

# Exponentielle Integrationsverfahren für die Schrödinger-Poisson-Gleichung

DISSERTATION  
zur Erlangung des Grades  
eines Doktors der Naturwissenschaften  
der Fakultät für Mathematik und Physik der  
Eberhard-Karls-Universität Tübingen

vorgelegt von  
MATHIAS FRÖHLICH  
aus Laucherthal

2004

Tag der mündlichen Prüfung:

Dekan:

1. Berichterstatter:

2. Berichterstatterin:

9. Februar 2004

Prof. Dr. Herbert Müther

Prof. Dr. Christian Lubich

Prof. Dr. Marlis Hochbruck

# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>1</b>
<b>1 Das Schrödinger-Poisson-Modell</b>	<b>3</b>
1.1 Halbleiter . . . . .	3
1.2 Die einfache Halbleiterdiode . . . . .	5
1.3 Physikalische Modelle . . . . .	7
1.4 Die Schrödinger-Poisson-Gleichung . . . . .	8
1.5 Transformation auf dimensionslose Größen . . . . .	10
1.6 Raumdiskretisierung . . . . .	11
1.7 Notationen und Vereinfachungen . . . . .	12
<b>2 Analytische Vorbereitungen</b>	<b>15</b>
2.1 Der Sobolevsche Einbettungssatz und Folgerungen . . . . .	15

2.2	Sobolev-Räume periodischer Funktionen . . . . .	18
2.3	Die Poisson-Gleichung . . . . .	20
2.3.1	Dirichlet-Randbedingungen . . . . .	20
2.3.2	Periodische Randbedingungen . . . . .	21
2.4	Die Schrödinger-Gleichung . . . . .	23
2.4.1	Die freie Schrödinger-Gleichung . . . . .	23
2.4.2	Die freie Schrödinger-Gleichung mit periodischen Randbedingungen . . . . .	24
2.4.3	Die Schrödinger-Gleichung mit konstantem Potential .	24
2.4.4	Die Schrödinger-Gleichung mit zeitabhängigem Potential	26
2.5	Die Schrödinger-Poisson-Gleichung . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Zeitintegrationsverfahren</b>	<b>33</b>
3.1	Exponentielles Euler-Verfahren . . . . .	34
3.2	Symmetrisches Exponentielles Schema . . . . .	43
3.3	Splitting-Verfahren . . . . .	58
3.3.1	Lie-Ableitungen . . . . .	60
3.3.2	Fehlerabschätzung . . . . .	63

**4 Numerische Experimente** **81**

4.1 Verwendete Numerik . . . . . 81

4.1.1 Die Exponentialfunktion . . . . . 81

4.1.2 Die Poisson-Gleichung . . . . . 83

4.2 Implementierung und Laufzeitverhalten . . . . . 83

4.2.1 Exponentielles Euler-Verfahren . . . . . 83

4.2.2 Symmetrisches Exponentielles Euler-Verfahren . . . . . 84

4.2.3 Splitting-Verfahren . . . . . 84

4.3 Numerisches Beispiel . . . . . 85



## Zusammenfassung

Ohne Halbleiter ist unsere heutige Welt nicht mehr vorstellbar. Das Internet, Mikroprozessoren und zahlreiche weitere Geräte aus unserem Alltag basieren vielfach auf Halbleiterelektronik. Auch die Simulationstechniken, die in der Mathematik entwickelt werden, machen erst mit Hilfe dieser Halbleitertechnologie in Computern einen wirklichen Sinn.

Simulationen ermöglichen kürzere Entwicklungszeiten für viele Produkte oder machen eine Entwicklung überhaupt erst möglich. Selbst um Halbleiter weiter zu verbessern, verwendet man Simulationstechniken, die helfen, die Produktzyklen in der Halbleiterindustrie kürzer und günstiger zu machen. Dafür benötigt man zum einen eine genaue Modellbildung und zum anderen numerische Methoden, um die aus den physikalischen Modellen hervorgehenden Differentialgleichungen effizient zu lösen. Genauso wichtig sind die theoretischen Untersuchungen der Fehler dieser Verfahren. Sie garantieren, dass die bei den numerischen Verfahren auftretenden Fehler in abschätzbaren Toleranzen bleiben.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit einem weiteren kleinen Baustein in dieser Kette. Der Schrödinger-Poisson-Gleichung, die quantenmechanische Effekte in Halbleitern beschreibt. Wir werden Zeitintegrationsverfahren für die Schrödinger-Poisson-Gleichung entwickeln und untersuchen. Die Untersuchungen umfassen von der Ortsdiskretisierung unabhängige Fehlerschätzungen ebenso wie numerische Experimente mit einfachen Beispielen.

Die Arbeit gibt zunächst eine kurze Einführung in die Funktionsweise und den physikalischen Hintergrund der Halbleiter. Die physikalisch-mathematischen Modelle, besonders im Hinblick auf die Schrödinger-Poisson-Gleichung, werden erläutert.

Das zweite Kapitel behandelt theoretische Eigenschaften der Schrödinger-Poisson-Gleichung und deren Lösung, sowie einen Existenzbeweis einer exakten Lösung im geeigneten Sobolev-Raum. Ebenso ist dort eine kurze Zusammenstellung analytischer Eigenschaften gegeben, die für die späteren Kapitel benötigt werden.

Im zentralen dritten Kapitel werden dann drei Zeitintegrationsverfahren zur Berechnung einer numerischen Approximation an die Lösung motiviert und die Eigenschaften der Semidiskretisierungen in der Zeit genauer untersucht. Das einfache Exponentielle Euler-Verfahren bildet dabei die Grundlage für das Verständnis der weiteren Verfahren. Die für den zugehörigen Konvergenzbeweis angewandten Techniken werden dann für die Betrachtungen einer symmetrisierten Variante des Exponentiellen Euler-Verfahrens verfeinert. Für das auf einem Splitting-Ansatz basierende dritte Verfahren werden dann Lie-Methoden verwendet, um Fehlerschranken herzuleiten. Eine Besonderheit, die bei der numerischen Approximation einer Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung auftritt, ist die Tatsache, dass die Regularität der numerischen Lösung in die Fehlerschranken mit eingeht. Daher werden zusätzlich Ergebnisse über die Regularität der numerischen Lösung für diese Verfahren bewiesen.

Im letzten Kapitel der Arbeit findet man die Beschreibung einer einfachen MATLAB-Implementierung dieser Verfahren. Rechnungen mit einem Beispielmodell runden die analytischen Ergebnisse aus dem vorigen Kapitel ab und belegen die praktische Verwendbarkeit der vorgestellten Approximationsverfahren.

# Kapitel 1

## Das Schrödinger-Poisson-Modell

### 1.1 Halbleiter

Halbleiter in elektronischen Schaltkreisen sind Kristallgitter aus Silizium oder Germanium. Diese Elemente sind auf unserer Erde in Hülle und Fülle vorhanden. Viele Gesteine enthalten Siliziumoxyd. Das Silizium wird durch einen chemischen Prozess aus dem Siliziumoxyd gewonnen. Für Halbleiterbauelemente werden große und vor allem zusammenhängende Einkristalle benötigt. Solche Kristalle werden für die Halbleiterindustrie in Form von Barren hergestellt. Die Barren schneidet man dann in Scheiben, die so genannten Waver.

Halbleiter sind, wie der Name schon sagt, weder echte Leiter noch echte Nichtleiter. Mit einem spezifischen Widerstand von  $625 \Omega m$  bei Silizium und  $0,454 \Omega m$  bei Germanium liegen sie dazwischen. Zum Vergleich: ein guter Leiter wie Kupfer hat einen spezifischen Widerstand von  $1,77 \times 10^{-8} \Omega m$  und ein guter Isolator wie zum Beispiel Bernstein hat einen spezifischen Widerstand von ungefähr  $1 \times 10^{16} \Omega m$ . Zudem ist der Widerstand eines Halbleiters stark temperaturabhängig. Daher verwendet man reine Halbleiter in so genannten Heißleitern als Temperaturfühler. Was macht diese Kristalle aber nun jenseits der Temperaturmessung so interessant?

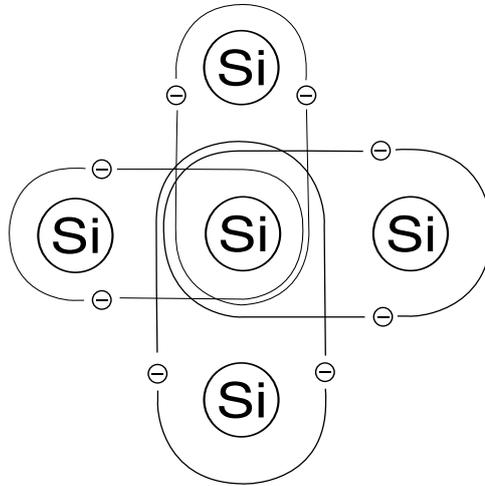


Abbildung 1.1: Kristallbindungen in einem Halbleiter

Die Leitfähigkeit eines Festkörpers wird im Wesentlichen von der Anzahl der freien Elektronen bestimmt. Halbleiter haben auf der äußersten Elektronenbahn eines Atoms immer 4 Elektronen, die so genannten Valenzelektronen. Im Kristallgitter bilden diese Elektronen die Kristallgitterbindungen. Jede dieser Valenzelektronen gehört dabei zu zwei benachbarten Atomen und bringt das Atom in die Edelgaskonfiguration. Abbildung 1.1 zeigt ein Silizium-Atom im Kristallgitter. Alle vier Elektronen sind fest in den Kristallbindungen zu den Nachbaratomen. Es sind also keine freien Elektronen vorhanden, die zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen könnten. Die Energie, die notwendig ist, um solche gebundenen Elektronen zu lösen, ist gerade so hoch, dass die thermische Energie in der Umgebung gerade reicht, um einige Elektronen auszulösen. Aus diesem Grund ist die Leitfähigkeit von der Temperatur oder der Lichteinstrahlung abhängig, aber immer noch zu klein, um aus dem Kristall einen guten Leiter zu machen.

Störungen in dieser Kristallstruktur verändern die Leitfähigkeit aber drastisch. Atome aus den benachbarten Spalten des Periodensystems haben in der äußeren Schale entweder drei oder fünf Elektronen. Bringt man zum Beispiel Phosphor, ein fünf-wertiges Atom, in die Kristallstruktur ein, so tragen vier der fünf Elektronen wieder zur Kristallbindung bei. Das fünfte Elektron bleibt sozusagen übrig, es ist mehr oder minder frei beweglich und trägt damit zur Leitfähigkeit bei. Abbildung 1.2 zeigt eine durch ein solches Phosphor-Atom verunreinigtes Kristallgitter. Man nennt eine solche Verunreinigung

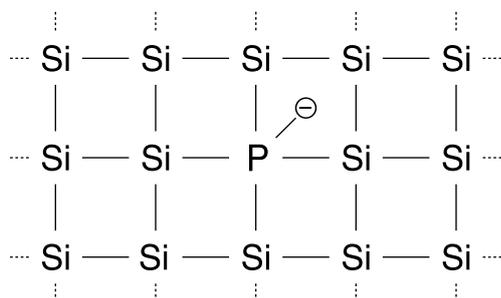


Abbildung 1.2: Ein Phosphor-Atom im Halbleiterkristall (N-Dotierung)

auch Dotierung. Ein solches fünf-wertiges Atom im Halbleiter heißt Donator. Eine Dotierung mit einem Donator heißt N-Dotierung. Dotiert man das Kristallgitter mit einem drei-wertigen Atom, wie zum Beispiel Bor, so verbinden sich die drei Elektronen mit den Nachbaratomen. Eine Bindung bleibt dann noch frei. Diese Fehlstelle, auch Loch genannt, ist genauso gut im Gitter beweglich wie das freie Elektron bei der N-Dotierung. Abbildung 1.3 zeigt ein

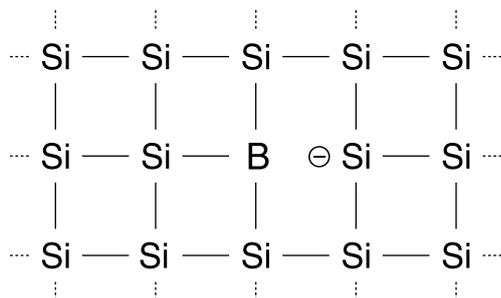


Abbildung 1.3: Ein Bor-Atom im Halbleiterkristall (P-Dotierung)

mit Bor dotiertes Kristallgitter. Ein solches Atom heißt dann Akzeptor und trägt ebenfalls auch zur Leitfähigkeit bei. Man nennt diese Art von Verunreinigung auch P-Dotierung und diese Art von Leitfähigkeit auch Lochleitung.

## 1.2 Die einfache Halbleiterdiode

Halbleiterbausteine in elektronischen Bauteilen machen sich diese Dotierungen und die Effekte an den Rändern der Dotierung zu nutze. Das ein-

fachste Beispiel, eine Diode, besteht aus zwei verschieden dotierten Bereichen, die aneinander angrenzen. Abbildung 1.4 zeigt den Ruhezustand einer

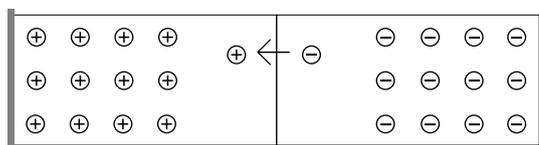


Abbildung 1.4: Halbleiterdiode ohne angelegte Spannung

solchen Halbleiterdiode ohne äußere Spannungen. Die linke Hälfte der Diode ist P-dotiert, die rechte Hälfte ist N-dotiert. Die freien Elektronen aus der N-Dotierung wandern an der Kontaktstelle der beiden Dotierungen in die Löcher der P-Dotierung. In dieser Verarmungszone sind also keine freien Ladungsträger, die Leitfähigkeit der Diode ist gering. Legt man auf der linken Seite eine negative und auf der rechten eine positive Spannung an (Abbildung

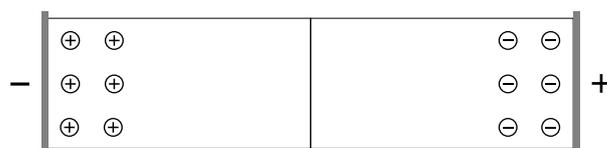


Abbildung 1.5: Halbleiterdiode in Sperrichtung

1.5), so verstärkt sich dieser Effekt. Die Diode lässt also in dieser Richtung keinen Strom durch, sie sperrt. Legt man die Spannung mit umgekehrter Po-

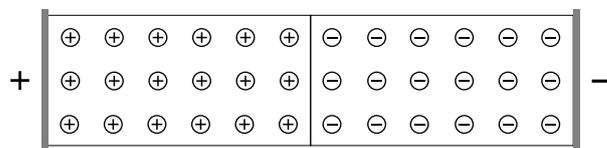


Abbildung 1.6: Halbleiterdiode in Durchlassrichtung

larität an, so verdrängt das elektrische Potential der angelegten Spannung die Elektronen aus den Löchern im P-dotierten Material (Abbildung 1.6). Im ganzen Halbleiter sind freie Ladungsträger vorhanden. Die Diode ist leitend, es fließt Strom.

## 1.3 Physikalische Modelle

Die ersten physikalische Modelle für Halbleiter basierten auf dem vom van Roosbroeck in [Roo50] beschriebenen Drift-Diffusionsmodell. Diese klassische Beschreibung eines Halbleiters reichte für die groben und langsamen Halbleiter jener Zeit vollkommen aus. Es scheint auch mit diversen Erweiterungen und Verbesserungen das Modell zu sein, das in der Halbleiterindustrie hauptsächlich zur Simulation verwendet wird [MRS90, GKL<sup>+</sup>01, Tro01, KS96]. Grund dafür ist, dass dieses Gleichungssystem gut verstanden ist, gute, über viele Jahre gewachsene Implementierungen für dieses Modell existieren und die Komplexität der Gleichungen akzeptable Simulationszeiten zulassen.

Heutige Mikroprozessoren haben aber zum Beispiel eine Strukturgröße von 90 *nm*. Das bedeutet, dass ein Transistor als Ganzes höchstens 90 *nm* lang ist und die Länge des Gate, der für die Schaltvorgänge wichtige Bereich des Transistors, gerade einmal ungefähr 40 *nm* beträgt. Bei einem Atomdurchmesser von circa 0,24 *nm* bei Silizium oder Germanium ist die Größe eines Transistors dann etwa bei dem 200-fachen Atomdurchmesser angelangt. Die Miniaturisierung in diesem Bereich schreitet weiter fort, Strukturgrößen von 50 *nm* sind in der Entwicklung. Bei Speicherbausteinen ist die Miniaturisierung wegen der regelmäßigen Anordnung der einfachen Schaltgruppen bereits weiter fortgeschritten. Es ist leicht einzusehen, dass man bei solchen Größenordnungen bereits quantenmechanische Betrachtungen benötigt. Aber nicht nur die Größenordnungen der Schaltkreise machen eine quantenmechanische Betrachtung notwendig, sondern auch die Funktionsprinzipien mancher Halbleiter, wie zum Beispiel das einer Tunnelodiode, basieren auf quantenmechanischen Effekten. All das macht eine quantenmechanische Betrachtung in der Modellierung unumgänglich.

In [MRS90] findet man eine umfassende Beschreibung der zur Zeit bekannten Halbleitermodelle. Es existieren einige Ansätze die quantenmechanische Einflüsse in die Modellbildung integrieren. Wir wollen dabei einen möglichen Ansatz und die damit verbundenen charakteristischen Probleme betrachten.

## 1.4 Die Schrödinger-Poisson-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_x \psi_j + V \psi_j$$

beschreibt das quantenmechanische Verhalten des Teilchens  $j$ , das durch die Wellenfunktion  $\psi_j = \psi_j(x, t)$  charakterisiert wird, in einem vorgegebenen Potential  $V = V(x, t)$ . Dabei bezeichnet  $x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  jeweils einen Punkt im Raum,  $t \in \mathbb{R}$  einen Zeitpunkt,  $\hbar$  die skalierte Plancksche-Wirkungskonstante und  $m_e$  die Masse des Elektrons. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  am Punkt  $x$  aufhält, ist durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$n_j(x, t) = |\psi_j(x, t)|^2$$

gegeben. Es gilt also

$$\|\psi_j(\cdot, t)\|_{L^2} = \int |\psi_j(x, t)|^2 dx = 1.$$

Für unser Modell ist das Potential  $V$  in einem Halbleiter gerade gegeben durch das elektrische Potential  $V(x, t) = -q_e V_e(x, t)$ . Dieses wird durch die vorhandenen Ladungsträger erzeugt. Dabei tragen zum einen die im Halbleiterkristall fest eingebrachten und zum anderen die freien Ladungsträger bei. Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass das elektrische Potential durch die Poisson-Gleichung von der Ladungsverteilung abhängt. Es gilt:

$$\epsilon \Delta_x V_e = \rho,$$

wobei  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante und  $\rho$  die Ladungsdichte ist. Wir nehmen an, dass die Dielektrizitätskonstante im Simulationsgebiet konstant ist und vernachlässigen kleine Schwankungen, die durch verschiedene Dotierungen hervorgerufen werden. Die Ladungsdichte  $\rho$  ist natürlich vom Ort und hier, bei unserem Problem, auch von der Zeit abhängig. Es ist

$$\rho(x, t) = q_e(C(x) - n(x, t)),$$

wobei  $q_e$  die Elementarladung eines Elektrons und  $C(x)$  die feste Ladungsverteilung im Halbleiter, gegeben durch das Dotierungsprofil, beschreibt. Die

Ladungsdichte  $n(x, t)$  beschreibt Ladungsverteilung der freien Ladungsträger. Für diese Ladungsverteilung der freien Ladungsträger verwenden wir in unserem Modell genau die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Teilchen. Es gilt

$$n(x, t) = \sum_j n_j(x, t) = \sum_j |\psi_j(x, t)|^2.$$

Wir haben also sogar eine Abhängigkeit des Potentials  $V$  selbst von den Wellenfunktionen  $\psi_j$  und durch diese Kopplung eine nichtlineare Schrödinger-Gleichung in der Zeit.

Zusammengefasst erhalten wir also die Schrödinger-Poisson-Gleichung in der folgenden Form:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_x \psi_j - q_e V_e \psi_j, \quad (1.1)$$

$$\epsilon_s \Delta_x V_e = q_e \left( \sum_j |\psi_j|^2 - C \right). \quad (1.2)$$

Die auftretenden Konstanten und Größen sind wie folgt definiert:

$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{VAs}^2 :$	Planck-Konstante/ $2\pi$ ,
$m_e = 9.10908 \times 10^{-31} \text{kg} :$	die Masse des Elektrons,
$q_e = 1.6 \times 10^{-19} \text{As} :$	die Elementarladung,
$\epsilon_s = 11.9\epsilon_0 = 1.052 \times 10^{-14} \text{As/Vm} :$	Permittivität von Silizium,
$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-16} \text{As/Vm} :$	Permittivität im Vacuum,
$C(x) :$	Dotierungsprofil und
$V_e :$	elektrisches Potential.

Bislang haben wir uns noch nicht mit Randbedingungen für diese partiellen Differentialgleichungen beschäftigt. Betrachten wir zunächst die Poisson-Gleichung für das elektrische Potential. Den Rand eines Halbleiters

$$\partial\Omega = \partial\Omega_N \dot{\cup} \partial\Omega_D$$

kann man in zwei disjunkte Teile aufspalten. Der erste Teil ist der freie Rand  $\partial\Omega_N$ , an dem der Halbleiter an die Umgebung, zumeist an einen Kunststoff oder Luft grenzt. Der zweite Teil ist die Kontaktfläche  $\partial\Omega_D$  an dem der technisch genutzte Halbleiter angeschlossen wird. Die Kontakte sind dabei kleine Metallbeschichtungen, die auf den Halbleiter aufgebracht werden. Am

freien Rand findet kein Ladungstransport senkrecht zum Rand statt. Das bedeutet, dass das elektrische Feld in Normalenrichtung verschwinden muss. Das elektrische Feld ist aber gerade der Gradient des elektrischen Potentials  $V$ , es müssen also Neumann-Randbedingungen gelten:

$$0 = E \cdot \nu = \nabla V \cdot \nu = \frac{\partial V}{\partial \nu} \text{ auf } \partial\Omega_N.$$

An den Kontaktflächen ist der physikalische Sachverhalt etwas schwieriger. Durch die zwei verschiedenen Materialien, der Halbleiter und das aufgebrachte Metall, entsteht eine Kontaktpotentialdifferenz an deren Grenzfläche. Diese Potentialdifferenz ist aber nur von den verwendeten Materialien abhängig, ist also eine Konstante, die wir hier vernachlässigen wollen. An den Kontaktflächen wird auf Grund der von außen angelegten Spannung einfach das elektrische Potential festgehalten, was in diesem Fall Dirichet-Randbedingungen entspricht:

$$U_A(t) = V \text{ auf } \partial\Omega_D.$$

Für die Schrödinger-Gleichung würde man am besten den ganzen  $\mathbb{R}^n$  verwenden. Die simulierten Elektronen sollten sich schon auf Grund des physikalischen Modells mit größter Wahrscheinlichkeit im Simulationsgebiet  $\Omega$  aufhalten oder an den Kontaktflächen des Halbleiters das Simulationsgebiet verlassen. Trotzdem kann eine Restwahrscheinlichkeit bestehen, dass die Ladungsträger auch an den isolierten Rändern aus  $\Omega$  herausfließen. Numerische Berechnungen können aber nicht auf den ganzen  $\mathbb{R}^n$  verwenden. Man muss also Sorge dafür tragen, dass die Wellenfunktion an den Bauteilrändern nicht reflektiert wird, wie es bei reinen Dirichlet-Randbedingungen zum Beispiel der Fall wäre. Man wählt daher eine Form transparenter Randbedingungen, die an den Rändern von  $\Omega$  idealerweise keine Reflexionen der Wellenfunktion erzeugen.

## 1.5 Transformation auf dimensionslose Größen

Die Größen, die in der oben aufgeführten Formulierung auftreten sind fast ausnahmslos mit Dimensionen versehen. Desweiteren sind die Größenordnungen der Konstanten deutlich von 1 verschieden. Wegen diesen Unterschieden

in den Größenordnungen könnte es auch zu numerischen Instabilitäten kommen. Daher betrachten wir im Folgenden eine Umskalierung der Gleichungen auf dimensionlose Größen und werden damit auch Konstanten erhalten die sehr viel näher an 1 liegen.

