g_n(x_{alt}, y_{1,alt}, \dots, y_{n,alt}) \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{pmatrix} x_{start} \\ y_{1,start} \\ \dots \\ y_{n_1,start} \\ y_{n_1+1,start} \\ \dots \\ y_{n,start} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{start} \\ b_1 \\ \dots \\ b_{n_1} \\ V_1 \\ \dots \\ V_{n_2} \end{pmatrix}$$

4. Das Schießverfahren

- Je nach Wahl der V_i sieht die Lösung anders aus



4. Das Schießverfahren

- Wähle V_1, \dots, V_{n_2} so , dass:

$$F_i(V_1, \dots, V_{n_2}) := b_i - y_i(V_1, \dots, V_{n_2}) \stackrel{!}{=} 0 \quad n_2 \leq i \leq n$$

- Die werden V_i sukzessive korrigiert

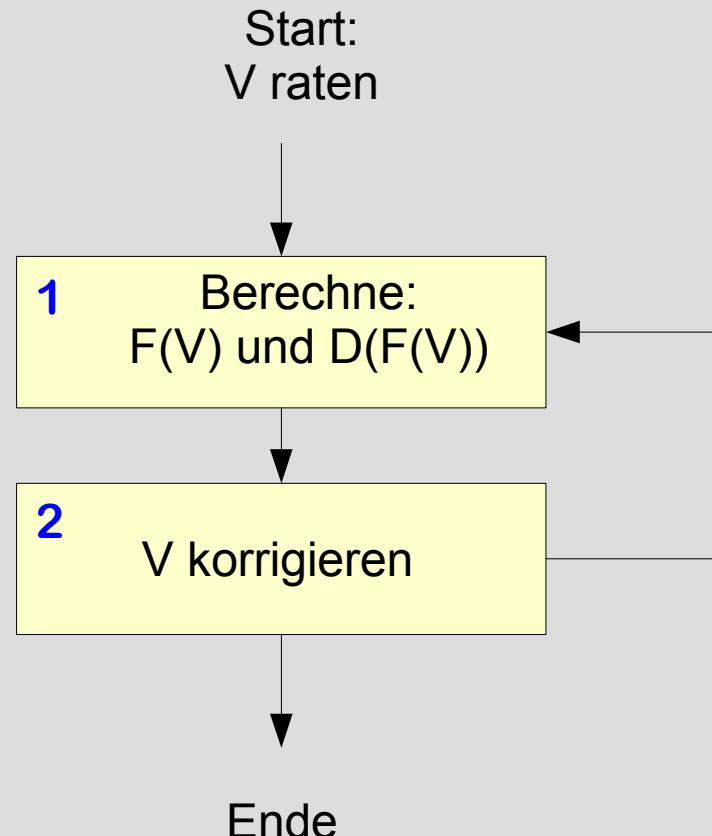
$$\vec{V}_{neu} = \vec{V}_{alt} + \Delta \vec{V}$$

- Korrektur aus der Taylor-Entwicklung der F_i :

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \vec{F}(\vec{V}_{alt} + \Delta \vec{V}) \approx \vec{F}(\vec{V}_{alt}) + \Delta \vec{V} \cdot D(\vec{F}(\vec{V}_{alt})) + O(\Delta \vec{V}_{alt}^2) \\ \Rightarrow \Delta \vec{V} &= -\frac{\vec{F}(\vec{V}_{alt})}{D(\vec{F}(\vec{V}_{alt}))} \end{aligned}$$

4. Das Schießverfahren

- Überblick:



5. Konkrete Umsetzung

- Schrödinger-Gleichung soll für ein zeitunabhängiges, symmetrisches Potential gelöst werden.

$$E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x)$$

$$\Rightarrow \varphi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(x)$$

- Wie sehen die Randbedingungen aus?

5. Konkrete Umsetzung

- Die Lösung soll ein physikalisches Problem beschreiben.
D.h. die Lösung muss normierbar sein !