Seien

$N$ :	typische Elektronendichte (z.B. $N = \max_{\Omega} C $ ),
$U_t = k_B T/q$ :	thermische Spannung, mit
$k_B$ :	Boltzmann-Konstante,
$T$ :	Temperatur,
$L$ :	typische Bauteillänge (z.B. $L = \text{diam}(\Omega)$ ),
$\tau = L^2 m/\hbar$ :	typische Zeiteinheit.

Dann definieren wir die dimensionslose Größen

$$\psi_s = \frac{\psi}{\sqrt{N}}, \quad C_s = \frac{C}{N}, \quad V_s = \frac{V}{U_t}, \quad t_s = \frac{t}{\tau}, \quad x_s = \frac{x}{L}.$$

Damit wird aus der ursprünglichen Gleichung

$$\begin{aligned} i\epsilon \frac{\partial}{\partial t_s} \psi_s &= -\frac{\epsilon^2}{2} \Delta_{x_s} \psi_s - V_s \psi_s, \\ \lambda \Delta_{x_s} V_s &= |\psi_s(t)|^2 - C_s, \end{aligned} \tag{1.3}$$

wobei

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{\hbar^2}{mL^2 k_B T} : && \text{skalierte Planck-Konstante,} \\ \lambda &= \frac{\epsilon_s U_T}{qNL^2} : && \text{skalierte Debye-Länge} \end{aligned}$$

ist. Die Größenordnungen dieser beiden Konstanten ist ungefähr  $2 \times 10^{-4}$  für  $\epsilon$  und  $2 \times 10^1$  für  $\lambda$ . Im Folgenden werden wir immer diesen Satz Gleichungen verwenden und den Index  $s$  an den Größen wieder weglassen.

## 1.6 Raumdiskretisierung

Durch die Wahl der Ortsdiskretisierung der partiellen Differentialgleichung können sich einige Vereinfachungen für die Zeitentwicklung ergeben. Man

findet einige Artikel, die sich mit dem so genannten Galerkin-Ansatz für die Schrödinger-Poisson-Gleichung beschäftigen. Für geeignet einfache Simulationsgebiete, wie zum Beispiel für  $\Omega = [0, 1]^3$ , und periodische Randbedingungen, lässt sich der Lösungsraum für die Schrödinger-Poisson-Gleichung durch trigonometrische Reihen darstellen. Setzt man diese Reihendarstellung in die Schrödinger-Poisson-Gleichung ein, so erhält man ein unendlichdimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Reihenkoeffizienten. Für die numerische Approximation bricht man diese Reihendarstellung ab und verwendet Standardverfahren zur Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen. Wir wollen diesen Ansatz nicht weiter verfolgen. Dennoch hier einige Referenzen zu diesem Thema: Einen Überblick über diese Zugangsweise findet man zum Beispiel in [BILZ96, LZ97, LTZ95]. Einen weiteren Zugang über Spektralmethoden, in diesem Fall zur Wigner-Poisson-Gleichung, behandelt [AR95].

## 1.7 Notationen und Vereinfachungen

Die Funktion  $\psi(\cdot, t)$  werden wir oft mit  $\psi(t)$  abkürzen. Ebenso verfahren wir mit dem Potential  $V(\psi(x, t))$  und der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $n(x, t)$ . Außerdem ist klar, dass wir mit  $\Delta$  und  $\nabla$  immer Ableitungen in der Raumrichtung  $x$  bezeichnen.

Das bislang beschriebene Modell enthält einige Details, die entweder für die analytische Betrachtung keine große Bedeutung haben, oder Randeffekte betreffen, die für die Schwierigkeit der Nichtlinearität in der Schrödinger-Gleichung eine eher untergeordnete Rolle spielen. So werden wir im Folgenden annehmen, dass wir  $H^2$ -Regularität für die Poisson-Gleichung haben. Das bedeutet aber, dass gemischte Randbedingungen, wie sie im physikalischen Modell in natürlicher Weise auftreten würden, in unseren Betrachtungen keine weitere Rolle spielen können. Wir werden im Folgenden die Randbedingungen weiter einschränken und im Verlauf der theoretischen Ausführungen immer homogene Dirichlet-Randbedingungen oder periodische Randbedingungen sowohl für die Schrödinger- als auch für die Poisson-Gleichung annehmen. Desweiteren verwenden wir in den analytischen Teilen dieser Arbeit das zeitlich konstante Dotierungsprofil und setzen die beiden übrigen Konstanten in 1.3,  $\lambda$  und  $\epsilon$  zu 1 was die folgenden Ausführungen deutlich übersichtlicher macht. Damit konzentrieren wir uns auf die wesentliche Schwierigkeit für

die Numerik der Zeitintegration, die Nichtlinearität der Schrödinger-Poisson-Gleichung.

Die Schrödinger-Poisson-Gleichung, wie wir sie hier betrachten werden, lautet damit also

$$\begin{aligned}i \frac{\partial}{\partial t} \psi &= -\Delta \psi + V \psi, \\ -\Delta V &= |\psi|^2,\end{aligned}\tag{1.4}$$

wobei  $|\psi|^2$  das punktweise Quadrat des Betrags ist.

Zunächst sammeln wir noch einige Grundlagen für die folgenden numerisch-analytischen Untersuchungen.



# Kapitel 2

## Analytische Vorbereitungen

Wir werden einige oft benötigte Beziehungen und Abschätzungen angeben.

### 2.1 Der Sobolevsche Einbettungssatz und Folgerungen

Eine sehr wichtige Eigenschaft, die von fundamentaler Bedeutung für die folgenden Abschätzungen ist, sind die Sobolevschen Ungleichungen und die daraus resultierenden stetigen Einbettungen. Im Folgenden bezeichnet  $W^{k,p}(\Omega)$  den Sobolev-Raum der Funktionen auf  $\Omega$  mit  $k$  verallgemeinerten Ableitungen in  $L^p(\Omega)$ .

#### Satz 1

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  beschränkt mit  $\partial\Omega \in C^1$ . Sei weiterhin  $u \in W^{k,p}(\Omega)$ . Es gilt dann:

- Für  $kp < n$  ist  $u \in L^{np/(n-kp)}(\Omega)$  und es gilt die Ungleichung

$$\|u\|_{L^{np/(n-kp)}} \leq C \|u\|_{W^{k,p}}$$

und damit die stetige Einbettung

$$W^{k,p}(\Omega) \subseteq L^{np/(n-kp)}(\Omega).$$

- Für  $kp > n$  und  $0 \leq m \leq k - n/p$  ist  $u \in C^m(\Omega)$  und es gilt die Ungleichung

$$\|u\|_{C^m} \leq C\|u\|_{W^{k,p}}$$

und damit die stetige Einbettung

$$W^{k,p}(\Omega) \subseteq C^m(\Omega).$$

Ein Beweis dieses Satzes findet man unter anderem in [Eva98] oder [GT83].

Wie üblich bezeichnen wir  $H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega)$ .

**Lemma 1**

Sei  $n \leq 3$  und  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  beschränkt mit  $\partial\Omega \in C^1$ . Dann ist  $H^1(\Omega) \subseteq L^4(\Omega)$  stetig und für  $u \in H^1(\Omega)$  gilt damit

$$\|u\|_{L^4} \leq C\|u\|_{H^1}.$$

**Beweis:**

Das Ergebnis folgt unmittelbar aus Satz 1. □

**Lemma 2**

Sei  $n \leq 3$ ,  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt,  $v \in H^2(\Omega)$  und  $u \in L^2(\Omega)$ . Dann ist für das punktweise Produkt  $(uv)(x) := u(x)v(x)$  auch  $uv \in L^2(\Omega)$  und es gilt

$$\|uv\|_{L^2} \leq C\|u\|_{H^2}\|v\|_{L^2}.$$

**Beweis:**

Mit der stetigen Einbettung  $H^2(\Omega) \subseteq L^\infty(\Omega)$  ist

$$\|uv\|_{L^2} \leq \|u\|_{L^\infty}\|v\|_{L^2} \leq C\|u\|_{H^2}\|v\|_{L^2}.$$

□

**Lemma 3**

Sei  $n \leq 3$ ,  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt,  $u, v \in H^2(\Omega)$ . Dann ist für das Produkt  $(\nabla u \cdot \nabla v)(x) := \nabla u(x) \cdot \nabla v(x)$  auch  $\nabla u \cdot \nabla v \in L^2(\Omega)$  und es gilt

$$\|\nabla u \cdot \nabla v\|_{L^2} \leq C \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}.$$

**Beweis:**

Die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung liefert

$$\|\nabla u \cdot \nabla v\|_{L^2} \leq \| |\nabla u|_2 |\nabla v|_2 \|_{L^2}.$$

Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung für Integrale gilt

$$\begin{aligned} \| |\nabla u|_2 |\nabla v|_2 \|_{L^2}^2 &= \int |\nabla u|_2^2 |\nabla v|_2^2 dx \\ &\leq \| |\nabla u|_2 \|_{L^2} \| |\nabla v|_2 \|_{L^2} = \| |\nabla u|_2 \|_{L^4} \| |\nabla v|_2 \|_{L^4}. \end{aligned}$$

Mit Lemma 1 erhalten wir zunächst

$$\| |\nabla u|_2 \|_{L^4} \| |\nabla v|_2 \|_{L^4} \leq C \| |\nabla u|_2 \|_{H^1} \| |\nabla v|_2 \|_{H^1}.$$

Zusammen haben wir also

$$\|\nabla u \cdot \nabla v\|_{L^2} \leq C \| |\nabla u|_2 \|_{H^1} \| |\nabla v|_2 \|_{H^1} \leq C \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}$$

und damit die Behauptung. □

**Lemma 4**

Sei  $n \leq 3$ ,  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt,  $u, v \in H^2(\Omega)$ . Dann ist für das punktweise Produkt  $(uv)(x) := u(x)v(x)$  auch  $uv \in H^2(\Omega)$  und es gilt

$$\|uv\|_{H^2} \leq C \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}.$$

**Beweis:**

Wir betrachten die zweiten partiellen Ableitungen

$$\partial_i \partial_j (uv) = (\partial_i \partial_j u)v + 2(\partial_i u)(\partial_j v) + u(\partial_i \partial_j v).$$

Die  $L^2(\Omega)$ -Norm einer solchen zweiten Ableitung lässt sich mit der Dreiecksungleichung wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned} & \|\partial_i \partial_j (uv)\|_{L^2} \\ & \leq \|\partial_i \partial_j u\|_{L^2} \|v\|_{L^\infty} + 2\|(\partial_i u)(\partial_j v)\|_{L^2} + \|u\|_{L^\infty} \|\partial_i \partial_j v\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Die zweiten Ableitungen schätzen wir nach oben mit der  $H^2(\Omega)$ -Norm und die  $L^\infty(\Omega)$ -Norm mit Hilfe der Sobolev-Ungleichung ebenfalls durch die  $H^2$ -Norm ab:

$$\|\partial_i \partial_j u\|_{L^2} \|v\|_{L^\infty} \leq C_1 \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}.$$

Für den Term mit den ersten Ableitungen verwenden wir Lemma 3

$$\|(\partial_i u)(\partial_j v)\|_{L^2} \leq C_2 \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}$$

und erhalten dann

$$\|\partial_i \partial_j (uv)\|_{L^2} \leq C_3 \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}.$$

Die in der  $H^2(\Omega)$ -Norm auftretenden ersten Ableitungen lassen sich mit der Sobolev-Ungleichung durch

$$\|\partial_i (uv)\|_{L^2} \leq \|\partial_i u\|_{L^2} \|v\|_{L^\infty} + \|u\|_{L^\infty} \|\partial_i v\|_{L^2} \leq C_4 \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}$$

abschätzen. Ebenso verfährt man mit der  $L^2(\Omega)$ -Norm der Funktionen selbst

$$\|uv\|_{L^2} \leq \|u\|_{L^2} \|v\|_{L^\infty} \leq C_5 \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}.$$

Zusammen haben wir also

$$\|uv\|_{H^2} \leq C \|u\|_{H^2} \|v\|_{H^2}$$

gezeigt und damit die Behauptung.  $\square$

## 2.2 Sobolev-Räume periodischer Funktionen

In Anwendungen betrachtet man oft den Fall periodischer Randbedingungen. Wir sammeln dazu einige Grundlagen über Sobolev-Räume von Funktionen mit periodischen Randbedingungen.

Wir betrachten jetzt als Simulationsgebiet den Einheitswürfel  $\Omega = [0, 1]^d$  für die Raumdimensionen  $d \leq 3$ . Andere rechteckige Gebiete lassen sich durch Skalierung und Translation auf dieses Gebiet zurückführen. Die Funktionen

$$e_n(x) := \exp(2\pi i n \cdot x)$$

bilden für die Multiindizes  $n \in \mathbb{Z}^d$  ein vollständiges Orthogonalsystem des Hilbertraumes  $L^2(\Omega)$ . Daher können wir jede Funktion  $f \in L^2(\Omega)$  in der Form

$$f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} c_n \exp(2\pi i n \cdot x)$$

darstellen. Wegen der Orthogonalität der Hilbertraumbasis ist die  $L^2$ -Norm gegeben durch

$$\|f\|_{L^2}^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |c_n|^2.$$

Der Raum  $L^2(\Omega)$  ist dann also wie folgt charakterisiert:

$$L^2(\Omega) = \left\{ f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} c_n \exp(2\pi i n \cdot x) \mid \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |c_n|^2 < \infty \right\}.$$

Die Ortsableitungen einer solchen Funktion lassen sich in der Reihendarstellung leicht angeben. Der Gradient ist

$$\nabla f(x) = 2\pi i \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} n c_n \exp(2\pi i n \cdot x)$$

und für die zweite Ableitung gilt

$$\Delta f(x) = -4\pi^2 \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |n|^2 c_n \exp(2\pi i n \cdot x).$$

Wie man leicht sieht, erhalten wir auch eine einfache Darstellung für die  $H^k(\Omega)$ -Halbnorm:

$$|f|_{H^k}^2 = (2\pi)^{2k} \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |n|^{2k} |c_n|^2$$

und damit auch eine Charakterisierung der Sobolev-Räume  $H^k(\Omega)$

$$H^k(\Omega) = \left\{ f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} c_n \exp(2\pi i n \cdot x) \mid \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |n|^{2k} |c_n|^2 < \infty \right\}.$$

Diese Charakterisierung und die Halbnorm gelten für alle  $k \in \mathbb{Z}$ .

## 2.3 Die Poisson-Gleichung

Wir sammeln Abschätzungen für die Lösung der Poisson-Gleichung in Abhängigkeit von den Daten.

### 2.3.1 Dirichlet-Randbedingungen

Wir betrachten die Poisson-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen. Sei  $f \in L^3$ . Dann ist eine Funktion  $u$  Lösung der Poisson-Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen, falls

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned} \tag{2.1}$$

gilt. Wir müssen hier voraussetzen, dass  $u$  mindestens in  $H^2$  liegt, um den Laplace-Operator darauf anwenden zu können. Die Randbedingungen werden in diesem Fall über eine weitere Einschränkung des Lösungsraumes erfüllt. Funktionen aus  $H_0^1$  erfüllen im Sinne des Spursatzes die gegebenen Randbedingungen. Damit erhalten wir zunächst  $H^2 \cap H_0^1$  als Lösungsraum für die Poisson-Gleichung.

Man kann die Voraussetzungen an die Lösung noch etwas abschwächen. Dazu multiplizieren wir die Poisson-Gleichung mit Testfunktionen  $v \in H_0^1$  und integrieren über das Gebiet  $\Omega$ . Nach partieller Integration des Laplace-Terms erhalten wir die Gleichung

$$a(u, v) = (f, v), \quad \text{für alle } v \in H_0^1(\Omega). \tag{2.2}$$

Dabei ist  $a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$  eine symmetrische Bilinearform und  $(u, v)$  das  $L^2$ -Skalarprodukt. Um die Bilinearform auswerten zu können genügt es nun, dass  $u \in H_0^1$  liegt. Man nennt nun  $u \in H_0^1$  eine schwache Lösung der Poisson-Gleichung, falls für alle  $v \in H_0^1$  die Gleichung (2.2) gilt. Wegen der Koerzivität der Bilinearform  $a$  auf  $H_0^1$  liefert der Satz von Lax-Milgram die eindeutige Existenz einer schwachen Lösung  $u \in H_0^1$ .

Mit Hilfe dieses Lösungsbegriffes können wir eine wichtige Regularitätseigenschaft angeben, die  $H^2$ -Regularität.

**Satz 2**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt,  $f \in L^2(\Omega)$  und  $\partial\Omega \in C^2$  oder  $\Omega$  konvex. Sei weiter  $u \in H_0^1(\Omega)$  eine schwache Lösung der Poisson-Gleichung (2.1). Dann ist  $u \in H^2(\Omega)$  und es gilt

$$\|u\|_{H^2} \leq C\|f\|_{L^2}.$$

Eine Ausführung des Beweises ist in [Bra97] zu finden.

Als unmittelbare Folgerung ergibt sich das folgende, oft verwendete Lemma:

**Lemma 5**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt und  $\partial\Omega \in C^2$  oder  $\Omega$  konvex. Dann sind in  $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  die Normen  $\|u\|_{H^2(\Omega)}$  und  $\|\Delta u\|_{L^2(\Omega)}$  zueinander äquivalent.

**2.3.2 Periodische Randbedingungen**

Die schwache Formulierung der Poisson-Gleichung im Raum der Linearformen auf  $H^1(\Omega)$  lässt sich im Fall von periodischen Randbedingungen noch einmal schwächer formulieren. Die Idee ist hierbei dieselbe wie bei der üblichen schwachen Formulierung. Die Differentialgleichung wird mit einer Testfunktion multipliziert und über das Gebiet  $\Omega$  integriert. Dann wird eine Ableitung mit Hilfe von partieller Integration auf die Testfunktion geschoben.

Im allgemeinen Kontext ist es nicht mehr möglich ein zweites Mal partiell zu integrieren und die Lösungen dann in  $L^2(\Omega)$  zu suchen. Das liegt zum einen daran, dass wir in  $L^2$  nicht mehr von Randwerten reden können, weil dort kein Spursatz mehr gilt und zum anderen werden im allgemeinen die Randterme, die bei der partiellen Integration auftreten, nicht mehr verschwinden.

Im Fall periodischer Randbedingungen kann man aber auf Grund der einfachen Reihendarstellung der Funktionen, des Laplace-Operators und dessen Inversen einfach die Lösung des Poisson-Problems angeben. Sei

$$f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^3} f_n \exp(2\pi i n \cdot x)$$

als Reihe dargestellt, dann ist die Lösung des Poisson-Problems

$$\begin{aligned}\Delta u &= f, \\ \int_{\Omega} u \, dx &= 0\end{aligned}$$

gegeben durch

$$u(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^3, n \neq 0} \frac{f_n}{|n|^2} \exp(2\pi i n \cdot x). \quad (2.3)$$

Man sieht hier

$$|u|_{H^k}^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}^3} |n|^{2k-4} |f_n|^2 = |f|_{H^{k-2}}^2,$$

das heisst, dass die  $H^k(\Omega)$ -Norm der Funktion  $u$  genau dann beschränkt bleibt, wenn die  $H^{k-2}(\Omega)$ -Halbnorm der Funktion  $f$  beschränkt ist.

Wir können also das Poisson-Problem bei periodischen Randbedingungen sozusagen beliebig schwach formulieren. Insbesondere bekommen wir Lösungen in  $L^2(\Omega)$ , falls die rechte Seite  $f \in H^{-2}(\Omega)$  liegt.

Wir haben damit und mit der Poisson-Ungleichung also folgendes Lemma bewiesen:

**Lemma 6**

Sei  $k \in \mathbb{Z}$  und  $f \in H^{k-2}(\Omega)$ , dann liegt die Lösung (2.3) der Poisson-Gleichung in  $H^k$  und es gilt

$$\|u\|_{H^k} \leq \|f\|_{H^{k-2}}.$$

Die  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung wird in den Fehlerabschätzungen eine wichtige Rolle spielen. Diese Eigenschaft ist im allgemeinen Kontext aber an einen glatten Rand und einheitliche Randbedingungen gebunden. Insbesondere können wir die  $H^2$ -Abschätzung auch in diesem Kontext für periodische Lösungen angeben.

**Korollar 1**

Sei  $f \in L^2(\Omega)$  dann ist die Lösung (2.3) der Poisson-Gleichung in  $H^2$  und es gilt

$$\|u\|_{H^2} \leq \|f\|_{L^2}.$$

## 2.4 Die Schrödinger-Gleichung

Wir wollen die exakte Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung etwas genauer betrachten und konzentrieren uns zunächst auf die freie Schrödinger-Gleichung.

### 2.4.1 Die freie Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten die freie Schrödinger-Gleichung auf einem beschränkten Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  mit Dirichlet-Randwerten:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\Delta \psi.$$

Wäre  $\Delta$  ein beschränkter Operator auf  $L^2$ , dann könnte man mit der Exponentialfunktion, definiert durch die Cauchy-Integralformel oder die Exponentialreihe, sofort die exakte Lösung dieser Differentialgleichung angeben. Für den unbeschränkten Operator  $-\Delta : H^2 \cap H_0^1 \subset L^2 \rightarrow L^2$  muss man aber anders vorgehen.

Der Satz von Stone [EN99, Kat80] liefert uns in diesem Fall, dass  $-\Delta$ , als selbstadjungierter Operator auf  $L^2$  mit dem Definitionsbereich  $D(-\Delta) = H^2 \cap H_0^1$ , eine unitäre Gruppe  $T(t)$  von Abbildungen  $T(t) : L^2 \rightarrow L^2$  erzeugt, so dass  $\psi(t) = T(t)\psi_0$  eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung zum Anfangswert  $\psi(0) = \psi_0$  ist, falls  $\psi_0 \in D(-\Delta)$ . Ist dagegen  $\psi$  nur in  $L^2$  so definiert  $T(t)\psi_0$  eine verallgemeinerte Lösung der freien Schrödinger-Gleichung. Man kann mit Hilfe des Lösungsoperators  $T(t)$  für den Laplace-Operator die Exponentialfunktion angewandt auf den Laplace-Operator durch

$$\exp(it\Delta)\psi_0 = T(t)\psi_0$$

definieren.

### 2.4.2 Die freie Schrödinger-Gleichung mit periodischen Randbedingungen

Wie wir bereits in 2.3.2 gesehen haben, können wir für den Fall periodischer Randbedingungen Funktionen aus  $L^2$  mit Hilfe einer Hilbertraumbasis darstellen. Für zeitabhängige Funktionen  $u(x, t)$  sind dann auch die Fourier-Koeffizienten  $u_n(t)$  von der Zeit abhängig. Es ist

$$u(x, t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^3} u_n(t) \exp(2\pi i n \cdot x).$$

Wieder setzen wir diese Darstellung in die Problemgleichung ein und erhalten Differentialgleichungen für die Fourier-Koeffizienten

$$i \frac{d}{dt} u_n(t) = -|n|^2 u_n(t),$$

welche durch die Funktionen

$$u_n(t) = \exp(it|n|^2) u_n(0)$$

gelöst werden.

Auch in diesem Fall kann man also einen Lösungsoperator für die freie Schrödinger-Gleichung angeben, den wir dann analog zum Fall der Dirichlet-Randbedingungen wieder als Exponentialfunktion bezeichnen.

### 2.4.3 Die Schrödinger-Gleichung mit konstantem Potential

Betrachten wir nun die Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -H\psi$$

mit  $H = -\Delta + V$ , wobei  $V : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  eine beschränkte, von der Zeit  $t$  unabhängige Funktion ist, die hier als Multiplikationsoperator aufgefasst wird. Die in den beiden vorigen Abschnitten gezeigten Techniken lassen sich auch

auf diesen Fall anwenden. Der Satz von Stone liefert wieder eine unitäre Gruppe  $T(t)$  mit deren Hilfe man den Lösungsoperator

$$\exp(-itH)\psi_0 = T_H(t)\psi_0$$

für  $\psi_0$  aus  $L^2$  definiert.

In diesem Kontext werden wir später noch häufiger folgendes Lemma benötigen:

**Lemma 7**

Seien  $H = -\Delta + V$ ,  $\tilde{H} = -\Delta + \tilde{V}$  zwei zeitlich konstante Hamiltonoperatoren und  $\phi \in H^2$ , dann gilt

$$\begin{aligned} & (\exp(-itH) - \exp(-it\tilde{H}))\phi \\ &= -i \int_0^t \exp(-i(t-s)\tilde{H})(H - \tilde{H}) \exp(-isH) ds \phi. \end{aligned}$$

**Beweis:**

Wir betrachten die Differentialgleichung

$$i\tilde{\phi}(t)' = H\tilde{\phi}(t)$$

mit dem Anfangswert

$$\tilde{\phi}(0) = \phi.$$

Dann gilt zunächst

$$\tilde{\phi}(t) = \exp(-itH)\phi.$$

Dieses Anfangswertproblem können wir aber auch umschreiben zu

$$i\tilde{\phi}(t)' = \tilde{H}\tilde{\phi}(t) + g(t),$$

wobei

$$\begin{aligned} g(t) &= (H - \tilde{H})\tilde{\phi}(t) \\ &= (H - \tilde{H})\exp(-itH)\phi \end{aligned}$$

eine nur von der Zeit  $t$  abhängige Funktion ist. In diesem Kontext haben wir aber für diese Differentialgleichung eine Lösung mittels Variation-der-Konstanten:

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}(t) &= \exp(-it\tilde{H})\phi - i \int_0^t \exp(-i(t-s)\tilde{H})g(s) ds \\ &= \exp(-it\tilde{H})\phi - i \int_0^t \exp(-i(t-s)\tilde{H})(H - \tilde{H}) \exp(-isH)\phi ds.\end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir damit also die Behauptung. □

#### 2.4.4 Die Schrödinger-Gleichung mit zeitabhängigem Potential

Wir wollen nun die Schrödinger-Gleichung mit einem zeitabhängigen Potential betrachten:

$$i\psi = -\Delta\psi + V(t)\psi.$$

Dabei soll das Potential  $V(t) \in L^\infty$  sein.

Motiviert durch die Variation-der-Konstanten Formel schreiben wir zunächst die folgende Integralgleichung

$$\psi(t) = \exp(it\Delta)\psi_0 + \int_0^t \exp(i(t-s)\Delta) V(s)\psi(s) ds, \quad (2.4)$$

wobei die Exponentialfunktion des Laplace-Operators für die jeweiligen Randbedingungen im Sinn der vorigen Abschnitte 2.4.1 und 2.4.2 definiert ist. Wegen der Voraussetzung an das Potential ist diese Gleichung mit Picard-Iteration lösbar. Eine solche Lösung nennt man dann milde Lösung der Differentialgleichung. Referenzen zu dieser Konstruktion findet man unter anderem in [EN99], [Paz82] und [Kat80].

Dadurch haben wir eine Darstellung der Lösung durch eine Variation-der-Konstanten Formel gewonnen. Diese Darstellung ist Basis für den folgenden Existenzbeweis und auch für die Fehlerschätzungen.

## 2.5 Die Schrödinger-Poisson-Gleichung

In [Cas96] wurde bereits die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Schrödinger-Poisson Gleichung in  $L^2(\mathbb{R}^3)$  gezeigt. Dort findet man auch Regularitätsergebnisse auf für  $\Omega = \mathbb{R}^3$  in der Form, dass für  $t > t_0$  die Lösung  $\psi(t)$  der Schrödinger-Poisson-Gleichung “beinahe” in  $H^2$  liegt, falls die Anfangswellenfunktion  $\psi_0$  im Unendlichen ausreichend schnell abfällt.

Im Folgenden setzen wir sehr oft voraus, dass die Lösung  $\psi(t)$  der Schrödinger-Poisson-Gleichung in  $H^2(\Omega)$  liegt. Der folgende Satz zeigt uns, dass dies für genügend kleine Zeiten eine durchaus realistische Annahme ist.

Für alle folgenden Ausführungen sollen außerdem, soweit nicht anders angegeben, die Voraussetzungen  $n \leq 3$ ,  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$  beschränkt mit  $\partial\Omega \in C^1$  gelten. Alle auftretenden Normen beziehen sich deshalb auf das Gebiet  $\Omega$ . Wir lassen daher die Angabe des Gebiets in Zukunft weg.

Wir betrachten die Gleichung

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi &= -\Delta \psi + V \psi, \\ -\Delta V &= |\psi|^2, \end{aligned} \tag{2.5}$$

mit entweder:

- (D) Dirichlet-Randbedingungen auf konvexem Gebiet  $\Omega$  oder Gebiet  $\Omega$  mit  $C^2$ -Rand
- oder
- (P) periodischen Randbedingungen.

Lösungen werden konstruiert als Lösungen der nichtlinearen Integralgleichung

$$\psi(t) = \exp(it\Delta)\psi_0 + \int_0^t \exp(i(t-s)\Delta) V(\psi(s))\psi(s) ds,$$

wobei

$$V(\psi) = -\Delta^{-1}|\psi|^2$$

die Lösung von

$$-\Delta V(\psi) = |\psi|^2$$

zu den Randbedingungen (D) beziehungsweise (P) ist.

Die Existenz solcher Lösungen in  $H^2$  wird für kleine Zeiten im folgenden Satz nachgewiesen.

**Satz 3**

Sei  $\psi_0 \in H^2 \cap H_0^1$  im Fall (D) beziehungsweise  $\psi_0 \in H^2$  im Fall (P). Zu jeder Konstanten  $K > \|\Delta\psi_0\|_{L^2}$  gibt es eine Zeit  $0 < t^* = t^*(K)$  so, dass die milde Lösung von (2.5) auf dem Intervall  $[0, t^*]$  in  $H^2$  existiert und

$$\|\Delta\psi(t)\|_{L^2} \leq K, \quad 0 \leq t \leq t^*.$$

Für den Beweis benötigen wir eine Variation eines Gronwall-Lemmas.

**Lemma 8**

Sei  $0 \leq a, b$  und  $t^* < \frac{1}{ab}$ . Sei ferner  $x : [0, t^*] \rightarrow \mathbb{R}$  stetig und es gelte

$$x(t) \leq a + b \int_0^t x(s)^2 ds \quad \text{für alle } t \in [0, t^*].$$

Dann gilt für  $t \in [0, t^*]$

$$x(t) \leq \frac{a}{1 - ab t}.$$

**Beweis:**

Sei  $0 < \epsilon < \frac{1-abt^*}{bt^*}$  und  $y_\epsilon : [0, t^*] \rightarrow \mathbb{R}$  definiert durch

$$y_\epsilon(t) := \frac{a + \epsilon}{1 - (a + \epsilon)bt}.$$

Die Funktion  $y_\epsilon(t)$  ist für  $\epsilon < \frac{1-abt^*}{bt^*}$  auf dem ganzen Intervall  $[0, t^*]$  definiert. Es gilt

$$y'_\epsilon(t) = b \left( \frac{a + \epsilon}{1 - (a + \epsilon)bt} \right)^2 = b y_\epsilon(t)^2.$$

Wir integrieren diese Gleichung und erhalten damit

$$y_\epsilon(t) = a + \epsilon + b \int_0^t y_\epsilon(s)^2 ds.$$

Offensichtlich gilt  $x(0) < y_\epsilon(0)$ . Angenommen es existiert ein  $t^* \in [0, t^*]$  mit  $x(t^*) = y_\epsilon(t^*)$ . Sei o.B.d.A.  $t^*$  das kleinste  $t^*$  mit dieser Eigenschaft. Das heißt, es ist  $x(t) \leq y_\epsilon(t)$  für alle  $t \in [0, t^*]$ . Daraus ergibt sich dann mit

$$x(t^*) \leq a + b \int_0^{t^*} x(s)^2 ds < a + \epsilon + b \int_0^{t^*} y_\epsilon(s)^2 ds = y_\epsilon(t^*)$$

ein Widerspruch. Es gilt also

$$x(t) < \frac{a + \epsilon}{1 - (a + \epsilon)bt}$$

für alle  $t \in [0, t^*]$  und alle  $\epsilon$ . Damit folgt die Behauptung.  $\square$

Mit Hilfe dieses Lemmas können wir nun den obigen Satz beweisen.

**Beweis:**

Wir wenden formal den Laplace-Operator auf die Variation-der-Konstanten Formel (2.4) an und erhalten dann

$$\begin{aligned} \Delta\psi(t_0 + h) &= \exp(hi\Delta)\Delta\psi(t_0) \\ &+ \frac{1}{i} \int_{t_0}^{t_0+h} \exp((h-s)i\Delta)\Delta[V(\psi(s))\psi(s)] ds. \end{aligned}$$

In der  $L^2$ -Norm erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \|\Delta\psi(t_0 + h)\|_{L^2} &\leq \|\exp(hi\Delta)\Delta\psi(t_0)\|_{L^2} + \int_{t_0}^{t_0+h} \|\exp((h-s)i\Delta)\Delta[V(\psi(s))\psi(s)]\|_{L^2} ds \\ &= \|\Delta\psi(t_0)\|_{L^2} + \int_{t_0}^{t_0+h} \|\Delta[V(\psi(s))\psi(s)]\|_{L^2} ds. \end{aligned}$$

Mit der Kettenregel gilt

$$\begin{aligned} \Delta[V(\psi(s))\psi(s)] &= \Delta V(\psi(s))\psi(s) + 2\nabla V(\psi(s)) \cdot \nabla\psi(s) + V(\psi(s))\Delta\psi(s). \end{aligned}$$

Wir schätzen die Normen der drei Summanden einzeln ab. Für den ersten Summanden gilt mit der Poisson-Gleichung (1.4) und (2)

$$\|\Delta V(\psi(s))\psi(s)\|_{L^2} = \|\psi(s)^2\psi(s)\|_{L^2} \quad (2.6)$$

$$\leq \|\psi(s)\|_{L^\infty} \|\psi(s)^2\|_{L^2} = \|\psi(s)\|_{L^\infty}^2. \quad (2.7)$$

Mit Hilfe des Sobolevschen Einbettungssatzes 1 erhalten wir dann

$$\|\Delta V(\psi(s))\psi(s)\|_{L^2} \leq C_1 \|\psi(s)\|_{H^2}^2.$$

Für die Abschätzung des zweiten Summanden verwenden wir zunächst die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung

$$\begin{aligned} \|\nabla V(\psi(s)) \cdot \nabla \psi(s)\|_{L^2} &\leq \|\nabla V(\psi(s))\|_{L^2} \|\nabla \psi(s)\|_{L^2} \\ &\leq \| |\nabla V(\psi(s))|_2 |\nabla \psi(s)|_2 \|_{L^2}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Mit der Hölder-Ungleichung gilt dann

$$\begin{aligned} \| |\nabla V(\psi(s))|_2 |\nabla \psi(s)|_2 \|_{L^2} &\leq \| |\nabla V(\psi(s))|_2 \|_{L^2}^{1/2} \| |\nabla \psi(s)|_2 \|_{L^2}^{1/2} \\ &= \| |\nabla V(\psi(s))|_2 \|_{L^4} \| |\nabla \psi(s)|_2 \|_{L^4}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Wir wenden nun obiges Lemma 1 an und erhalten

$$\begin{aligned} \| |\nabla V(\psi(s))|_2 \|_{L^4} \| |\nabla \psi(s)|_2 \|_{L^4} &\leq C_2 \| |\nabla V(\psi(s))|_2 \|_{H^1} \| |\nabla \psi(s)|_2 \|_{H^1} \\ &\leq C_3 \|V(\psi(s))\|_{H^2} \|\psi(s)\|_{H^2}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Unter den gegebenen Voraussetzungen haben wir die  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung und zusammen mit (2)

$$\|V(\psi(s))\|_{H^2} \|\psi(s)\|_{H^2} \leq C_4 \|\psi(s)^2\|_{L^2} \|\psi(s)\|_{H^2} = C_4 \|\psi(s)\|_{H^2}^2. \quad (2.11)$$

Für den dritten Summanden verwenden wir zunächst wieder den Sobolevschen Einbettungssatz 1. Wir erhalten damit

$$\|V(\psi(s))\Delta\psi(s)\|_{L^2} \leq \|V(\psi(s))\|_{L^\infty} \|\Delta\psi(s)\|_{L^2} \leq C_5 \|V(\psi(s))\|_{H^2} \|\Delta\psi(s)\|_{L^2}.$$

Mit der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung und (2) erhalten wir dann

$$\|V(\psi(s))\|_{H^2} \|\Delta\psi(s)\|_{L^2} \leq C_6 \|\psi(s)^2\|_{L^2} \|\psi(s)\|_{H^2} \leq C_7 \|\psi(s)\|_{H^2}^2.$$

Damit haben wir insgesamt folgende Abschätzung bewiesen

$$\|\psi(t_0 + h)\|_{H^2} \leq C_8 \|\Delta\psi(t_0 + h)\|_{L^2} \leq C_8 \|\Delta\psi(t_0)\|_{L^2} + C_9 \int_{t_0}^{t_0+h} \|\psi(s)\|_{H^2}^2 ds$$

und erhalten mit dem Gronwall-Lemma 8

$$\|\psi(t_0 + \tau)\|_{H^2} \leq \frac{C_8 \|\psi(t_0)\|_{H^2}}{1 - C_9 C_8 \|\psi(t_0)\|_{H^2} \tau}.$$

Aus dieser a-Priori Abschätzung kann man dann die Behauptung für genügend kleine Zeiten  $\tau > 0$  ableiten.  $\square$



# Kapitel 3

## Zeitintegrationsverfahren

Wir untersuchen im Folgenden einige Verfahren zur Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung:

$$\begin{aligned}i\frac{\partial}{\partial t}\psi &= -\Delta\psi + V\psi, \\ -\Delta V &= |\psi|^2,\end{aligned}\tag{3.1}$$

mit entweder

- (D) Dirichlet-Randbedingungen auf konvexem Gebiet  $\Omega$  oder Gebiet  $\Omega$  mit  $C^2$ -Rand
- oder
- (P) periodischen Randbedingungen.

Die Integrationsschemata basieren auf dem Ansatz der Exponentiellen Integratoren. Wir werden die Stabilität der Verfahren untersuchen und Fehlerabschätzungen für die Semidiskretisierung in der Zeit beweisen.

### 3.1 Exponentielles Euler-Verfahren

Ein naheliegender Ansatz eines Verfahrens zur Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung (1.1) ist das Exponentielle Euler-Verfahren. Wir werden zeigen, dass dieses Verfahren unabhängig von der Ortsdiskretisierung Ordnung eins hat. Wir werden im Folgenden den Hamilton Operator

$$H = H(\psi) = -\Delta + V(\psi)$$

als übliche Abkürzung verwenden. Die Idee des Verfahrens basiert auf der Variation-der-Konstanten Formel für den Differentialgleichungsteil umgeschrieben zu

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H(\psi(t_0))\psi(t) + [V(\psi(t)) - V(\psi(t_0))]\psi(t).$$

Die Variation-der-Konstanten Formel für diese Gleichung ist dann

$$\begin{aligned} \psi(t_n + h) &= \exp\left(\frac{h}{i} H(\psi(t_n))\right) \psi(t_n) \\ &+ \int_0^h \exp\left(\frac{h-s}{i} H(\psi(t_n))\right) \frac{1}{i} (V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))) \psi(t_n + s) ds. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Wir vernachlässigen den Integralterm und erhalten damit das folgende Verfahren zur Schrittweite  $0 < h$ :

$$\begin{aligned} -\Delta V_n &= |\psi_n|^2 \\ H_n &= -\Delta + V_n \\ \psi_{n+1} &= \exp\left(\frac{h}{i} H_n\right) \psi_n. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Die Konvergenz des Verfahrens weisen wir auf einem Zeitintervall  $[0, \bar{t}]$  nach, dessen Länge im Wesentlichen der Länge des Regularitätsintervalls  $[0, t^*]$  aus Satz 3 entspricht. Insbesondere ist  $\bar{t}$  unabhängig von der Schrittweite  $h$ . Eine Besonderheit des Beweises dieses Satzes liegt darin, dass die Glattheit der numerischen Lösung in den Beweis der stabilen Fehlerfortpflanzung eingeht.

#### Satz 4

Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung mit Randbedingungen (D) oder (P) gelte: Sei  $\psi(t) \in H^2$  für  $t \in [t_0, t^*]$ . Dann gilt für die numerische Approximation  $\psi_n$  an die exakte Lösung  $\psi(t_n)$

$$\|\psi_n - \psi(t_n)\| \leq Ch,$$

wobei die Konstante von der  $H^2$ -Norm der exakten Lösung auf dem Integrationsintervall und der  $H^1$ -Normen der numerischen Lösung abhängt, aber unabhängig von  $n$  und  $h$  mit  $nh \leq t^*$  ist.

Lemma 11 zeigt, dass auf einem von  $h$  unabhängigen Intervall die  $H^2$ -Normen und somit auch insbesondere die  $H^1$ -Normen der numerischen Lösung beschränkt bleiben.

Wir werden im folgenden mehrfach auf das folgende Lemma zurückgreifen:

**Lemma 9**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 4,  $V(\psi(t_0 + s))$  und  $V(\psi(t_0))$  die Lösungen des Poisson-Problems zu den entsprechenden Wellenfunktionen. Dann gilt für genügend kleine  $s \in \mathbb{R}$

$$\|V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))\|_{H^2} \leq C|s| \max_{\xi \in [t_0, t_0+s]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^2,$$

wobei die Konstante  $C$  unabhängig von  $s$  und  $\psi(t)$  ist.

**Beweis:**

Wegen der  $H^2$ -Regularität des Poisson-Problems können wir zunächst wie folgt abschätzen

$$\|V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))\|_{H^2} \leq C_1 \| |\psi(t_0 + s)|^2 - |\psi(t_0)|^2 \|_{L^2}.$$

Wir entwickeln  $|\psi(t_0 + s)|^2$  nach Taylor um  $t_0$

$$\| |\psi(t_0 + s)|^2 - |\psi(t_0)|^2 \|_{L^2} = \left\| \int_{\xi=0}^s \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\xi)|^2 d\xi \right\|_{L^2}.$$

Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\xi)|^2 = 2 \operatorname{Re}(\overline{\psi(\xi)} \dot{\psi}(\xi)).$$

Damit können wir nun obigen Term weiter abschätzen. Es gilt

$$\| |\psi(t_0 + s)|^2 - |\psi(t_0)|^2 \|_{L^2} \leq \int_0^s \|\overline{\psi(\xi)} \dot{\psi}(\xi)\|_{L^2} d\xi \leq \int_0^s \|\psi(\xi)\|_{L^\infty} \|\dot{\psi}(\xi)\|_{L^2} d\xi$$

und mit dem Sobolevschen Einbettungssatz dann

$$\| |\psi(t_0 + s)|^2 - |\psi(t_0)|^2 \|_{L^2} \leq \int_0^s \|\psi(\xi)\|_{H^2} \|\dot{\psi}(\xi)\|_{L^2}.$$

Somit bleibt die Zeitableitung abzuschätzen. Dazu setzen wir die Differentialgleichung ein

$$\begin{aligned} \|\dot{\psi}(\xi)\|_{L^2} &= \|H(\psi(\xi))\psi(\xi)\|_{L^2} \\ &= \left\| \frac{1}{i}(-\Delta\psi(\xi) + V(\psi(\xi))\psi(\xi)) \right\|_{L^2} \\ &\leq \underbrace{\|\Delta\psi(\xi)\|_{L^2}}_{\leq C_2\|\psi(\xi)\|_{H^2}} + \|V(\psi(\xi))\|_{L^\infty} \|\psi(\xi)\|_{L^2} \end{aligned}$$

und verwenden den Sobolevschen Einbettungssatz. Damit ergibt sich

$$C_2\|\psi(\xi)\|_{H^2} + \|V(\psi(\xi))\|_{L^\infty} \leq C_3(\|\psi(\xi)\|_{H^2} + \|V(\psi(\xi))\|_{H^2}).$$

Wieder verwenden wir die  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung und Lemma 2 und erhalten

$$\|V(\psi(\xi))\|_{H^2} \leq C_4\|\psi(\xi)\|_{L^2} \leq C_4\|\psi(\xi)\|_{H^2}.$$

Insgesamt gilt also

$$\left\| \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\xi)|^2 \right\|_{L^2} \leq C_5\|\psi(\xi)\|_{H^2}^2.$$

Mit der Dreiecksungleichung erhalten wir die Behauptung.  $\square$

Mit Hilfe dieses Lemmas können wir nun eine Aussage über den lokalen Fehler beweisen:

**Lemma 10** (*Lokaler Fehler*)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 4. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung gelten die entsprechenden Randbedingungen (D) oder (P). Sei  $\psi(t) \in H^2$  für  $0 \leq t \leq h$ . Dann gilt für den Fehler des Verfahrens nach einem Schritt

$$\|\psi_1 - \psi(t_0 + h)\|_{L^2} \leq Ch^2,$$

wobei die Konstante  $C$  von der  $H^2$ -Norm der exakten Lösung auf dem Intervall  $[t_0, t_0 + h]$  und von der  $H^2$ -Norm der numerischen Lösung abhängt.

**Beweis:**

Der Fehler nach einem Schritt des Verfahrens ist

$$\begin{aligned} & \psi_1 - \psi(t_0 + h) \\ &= \frac{1}{i} \int_0^h \exp\left(\frac{h-s}{i} H(\psi(t_0))\right) [V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))] \psi(t_0 + s) \, ds. \end{aligned}$$

Für die  $L^2$ -Norm gilt dann wegen  $\|\exp(\frac{h-s}{i} H(\psi(t_0)))\|_{L^2 \rightarrow L^2} = 1$  und  $\|\psi(t_0 + s)\|_{L^2} = 1$  die folgende Ungleichung

$$\|\psi_{n+1} - \psi(t_0 + h)\|_{L^2} \leq \int_0^h \|V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))\|_{L^\infty} \, ds.$$

Mit der Sobolev-Einbettung können wir die  $L^\infty$ - durch die  $H^2$ -Norm abschätzen und erhalten

$$\|V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))\|_{L^\infty} \leq C_1 \|V(\psi(t_0 + s)) - V(\psi(t_0))\|_{H^2}.$$

Wir verwenden jetzt Lemma 9 erhalten dann mit

$$\|\psi_1 - \psi(t_0 + h)\|_{L^2} \leq C_2 h^2$$

die Behauptung. □

Wir werden für den Beweis der Fehlerfortpflanzung Regularitätsaussagen über die numerische Lösung benötigen. Das folgende Lemma liefert ein zu Satz 3 entsprechendes Resultat für die diskrete Lösung.