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi^*(x) \cdot \varphi(x) = 1$$

$$\Rightarrow \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \varphi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \varphi'(x) = 0$$

5. Konkrete Umsetzung

- Die Randbedingungen eignen sich nicht um das Problem zu lösen:
 - Alle Randbedingungen sind Null (triviale Lösung)
 - Randbedingungen im Unendlichen (Runge-Kutta-Verfahren ungeeignet)
 - 4 Randbedingungen bei einer DGL 2. Ordnung
- Wähle stattdessen Startpunkt im klassisch verbotenem Bereich

$$\varphi(x_{start}) = \varepsilon_1, \quad \varphi'(x_{start}) = \varepsilon_2, \quad \varepsilon_1, \varepsilon_2 \ll 1$$

5. Konkrete Umsetzung

- Symmetrie des Potentials für RB bei $x=0$ nutzen
- $V(x) = V(-x) \Rightarrow$ Hamilton-Operator ist ein gerader Operator

$$\Pi H \Pi^+ = H$$

$$\Pi H = H \Pi$$

$$\Rightarrow [\Pi, H]_- = 0$$

gemeinsamer Satz von
Eigenfunktionen!

$$\Rightarrow \varphi(0) = 0, \quad \varphi'(0) \neq 0 \quad \text{oder}$$
$$\varphi(0) \neq 0, \quad \varphi'(0) = 0$$

Erinnerung:
Paritäts-Operator ist unitär

$$\Pi \Pi^+ = \Pi^+ \Pi = 1$$

EW:

$$\Pi |\xi\rangle = \pi |\xi\rangle \quad \pi = \pm 1$$

$$\Rightarrow \Pi^+ = \Pi^{-1} = \Pi$$

5. Konkrete Umsetzung

- Zwei im Endlichen liegende Randpunkte
- Noch drei Randbedingungen... Griff in die Trickkiste:

$$\varphi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(x)$$

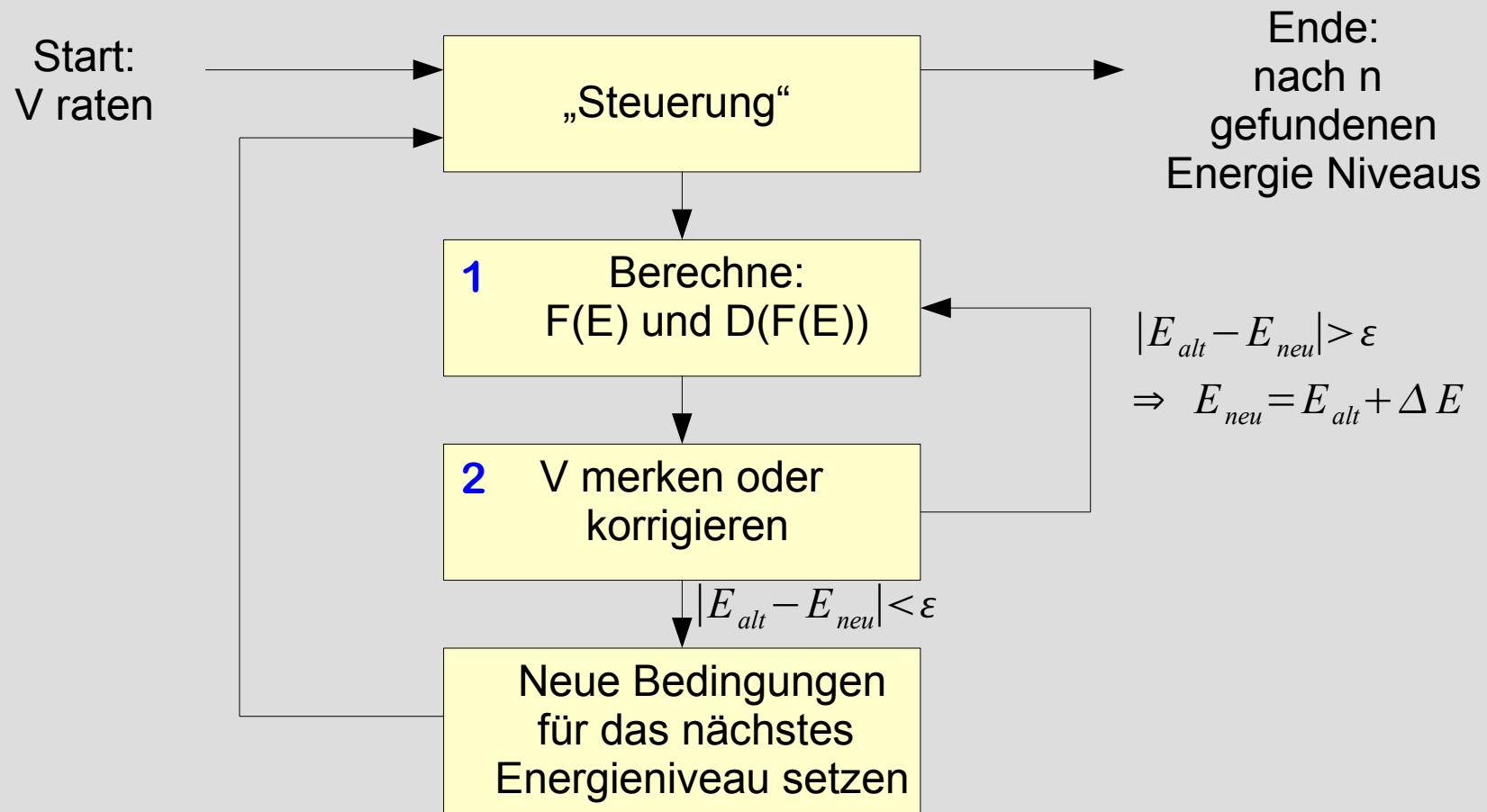
$$\Rightarrow \begin{pmatrix} y'_1(x) \\ y'_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1(x), y_2(x)) \\ f_2(x, y_2(x), y_2(x)) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} y'_1(x) \\ y'_n(x) \\ E' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1(x), y_2(x), E) \\ f_2(x, y_2(x), y_2(x), E) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Diskretes Spektrum