**Lemma 11** (*Regularität der numerischen Lösung*)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 4. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung gelten entweder die Randbedingungen (D) oder (P). Dann gibt es zu jeder Konstanten  $K > \|\Delta\psi_0\|_{L^2}$  eine Zeit  $0 < t^* = t^*(K)$  so dass die numerische Lösung  $\psi_n$  zur Schrittweite  $h$  mit  $nh < t^*$ , berechnet mit (3.3) auf dem Intervall  $[0, t^*]$  in  $H^2$  existiert und

$$\|\Delta\psi_k\|_{L^2} \leq K, \quad 0 \leq k \leq n, \quad nh < t^*.$$

**Beweis:**

Wir führen zunächst eine weitere Differentialgleichung ein: Sei  $\phi$  die Lösung des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \phi &= -\Delta \phi + V(\psi_n) \phi, \\ \phi(t_n) &= \psi_n, \end{aligned}$$

wobei  $\psi_n$  die numerische Lösung des Exponentiellen Euler-Verfahrens zur Zeit  $t_n$  ist. Dann gilt offensichtlich für die numerische Lösung zur Zeit  $t_{n+1}$

$$\psi_{n+1} = \phi(t_n + h).$$

Wir verwenden nun dieselben Techniken wie bereits im Beweis zu Satz 3, wenden  $\Delta$  auf die Variation-der-Konstanten Formel für  $\phi$  an und erhalten

$$\Delta \phi(t_n + \tau) = \exp\left(-\frac{\tau}{i} \Delta\right) \Delta \phi(t_n) + \frac{1}{i} \int_{t_n}^{t_n + \tau} \exp\left(-\frac{\tau - s}{i} \Delta\right) \Delta [V(\psi_n) \phi(s)] ds.$$

Wir nehmen die  $L^2$ -Norm davon und erhalten dann

$$\begin{aligned} &\|\Delta \phi(t_0 + \tau)\|_{L^2} \\ &\leq \|\exp\left(-\frac{\tau}{i} \Delta\right) \Delta \phi(t_0)\|_{L^2} + \int_{t_0}^{t_0 + \tau} \|\exp\left(-\frac{\tau - s}{i} \Delta\right) \Delta [V(\psi_n) \phi(s)]\|_{L^2} ds \\ &= \|\Delta \phi(t_0)\|_{L^2} + \int_{t_0}^{t_0 + \tau} \|\Delta [V(\psi_n) \phi(s)]\|_{L^2} ds. \end{aligned}$$

Mit der Kettenregel gilt

$$\begin{aligned} &\Delta [V(\psi_n) \phi(s)] \\ &= \Delta V(\psi_n) \phi(s) + 2 \nabla V(\psi_n) \cdot \nabla \phi(s) + V(\psi_n) \Delta \phi(s). \end{aligned}$$

Wir schätzen die Normen der 3 Summanden einzeln ab. Diese Abschätzungen lassen sich hier aber im Gegensatz zu Satz 3 so durchführen, dass wir ein standard Gronwall-Lemma anwenden können. Für den ersten Summanden gilt mit der Poisson-Gleichung (1.4) und Lemma 2

$$\begin{aligned} \|\Delta V(\psi_n) \phi(s)\|_{L^2} &= \|\psi_n^2 \phi(s)\|_{L^2} \\ &\leq \|\psi_n \phi(s)\|_{L^\infty} \|\psi_n\|_{L^2} = \|\psi_n\|_{L^\infty} \|\phi(s)\|_{L^\infty}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe des Sobolevschen Einbettungssatzes 1 und Lemma 5 erhalten wir dann

$$\|\Delta V(\psi_n) \phi(s)\|_{L^2} \leq C_1 \|\psi_n\|_{H^2} \|\phi(s)\|_{H^2} \leq C_2 \|\psi_n\|_{H^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2}.$$

Für die Abschätzung des zweiten Summanden verwenden wir zunächst die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung und erhalten

$$\begin{aligned} \|\nabla V(\psi_n) \cdot \nabla \phi(s)\|_{L^2} &\leq \|\nabla V(\psi_n)\|_{L^2} \|\nabla \phi(s)\|_{L^2} \\ &\leq \| |\nabla V(\psi_n)|_2 |\nabla \phi(s)|_2 \|_{L^2}. \end{aligned}$$

Mit der Hölder-Ungleichung gilt dann

$$\begin{aligned} \| |\nabla V(\psi_n)|_2 |\nabla \phi(s)|_2 \|_{L^2} &\leq \| |\nabla V(\psi_n)|_2 \|_{L^2}^{1/2} \| |\nabla \phi(s)|_2 \|_{L^2}^{1/2} \\ &= \| |\nabla V(\psi_n)|_2 \|_{L^4} \| |\nabla \phi(s)|_2 \|_{L^4}. \end{aligned}$$

Wir wenden nun Lemma 1 an und erhalten

$$\begin{aligned} \| |\nabla V(\psi_n)|_2 \|_{L^4} \| |\nabla \phi(s)|_2 \|_{L^4} &\leq C_2 \| |\nabla V(\psi_n)|_2 \|_{H^1} \| |\nabla \phi(s)|_2 \|_{H^1} \\ &\leq C_3 \|V(\psi_n)\|_{H^2} \|\phi(s)\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Unter den Voraussetzungen haben wir die  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung und zusammen mit Lemma 2

$$\|V(\psi_n)\|_{H^2} \|\phi(s)\|_{H^2} \leq C_4 \|\psi_n\|_{L^2} \|\phi(s)\|_{H^2} = C_5 \|\psi_n\|_{H^2} \|\phi(s)\|_{H^2}.$$

Nochmal schätzen wir die  $H^2$ -Norm mit Lemma 5 ab und erhalten

$$\|\psi_n\|_{H^2} \|\phi(s)\|_{H^2} \leq C_6 \|\psi_n\|_{H^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2}.$$

Für den dritten Summanden verwenden wir zunächst wieder den Sobolev-schen Einbettungssatz. Dann gilt

$$\|V(\psi_n) \Delta \phi(s)\|_{L^2} \leq \|V(\psi_n)\|_{L^\infty} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2} \leq C_7 \|V(\psi_n)\|_{H^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2}.$$

Mit der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung und (2) erhalten wir dann

$$\|V(\psi_n)\|_{H^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2} \leq C_8 \|\psi_n\|_{L^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2} \leq C_9 \|\psi_n\|_{H^2} \|\Delta \phi(s)\|_{L^2}.$$

Damit haben wir insgesamt folgende Abschätzung bewiesen

$$\|\Delta \phi(t_n + \tau)\|_{L^2} \leq \|\Delta \phi(t_n)\|_{L^2} + C_{12} \|\psi_n\|_{H^2} \int_{t_n}^{t_n + \tau} \|\Delta \phi(s)\|_{H^2} ds$$

und erhalten mit dem standard Gronwall-Lemma

$$\|\Delta \phi(t_n + h)\|_{L^2} \leq C_{12} \|\Delta \phi(t_n)\|_{L^2} e^{C_{12}h},$$

also für die äquivalente  $H^2$ -Norm

$$\|\phi(t_n + h)\|_{H^2} \leq C_{13} \|\phi(t_n)\|_{H^2} e^{C_{14}h}.$$

Wir erhalten damit, ebenso wie im kontinuierlichen Fall, dass die numerische Lösung für genügend kleine Zeiten in  $H^2$  bleibt, wenn der Startwert  $\psi_0$  in  $H^2$  liegt. Das ist aber die Behauptung.  $\square$

Nun zur Fehlerfortpflanzung:

**Lemma 12** (*Stabilität*)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 4. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung gelten die entsprechenden Randbedingungen (D) oder (P). Sei  $\psi_{n+1}, \tilde{\psi}_{n+1}$  die numerischen Lösungen zu den Startwerten  $\psi_n, \tilde{\psi}_n \in H^1$ , berechnet mit der Schrittweite  $h$ . Dann gilt

$$\|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} \leq \left(1 + hC(\|\psi_n\|_{H^1} + \|\tilde{\psi}_n\|_{H^1})\|\psi_n\|_{H^1}\right) \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2}.$$

**Beweis:**

Sei  $\psi_{n+1}$  und  $\tilde{\psi}_{n+1}$  die numerischen Lösungen zu den Startwerten  $\psi_n$  und  $\tilde{\psi}_n$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1} &= \exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)\tilde{\psi}_n \\ &= \left(\exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right) - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)\right)\psi_n + \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)(\psi_n - \tilde{\psi}_n). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Für die  $L^2$ -Norm dieses Ausdrucks gilt also mit der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned} \|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} &\leq \left\| \exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right) - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right) \right\| \|\psi_n\|_{L^2} \\ &\quad + \left\| \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right) \right\| \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Der zweite Term ist aber wegen der  $L^2$ -Isometrieeigenschaft von  $\exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)$

$$\left\| \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right) \right\| \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2} = \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2}.$$

Bleibt also die Untersuchung des ersten Summanden. Zuerst schreiben wir die Differenz der Exponentialfunktionen mit Hilfe von Lemma 7 um. Wir

haben also

$$\begin{aligned} & (\exp(\frac{h}{i}H(\psi_n)) - \exp(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)))\psi_n \\ &= \frac{1}{i} \int_0^h \exp(\frac{(h-\theta)}{i}H(\tilde{\psi}_n))[H(\psi_n) - H(\tilde{\psi}_n)] \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n d\theta. \end{aligned}$$

Für die  $L^2$ -Norm des Integranden gilt mit  $H(\psi_n) - H(\tilde{\psi}_n) = V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)$

$$\begin{aligned} & \left\| \exp(\frac{(h-\theta)}{i}H(\tilde{\psi}_n))[H(\psi_n) - H(\tilde{\psi}_n)] \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \right\|_{L^2} \\ &= \left\| [V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)] \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Wir schätzen hier mit der Hölder-Ungleichung weiter ab und haben dann

$$\begin{aligned} & \left\| [V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)] \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \right\|_{L^2} \\ & \leq \|V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)\|_{L^4} \left\| \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \right\|_{L^4}. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Die  $L^4$ -Norm des ersten Terms lässt sich wegen Lemma 1 durch die  $H^1$ -Norm abschätzen. Weil  $V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)$  die Lösung der Poisson-Gleichung

$$-\Delta(V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)) = |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2$$

ist, können wir wie folgt abschätzen:

$$\|V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)\|_{H^1} \leq C_3 \| |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 \|_{H^{-1}}.$$

Die  $H^{-1}$ -Norm ist aber definiert durch

$$\| |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 \|_{H^{-1}} = \sup_{\eta \in H^1, \|\eta\|_{H^1}=1} \int \eta (|\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2) dx,$$

deren Betrag wir wieder mit Hilfe der Hölder-Ungleichung mit  $p = 4$  für den Exponenten bei  $\eta$  und  $q = 4/3$  beim zweiten Faktor mit

$$\int \eta (|\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2) dx \leq \|\eta\|_{L^4} \| |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 \|_{L^{\frac{4}{3}}}$$

abschätzen. Wieder ist die  $L^4$ -Norm dominiert durch die  $H^1$ -Norm von  $\eta$ , welche aber nach Voraussetzung 1 ist. Für den verbleibenden Term faktorisieren wir wie folgt

$$|\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 = (|\psi_n| + |\tilde{\psi}_n|)(|\psi_n| - |\tilde{\psi}_n|)$$

und wenden auf die Norm in der Integralschreibweise

$$\| |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 \|_{L^{\frac{4}{3}}} = \left( \int (|\psi_n| + |\tilde{\psi}_n|)^{\frac{4}{3}} (|\psi_n| - |\tilde{\psi}_n|)^{\frac{4}{3}} dx \right)^{\frac{3}{4}}$$

die Hölder-Ungleichung an. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \| |\psi_n|^2 - |\tilde{\psi}_n|^2 \|_{L^{\frac{4}{3}}} &\leq \| (|\psi_n| + |\tilde{\psi}_n|)^{\frac{4}{3}} \|_{L^{\frac{3}{4}}} \| (|\psi_n| - |\tilde{\psi}_n|)^{\frac{4}{3}} \|_{L^{\frac{3}{2}}} \\ &= \| |\psi_n| + |\tilde{\psi}_n| \|_{L^4} \| |\psi_n| - |\tilde{\psi}_n| \|_{L^2} \\ &\leq \| |\psi_n| + |\tilde{\psi}_n| \|_{L^4} \| \psi_n - \tilde{\psi}_n \|_{L^2}. \end{aligned}$$

Die  $L^4$ -Norm schätzen wir abermals mit der  $H^1$ -Norm ab. Aus dem Integral der Länge  $h$  gewinnen wir noch einen Faktor  $h$  und erhalten für die Differenz der Exponentialfunktionen

$$\| (\exp(\frac{h}{i}H(\psi_n)) - \exp(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)))\psi_n \|_{L^2} \quad (3.6)$$

$$\leq C_4 h (\| \psi_n \|_{H^1} + \| \tilde{\psi}_n \|_{H^1}) \| \psi \|_{H^1} \| \psi_n - \tilde{\psi}_n \|_{L^2}. \quad (3.7)$$

Betrachten wir nun noch den zweiten Summanden aus (3.5). Wir schätzen zunächst mit Lemma 1

$$\| \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \|_{L^4} \leq C_4 \| \exp(\frac{\theta}{i}H(\psi_n))\psi_n \|_{H^1}$$

ab. Die  $H^1$ -Norm ist äquivalent zur Energienorm

$$\| \phi \|_E = (\phi, H(\psi_n)\phi)_{L^2}.$$

Diese ist aber wegen der Energieerhaltung der Schrödinger-Gleichung bei konstantem  $H(\psi_n)$  konstant: Differenziert man diese Norm für eine Lösung  $\psi \in H^2$  der Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{d}{dt} \phi = H(\psi_n)\phi.$$

nach der Zeit, so erhält man wegen des zeitunabhängigen Hamiltonoperators

$$\frac{d}{dt} (\phi, H(\psi_n)\phi)_{L^2} = 2 \operatorname{Re} \left( \frac{d}{dt} \phi, H(\psi_n)\phi \right)_{L^2} = -2 \operatorname{Re} (iH(\psi_n)\phi, H(\psi_n)\phi)_{L^2} = 0.$$

Was die Erhaltung der Energienorm bedeutet.

Zusammengenommen haben wir damit also die Behauptung.  $\square$

Jetzt haben wir alle Bausteine um Satz 4 zu Beweisen.

**Beweis:**

Lemma 10 liefert uns die nötige Aussage über den lokalen Fehler. Die Existenz der numerischen Lösung in  $H^2$  erhalten wir aus Lemma 11, mit dessen Hilfe wir für beschränkte Zeiten die Voraussetzungen für die Fehlerfortpflanzung aus Lemma 12 erhalten. Diese Ergebnisse liefern die Aussage über die globale Fehlerschranke mit Standardmethoden, wie man sie zum Beispiel in [HNW87, S 159ff] findet. Wir erhalten damit die Behauptung des Satzes.  $\square$

Zu bemerken wäre noch, dass in diesem Resultat die Glattheit der numerischen Lösung in Form der  $H^1$ -Norm eingeht.

## 3.2 Symmetrisches Exponentielles Schema

Wir wollen nun ein symmetrisches Verfahren, basierend auf dem Exponentiellen Euler-Verfahren (3.3), vorstellen. Wir werden damit globale Ordnung 2 erreichen.

Ein naheliegender Ansatz ist, die Hamiltonfunktion im Mittelpunkt des Integrationsintervalls zu berechnen. Damit erhalten wir dann das folgende symmetrisierte Euler-Verfahren

$$\begin{aligned} -\Delta V_n &= |\psi_n|^2 \\ H_n &= -\Delta + V_n \\ \psi_{n+1} &= \exp\left(\frac{2h}{i} H_n\right) \psi_{n-1}. \end{aligned}$$

Für den Startschritt verwendet man einen Schritt des exponentielle Euler-Verfahrens aus dem vorigen Abschnitt.

**Satz 5**

Sei  $\psi(t) \in H^2$  für  $t \in [t_0, t^*]$  im Fall periodischer Randbedingungen (P) oder  $\psi(t) \in H^3 \cap H_0^1$  für  $t \in [t_0, t^*]$  im Fall Dirichlet-Randbedingungen (D). Dann

gilt für die numerische Approximation  $\psi_n$  an die exakte Lösung  $\psi(t_n)$

$$\|\psi_n - \psi(t_n)\| \leq Ch^2,$$

wobei die Konstante im Fall (P) von der  $H^2$ -Norm oder im Fall (D) von der  $H^3$ -Norm der exakten Lösung auf dem Integrationsintervall und der  $H^1$ -Normen der numerischen Lösung abhängt.

Zum Beweis des Satzes benötigen wir folgende Lemmata:

**Lemma 13**

Mit den üblichen Bezeichnungen gilt

$$\|(\exp(\frac{s}{i}H(\psi(t_n))) - I)H(\psi(t_n))^{-1}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq |s|.$$

**Beweis:**

Die Funktion  $x \rightarrow (\exp(ix) - 1)/x$  ist für  $0 \neq x \in \mathbb{R}$  durch 1 beschränkt. Dann gilt mit Hilfe des Spektralsatzes für unbeschränkte Operatoren

$$\begin{aligned} & \|(\exp(\frac{s}{i}H(\psi(t_n))) - I)H(\psi(t_n))^{-1}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \\ & \leq \max_{\xi \in \mathbb{R}} |(\exp(-is\xi) - 1)/\xi| \\ & \leq \max_{\xi \in \mathbb{R}} |(\exp(-is\xi) - 1)/(s\xi)| |s| \leq |s|. \end{aligned}$$

□

**Lemma 14**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 5. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung sollen die Randbedingungen (D) gelten. Für  $\psi \in H^3$  ist  $(\Delta\psi)^2 + \psi\Delta^2\psi \in H^{-1}$ . Daher ist das Randwertproblem

$$\begin{aligned} -\Delta V &= (\Delta\psi)^2 + \psi\Delta^2\psi, \\ V|_{\partial\Omega} &= 0 \end{aligned}$$

im schwachen Sinn wohlgestellt. Für die Lösung  $V \in H_0^1$  gilt

$$\|V\|_{H^1} \leq C\|\psi\|_{H^3}^2,$$

wobei die Konstante  $C$  unabhängig von  $\psi$  ist.

**Beweis:**

Wir verwenden den Standardansatz, um eine schwache Lösung des Randwertproblems in  $H_0^1$  zu bekommen. Sei  $\psi$  zunächst genügend glatt vorausgesetzt. Multiplikation mit der Testfunktion  $\psi$  und Integration ergibt dann

$$-(\eta, \Delta V)_{L^2} = (\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2} + (\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2}.$$

Wir suchen eine Lösung in  $H_0^1$ . Daher setzen wir für die Testfunktion  $\eta$  ebenfalls voraus, dass sie in  $H_0^1$  liegt. Partielle Integration ergibt

$$\int_{\Omega} \nabla \eta \cdot \nabla V \, dx = (\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2} + (\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2}. \quad (3.8)$$

Die Randterme verschwinden wegen der Wahl der Testfunktion. Zu zeigen ist also, dass die rechte Seite von (3.8) eine beschränkte Linearform

$$L(\eta) = (\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2} + (\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2} \quad (3.9)$$

von  $H^1$  nach  $\mathbb{C}$  ist. Dann erhalten wir wegen der Elliptizität der Bilinearform auf der linken Seite und mit dem Satz von Lax-Milgram die Existenz und Eindeutigkeit einer solchen Funktion  $V \in H^1$ .

Dazu betrachten wir die Terme auf der rechten Seite genauer. Wiederum wenden wir partielle Integration an und erhalten dann mit der Produktregel

$$\begin{aligned} (\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2} &= \int_{\Omega} \eta \psi \Delta^2 \psi \, dx \\ &= \int_{\Omega} \nabla(\eta \psi) \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx \\ &= \int_{\Omega} \psi \nabla \eta \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx + \int_{\Omega} \eta \nabla \psi \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx. \end{aligned}$$

Die Randterme verschwinden wieder wegen  $\eta|_{\partial\Omega} = 0$ . Also gilt für den Betrag

$$|(\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2}| \leq \left| \int_{\Omega} \psi \nabla \eta \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx \right| + \left| \int_{\Omega} \eta \nabla \psi \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx \right|. \quad (3.10)$$

Wir schätzen das erste Integral in (3.10) mit Hilfe der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung ab

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \psi \nabla \eta \cdot \nabla(\Delta \psi) \, dx \right| &\leq \int_{\Omega} \psi |\nabla \eta|_2 |\nabla(\Delta \psi)|_2 \, dx \\ &\leq \|\psi\|_{L^\infty} \int_{\Omega} |\nabla \eta|_2 |\nabla(\Delta \psi)|_2 \, dx \\ &\leq \|\psi\|_{L^\infty} \|\nabla \eta\|_{L^2} \|\nabla(\Delta \psi)\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Zusammen mit der Poincaré-Ungleichung und der stetigen Einbettung  $H^2 \subseteq L^\infty$  erhalten wir

$$\left| \int_{\Omega} \psi \nabla \eta \cdot \nabla (\Delta \psi) \, dx \right| \leq \|\psi\|_{H^2} \|\eta\|_{H^1} \|\psi\|_{H^3}.$$

Das zweite Integral in (3.10) kann man mit ähnlichen Argumenten durch

$$\left| \int_{\Omega} \eta \nabla \psi \cdot \nabla (\Delta \psi) \, dx \right| \leq \| |\nabla \psi|_2 \|_{L^\infty} \|\eta\|_{L^2} \| |\nabla (\Delta \psi)|_2 \|_{L^2}$$

abschätzen. Wieder mit der stetigen Einbettung und der Poincaré-Ungleichung erhalten wir

$$\left| \int_{\Omega} \eta \nabla \psi \cdot \nabla (\Delta \psi) \, dx \right| \leq \|\psi\|_{H^3} \|\eta\|_{L^2} \|\psi\|_{H^3}.$$

Um die Stetigkeit von  $L(\eta)$  zu zeigen benötigen wir noch das zweite Skalarprodukt in (3.9). Wir integrieren wieder partiell und wenden die Produktregel an:

$$\begin{aligned} (\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2} &= \int_{\Omega} \eta \Delta \psi \Delta \psi \, dx \\ &= \int_{\Omega} \nabla (\eta \Delta \psi) \nabla \psi \, dx \\ &= \int_{\Omega} \Delta \psi \nabla \eta \cdot \nabla \psi \, dx + \int_{\Omega} \eta \nabla \Delta \psi \cdot \nabla \psi \, dx. \end{aligned}$$

Die Randterme verschwinden wieder wegen  $\eta|_{\partial\Omega} = 0$ . Die beiden Integrale lassen sich mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung, der Poincaré-Ungleichung und der stetigen Einbettung abschätzen. Für das erste Integral gilt

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \Delta \psi \nabla \eta \cdot \nabla \psi \, dx \right| &\leq \left| \int_{\Omega} \Delta \psi |\nabla \eta|_2 |\nabla \psi|_2 \, dx \right| \\ &\leq \| |\nabla \psi|_2 \|_{L^\infty} \left| \int_{\Omega} \Delta \psi |\nabla \eta|_2 \, dx \right| \\ &\leq \| |\nabla \psi|_2 \|_{L^\infty} \|\Delta \psi\|_{L^2} \| |\nabla \eta|_2 \|_{L^2} \\ &\leq C \|\psi\|_{H^3} \|\psi\|_{H^2} \|\eta\|_{H^1}. \end{aligned}$$

Für das zweite Integral gilt

$$\begin{aligned}
\left| \int_{\Omega} \eta \nabla \Delta \psi \cdot \nabla \psi \, dx \right| &\leq \left| \int_{\Omega} \eta |\nabla \Delta \psi|_2 |\nabla \psi|_2 \, dx \right| \\
&\leq \|\nabla \psi\|_{L^\infty} \int_{\Omega} \eta |\nabla \Delta \psi|_2 \, dx \\
&\leq \|\nabla \psi\|_{L^\infty} \|\eta\|_{L^2} \|\nabla \Delta \psi\|_{L^2} \\
&\leq C \|\psi\|_{H^3} \|\eta\|_{L^2} \|\psi\|_{H^3}.
\end{aligned}$$

Insgesamt haben wir damit

$$|L(\eta)| \leq C \|\psi\|_{H^3}^2 \|\eta\|_{H^1}$$

bewiesen. Also ist  $L$  stetig und wir erhalten eine schwache Lösung  $V$  der Poisson-Gleichung in  $H^1$ . Außerdem erhalten wir für die  $H^{-1}$ -Norm

$$\|L\|_{H^{-1}} \leq C \|\psi\|_{H^3}^2.$$

Damit und mit der  $H^1$ -Abschätzung in [Bra97, §3] erhalten wir also

$$\|V\|_{H^1} \leq C \|\psi\|_{H^3}^2.$$

Insgesamt ergibt sich damit die Behauptung.  $\square$

Für den Fall periodischer Randbedingungen kann man bei vorigem Lemma auch mit einer schwächeren Voraussetzung auskommen. Daher noch das folgende

**Lemma 15**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie in Satz 5. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung sollen die Randbedingungen (P) gelten. Für  $\psi \in H^2$  ist  $(\Delta \psi)^2 + \psi \Delta^2 \psi \in H^{-2}$ . Daher ist das Randwertproblem

$$-\Delta V = (\Delta \psi)^2 + \psi \Delta^2 \psi$$

mit periodischen Randbedingungen im schwachen Sinn wohlgestellt. Für die Lösung  $V \in L^2$  gilt

$$\|V\|_{L^2} \leq C \|\psi\|_{H^2}^2,$$

wobei die Konstante  $C$  von  $\psi$  unabhängig ist.

**Beweis:**

Wir wollen eine schwache Formulierung des Poisson-Problems verwenden und Lösungen in  $L^2$  suchen. Sei in diesem Fall  $\eta \in H^2$ . In der Gleichung (3.8) können wir dann ein zweites Mal partiell integrieren und erhalten

$$-(\Delta\eta, V)_{L^2} = L(\eta).$$

Die Randterme verschwinden wegen den periodischen Rändern. Wie wir in (2.2) gesehen haben reicht es in diesem Kontext zu zeigen, dass  $L \in H^{-2}(\Omega)$  ist.

Wir betrachten wieder zunächst den ersten Term aus (3.9). Mit zweimaliger partieller Integration gilt

$$(\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2} = (\eta \bar{\psi}, \Delta^2 \psi)_{L^2} = (\Delta(\eta \bar{\psi}), \Delta \psi)_{L^2}.$$

Wieder verschwinden die Randterme wegen der Periodizität. Wir verwenden die Poincaré-Ungleichung

$$|(\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2}| \leq \|\Delta(\eta \bar{\psi})\|_{L^2} \|\Delta \psi\|_{L^2} \leq C_1 \|\eta \bar{\psi}\|_{H^2} \|\psi\|_{H^2}$$

und erhalten dann mit Lemma 4

$$|(\eta, \psi \Delta^2 \psi)_{L^2}| \leq C_2 \|\eta\|_{H^2} \|\psi\|_{H^2}^2.$$

Betrachten wir nun den zweiten Term aus (3.9). Es ist

$$(\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2} = (\eta \bar{\Delta \psi}, \Delta \psi)_{L^2}$$

und damit mit der Poincaré-Ungleichung

$$|(\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2}| \leq \|\eta \bar{\Delta \psi}\|_{L^2} \|\Delta \psi\|_{L^2}.$$

Wir verwenden jetzt Lemma 2 und erhalten also

$$|(\eta, (\Delta \psi)^2)_{L^2}| \leq C_3 \|\eta\|_{H^2} \|\Delta \psi\|_{L^2} \|\Delta \psi\|_{L^2} \leq C_4 \|\eta\|_{H^2} \|\psi\|_{H^2}^2.$$

Insgesamt haben wir jetzt also bewiesen, dass  $L(\eta)$  eine stetige Linearform auf  $H^2$  ist und erhalten damit, dass  $V \in L^2$ . Es gilt sogar mit Lemma 6

$$\|V\|_{L^2} \leq C \|\psi\|_{H^2}^2$$

und damit die Behauptung. □

**Lemma 16**

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie in Satz 5. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung sollen die Randbedingungen (D) gelten. Sei  $\psi(t) \in H^3$  eine Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung. Dann gilt

$$\left\| \frac{d^2}{dt^2} V(\psi(t)) \right\|_{L^2} \leq C(\|\psi(t)\|_{H^2}^3 + \|\psi(t)\|_{H^3}^2),$$

wobei die Konstante  $C$  unabhängig von  $\psi$  ist.

**Beweis:**

Zunächst betrachten wir die erste Zeitableitung des Potentials

$$-\frac{d}{dt} \Delta V(\psi(t)) = \frac{d}{dt} |\psi(t)|^2 = 2 \operatorname{Re}(\psi(t) \dot{\psi}(t)).$$

Damit erhalten wir zusammen mit dem Sobolevschen Einbettungssatz und der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung eine Abschätzung für die  $L^\infty$ -Norm

$$\left\| \frac{d}{dt} V(\psi(t)) \right\|_{L^\infty} \leq \left\| \frac{d}{dt} V(\psi(t)) \right\|_{H^2} \leq 2 \|\psi(t) \dot{\psi}(t)\|_{L^2}. \quad (3.11)$$

Für die zweite Zeitableitung erhalten wir dann

$$-\frac{d^2}{dt^2} \Delta V(\psi(t)) = \frac{d^2}{dt^2} |\psi(t)|^2 = 2 \operatorname{Re}(\dot{\psi}(t) \dot{\psi}(t) + \psi(t) \ddot{\psi}(t)).$$

Betrachten wir nun die zweite Zeitableitung von  $\psi(t)$ . Dazu differenzieren wir die Differentialgleichung ein zweites Mal und erhalten zunächst

$$\begin{aligned} i\ddot{\psi}(t) &= \frac{d}{dt} [-\Delta\psi(t) + V(\psi(t))\psi(t)] \\ &= -\Delta\dot{\psi}(t) + \frac{d}{dt} [V(\psi(t))] \psi(t) + V(\psi(t))\dot{\psi}(t). \end{aligned}$$

Wir setzen die Differentialgleichung abermals ein und erhalten

$$\begin{aligned} \ddot{\psi}(t) &= -\Delta^2\psi(t) + \Delta V(\psi(t))\psi(t) + \frac{1}{i} \frac{d}{dt} [V(\psi(t))] \psi(t) \\ &\quad + V(\psi(t))\Delta\psi(t) - V(\psi(t))^2\psi(t). \end{aligned}$$

Wir spalten  $\frac{d^2}{dt^2} V(\psi(t))$  in zwei Summanden auf. Sei  $V_1(\psi(t))$  so, dass gilt

$$-\Delta V_1(\psi(t)) = \Delta^2\psi(t) + (\Delta\psi(t))^2,$$

wobei

$$V_1(\psi(t)) = 0$$

auf  $\partial\Omega$ . Sei  $V_2(\psi(t))$  definiert durch

$$V_2(\psi(t)) = \frac{d^2}{dt^2}V(\psi(t)) - 2\operatorname{Re}(V_1(\psi(t))).$$

Damit gilt für  $V_2(\psi(t))$  die partielle Differentialgleichung

$$\begin{aligned} -\Delta V_2(\psi(t)) &= 2\operatorname{Re}\left[-\Delta\psi(t)V(\psi(t))\psi(t) - V(\psi(t))\psi(t)\Delta\psi(t)\right. \\ &\quad + V(\psi(t))\psi(t)V(\psi(t))\psi(t) + \psi(t)\Delta V(\psi(t))\psi(t) \\ &\quad + \psi(t)\frac{d}{dt}[V(\psi(t))]\psi(t) - \psi(t)V(\psi(t))\Delta\psi(t) \\ &\quad \left.+ \psi(t)V(\psi(t))^2\psi(t)\right]. \end{aligned}$$

Wir wollen nun die  $L^2$ -Norm von  $\frac{d^2}{dt^2}V(\psi(t))$  abschätzen. Für die Norm von  $V_1(\psi(t))$  haben wir in Lemma 14 gezeigt, dass sogar die  $H^1$ -Norm von  $V_1$  durch

$$\|V_1(\psi(t))\|_{L^2} \leq \|V_1(\psi(t))\|_{H^1} \leq C\|\psi(t)\|_{H^3}$$

beschränkt ist. Bleibt noch die  $L^2$ -Norm von  $V_2(\psi(t))$  abzuschätzen. Man betrachtet zuerst

$$\|\Delta\psi(t)V(\psi(t))\psi(t)\|_{L^2} \leq \|\Delta\psi(t)\|_{L^2}\|V(\psi(t))\|_{L^\infty}\|\psi(t)\|_{L^\infty}.$$

Mit der  $H^2$ -Regularität und dem Sobolevschen Einbettungssatz erhalten wir also

$$\|\Delta\psi(t)V(\psi(t))\psi(t)\|_{L^2} \leq C_1\|\psi(t)\|_{H^2}^3.$$

Analog dazu erhalten wir auch für den zweiten und sechsten Term

$$\begin{aligned} \|V(\psi(t))\psi(t)\Delta\psi(t)\|_{L^2} &\leq C_1\|\psi(t)\|_{H^2}^3, \\ \|\psi(t)V(\psi(t))\Delta\psi(t)\|_{L^2} &\leq C_1\|\psi(t)\|_{H^2}^3. \end{aligned}$$

Für den dritten Term erhalten wir mit denselben Argumenten

$$\begin{aligned} \|V(\psi(t))\psi(t)V(\psi(t))\psi(t)\|_{L^2} &\leq \|V(\psi(t))\|_{L^\infty}\|\psi(t)\|_{L^\infty}\|V(\psi(t))\|_{L^\infty}\|\psi(t)\|_{L^2} \\ &\leq C_2\|\psi(t)\|_{H^2}^3. \end{aligned}$$

Analog dazu erhalten wir für den letzten Term ebenso

$$\|\psi(t)V(\psi(t))^2\psi(t)\|_{L^2} \leq C_2\|\psi(t)\|_{H^2}^3.$$

Für den vierten Term erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned} \|\psi(t)\Delta V(\psi(t))\psi(t)\|_{L^2} &\leq \|\psi(t)\|_{L^\infty}^2\|\Delta V(\psi(t))\|_{L^2} \\ &= \|\psi(t)\|_{L^\infty}^2\|\psi(t)\|_{L^2}^2. \end{aligned}$$

Wir setzen die rechte Seite der Poisson-Gleichung ein und erhalten wieder mit der stetigen Einbettung  $H^2$  in  $L^\infty$  beziehungsweise  $L^4$

$$\|\psi(t)\Delta V(\psi(t))\psi(t)\|_{L^2} \leq \|\psi(t)\|_{H^2}^2\|\psi(t)\|_{H^2}^{1/2}.$$

Den fünften Term schätzen wir mit Hilfe der Sobolev-Einbettung und (3.11) ab:

$$\begin{aligned} \|\psi(t)\frac{d}{dt}[V(\psi(t))]\psi(t)\|_{L^2} &\leq \|\psi(t)\|_{L^\infty}\|\frac{d}{dt}[V(\psi(t))]\|_{L^\infty}\|\psi(t)\|_{L^2} \\ &\leq C_3\|\psi(t)\|_{H^2}\|\psi(t)\dot{\psi}(t)\|_{L^2} \\ &\leq C_3\|\psi(t)\|_{H^2}^2\|\dot{\psi}(t)\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Wir setzen nochmal die Differentialgleichung ein und erhalten analog zu den Argumenten im Beweis zu Lemma 9

$$\|\psi(t)\frac{d}{dt}[V(\psi(t))]\psi(t)\|_{L^2} \leq C_4\|\psi(t)\|_{H^2}^3.$$

Insgesamt erhalten wir dann mit der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung für  $V_2(\psi(t))$  die Abschätzung

$$\|V_2(\psi(t))\|_{L^2} \leq C_5\|\psi(t)\|_{H^2}^3.$$

Damit ergibt sich die Behauptung. □

### Lemma 17

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 5. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung sollen die Randbedingungen (P) gelten. Sei  $\psi(t) \in H^2(\Omega)$  eine Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung. Dann gilt

$$\left\|\frac{d^2}{dt^2}V(\psi(t))\right\|_{L^2} \leq C\|\psi(t)\|_{H^2}^3,$$

wobei die Konstante  $C$  nur von der  $H^2$ -Norm der exakten Lösung  $\psi(t)$  abhängt.

**Beweis:**

Der Beweis läuft weitgehend analog zum Beweis des vorigen Lemmas 16. Die Terme, die im Potential  $V_1(\psi)$  zusammengefasst sind, werden hier allerdings mit Lemma 15 durch

$$\|V_1(\psi(t))\|_{L^2} \leq C\|\psi(t)\|_{H^2}^2$$

abgeschätzt. Zusammen mit den Abschätzungen für  $V_2(\psi(t))$ , die ohnehin durch die  $H^2$ -Norm von  $\psi(t)$  abgeschätzt wurden, ergibt sich damit die Behauptung.  $\square$

Nun der Beweis des Satzes 5:

**Beweis:**

Wir betrachten zuerst den Defekt in einem Schritt und beginnen wieder mit der Variation-der-Konstanten Formel

$$\begin{aligned} \psi(t_n + h) &= \exp\left(\frac{h}{i}H(\psi(t_n))\right)\psi(t_n) \\ &+ \int_0^h \exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right)\frac{1}{i}(V(\psi(t_n+s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n+s) ds \end{aligned} \quad (3.12)$$

und derselben Gleichung für  $-h$

$$\begin{aligned} \psi(t_n - h) &= \exp\left(\frac{-h}{i}H(\psi(t_n))\right)\psi(t_n) \\ &+ \int_0^{-h} \exp\left(\frac{-h-s}{i}H(\psi(t_n))\right)\frac{1}{i}(V(\psi(t_n+s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n+s) ds. \end{aligned}$$

Multiplikation von links mit  $\exp(\frac{h}{i}H(\psi(t_n)))$  ergibt

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{h}{i}H(\psi(t_n))\right)\psi(t_n - h) &= \psi(t_n) \\ &+ \int_0^{-h} \exp\left(\frac{-s}{i}H(\psi(t_n))\right)\frac{1}{i}(V(\psi(t_n+s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n+s) ds. \end{aligned}$$

Wir lösen nach  $\psi(t_n)$  auf und setzen dann in (3.12) ein

$$\begin{aligned} \psi(t_n + h) &= \exp\left(\frac{2h}{i}H(\psi(t_n))\right)\psi(t_n - h) \\ &+ \int_{-h}^h \exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right)\frac{1}{i}(V(\psi(t_n+s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n+s) ds. \end{aligned}$$

Der Defekt im  $n$ -ten Schritt ist dann also gerade der Integralterm

$$\begin{aligned} d_n &= \psi(t_n + h) - \exp\left(\frac{2h}{i}H(\psi(t_n))\right)\psi(t_n - h) \\ &= \int_{-h}^h \exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right) \frac{1}{i}(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) ds. \end{aligned}$$

Wir teilen den Integralterm wie folgt in zwei Integrale auf:

$$d_n = \int_{-h}^h \left(\exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right) - I\right) \frac{1}{i}(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) ds \quad (3.13)$$

$$+ \int_{-h}^h \frac{1}{i}(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) ds. \quad (3.14)$$

Betrachten wir zunächst das erste Integral (3.13). Wir fügen hier die Identität  $H(\psi(t_n))^{-1}H(\psi(t_n))$  ein und erhalten für den Integranden

$$\begin{aligned} & \left(\exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right) - I\right)H(\psi(t_n))^{-1} \\ & \quad H(\psi(t_n))\frac{1}{i}(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) \end{aligned}$$

Nehmen wir nun die  $L^2$ -Norm, dann erhalten wir mit Lemma 13

$$\begin{aligned} & \left\| \left(\exp\left(\frac{h-s}{i}H(\psi(t_n))\right) - I\right)H(\psi(t_n))^{-1} \right\|_{L^2 \rightarrow L^2} \\ & \quad \left\| H(\psi(t_n))(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) \right\|_{L^2} \\ & \leq |h-s| \left\| H(\psi(t_n))(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) \right\|_{L^2}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Zur Abschätzung der verbleibenden  $L^2$ -Norm betrachten wir zunächst noch einmal den Ausdruck ohne Norm. Wir setzen die Definition des Hamilton-Operators ein

$$\begin{aligned} & H(\psi(t_n))[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n + s) \\ & = -\Delta[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n) \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$+ V(\psi(t_n))[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n) \quad (3.17)$$

und untersuchen die einzelnen Terme etwas genauer. Für (3.16) erhalten wir unter Verwendung der Poisson-Gleichung

$$\begin{aligned} & -\Delta[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n) \\ &= [\Delta V(\psi(t_n + s)) - \Delta V(\psi(t_n))]\psi(t_n) \\ &= [|\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2]\psi(t_n). \end{aligned}$$

Dann gilt für die  $L^2$ -Norm von (3.16)

$$\begin{aligned} & \|\Delta[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n)\|_{L^2} \\ & \leq \| [|\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2]\psi(t_n) \|_{L^2} \\ & \leq \|\psi(t_n)\|_{L^\infty} \| |\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2 \|_{L^2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Den Term (3.17) betrachten hier in der Norm und verwenden den Sobolev-schen Einbettungssatz und die  $H^2$ -Regularität des Poisson-Problems. Damit gilt dann

$$\begin{aligned} & \|V(\psi(t_n))[V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))]\psi(t_n)\|_{L^2} \\ & \leq \|V(\psi(t_n))\|_{L^\infty} \|V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))\|_{L^\infty} \|\psi(t_n)\|_{L^2} \\ & \leq C_1 \|V(\psi(t_n))\|_{H^2} \|V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n))\|_{H^2} \\ & \leq C_2 \|\psi(t_n)\|_{L^2} \| |\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2 \|_{L^2} \\ & \leq C_2 \|\psi(t_n)\|_{L^\infty} \|\psi(t_n)\|_{L^2} \| |\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2 \|_{L^2}, \end{aligned}$$

eine Abschätzung vom gleichen Typ wie zuvor für (3.18). Wir verwenden wieder den Sobolev-schen Einbettungssatz für  $\|\psi(t_n)\|_{L^\infty}$  und dann den Beweis zu Lemma 9, um  $\| |\psi(t_n + s)|^2 - |\psi(t_n)|^2 \|_{L^2}$  abzuschätzen, und erhalten für die  $L^2$ -Norm in (3.15)

$$\begin{aligned} & \|H(\psi(t_n))(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s)\|_{L^2} \\ & \leq C_3 \|\psi(t_n)\|_{H^2} |s| \max_{\xi \in [-s, s]} \|\psi(t_n + \xi)\|_{H^2}^2. \end{aligned}$$

Zusammen mit dem Integral erhalten wir also für die  $L^2$ -Norm von (3.13) die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \left\| \int_{-h}^h \left( \exp\left(\frac{h-s}{i} H(\psi(t_n))\right) - I \right) \frac{1}{i} (V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\psi(t_n + s) ds \right\| \\ & \leq C_4 h^3 \|\psi(t_n)\|_{H^2} \max_{\xi \in [-s, s]} \|\psi(t_n + \xi)\|_{H^2}^2. \end{aligned}$$

Damit haben wir gezeigt, dass (3.13) in der Größenordnung  $O(h^3)$  ist.

Betrachten wir jetzt den zweiten Term (3.14). Wieder ersetzen wir  $\psi(t_n + s)$  durch die Variation-der-Konstanten Formel (3.2) und erhalten dann

$$\begin{aligned} & \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \psi(t_n + s) ds \\ &= \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \exp\left(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))\right) \psi(t_n) ds + r_1, \end{aligned} \quad (3.19)$$

wobei der Rest durch

$$\begin{aligned} r_1 &= \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \\ & \quad \int_0^s \exp\left(\frac{s-\sigma}{i} H(\psi(t_n))\right) \frac{1}{i} (V(\psi(t_n + \sigma)) - V(\psi(t_n))) \psi(t_n + \sigma) d\sigma ds \end{aligned}$$

gegeben ist. Wir betrachten dazu zuerst die  $L^2$ -Norm des inneren Integrals

$$\begin{aligned} & \left\| \int_0^s \exp\left(\frac{s-\sigma}{i} H(\psi(t_n))\right) \frac{1}{i} (V(\psi(t_n + \sigma)) - V(\psi(t_n))) \psi(t_n + \sigma) d\sigma \right\|_{L^2} \\ & \leq \int_0^s \|V(\psi(t_n + \sigma)) - V(\psi(t_n))\|_{L^\infty} \|\psi(t_n + \sigma)\|_{L^2} d\sigma. \end{aligned}$$

Wir verwenden den Sobolevschen Einbettungssatz, wenden Lemma 9 an und erhalten dann für den Integranden

$$\begin{aligned} & \|V(\psi(t_n + \sigma)) - V(\psi(t_n))\|_{L^\infty} \|\psi(t_n + \sigma)\|_{L^2} \\ & \leq C_5 \|V(\psi(t_n + \sigma)) - V(\psi(t_n))\|_{H^2} \\ & \leq C_6 |\sigma| \max_{\xi \in [t_n - \sigma, t_n + \sigma]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^2. \end{aligned}$$

Für die  $L^2$ -Norm des Restterms  $r_1$  erhalten wir zunächst

$$\|r_1\|_{L^2} \leq C_7 \int_{-h}^h \|(V(\psi(t_n + s)) - V(\psi(t_n)))\|_{L^\infty} s^2 \max_{\xi \in [t_n - s, t_n + s]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^2 ds$$

und wieder mit Hilfe der Sobolev-Einbettung und Lemma 9

$$\|r_1\|_{L^2} \leq C_8 \max_{\xi \in [t_n - \sigma, t_n + \sigma]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^4 h^4.$$

Für die weitere Abschätzung schreiben wir das Integral in (3.19) als

$$\begin{aligned} & \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \exp\left(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))\right) \psi(t_n) ds \\ &= \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \psi(t_n) ds + r_2 \end{aligned}$$

mit

$$r_2 = \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] (\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) \psi(t_n) ds.$$

Die Norm des Restes lässt sich wieder mit dem Sobolevschen Einbettungssatz und Lemma 9 abschätzen

$$\begin{aligned} \|r_2\|_{L^2} &\leq \int_{-h}^h \|V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))\|_{L^\infty} \|(\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) \psi(t_n)\|_{L^2} ds \\ &\leq C_9 \max_{\xi \in [t_n-h, t_n+h]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^2 \int_{-h}^h |s| \|(\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) \psi(t_n)\|_{L^2} ds. \end{aligned}$$

Die Norm im Integranden schätzen wir mit Hilfe von Lemma 13 ab:

$$\begin{aligned} &\|(\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) \psi(t_n)\|_{L^2} \\ &= \|(\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) H(\psi(t_n))^{-1} H(\psi(t_n)) \psi(t_n)\|_{L^2} \\ &\leq \|(\exp(\frac{s}{i} H(\psi(t_n))) - I) H(\psi(t_n))^{-1}\|_{L^2} \|H(\psi(t_n)) \psi(t_n)\|_{L^2} \\ &\leq |s| \|H(\psi(t_n)) \psi(t_n)\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für den Rest

$$\|r_2\|_{L^2} \leq C_{10} \max_{\xi \in [t_n-h, t_n+h]} \|\psi(\xi)\|_{H^2}^2 \|\psi(t_n)\|_{H^2} h^3.$$

Im verbleibenden Integral entwickeln wir das Potential  $V(\psi(t_n + s))$  nach Taylor und erhalten zunächst

$$\begin{aligned} &\int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \psi(t_n) ds \\ &= - \int_{-h}^h s \frac{d}{dt} V(\psi(t_n)) \psi(t_n) ds \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{-h}^h \int_0^s (s - \tau) \frac{d^2}{dt^2} V(\psi(t_n + \tau)) d\tau \psi(t_n) ds. \end{aligned}$$

Das Integral über die erste Ableitung verschwindet wegen den symmetrischen Integralgrenzen. Daher gilt für die Norm

$$\begin{aligned} &\| \int_{-h}^h [V(\psi(t_n)) - V(\psi(t_n + s))] \psi(t_n) ds \|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{6} \|\psi(t_n)\|_{L^\infty} \max_{\xi \in [t_n-h, t_n+h]} \left\| \frac{d^2}{dt^2} V(\psi(\xi)) \right\|_{L^2} h^3. \end{aligned}$$

Mit Hilfe von Lemma 16 können wir dann die zweite Ableitung des Potentials durch die  $H^3$ -Norm von  $\psi$  abschätzen. Im Fall periodischer Randbedingungen reicht mit Hilfe von Lemma 17 sogar die  $H^2$ -Norm. Insgesamt haben wir damit bewiesen, dass

$$\|d_n\|_{L^2} \leq C_{11}h^3$$

gilt, wobei die Konstante  $C_{11}$  unabhängig von  $V(\psi)$  und dessen Zeitableitungen ist.

Die Abschätzung für die Fehlerfortpflanzung verläuft weitgehend analog zur Abschätzung aus dem Exponentiellen Euler-Verfahren. Seien  $\psi_{n+1}$  und  $\tilde{\psi}_{n+1}$  die numerischen Lösungen zu den Startwerten  $\psi_n, \psi_{n-1}$  beziehungsweise  $\tilde{\psi}_n, \tilde{\psi}_{n-1}$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1} &= \exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right)\psi_{n-1} - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)\tilde{\psi}_{n-1} \\ &= \left(\exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right) - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)\right)\psi_{n-1} + \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)(\psi_{n-1} - \tilde{\psi}_{n-1}). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Die Differenz der Exponentialfunktionen lässt sich wie in (3.6) durch

$$\begin{aligned} &\left\| \left(\exp\left(\frac{h}{i}H(\psi_n)\right) - \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)\right)\psi_{n-1} \right\| \\ &\leq hC_{12}(\|\psi_n\|_{H^1} + \|\tilde{\psi}_n\|_{H^1})\|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2} \end{aligned}$$

abschätzen. Ebenfalls wie zuvor gilt mit der  $L^2$ -Isometrieeigenschaft von  $\exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)$

$$\left\| \exp\left(\frac{h}{i}H(\tilde{\psi}_n)\right)(\psi_{n-1} - \tilde{\psi}_{n-1}) \right\|_{L^2} = \|\psi_{n-1} - \tilde{\psi}_{n-1}\|_{L^2}.$$

Damit haben wir insgesamt folgende Abschätzung für die Fehlerfortpflanzung bewiesen:

$$\begin{aligned} &\|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} \\ &\leq hC_{12}(\|\psi_n\|_{H^1} + \|\tilde{\psi}_n\|_{H^1})\|\psi_n\|_{H^1}\|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2} + \|\psi_{n-1} - \tilde{\psi}_{n-1}\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Für die globale Fehlerschranke verwenden wir nun Standardmethoden wie man sie zum Beispiel in [HNW87] findet. Die Regularität der numerischen

Lösung in der  $H^1$ -Norm erhalten wir wie schon zuvor beim unsymmetrischen exponentiellen Euler-Verfahren aus einer leichten Modifikation von Lemma 11. Man erhält diese, indem man für den Startwert der Differentialgleichung im Beweis  $\phi(t_n - h) = \psi_{n-1}$  wählt. Und auch hier geht diese Eigenschaft in die globale Fehlerabschätzung entscheidend mit ein. Wir erhalten damit die Behauptung des Satzes.  $\square$

### 3.3 Splitting-Verfahren

Ein weiterer Verfahrenstyp, der bei einer Schrödinger-Gleichung sehr oft verwendet wird ist der Splitting-Ansatz, den wir in diesem Abschnitt untersuchen.