- 3 DGL mit drei 3 Randbedingungen => Alles OK

5. Konkrete Umsetzung



5.1. Konkrete Umsetzung

- Abramowitz and Stegun, Handbook of Mathematical Functions:
25.5.22: Runge-Kutta Method (p.897)

$$y_{n+1} = y_n + h \left(y'_{n+} + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2) \right) + O(h^4)$$

$$y'_{n+1} = y'_{n+} + \frac{1}{6} k_1 + \frac{2}{3} k_2 + \frac{1}{6} k_3$$

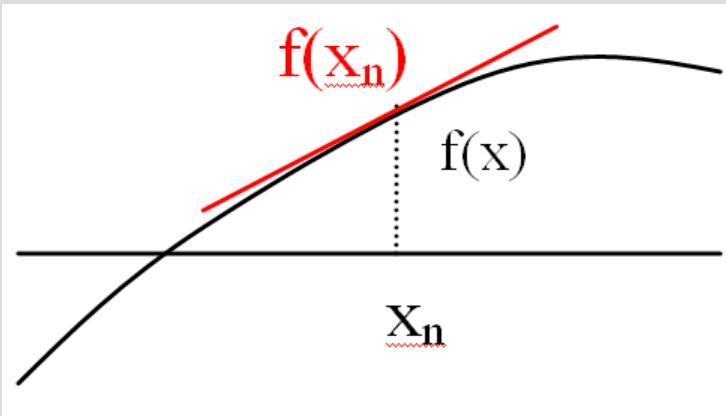
$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} y'_{n+} + \frac{h}{8} k_1\right)$$

$$k_3 = h f\left(x_n + h, y_n + h y'_{n+} + \frac{h}{2} k_2\right)$$

5.2. Konkrete Umsetzung

- Berechnung der Energiekorrektur



$$\vec{V}_{neu} = \vec{V}_{alt} - \frac{\vec{F}(\vec{V}_{alt})}{D(\vec{F}(\vec{V}_{alt}))}$$

↓

$$E_{neu} = E_{alt} - \frac{\varphi(x_{Ende}, E_n)}{\varphi'(x_{Ende}, E_n)}$$

Ableitung ohne analytische Funktion?

Exkurs numerisches Differenzieren

- Sind zu einem Grafen $y=f(x)$ die Punkte $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ gegeben, dann existiert genau ein Polynom (Interpolationspolynom)

$$p(x) = a_0 + a_1 x^1 + a_2 x^2 + \dots + a_{n-1} x^{n-1}$$

mit der Eigenschaft $p(x_i) = y_i$ für alle i .