Das Splitting-Verfahren lautet für unseren Fall

$$\begin{aligned}\psi_{n+1/2} &= \exp\left(\frac{hi}{2}\Delta\right)\psi_n \\ -\Delta V_{n+1/2} &= |\psi_{n+1/2}|^2 \\ \hat{\psi}_{n+1/2} &= \exp\left(\frac{h}{i}V_{n+1/2}\right)\psi_{n+1/2} \\ \psi_{n+1} &= \exp\left(\frac{hi}{2}\Delta\right)\hat{\psi}_{n+1/2}.\end{aligned}\tag{3.21}$$

Im Fall der Schrödinger-Poisson-Gleichung ist dieses Verfahren sogar symmetrisch.

Das Potential  $V(\psi)$  ist ein reellwertiger Multiplikator und als solcher verändert der Operator  $\exp(\frac{h}{i}V_{n+1/2})$  nur die Phase der Funktion  $\psi$ , nicht aber den Betrag. Es gilt also:

$$|\hat{\psi}_{n+1/2}| = \left|\exp\left(\frac{h}{i}V_{n+1/2}\right)\psi_{n+1/2}\right| = |\psi_{n+1/2}|\tag{3.22}$$

und damit folgt die Symmetrie des Verfahrens. Daraus lässt sich aber noch mehr ableiten. Das bedeutet, dass für eine Lösung der Differentialgleichung

$$i\frac{d}{dt}\phi = V(\phi)\phi$$

das Potential  $V(\phi)$  konstant bleibt, also

$$\phi(t+h) = \exp\left(\frac{h}{i}V(\phi(t))\right)\phi(t)$$

die obige Differentialgleichung für  $\phi$  sogar exakt löst.

Für unser Splitting-Verfahren heisst das aber, dass es ein Splitting in zwei exakte Lösungsflüsse ist. Der Fehler, der beim Berechnen des Verfahrens entsteht, also nur durch das Splitting des Hamilton-Operators in die beiden Anteile.

Wir werden nun die folgende Aussage über den globalen Fehler des Splitting-Verfahrens beweisen.

**Satz 6**

*Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung mit Randbedingungen (D) oder (P) gelte: Sei  $\psi(t) \in H^2$  für  $t \in [t_0, t^*]$ . Dann gilt für die numerische Approximation  $\psi_n$  an die exakte Lösung  $\psi(t_n)$*

$$\|\psi_n - \psi(t_n)\| \leq Ch,$$

*wobei die Konstante von der  $H^2$ -Norm der exakten Lösung auf dem Integrationsintervall und der  $H^1$ -Norm der numerischen Lösung abhängt, aber unabhängig von  $n$  und  $h$  mit  $nh \leq t^*$  ist.*

Eine Verbindung der im folgenden Beweis entwickelten Techniken mit denen aus [JL00, Lub04] würde es ermöglichen, unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen Fehlerschranken zweiter Ordnung zu erhalten. Wegen des erheblichen technischen Aufwands wird dies hier aber nicht im Detail durchgeführt.

Um die Fehlerschranken der Semidiskretisierung des Splitting-Verfahrens zu untersuchen, linearisieren wir die exakte Lösung sowie das Verfahren selbst mit Hilfe der Lie-Ableitungen. Die dann verwendeten Techniken bauen auf [Lub04] und [JL00] auf. Im nächsten Abschnitt sammeln wir daher einige Grundlagen und Eigenschaften der Lie-Ableitungen. Als gute Referenz zu diesem Thema hat sich [HLW02] erwiesen.

### 3.3.1 Lie-Ableitungen

Sei  $X$  ein Banachraum und  $F : D(F) \subseteq X \rightarrow X$ . Dann ist mit der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt}u(t) = F(u(t))$$

durch die Lösung zum Anfangswert  $u_0 = u(t_0)$  der Lösungsfluss

$$\varphi_F^t(u_0) = u(t)$$

definiert. Der Lie-Differentialoperator  $D_F$  angewandt auf einen Operator  $G$  ist dann definiert durch

$$D_F G(u) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} G(\varphi_F^t(u)). \quad (3.23)$$

Dieser Ausdruck ist definiert für Gateaux-differenzierbare Funktionen  $G$ . Für Frechet-differenzierbares  $G$  wird dies zu

$$D_F G(u) = G'(u)F(u).$$

Desweiteren definieren wir zunächst durch

$$(\exp(tD_F)G)(u) = G(\varphi_F^t(u)) \quad (3.24)$$

die Exponentialfunktion auf einem Lie-Differentialoperator  $D_F$ .

Wir werden den Vertauschungssatz benötigen:

**Lemma 18** (*Vertauschungssatz*)

Seien  $\varphi_F^t$  und  $\varphi_G^t$  die Lösungsflüsse zu  $u' = F(u)$  und  $u' = G(u)$ . Dann gilt

$$(\varphi_F^t \circ \varphi_G^s)(u) = \exp(sD_G) \exp(tD_F)I(u).$$

**Beweis:**

Der Beweis ergibt sich unmittelbar durch zweimalige Anwendung der Definition (3.24).  $\square$

Der Lie-Exponentialoperator lässt sich wie gewohnt nach einem reellen Parameter ableiten. Folgendes Lemma zeigt dies:

**Lemma 19**

Sei  $F : X \rightarrow X$ ,  $h \in \mathbb{R}$ , so ist die Exponentialfunktion nach  $t$  differenzierbar und es gilt

$$\frac{d}{dt} \exp(tD_F) = D_F \exp(tD_F) = \exp(tD_F) D_F.$$

**Beweis:**

Wir führen die Ausdrücke auf die ursprüngliche Bedeutung zurück. Sei  $G : X \rightarrow X$  und  $u \in X$ . Dann ist nach Definition

$$\frac{d}{dt} (\exp(tD_F)G)(u) = \frac{d}{dt} (G \circ \varphi_F^t)(u).$$

Ebenso gilt nach Definition

$$(D_F \exp(hD_F)G)(u) = (D_F(G \circ \varphi_F^h))(u).$$

Weiters ist nach Definition der Lie-Ableitung

$$(D_F(G \circ \varphi_F^h))(u) = \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (G \circ \varphi_F^h \circ \varphi_F^\tau)(u). \quad (3.25)$$

Wir können die beiden Lösungsflüsse zusammenfassen und erhalten mit

$$\left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (G \circ \varphi_F^t \circ \varphi_F^\tau)(u) = \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=t} (G \circ \varphi_F^\tau)(u) = \frac{d}{dt} (G \circ \varphi_F^t)(u)$$

den ersten Teil der Gleichung.

Setzen wir wieder bei (3.25) an und vertauschen die beiden Lösungsflüsse zur selben Differentialgleichung, so ist

$$\left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (G \circ \varphi_F^h \circ \varphi_F^\tau)(u) = \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (G \circ \varphi_F^\tau \circ \varphi_F^h)(u).$$

Damit erhalten wir mit den Definitionen (3.24) und (3.23) wieder

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (G \circ \varphi_F^\tau \circ \varphi_F^h)(u) &= \left. \frac{d}{d\tau} \right|_{\tau=0} (\exp(hD_F)(G \circ \varphi_F^\tau))(u) \\ &= (\exp(hD_F)D_F G)(u). \end{aligned}$$

Also auch den zweiten Teil der Gleichung. □

Der Kommutator zweier Vektorfelder ist definiert durch

$$[F, G] = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} (F(\varphi_G^t) - G(\varphi_F^t)). \quad (3.26)$$

Falls  $F$  und  $G$  Frechet-differenzierbar sind, ist diese Definition äquivalent zu

$$[F, G] = F'G - G'F.$$

Die Lie-Klammer zweier Lie-Differentialoperatoren ist definiert durch

$$[D_F, D_G] := D_FD_G - D_GD_F.$$

Die Lie-Klammer kann mit dem Kommutator in Verbindung gesetzt werden, es gilt folgendes Lemma:

**Lemma 20**

Seien  $F, G : X \rightarrow X$  Frechet-differenzierbar, dann gilt

$$[D_F, D_G] = D_{[G, F]}.$$

**Beweis:**

Sei  $H : X \rightarrow X$  zwei mal Frechet-Differenzierbar. Es gilt

$$D_FD_GH = D_F(H'G) = H''(F, G) + H'G'F.$$

Bildet man damit und mit vertauschten  $G$  und  $F$  nun den Kommutator, so fallen die Terme zweiter Ordnung weg. Es ist

$$[D_F, D_G]H = H'G'F - H'F'G.$$

Für die Lie-Ableitung des Kommutators gilt

$$D_{[G, F]}H = H'[G, F] = H'G'F - H'F'G$$

und damit die Behauptung. □

Nun haben wir das Rüstzeug um die Fehler des Splitting-Verfahrens zu untersuchen.

### 3.3.2 Fehlerabschätzung

Wir definieren zunächst die folgenden drei Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\psi_T(t) &= \hat{T}(\psi_T(t)) = -\frac{1}{i}\Delta\psi_T(t), \\ \frac{d}{dt}\psi_V(t) &= \hat{V}(\psi_V(t)) = \frac{1}{i}V(\psi_V(t))\psi_V(t) \quad \text{und} \\ \frac{d}{dt}\psi_H(t) &= \hat{H}(\psi_H(t)) = \frac{1}{i}(-\Delta\psi_H(t) + V(\psi_H(t))\psi_H(t))\end{aligned}$$

mit den zugehörigen Ladungsflüssen  $\varphi_H^t(\psi)$ ,  $\varphi_V^t(\psi)$  und  $\varphi_H^t(\psi)$ . Wir werden des öfteren folgende Lemmata verwenden.

**Lemma 21**

Sei  $\psi \in H^2$  mit  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ , dann gilt für die Norm

$$\|\hat{V}(\psi)\|_{H^2} \leq C\|\psi\|_{H^2}^2$$

mit einer von  $\psi$  unabhängigen Konstanten  $C$ .

**Beweis:**

Nach Definition von  $\hat{V}$  haben wir

$$\|\hat{V}(\psi)\|_{H^2} = \|V(\psi)\psi\|_{H^2}.$$

Aus Lemma 4 wissen wir, dass das Produkt zweier  $H^2$ -Funktionen wieder in  $H^2$  liegt:

$$\|V(\psi)\psi\|_{H^2} \leq C_1\|V(\psi)\|_{H^2}\|\psi\|_{H^2}.$$

Zusammen mit der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung, deren Lösung  $V(\psi)$  ist, haben wir dann

$$\|V(\psi)\psi\|_{H^2} \leq C_2\|\psi^2\|_{L^2}\|\psi\|_{H^2}$$

und mit Lemma 2 gilt

$$\|\psi^2\|_{L^2} \leq C_3\|\psi\|_{H^2}.$$

Zusammen haben wir also die Behauptung. □

**Lemma 22**

Sei  $\psi \in H^2$  und  $0 \leq \tau$ , dann gilt für die Norm

$$\|\Delta\varphi_T^\tau(\psi)\|_{L^2} \leq \|\Delta\psi\|_{L^2}.$$

**Beweis:**

Wir setzen den Fluss ein und erhalten

$$\|\Delta\varphi_T^\tau(\psi)\|_{L^2} = \|\Delta \exp(\frac{\tau}{i}\Delta)\psi\|_{L^2}.$$

Der Laplace-Operator kommutiert aber mit der Exponentialfunktion des Laplace-Operators. Es gilt also

$$\|\Delta \exp(\frac{\tau}{i}\Delta)\psi\|_{L^2} \leq \|\exp(\frac{\tau}{i}\Delta)\Delta\psi\|_{L^2}.$$

Jetzt greift wieder die  $L^2$ -Normerhaltung und wir haben

$$\|\exp(\frac{\tau}{i}\Delta)\Delta\psi(t_0)\|_{L^2} \leq \|\Delta\psi(t_0)\|_{L^2}$$

und damit die Behauptung. □

Ein wichtiger Baustein zum Beweis der Fehlerschranken ist eine Abschätzung für den Kommutator der beiden Operatoren. Dieser liefert folgendes Lemma:

**Lemma 23** (Kommutatorabschätzung)

Sei  $\psi \in H^2$  dann gilt für die  $L^2$ -Norm des ersten Kommutators

$$\|[\hat{T}, \hat{V}](\psi)\|_{L^2} \leq C\|\psi\|_{H^2}$$

mit einer von  $\psi$  unabhängigen Konstante.

**Beweis:**

Wir setzen zunächst die Definition des Kommutators (3.26) ein, es ist

$$[\hat{T}, \hat{V}] = \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{T}(\varphi_V^t) - \hat{V}(\varphi_T^t).$$

Ausgewertet an einem  $\psi \in H^2$  haben wir für

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{T}(\varphi_V^t)(\psi) &= \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} i\Delta(\exp(\frac{t}{i}V(\psi))\psi) \\ &= i\Delta\left(\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \exp(\frac{t}{i}V(\psi))\psi\right) = \Delta(V(\psi)\psi). \end{aligned}$$

Mit der Produktregel ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{T}(\varphi_V^t)(\psi) = \Delta V(\psi)\psi + 2\nabla V(\psi) \cdot \nabla\psi + V(\psi)\Delta\psi.$$

Für den zweiten Term setzen wir zunächst die Definitionen ein

$$\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{V}(\varphi_T^t)(\psi) = i \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \Delta^{-1}(|\varphi_T^t(\psi)|^2)\varphi_T^t(\psi)$$

und erhalten dann mit der Produktregel

$$\frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{V}(\varphi_T^t)(\psi) = i\Delta^{-1}\left(\frac{d}{dt}|\varphi_T^t(\psi)|^2\right)\varphi_T^t(\psi) + i\Delta^{-1}(|\varphi_T^t(\psi)|^2)\frac{d}{dt}\varphi_T^t(\psi) \Big|_{t=0}.$$

Der erste der beiden Summanden ist

$$i\Delta^{-1}\left(\frac{d}{dt}|\varphi_T^t(\psi)|^2\right)\varphi_T^t(\psi) = i\Delta^{-1}(2\operatorname{Re}\varphi_T^t(\psi)\frac{d}{dt}\overline{\varphi_T^t(\psi)})\varphi_T^t(\psi),$$

ausgewertet an  $t = 0$

$$i\Delta^{-1}\left(\frac{d}{dt}|\varphi_T^t(\psi)|^2\right)\varphi_T^t(\psi) \Big|_{t=0} = i\Delta^{-1}(2\operatorname{Re}\psi i\Delta\bar{\psi})\psi.$$

Der zweite Summand ausgewertet an  $t = 0$  ist

$$i\Delta^{-1}(|\varphi_T^t(\psi)|^2)\frac{d}{dt}\varphi_T^t(\psi) \Big|_{t=0} = i\Delta^{-1}(|\psi|^2)i\Delta\psi = V(\psi)\Delta\psi.$$

Beim Zusammensetzen der Terme fallen die beiden  $V(\psi)\Delta\psi$ -Terme weg. Wir erhalten also für den Kommutator

$$[\hat{T}, \hat{V}] = \Delta V(\psi)\psi + 2\nabla V(\psi) \cdot \nabla\psi - \Delta^{-1}(2\operatorname{Re}\psi i\Delta\bar{\psi})\psi.$$

Wir benötigen nun die  $L^2$ -Norm des Kommutators und betrachten den ersten Term. Ebenso wie in (2.6) im Beweis zu Satz 3 gilt

$$\|\Delta V(\psi)\psi\|_{L^2} = \|\psi^2\psi\|_{L^2} \leq \|\psi\|_{L^\infty}^2 \|\psi\|_{L^2} \leq C_1 \|\psi\|_{H^2}^2.$$

Den zweiten Term haben wir ebenfalls bereits im Beweis zu Satz 3 abgeschätzt. Mit (2.8) bis (2.11) gilt

$$\|\nabla V(\psi) \cdot \nabla \psi\|_{L^2} \leq C_2 \|\psi\|_{H^2}^2.$$

Für den dritten Term haben wir

$$\begin{aligned} \|(\Delta^{-1}\psi)\psi\Delta\psi\|_{L^2} &\leq \|(\Delta^{-1}\psi)\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^\infty} \|\Delta\psi\|_{L^2} \\ &\leq C_3 \|(\Delta^{-1}\psi)\|_{H^2} \|\psi\|_{H^2}^2 \\ &\leq C_4 \|\psi\|_{L^2} \|\psi\|_{H^2}^2 \\ &\leq C_4 \|\psi\|_{H^2}^2. \end{aligned}$$

Insgesamt gilt also für die  $L^2$ -Norm des ersten Kommutators

$$\|[\hat{T}, \hat{V}](\psi)\|_{L^2} \leq C_7 \|\psi\|_{H^2}^2$$

und damit die Behauptung.  $\square$

**Lemma 24** (*Lokaler Fehler*)

Sei die Lösung  $\psi(t) \in H^2$  für  $t \in [t_0, t_0 + h]$  und gelte für die  $L^2$ -Norm der Kommutatoren

$$\|[\hat{T}, \hat{V}](\psi)\|_{L^2} \leq C \|\psi\|_{H^2}.$$

Dann haben wir für die numerische Approximation  $\psi_1$  durch einen Schritt des Splitting-Verfahrens (3.21) an die exakte Lösung  $\psi(t_1)$

$$\|\psi_1 - \psi(t_1)\| \leq Ch^2.$$

**Beweis:**

Zuerst formulieren wir die exakte Lösung mit Hilfe der Lie-Operatoren und verwenden die Darstellung durch die Variation-der-Konstanten Formel (2.4), die wir hier zur besseren Übersicht noch einmal angeben:

$$\psi(t_0 + h) = \exp\left(-\frac{h}{i}\Delta\right)\psi(t_0) + \int_0^h \exp\left(-\frac{h-s}{i}\Delta\right)\frac{1}{i}V(\psi(t_0 + s))\psi(t_0 + s) ds.$$

In der Darstellung der Lie-Operatoren ist der erste Term

$$\exp\left(-\frac{h}{i}\Delta\right)\psi(t_0) = \varphi_T^h(\psi(t_0)) = \exp(hD_T)I(\psi(t_0)).$$

Den Integralterm schauen wir uns etwas genauer an: Wir formulieren die Ausdrücke als Lösungsflüsse der entsprechenden Differentialgleichungen und erhalten

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{h-s}{i}\Delta\right)\frac{1}{i}V(\psi(t_0+s))\psi(t_0+s) \\ &= \exp\left(-\frac{h-s}{i}\Delta\right)\frac{1}{i}V(\varphi_H^s(\psi(t_0)))\varphi_H^s(\psi(t_0)) \\ &= (\varphi_T^{h-s})'(\hat{V} \circ \varphi_H^s)(\psi(t_0)). \end{aligned}$$

Wir wollen nun sehen, wie wir dies im Lie-Kontext darstellen können. Nach (3.24) gilt

$$(\varphi_T^{h-s})'(\hat{V} \circ \varphi_H^s)(\psi(t_0)) = (\exp(sD_H)((\varphi_T^{h-s})'\hat{V}))(\psi(t_0)).$$

Für das verbleibende Vektorfeld  $(\varphi_T^{h-s})'\hat{V}$  haben wir dann mit (3.23)

$$(\varphi_T^{h-s})'\hat{V}(\psi(t_0)) = (D_V\varphi_T^{h-s})(\psi(t_0)).$$

Wie schon zuvor ist dann für den Lösungsfluss

$$\varphi_T^{h-s}(\psi(t_0)) = (\exp((h-s)D_T)I)(\psi(t_0)).$$

Insgesamt haben wir für den Ausdruck im Integral

$$(\varphi_T^{h-s})'(\hat{V} \circ \varphi_H^s)(\psi(t_0)) = (\exp(sD_T)D_V \exp((h-s)D_T)I)(\psi(t_0)).$$

Mit einer Variablentransformation  $s \rightarrow h-s$  lautet die Variation-der-Konstanten Formel in dieser Notation

$$\begin{aligned} \psi(t_0+h) &= \exp(hD_H)I(\psi(t_0)) \\ &= \exp(hD_T)I(\psi(t_0)) + \int_0^h \exp((h-s)D_H)D_V \exp(sD_T)I(\psi(t_0)) ds. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Setzt man für  $\exp(hD_H)$  nochmal die Variation-der-Konstanten Formel ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \psi(t_0+h) &= \exp(hD_T)I(\psi(t_0)) \\ &+ \int_0^h \exp((h-s)D_T)D_V \exp(sD_T)I(\psi(t_0)) ds + R_1(\psi(t_0)), \end{aligned}$$

wobei der Rest zunächst

$$R_1(\psi(t_0)) = \int_0^h \int_0^{h-s} g(s, \sigma) d\sigma ds$$

mit

$$g(s, \sigma) = (\exp((h - s - \sigma)D_H)D_V \exp(\sigma D_T)D_V \exp(sD_T)I)(\psi(t_0)) \quad (3.28)$$

ist.

Bevor wir das numerische Verfahren in diesen Kontext übersetzen, wollen wir zuerst noch die Exponentialfunktion des Potentials durch eine Potenzreihe ersetzen. Wir haben

$$\exp\left(\frac{h}{i}V(\psi)\right) = I + \frac{h}{i}V(\psi) + \int_0^t (t - \tau)\left(\frac{1}{i}V(\psi)\right)^2 d\tau.$$

Eingesetzt in das Splitting-Verfahren ist also

$$\psi_1 = \exp\left(-\frac{h}{i}\Delta\right)\psi_0 + \exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\frac{h}{i}V\left(\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0\right)\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0 + R_2(\psi_0), \quad (3.29)$$

wobei

$$R_2(\psi_0) = \exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\int_0^t (t - \tau)\left(\frac{1}{i}V\left(\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0\right)\right)^2 d\tau \exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0.$$

Wir wollen nun die führenden Terme aus (3.29) in den Kontext der Lie-Ableitungen übersetzen. Für den ersten Summanden wissen wir bereits

$$\exp\left(-\frac{h}{i}\Delta\right)\psi_0 = \exp(hD_T)I(\psi_0).$$

Der zweite Summand ist

$$\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\frac{h}{i}V\left(\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0\right)\exp\left(-\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_0 = h(\varphi_T^{\frac{h}{2}})'(\hat{V} \circ \varphi_T^{\frac{h}{2}})(\psi_0),$$

das ist aber analog zu den vorigen Betrachtungen

$$(\varphi_T^{\frac{h}{2}})'(\hat{V} \circ \varphi_T^{\frac{h}{2}})(\psi_0) = \exp\left(\frac{1}{2}hD_T\right)D_V \exp\left(\frac{1}{2}hD_T\right)I(\psi_0).$$

Betrachten wir nun den Fehler des numerischen Verfahrens nach einem Schritt. Es ist

$$\psi_1 - \psi(t_0 + h) = R_2(\psi_0) - R_1(\psi(t_0)) + R_3(\psi_0),$$

wobei

$$\begin{aligned} R_3(\psi_0) &= h \exp\left(\frac{1}{2}hD_T\right)D_V \exp\left(\frac{1}{2}hD_T\right)I(\psi_0) \\ &\quad - \int_0^h \exp((h-s)D_T)D_V \exp(sD_T)I(\psi_0) ds \end{aligned} \quad (3.30)$$

ist. Das ist aber gerade der Quadraturfehler der Mittelpunktsregel auf dem Intervall  $[0, h]$  angewandt auf die Funktion

$$f(s) = \exp((h-s)D_T)D_V \exp(sD_T)I(\psi_0).$$

Wir können diesen Quadraturfehler mit Hilfe des Peano-Kerns

$$hf\left(\frac{1}{2}h\right) - \int_0^h f(s) ds = h^2 \int_0^1 K_1(s)f'(sh) ds \quad (3.31)$$

darstellen. Wir benötigen also die Ableitungen der Funktion  $f$ . Wie wir in Lemma 19 gesehen haben, können wir den Lie-Exponentialoperator wie gewohnt nach der Zeit  $t$  ableiten. Die erste Ableitung ist mit der Produktregel

$$\begin{aligned} f'(s) &= (\exp((h-s)D_T)D_V D_T \exp(sD_T)I \\ &\quad - D_T \exp((h-s)D_T)D_V \exp(sD_T)I)(\psi_0) \\ &= -\exp((h-s)D_T)[D_T, D_V] \exp(sD_T)I(\psi_0) \end{aligned}$$

und mit Gleichung (20) haben wir

$$f'(s) = \exp((h-s)D_T)D_{[\hat{X}, \hat{V}]} \exp(sD_T)I(\psi_0).$$

Nun schätzen wir die Restterme der Reihe nach ab. Den ersten Restterm

$$R_1(\psi_0) = (\exp((h-s-\sigma)D_H)D_V \exp(\sigma D_T)D_V \exp(sD_T)I)(\psi_0)$$

müssen wir zuerst wieder in die klassische Schreibweise zurückführen. Für den letzten Teil des Ausdrucks verläuft dies analog zu den vorigen Überlegungen, es ist

$$(\exp(\sigma D_T)D_V \exp(sD_T)I)(\psi(t_0)) = (\varphi_T^s)' \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma. \quad (3.32)$$

Um die Lie-Ableitung  $D_V$  zu bestimmen setzen wir zunächst die Definition (3.23) ein und werten an einem  $u \in H^2$  aus:

$$(D_V \exp(\sigma D_T)D_V \exp(sD_T)I)(u) = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} (\varphi_T^s)' \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma \circ \varphi_V^t(u).$$

Die Differentiation nach  $t$  kommutiert mit dem von  $t$  unabhängigen linearen Operator  $(\varphi_T^s)'$ . Betrachten wir also im Weiteren

$$\frac{d}{dt} \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma \circ \varphi_V^t(u)$$

und setzen die entsprechenden Definitionen ein. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma \circ \varphi_V^t(u) &= \frac{d}{dt} \left( (-\Delta^{-1} | \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u|^2) \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u \right). \end{aligned}$$

Die Differentiation nach  $t$  ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma \circ \varphi_V^t(u) &= (-\Delta^{-1} \frac{d}{dt} | \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u|^2) \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u \\ &\quad + (-\Delta^{-1} | \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u|^2) \frac{d}{dt} (\exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u). \end{aligned}$$

Für die Zeitableitung im ersten Term haben wir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} | \exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u &= 2 \operatorname{Re}(\exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u \overline{\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u)) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u}) \end{aligned}$$

und für diese im zweiten gilt

$$\frac{d}{dt} (\exp(\sigma i \Delta) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u) = (\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u)) \exp(\frac{t}{i} V(u)) u).$$

Wir setzen die Resultate wieder zusammen und werten die Terme bei  $t = 0$  aus. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Big|_{t=0} \hat{V} \circ \varphi_T^\sigma \circ \varphi_V^t(u) &= (-\Delta^{-1} 2 \operatorname{Re}(\exp(\sigma i \Delta) u \overline{\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u)) u})) \exp(\sigma i \Delta) u \\ &\quad + (-\Delta^{-1} | \exp(\sigma i \Delta) u|^2) (\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u)) u). \end{aligned}$$

Betrachten wir nun noch den letzten Teil des Restterms  $R_1(\psi_0)$ . Einsetzen der Definition (3.24) für  $\exp((h - s - \sigma) D_H)$  liefert eine Gleichung für  $u$ . Wertet

man  $R_1$  an der Stelle  $\psi_0$  aus, dann ist  $u$  die exakte Lösung der Schrödinger-Poisson-Gleichung an der Stelle  $h - s - \sigma$ :

$$u = \psi(h - s - \sigma).$$

Der Operator  $(\varphi_T^s)'$  in Gleichung (3.32) ändert die  $L^2$ -Norm nicht. Wir lassen diesen also gleich weg. Es gilt dann mit der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned} \|R_1(\psi_0)\|_{L^2} &\leq \|(-\Delta^{-1} 2 \operatorname{Re}(\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u)) \exp(\sigma i \Delta) u)\|_{L^2} \\ &\quad + \|(-\Delta^{-1} |\exp(\sigma i \Delta) u|^2) (\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{L^2}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Wir betrachten wieder die Summanden einzeln. Den ersten können wir wie folgt abschätzen. Es gilt

$$\begin{aligned} &\|(-\Delta^{-1} 2 \operatorname{Re}(\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u)) \exp(\sigma i \Delta) u)\|_{L^2} \\ &\leq 2 \|\Delta^{-1} (\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{L^\infty} \|\exp(\sigma i \Delta) u\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Die  $L^2$ -Norm der Funktion  $u$  ist als exakte Lösung einer Schrödinger Gleichung identisch eins, die Multiplikation mit  $\exp(\sigma i \Delta)$  ändert diese nicht. Der erste Faktor lässt sich wegen des Sobolevschen Einbettungssatzes und der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung durch dessen rechte Seite abschätzen. Es gilt

$$\begin{aligned} &\|\Delta^{-1} (\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{L^\infty} \\ &\leq C_1 \|\Delta^{-1} (\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{H^2} \\ &\leq C_2 \|(\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Weiters gilt

$$\begin{aligned} &\|(\exp(\sigma i \Delta) u \exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u))\|_{L^2} \\ &\leq \|\exp(\sigma i \Delta) u\|_{L^2} \|\exp(\sigma i \Delta) (\frac{1}{i} V(u) u)\|_{L^\infty}. \end{aligned}$$

Die  $L^2$ -Norm ist wie oben

$$\|\exp(\sigma i \Delta) u\|_{L^2} = \|u\|_{L^2} = \|\psi(h - s - \sigma)\|_{L^2} = 1.$$

Die  $L^\infty$ -Norm ist mit dem Sobolevschen Einbettungssatzes dominiert durch die  $H^2$ -Norm. Wegen Lemma 22 gilt

$$\|\exp(\sigma i\Delta)(\frac{1}{i}V(u))u\|_{L^\infty} \leq C_3 \|\exp(\sigma i\Delta)(\frac{1}{i}V(u))u\|_{H^2} \leq C_4 \|V(u)u\|_{H^2}.$$

Lemma 21 liefert die folgende Abschätzung:

$$\|V(u)u\|_{H^2} \leq C_5 \|u\|_{H^2}^2 \leq C_6 \|\psi(h-s-\sigma)\|_{H^2}^2.$$

Betrachten wir nun den zweiten Summanden in (3.33). Es ist

$$\begin{aligned} & \|(-\Delta^{-1}|\exp(\sigma i\Delta)u|^2)(\exp(\sigma i\Delta)(\frac{1}{i}V(u))u)\|_{L^2} \\ & \leq \|\Delta^{-1}|\exp(\sigma i\Delta)u|^2\|_{L^\infty} \|(\exp(\sigma i\Delta)(\frac{1}{i}V(u))u)\|_{L^2}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Wieder schätzen wir die Lösung der Poisson-Gleichung durch die  $L^2$ -Norm der rechten Seite ab, wir haben

$$\|(-\Delta^{-1}|\exp(\sigma i\Delta)u|^2)\|_{L^\infty} \leq C_7 \| |\exp(\sigma i\Delta)u|^2 \|_{L^2}.$$

Mit der stetigen Sobolev-Einbettung und Lemma 22 erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \| |\exp(\sigma i\Delta)u|^2 \|_{L^2} & \leq \| \exp(\sigma i\Delta)u \|_{L^2} \| \exp(\sigma i\Delta)u \|_{L^\infty} \\ & \leq C_8 \| \exp(\sigma i\Delta)u \|_{H^2} \\ & \leq C_9 \|\psi(h-s-\sigma)\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Für den zweiten Faktor in (3.34) haben wir mit den obigen Argumenten

$$\|(\exp(\sigma i\Delta)(\frac{1}{i}V(u))u)\|_{L^2} = \|V(u)u\|_{L^2} \leq \|\psi(h-s-\sigma)\|_{H^2}^2.$$

Zusammen mit dem Doppelintegral über diesen Term ist also

$$\|R_1(\psi_n)\|_{L^2} \leq C_{10} h^2 \max_{\xi \in [0, h]} (\|\psi(\xi)\|_{H^2}^2 + \|\psi(\xi)\|_{H^2}^3)$$

gezeigt.

Betrachten wir die  $L^2$ -Norm des Restterms  $R_2(\psi_0)$ . Wir haben wieder wegen der  $L^2$ -Isometrie-eigenschaft der Exponentialfunktion und der Dreiecksungleichung

$$\|R_2(\psi_0)\|_{L^2} \leq \int_0^t (t-\tau) \|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)^2 \exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0\|_{L^2} d\tau.$$

Der Integrand lässt sich zunächst wie folgt abschätzen

$$\begin{aligned} & \|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)^2 \exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0\|_{L^2} \\ & \leq \|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)\|_{L^\infty}^2 \|\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Die  $L^\infty$ -Norm wird wegen des Sobolevschen Einbettungssatzes wieder durch die  $H^2$ -Norm dominiert

$$\|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)\|_{L^\infty} \leq C_{11} \|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)\|_{H^2},$$

welche sich aber wegen der  $H^2$ -Regularität der Poisson-Gleichung durch

$$\|V(\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0)\|_{H^2} \leq C_{12} \| |\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0|^2 \|_{L^2}$$

abschätzen lässt. Diese Norm können wir aber wegen Lemma 2 und Lemma 22 durch

$$\| |\exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0|^2 \|_{L^2} \leq C_{13} \| \exp(-\frac{h}{2i}\Delta)\psi_0 \|_{H^2} \leq C_{14} \|\psi_0\|_{H^2}$$

abschätzen. Wir haben also zusammen mit dem Integral

$$\|R_2(\psi_0)\|_{L^2} \leq C_{15} h^2 \|\psi_0\|_{H^2}^2.$$

Wir schätzen nun noch den verbleibenden dritten Restterm ab. Auch diesmal übersetzen wir die auftretenden Terme zunächst zurück in die klassische Schreibweise. Wir haben

$$\begin{aligned} f'(s) &= \exp((h-s)D_T) D_{[\hat{T}, \hat{V}]} \exp(sD_T) I(\psi_0) \\ &= (\varphi_T^s)'[\hat{T}, \hat{V}] \circ \varphi_H^{h-s}(\psi_0). \end{aligned}$$

Die  $L^2$ -Norm davon ist dann zunächst mit der  $L^2$ -Isometrieeigenschaft von  $(\varphi_T^s)'$

$$\|(\varphi_T^s)'[\hat{T}, \hat{V}] \circ \varphi_H^{h-s}(\psi_0)\|_{L^2} \leq C_{16} \|[\hat{T}, \hat{V}] \circ \varphi_H^{h-s}(\psi_0)\|_{L^2}$$

und nun gilt mit der Kommutatorabschätzung Lemma 23

$$\|[\hat{T}, \hat{V}] \circ \varphi_H^{h-s}(\psi_0)\|_{L^2} \leq C_{17} \|\varphi_H^{h-s}(\psi_0)\|_{H^2},$$

was wir schlussendlich durch

$$\|\varphi_H^{h-s}(\psi_0)\|_{H^2} \leq C_{18} \|\psi_0\|_{H^2}$$

abschätzen können. Zusammen mit dem Doppelintegral über diesen Term haben wir also

$$\|R_3(\psi_0)\|_{L^2} \leq C_{19} h^2 \|\psi_0\|_{H^2}^2$$

gezeigt.

Insgesamt ist das die Behauptung über den lokalen Fehler.  $\square$

**Lemma 25** (*Regularität der numerischen Lösung*)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 6. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung gelten entweder die Randbedingungen (D) oder (P). Dann gibt es zu jeder Konstanten  $K > \|\Delta\psi_0\|_{L^2}$  eine Zeit  $0 < t^* = t^*(K)$  so, dass die numerische Lösung  $\psi_n$  zur Schrittweite  $h$  mit  $hn < t^*$ , berechnet mit (3.21) auf dem Intervall  $[0, t^*]$  in  $H^2$  existiert und

$$\|\Delta\psi_k\|_{L^2} \leq K, \quad 0 \leq k \leq n.$$

**Beweis:**

Betrachten wir die Norm der numerischen Lösung nach einem Integrations-schritt. Es ist

$$\|\Delta\psi_{n+1}\|_{L^2} = \|\Delta \exp\left(\frac{hi}{2}\Delta\right) \exp\left(\frac{h}{2i}V(\psi_{n+1/2})\right)\psi_{n+1/2}\|_{L^2},$$

wobei

$$\psi_{n+1/2} = \exp\left(\frac{hi}{2}\Delta\right)\psi_n.$$

Der Laplace-Operator kommutiert wieder mit dessen Exponentialfunktion. Mit der  $L^2$ -Isometrie-eigenschaft des Exponentialoperators erhalten wir zunächst

$$\|\Delta\psi_{n+1}\|_{L^2} = \|\Delta(\exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\right)\psi_{n+1/2})\|_{L^2}.$$

Das Potential  $V(\psi_{n+1/2})$  ist ein Multiplikator, damit auch dessen Exponentialfunktion. Wir differenzieren also nach dem Ort und erhalten

$$\begin{aligned} & \Delta(\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2}) \\ &= \Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2} + 2\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \cdot \nabla \psi_{n+1/2} \\ &+ \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\Delta\psi_{n+1/2}. \end{aligned}$$

Für die  $L^2$ -Norm bedeutet das

$$\begin{aligned} & \|\Delta(\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2})\|_{L^2} \\ &= \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2}\|_{L^2} + 2\|\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \cdot \nabla \psi_{n+1/2}\|_{L^2} \\ &+ \|\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Für den ersten Term verwenden wir den Sobolevschen Einbettungssatz. Es ist

$$\begin{aligned} \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2}\|_{L^2} &\leq \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2} \|\psi_{n+1/2}\|_{L^\infty} \\ &\leq C_1 \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2} \|\psi_{n+1/2}\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Mit der Normäquivalenz Lemma 5 gilt also

$$\|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\psi_{n+1/2}\|_{L^2} \leq C_2 \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2} \|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}.$$

Den zweiten Term schätzen wir mit der Hölder-Ungleichung ab und erhalten

$$\begin{aligned} & \|\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \cdot \nabla \psi_{n+1/2}\|_{L^2} \\ &\leq \|\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^4} \|\nabla \psi_{n+1/2}\|_{L^4} \\ &\leq C_3 \|\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{H^1} \|\nabla \psi_{n+1/2}\|_{H^1} \\ &\leq C_3 \|\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{H^2} \|\psi_{n+1/2}\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Ebenso ergibt sich mit derselben Normäquivalenz aus Lemma 5 dann

$$\begin{aligned} & \|\nabla \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \cdot \nabla \psi_{n+1/2}\|_{L^2} \\ &\leq C_4 \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2} \|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Beim dritten Term schätzen wir mit den vorigen Argumenten wie folgt ab:

$$\|\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2} \leq \|\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^\infty} \|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}.$$

Die  $L^\infty$ -Norm der Exponentialfunktion ist identisch 1. Wir haben

$$\|\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2} \leq \|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}.$$

Wir müssen folglich

$$\|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2}$$

abschätzen. Die Ortsableitung ist

$$\begin{aligned} \Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) &= \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}) \cdot \nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}) \\ &\quad + \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})) \Delta \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}). \end{aligned}$$

Die  $L^2$ -Norm davon ist wegen der  $L^2$ -Norm-Isometrie-eigenschaft von  $\exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))$  und der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned} \|\Delta \exp(\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}))\|_{L^2} &\leq \|\nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}) \cdot \nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^2} \\ &\quad + \|\Delta \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Den ersten Term schätzen wir wieder mit der Hölder-Ungleichung und Lemma 5 durch

$$\begin{aligned} &\|\nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2}) \cdot \nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^2} \\ &\leq \|\nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^4} \|\nabla \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^4} \\ &\leq C_5 \|\frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{H^1}^2 \\ &\leq C_6 \|\Delta \frac{h}{i}V(\psi_{n+1/2})\|_{L^2}^2 \end{aligned}$$

ab. Wir ersetzen  $\Delta V(\psi_{n+1})$  durch die rechte Seite der Poisson-Gleichung und erhalten mit den üblichen Argumenten

$$\|\Delta V(\psi_{n+1/2})\|_{L^2} \leq C_7 \|\psi_{n+1/2}\|_{L^2}^2 \leq C_8 \|\psi_{n+1/2}\|_{H^2} \leq C_9 \|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}.$$

Zusammengesetzt ergibt das

$$\|\Delta\psi_{n+1}\|_{L^2} \leq (1 + C_{10}h\|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2} + C_{11}h^2\|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}^2)\|\Delta\psi_{n+1/2}\|_{L^2}.$$

Wieder lässt  $\exp(\frac{hi}{2}\Delta)$  die  $L^2$ -Norm unverändert und wir erhalten

$$\|\Delta\psi_{n+1}\|_{L^2} \leq (1 + C_{10}h\|\Delta\psi_n\|_{L^2} + C_{11}h^2\|\Delta\psi_n\|_{L^2}^2)\|\Delta\psi_n\|_{L^2}.$$

Mir Hilfe dieser Abschätzung erhalten wir dann die Behauptung.  $\square$

**Lemma 26** (*Stabilität*)

Sei  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$  wie im Satz 6. Für die Schrödinger-Poisson-Gleichung gelten die entsprechenden Randbedingungen (D) oder (P). Sei  $\psi_{n+1}, \tilde{\psi}_{n+1}$  die numerischen Lösungen zu den Startwerten  $\psi_n, \tilde{\psi}_n \in H^1$  berechnet mit der Schrittweite  $h$ . Dann gilt

$$\|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} \leq \left(1 + hC(\|\psi_n\|_{H^1} + \|\tilde{\psi}_n\|_{H^1})\|\psi_n\|_{H^1}\right) \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2}.$$

**Beweis:**

Die Fehlerfortpflanzung basiert auf denselben Techniken wie die Fehlerfortpflanzung bei den vorigen Verfahren. Seien  $\psi_{n+1}$  und  $\tilde{\psi}_{n+1}$  die numerischen Lösungen zu den Startwerten  $\psi_n$  und  $\tilde{\psi}_n$ . Es ist dann

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1} &= \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right) \exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n \\ &\quad - \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right) \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\tilde{\psi}_n. \end{aligned}$$

Für die  $L^2$ -Norm klammern wir die erste Exponentialfunktion aus

$$\begin{aligned} &\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1} \\ &= \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right) \left( \exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\tilde{\psi}_n \right) \end{aligned}$$

und erhalten wegen des imaginärwertigen Spektrums im Argument der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} &\|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} \\ &= \left\| \exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\tilde{\psi}_n \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Wir fügen einen geeigneten Term ein und subtrahieren diesen wieder. Mit der Dreiecksungleichung haben wir dann

$$\begin{aligned} & \|\psi_{n+1} - \tilde{\psi}_{n+1}\|_{L^2} \\ &= \left\| \exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n \right\|_{L^2} \\ &+ \left\| \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\tilde{\psi}_n \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Für den zweiten Term erhalten wir wie oben

$$\begin{aligned} & \left\| \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\tilde{\psi}_n \right\|_{L^2} \\ &= \left\| \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)(\psi_n - \tilde{\psi}_n) \right\|_{L^2} \\ &= \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2} \end{aligned}$$

und für den ersten Summanden wenden wir Lemma 7 an. Dann gilt

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{h}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n - \exp\left(\frac{h}{i}V(\tilde{\psi}_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n \\ &= \int_0^{\frac{h}{2}} f(\theta) d\theta \end{aligned}$$

mit

$$f(\theta) = \frac{1}{i} \exp\left(\left(\frac{h}{2i} - \frac{\theta}{i}\right)V(\tilde{\psi}_n)\right) (V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)) \exp\left(\frac{\theta}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n.$$

Bei der  $L^2$ -Norm von  $f(\theta)$  hilft uns wieder das imaginärwertige Spektrum im Argument der Exponentialfunktion, wir haben also sofort

$$\|f(\theta)\|_{L^2} = \|(V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)) \exp\left(\frac{\theta}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n\|_{L^2}.$$

Wir verwenden die Hölder-Ungleichung und erhalten

$$\begin{aligned} & \|(V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)) \exp\left(\frac{\theta}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n\|_{L^2} \\ &\leq \| (V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)) \|_{L^4} \left\| \exp\left(\frac{\theta}{i}V(\psi_n)\right) \exp\left(\frac{h}{2i}\Delta\right)\psi_n \right\|_{L^4}. \end{aligned}$$

Den ersten Term haben wir bereits im Beweis zu Lemma 12 abgeschätzt. Damit ist

$$\begin{aligned} & \|V(\psi_n) - V(\tilde{\psi}_n)\|_{L^4} \\ &\leq C_1 \| |\psi_n| + |\tilde{\psi}_n| \|_{H^1} \|\psi_n - \tilde{\psi}_n\|_{L^2} \leq 2C_2 \| |\psi_n| + |\tilde{\psi}_n| \|_{H^1}. \end{aligned}$$

Auch für den zweiten Term können wir die selben Argumente wie im Beweis zu Lemma 12 verwenden. Hier allerdings jeweils mit  $V(\psi_n)$  beziehungsweise  $-\Delta$  an der Stelle von  $H(\psi_n)$ . Zusammen genommen haben wir dann die Behauptung gezeigt.  $\square$

Mit Hilfe dieser Lemma können wir nun die Aussage über den globalen Fehler aus Satz 6 beweisen:

**Beweis:**

Die Kommutatorabschätzung aus Lemma 23 liefert uns die Voraussetzungen für das Lemma 24, welches die notwendige Aussage über den lokalen Fehler liefert. Die Existenz der numerischen Lösung in  $H^2$  erhalten wir aus Lemma 25, mit dessen Hilfe wir für beschränkte Zeiten die Voraussetzungen für die Fehlerfortpflanzung aus Lemma 26 erhalten. Aus diesen Ergebnissen erhält man die Aussage über die globale Fehlerschranke mit Standardmethoden. Wir erhalten damit die Behauptung des Satzes.  $\square$

Nachdem wir einige theoretische Eigenschaften dieser Zeitschrittverfahren nachgewiesen haben wollen wir uns jetzt numerischen Beispielen zuwenden.



# Kapitel 4

## Numerische Experimente

Die in dieser Arbeit beschriebenen Verfahren wurden in `MATLAB` implementiert und miteinander verglichen. Die Resultate aus diesen Berechnungen sind in diesem Kapitel dargestellt.

### 4.1 Verwendete Numerik

Zuerst wollen wir uns kurz mit den numerischen Verfahren beschäftigen, die die notwendigen Zwischenergebnisse bereitstellen.

#### 4.1.1 Die Exponentialfunktion

Das Kernelement der hier präsentierten Verfahren ist die Operator-Exponentialfunktion. Wir haben in unserem Fall die Multiplikation eines Vektors mit der Matrix

$$\exp(i\alpha A)$$

zu berechnen. Dabei ist  $A$  eine symmetrische Matrix und  $\alpha$  eine reelle Zahl. Für kleine Dimensionen der gewöhnlichen Differentialgleichung ( $n \leq 100$ )

ist es sinnvoll diese Exponentialfunktion einfach voll zu berechnen und dann mit dem Vektor zu multiplizieren. **MATLAB** stellt eine Reihe nativer Funktionen zur Berechnung der Matrix-Exponentialfunktion zur Verfügung. Genaueres zur Implementierung dieser eingebauten Funktionen findet man in der **MATLAB** Dokumentation [Mat02]. Den mathematischen Hintergrund dazu zeigt [GL89] und speziell mit Algorithmen für die Exponentialfunktion beschäftigt sich [ML78] und [ML03]. Für unsere Betrachtungen genügt es zu wissen, dass die Exponentialfunktion einer Matrix im Wesentlichen durch Diagonalisierung des Arguments und Anwenden der Exponentialfunktion auf die Diagonalmatrix berechnet wird. Es ist bekannt, dass eine symmetrische Matrix zum einen effizienter und zum anderen stabiler zu diagonalisieren ist als eine nichtsymmetrische Matrix. Daher verwenden wir nicht  $i\alpha A$  zur Diagonalisierung sondern nur die symmetrische Matrix  $A$  selbst. Die skalaren Vielfachen multiplizieren wir dann später mit der Diagonalmatrix. Diese Implementierung hat sich als wesentlich stabiler herausgestellt.