- Beweis:

$$\begin{pmatrix} x_1^0 & x_1^1 & \dots & x_1^{n-1} \\ \vdots & & & \vdots \\ x_n^0 & x_n^1 & \dots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \det(X) = \left(\prod_{1 \leq i \leq k \leq n} (x_k - x_i) \right) \neq 0 \quad \text{Vandermonde-Determinante}$$

Exkurs numerisches Differenzieren

- $p(x)$ darstellbar durch Lagrange-Koeffizienten:

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \quad \text{Lagrange-Koeffizienten}$$

$$\Rightarrow p(x) = \sum_{k=1}^n y_k L_k(x)$$

Die Lagrange-Koeffizienten verhalten sich wie das Kronecker-Produkt:

$$L_k(x_j) = \delta_{jk}$$

$$\Rightarrow p(x_j) = \sum_{k=1}^n y_k L_k(x_j) = \sum_{k=1}^n y_k \delta_{jk} = y_j$$

- $p(x)$ und $f(x)$ bis auf ein Restglied identisch!
- Also auch die Ableitungen

Exkurs numerisches Differenzieren

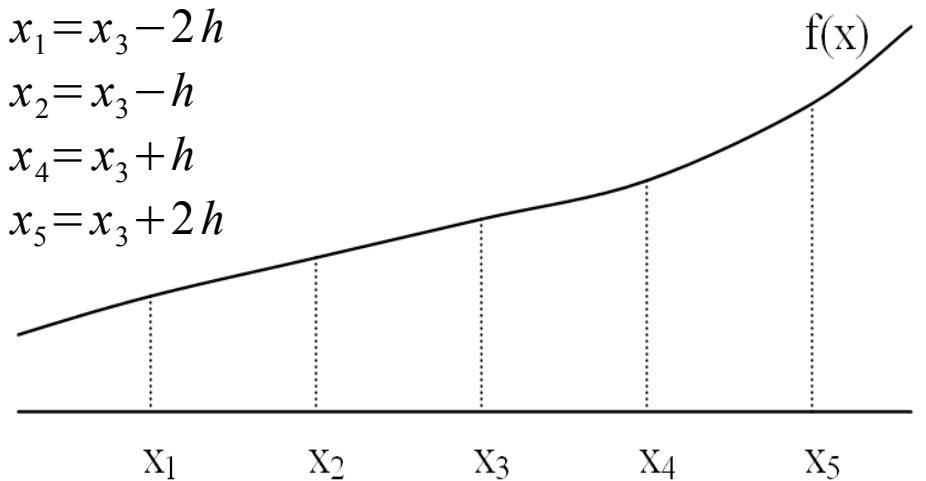
- Konkret:

$$x_1 = x_3 - 2h$$

$$x_2 = x_3 - h$$

$$x_4 = x_3 + h$$

$$x_5 = x_3 + 2h$$



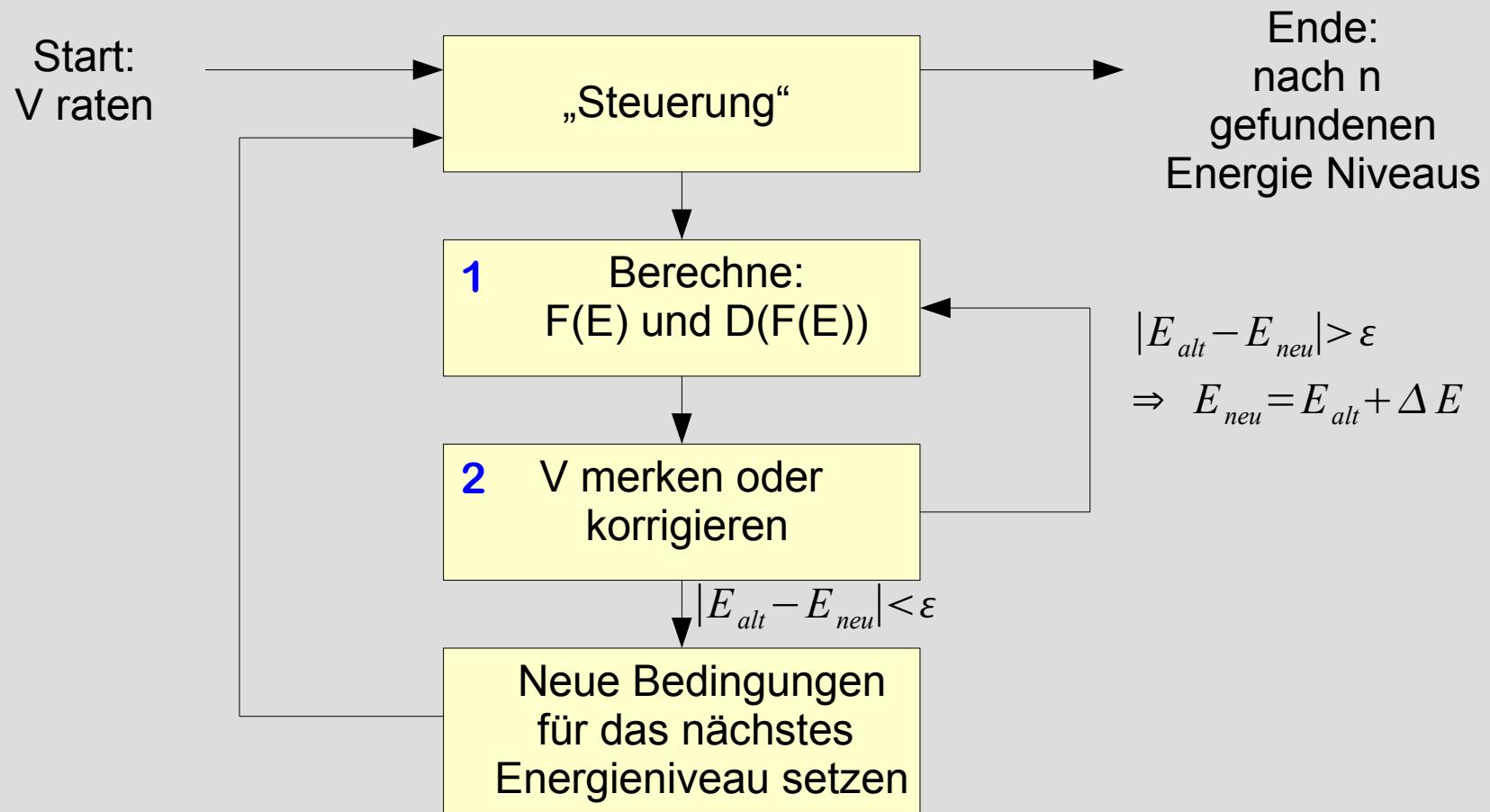
$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) \approx \frac{\partial}{\partial x} p(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} p(x) = \sum_{k=1}^5 \underbrace{f(x_k)}_{y_k} \left[\frac{\partial}{\partial x} L_k(x) \right]$$

Fünfpunkte-Mittelpunkt Formel:

$$\Rightarrow f'(x) \approx \frac{1}{12} (f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h))$$

5. Konkrete Umsetzung



6. Literatur

- Paul A. Tipler, Gene Mosca, Physik fpr Wissenschaftler und Ingeneure, 2.Auflage – Elsevier Spektrum Verlag
- W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling, B.P.Flannery, Numerical Recipes, 3. Auflage - Cambridge University Press
- Abramowitz and Stegun, Handbook of Mathematical Functions
- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloe, Quantenmechanik Band 1, 3. Auflage – de Gruyter Verlag
- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1 Quantenmechanik Grundlagen, 6. Auflage – Springer Verlag
- De Vries, A first Course in Computational Physics, 1994 – John Wiley & Sons
- Burden Faires, Nummerische Methoden, 1995 – Spektrum Verlag
- M. Beyer, W. Boeck, K. Möller, W. Zeangl, Hochspannungstechnik, 1996 – Springerverlag
- <http://wwwmath.uni-muenster.de/reine/u/raimar/lehre/SS07/Math-f-Phys-IV/Math-f-Ph-4.pdf>
- http://teacher.eduhi.at/alindner/Dyn_Geometrie/kettenlinie/
- <http://www.sbg.ac.at/mat/staff/linhart/Nummath1.pdf>