Darüber hinaus ist es für größere Differentialgleichungssysteme, so wie sie bei unserem Problem in natürlicher Weise vorkommen würden, nicht mehr möglich die ganze Exponentialfunktion zu berechnen. Selbst wenn die Matrix  $A$  nur schwach besetzt ist, wird die Matrix  $\exp(A)$  im Allgemeinen voll besetzt sein. Daher ist weder der Speicherbedarf für eine solche voll besetzte Matrix, noch der Rechenaufwand, der in der Größenordnung  $O(n^3)$  liegt, zur Berechnung dieser Matrix von heutigen Computern zu decken. Abhilfe schafft es, den Vektor  $\exp(i\alpha A)v$  in einem geeigneten Unterraum zu approximieren. Für unsere Implementierungen wurden Krylov-Raum-Techniken verwendet, wie sie in [HL97] beschrieben sind. Diese Techniken wurden bereits mit Erfolg in dem in [HLS98] beschriebenen Integrationsverfahren **exp4** verwendet.

Für die Berechnung von  $\beta \exp(\alpha A)v$  verwendet man dabei im Wesentlichen die Approximation

$$\beta \exp(i\alpha A)v \approx \beta \|v\| V_k \exp(i\alpha H_k) e_1,$$

wobei  $V_k \in \mathbb{C}^{n \times k}$  eine Matrix ist, deren Spalten den Krylov-Raum der Dimension  $k$  zum Startvektor  $v$  und der Matrix  $A$  aufspannt und  $H_k = V_k^* A V_k$  die Projektion von  $A$  auf den Krylov-Raum der Dimension  $k$  ist. Da  $A$  in unserem Fall symmetrisch ist, kann man zur Konstruktion der Basisvektoren  $V_k$  den einfacheren und schnelleren symmetrischen Lanczos-Prozess verwenden. Zu bemerken wäre, dass die Matrix  $H_k$  in diesem Fall wieder symmetrisch ist und daher die oben aufgeführten Techniken für die Berechnung der vollen Matrix  $\exp(i\alpha H_k)$  anwendbar sind. Einen guten Überblick über Krylov-Verfahren

gibt [GS97]. Aussagen über das Approximationsverhalten für verschiedene Funktionen sind in [HL98] zu finden.

### 4.1.2 Die Poisson-Gleichung

Die Lösung der Poisson-Gleichung wurde direkt berechnet. Auf Grund des einfachen Beispiels in einer Raumdimension ist das direkte Lösen eines Gleichungssystems mit einer Tridiagonalmatrix ohnehin optimal. Für höhere Raumdimensionen ist hier aber viel Raum für Verbesserungen.

## 4.2 Implementierung und Laufzeitverhalten

Die Implementierung der einfachen Verfahren stellt keine besonderen Anforderungen an die Softwarearchitektur. Für numerische Software ist Effizienz ein besonderes Thema. `MATLAB` bietet hier in älteren Versionen die Möglichkeit die Anzahl der benötigten Fließpunktoperationen zu zählen. Das Laufzeitverhalten einer Implementierung in einer compilierten Programmiersprache wie `C` sollte sich im Wesentlichen so verhalten wie die Anzahl der Fließpunktoperationen zeigt. Das Laufzeitverhalten in `flops` aller untersuchten Verfahren wird dabei im Wesentlichen durch die Anzahl der Exponentialfunktionsauswertungen und die Anzahl der benötigten Potentialauswertungen bestimmt. Die restlichen wenigen Vektoroperationen beeinflussen die Laufzeit kaum. Wir werden deshalb für jedes Verfahren die Anzahl der Exponentialfunktions- und Potentialauswertungen noch einmal angeben.

### 4.2.1 Exponentielles Euler-Verfahren

Getestet wurde mit konstanter Schrittweite. Leider ist kein einfaches Verfahren bekannt, mit dem man eine billige Fehlerschätzung für dieses Schema bekommen könnte. Daher ist es hier leider nicht möglich eine adaptive Schrittweitensteuerung zu realisieren, obwohl das einschrittige Schema selbst einen einfachen Wechsel der Schrittweite erlauben würde. Pro Zeitschritt sind

bei diesem Verfahren eine Lösung der Potentialgleichung und eine Auswertung der Matrix-Exponentialfunktion notwendig.

### 4.2.2 Symmetrisches Exponentielles Euler-Verfahren

Für das Symmetrische Exponentielle Euler-Verfahren wurde das originale Schema, wie es im Abschnitt 3.2 beschrieben ist, verwendet. Den Anfangsschritt berechnet man mit einem Schritt des exponentiellen Euler-Verfahrens, der durch seine einmalige Anwendung die globale Fehlerschranke von  $O(h^2)$  nicht verschlechtert. Eine Veränderung der Schrittweite ist daher für dieses Mehrschrittverfahren nicht so einfach möglich, da mehrfaches Berechnen des Startschrittes die höhere Approximationsordnung zerstören würde. Allerdings ist auch hier ohnehin keine einfache zu berechnende Fehlerschätzung bekannt, so dass eine adaptive Schrittweitensteuerung hier ebenfalls nicht in Frage kommt. Auch hier ist pro Zeitschritt eine Lösung der Potentialgleichung und eine Auswertung der Matrix-Exponentialfunktion notwendig.

### 4.2.3 Splitting-Verfahren

Auch beim Splitting-Verfahren wurde das ursprüngliche Schema aus Abschnitt 3.3 verwendet. Es wäre hier zwar wieder möglich die Schrittweite einfach zu verändern, aber auch dieses Verfahren teilt die gemeinsame Eigenschaft, dass keine billige Fehlerschätzung verfügbar ist. Daher sind für dieses Verfahren nur Berechnungen mit konstanter Schrittweite angestellt worden. Zunächst sind bei diesem Verfahren pro Zeitschritt zwei Auswertungen der Exponentialfunktion des Laplace-Operators und eine Auswertung der Exponentialfunktion des Potentials notwendig. Die Exponentialfunktion für einen Multiplikator wie in unserem Fall das Potential ist aber eine vergleichsweise einfache Operation, bei welcher nur auf jedem Vektorelement die skalare Exponentialfunktion ausgewertet werden muss. Diese Auswertung fällt aber genauso wie alle anderen vektorwertigen Operationen aus den Zeitschrittverfahren kaum ins Gewicht. In viele Fällen wird man sich aber nicht für die Lösung der Gleichung an den Zwischenschritten, sondern nur am Endzeitpunkt der Zeitintegration interessieren. In diesem Fall kann man die Exponentialfunktionsauswertungen des Laplace-Operators am Ende

eines Integrationsschrittes mit der Auswertung am Anfang des nächsten Integrationsschrittes kombinieren. Man erreicht damit im Wesentlichen dasselbe Laufzeitverhalten wie bei den beiden vorangegangenen Verfahren.

### 4.3 Numerisches Beispiel

Als Beispiel für die Rechnungen verwenden wir die Schrödinger-Poisson-Gleichung so, wie sie im vereinfachten Model des theoretischen Teils verwendet wurde. Das Simulationsgebiet  $\Omega$  ist das Intervall  $[0, 1]$ . Die Differentialgleichung lautet also

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \psi &= -\Delta \psi + V \psi, \\ -\Delta V &= |\psi|^2 \end{aligned}$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \psi(t) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \\ V(\psi(t)) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

für alle  $t$  aus dem Integrationsintervall  $[0, 0.1]$ . Als Anfangswert wurde eine Gaußsche Verteilung

$$\psi(t_0) = \frac{1}{a} e^{-\left(\frac{x-0.5}{60}\right)^2}$$

mit  $a = \int_0^1 e^{-\left(\frac{x-0.5}{60}\right)^2} dx$  verwendet. Eine Hintergrundladung ist, wie auch bei den theoretischen Untersuchungen, nicht vorhanden. Die Wellenfunktion und das Potential sind mit Hilfe der Linienmethode im Ort diskretisiert. Die beiden Laplace-Operatoren sind als einfache finite Differenzen implementiert.

Mit den beiden Verfahren der Ordnung 2 wurden mit der Schrittweite  $h = 10^{-7}$  Referenzlösungen berechnet. Für die folgenden Abbildungen wurde die Splitting-Referenzlösung verwendet. Die 2-Normen der berechneten Referenzlösungen unterscheiden sich in der Größenordnung  $10^{-10}$ . Ein unabhängiges weiteres Verfahren wurde mangels geeigneter Alternativen nicht verwendet.

Abbildung 4.1 zeigt den Fehler am Zeitpunkt  $t = 0.1$  der drei Verfahren

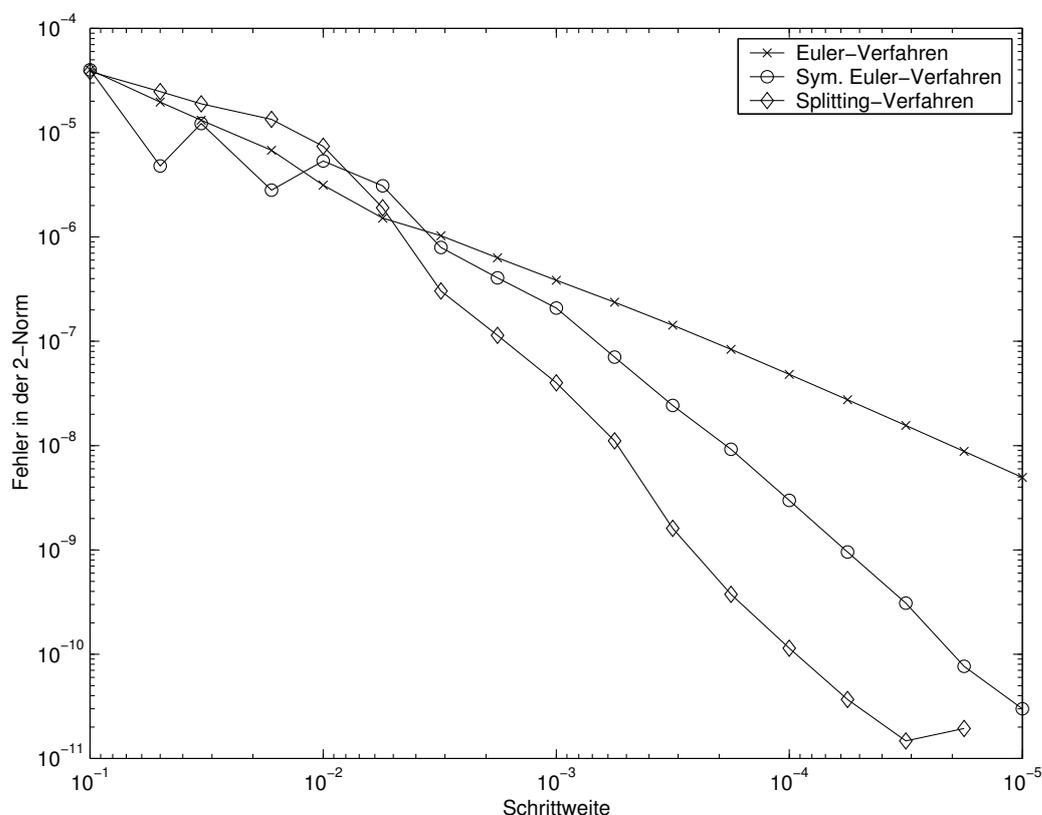


Abbildung 4.1: Fehler-Schrittweite, Dirichlet-Randbedingungen

in Abhängigkeit von der Integrationsschrittweite  $h$ . Die Rechnungen wurden mit einer maximalen Schrittweite von  $h = 0.1$  berechnet. Die ersten Vergleichsergebnisse sind also mit nur einem Zeitintegrationsschritt erzielt worden. Das erklärt auch zumindest für die beiden Euler-Verfahrensvarianten, dass diese die exakt gleichen Ergebnisse liefern. In diesem Fall wird für das symmetrische Euler-Verfahren nur der Euler-Startschritt durchgeführt. In dem Bereich ist bereits eine sehr hohe Genauigkeit von  $10^{-4}$  zu beobachten. Man kann in dieser Abbildung, recht deutlich die erreichten Fehlerordnungen von 1 für das Exponentielle Euler-Verfahren und 2 für die anderen beiden Verfahren ablesen. Das deckt sich auch mit den Ergebnissen für die beiden Euler-Verfahrensansätze und mit den weiteren Überlegungen zum Splitting-Verfahren aus dem theoretischen Teil dieser Arbeit. Das Splitting-Verfahren liefert dabei etwas genauere Ergebnisse als die symmetrische Variante des Exponentiellen Euler-Verfahrens. Die nächste Abbildung 4.2 zeigt die Abhängigkeit des Fehlers vom notwendigen Rechenaufwand gemessen in Fließpunktoperationen, die man mit Hilfe von MATLAB leicht ermitteln

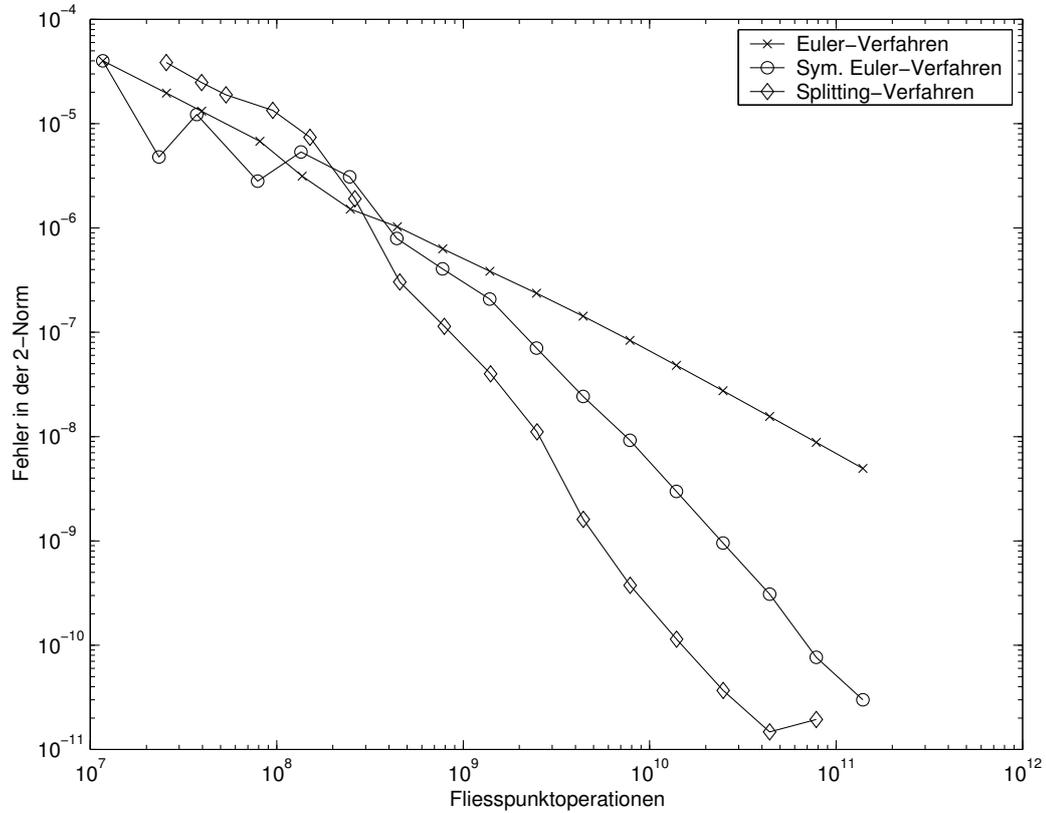


Abbildung 4.2: Fehler-Rechenaufwand, Dirichlet-Randbedingungen

kann. Im Wesentlichen bietet sich hier dasselbe Bild wie zuvor. Die Verfahren benötigen, von Startschritten abgesehen, die selbe Anzahl an Rechenoperationen pro Zeitschritt. Bei großen Schrittweiten, die im Extremfall hier sogar zu einem einzigen Integrationsschritt für das gesamte Integrationsintervall führen, sieht man, dass das Splitting-Verfahren einen doch nicht unerheblichen Mehraufwand durch die zweite Exponentialfunktionsauswertung hat. Dieses Diagramm unterstützt also die Überlegungen aus dem vorigen Abschnitt zum Rechenaufwand pro Zeitschritt. Zur Vollständigkeit zeigt Abbildung 4.3 die Fehler des elektrische Potentials in der 2-Norm. Die Ergebnisse gleichen denen für die Wellenfunktion  $\psi$ . Auf Grund der betrachteten Gleichungen würde man das genau so erwarten. Interessant ist lediglich, dass das Symmetrische Euler-Verfahren bei großen Schrittweiten das Potential etwas schlechter approximiert als das Splitting-Verfahren, obwohl die Approximation der Wellenfunktionen etwa gleich gut ist. Alles in allem scheint das Splitting-Verfahren für dieses Beispiel die beste Wahl zu sein.

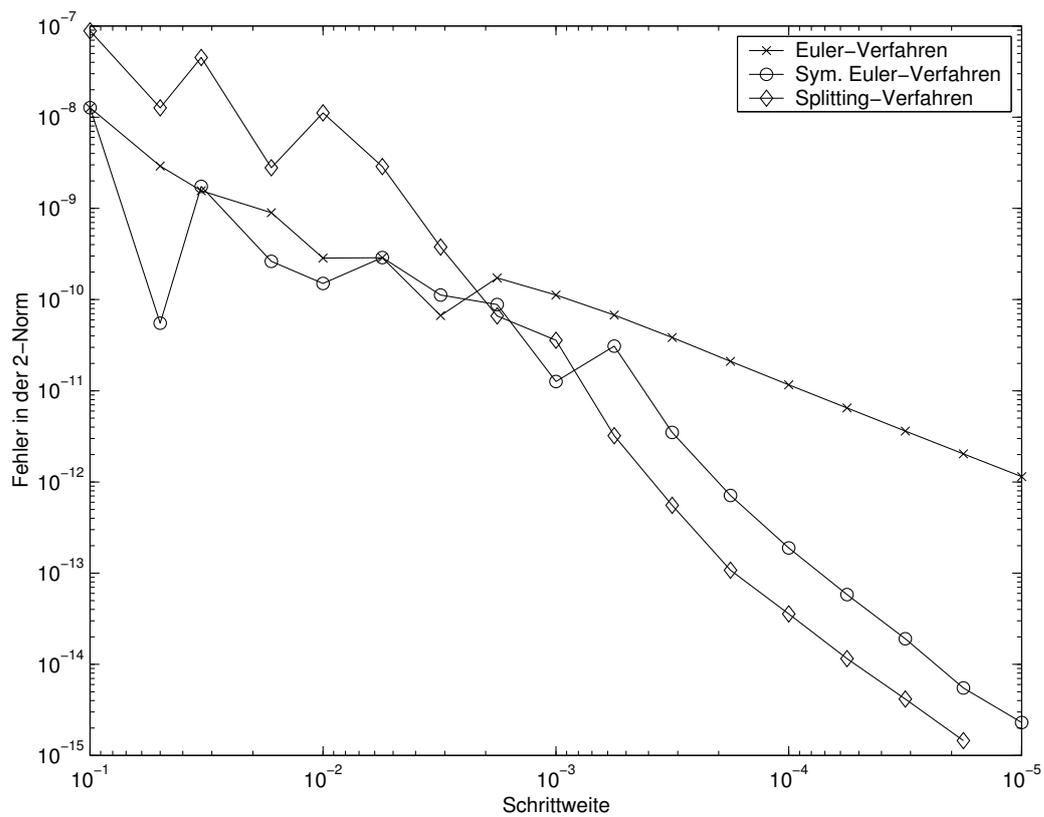


Abbildung 4.3: Fehler des Potentials-Schrittweite, Dirichlet-Randbedingungen

# Literaturverzeichnis

- [AR95] A. Arnold und C. Ringhofer. Operator Splitting Methods Applied to Spectral Discretizations of Quantum Transport Equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(6):1876–1894, 1995.
- [BILZ96] S. Bohun, R. Illner, H. Lange, und P. F. Zweifel. Error Estimates for Galerkin Approximations to the Periodic Schrödinger-Poisson System. *Z. Angew. Math. Mech.*, 76(No.1):7–13, 1996.
- [Bra97] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, second edition, 1997.
- [Cas96] R. Castella.  $L^2$ -solutions to the Schrödinger-Poisson System: Existence, Uniqueness, Time Behaviour, and Smoothing Effects. *C. R. Acad. Sci.*, 323:1243–1248, 1996.
- [EN99] K. J. Engel und R. Nagel. *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*. Graduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [Eva98] L. C. Evans. *Partial Differential Equations*, volume 19. American Mathematical Society, 1998.
- [GKL<sup>+</sup>01] H. Gajewski, H. C. Kaiser, H. Langmach, R. Nürnberg, und R. H. Richter. Mathematical Modelling and Numerical Simulation of Semiconductor Detectors. Preprint, Weierstraß-Institut für angewandte Analysis und Stochastik, 2001.
- [GL89] G. H. Golub und C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. John Hopkins Univ. Press, Baltimore and London, second edition, 1989.
- [GS97] M. H. Gutknecht und Z. Strakoš. Accuracy of Three-term and Two-term Recurrences for Krylov Space Solvers. Technical report

- TR-97-21, Swiss Center for Scientific Computing, ETH Zürich, CH-8092 Zürich, Switzerland, 1997.
- [GT83] D. Gilbag und N. S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, second edition, 1983.
- [HL97] M. Hochbruck und Ch. Lubich. On Krylov Subspace Approximations to the Matrix Exponential Operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(5):1911–1925, 1997.
- [HL98] M. Hochbruck und Ch. Lubich. Error Analysis of Krylov Methods in a Nutshell. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(2):695–701, 1998.
- [HLS98] M. Hochbruck, Ch. Lubich, und H. Selhofer. Exponential Integrators for Large Systems of Differential Equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19:1552–1574, 1998.
- [HLW02] E. Hairer, C. Lubich, und G. Wanner. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer Series in Computational Mathematics 31. Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [HNW87] E. Hairer, S. P. Norsett, und G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I–Nonstiff Problems*. Springer Series in Computational Mathematics 8. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1987.
- [JL00] T. Jahnke und C. Lubich. Error Bounds for Exponential Operator Splitting. *BIT*, (4):735–744, 2000.
- [Kat80] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer-Verlag, second edition, 1980.
- [KS96] W. Klix und R. Stenzel. SIMBA Ein Programm zur 3D-Simulation des innerelektronischen Verhaltens von Halbleiterstrukturen. Software Documentation, TU Dresden, HTW Dresden, 1996.
- [LTZ95] H. Lange, B. Toomire, und P. F. Zweifel. An Overview of Schrödinger-Poisson Problems. *Rep. Math. Phys.*, 36(No.2–3):331–345, 1995.
- [Lub04] C. Lubich. Variational Splitting for Multiconfiguration Quantum Dynamics. *Erscheint in Appl. Num. Math.*, 2004.

- [LZ97] H. Lange und P. F. Zweifel. Mixed Boundary-Value Problems for the Two-Dimensional Schrödinger-Poisson System. *Rep. Math. Phys.*, 39(No.3):283–297, 1997.
- [Mat02] Mathworks. *MATLAB, The Language of Technical Computing*. The MathWorks, Inc., 3 Apple Hill Drive, Natick, 6th. edition, 2002.
- [ML78] Moler und C. F. Van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix. *SIAM Rev.*, 20:801–836, 1978.
- [ML03] Moler und C. F. Van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty Five Years Later. *SIAM Rev.*, 45(1):3–49, 2003.
- [MRS90] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, und C. Schmeiser. *Semiconductor Equations*. Springer-Verlag, Wien New York, 1990.
- [Paz82] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, 2 edition, 1982.
- [Roo50] W. Van Roosbroeck. Theory of the Flow of Electrons and Holes in Germanium and other Semiconductors. *Bell Systems Technical Journal*, 29:560, 1950.
- [Tro01] C. Troger. *Modellierung von Quantisierungseffekten in Feldeffekttransistoren*. PhD thesis, Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, Technische Universität Wien, 2001.



# Lebenslauf

- Persönliche Daten

Name	Dipl. Math. Mathias Fröhlich
Geburtstag	18. Dezember 1971
Geburtsort	Sigmaringen
Staatsangehörigkeit	deutsch
Familienstand	ledig
Privatadresse	Im Wengertacker 40 72138 Kirchentellinsfurt
Telefon	07121 907880
Heimatadresse	Gartenstraße 18 72517 Sigmaringendorf
Telefon	07571 50424

- Schulbildung

1978-1982	Grundschule Sigmaringendorf
1982-1983	Hauptschule Sigmaringendorf
1983-1992	Hohenzollerngymnasium Sigmaringen
1992	Abitur

- Studium

WS92/93	Studium der Mathematik an der TU Karlsruhe
SS93	Wechsel an die Universität Tübingen
November 1998	Diplomabschluss an der Mathematischen Fakultät der Universität Tübingen
Dezember 1998	Beginn einer Promotion am Fachbereich Numerik der Mathematischen Fakultät der Universität Tübingen