

Aufgabe 1. Lösung nichtlinearer Gleichungen mit einer Variablen

1. Teil: Nullstellenbestimmung

Aufgabenstellung

Es sollten in Fortran verschiedene Verfahren zur iterativen Nullstellenbestimmung von Funktionen programmiert werden. Die Nullstellensuche ist die Suche nach der Lösung der Gleichung $f(x) = 0$, und kann iterativ auf unterschiedlichem Wege durchgeführt werden:

a) Bisektionsverfahren

Dieses Verfahren basiert auf zwei Startpunkten, die die Nullstelle einschließen. Bei jedem Iterationsschritt wird das Intervall (a, b) halbiert, und danach festgestellt ob die Nullstelle zwischen a und x oder x und b liegt.

$$x = \frac{a + b}{2} \quad (1)$$

Dazu bietet es sich an, die Vorzeichen von a , x und b zu vergleichen, da diese auf den beiden Seiten der Nullstelle unterschiedlich sein müssen. Je nachdem werden dann a oder b durch x ersetzt und die Iteration von neuem begonnen.

b) Newton-Verfahren

Dieser Algorithmus wird auch Tangenten-Verfahren genannt, da hierbei die Ableitung der Funktion zu Hilfe genommen wird. Diese Methode funktioniert daher nur bei Funktionen, deren Ableitung bekannt ist.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (2)$$

Für die Berechnung ist hier ein Startwert x_1 erforderlich.

c) Regula Falsi

Bei diesem Verfahren handelt es sich um eine Abwandlung des Newton-Algorithmus mit Ähnlichkeit zum Bisektionsverfahren. Es wird auch Sekanten-Verfahren genannt. Hierbei wird die analytische Ableitung der Funktion aus dem Newtonverfahren durch den Differenzenquotienten aus den letzten beiden Näherungslösungen ersetzt.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i) \cdot (x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \quad (3)$$

Diese Methode ist in Fällen angebracht, wo die analytische Ableitung der Funktion nicht bekannt ist.

d) Fixpunkt-Verfahren

Diese Methode ist auch als „einfache Iteration“ bekannt. Beim Fixpunktverfahren muss das zu lösende Problem $f(x) = 0$ in diese Form gebracht werden: $x = \phi(x)$.

Dann sieht die Iteration folgendermaßen aus

$$x_{i+1} = \phi(x_i) \quad (4)$$

Wieder geht man von einer Startnäherung x_1 aus.

Die oben beschriebenen Verfahren sollten an den Funktionen aus Vorübung 0 getestet und auf ihre Genauigkeit überprüft werden. Außerdem sollte der Verlauf der Konvergenz bis auf die vorgegebene Genauigkeit von 10^{-4} von unterschiedlichen Startwerten aus betrachtet werden.

Testfunktionen

Die beiden Testfunktionen wurden Beispiel 0 entnommen:

$$f_1(x) = x^3 - 5x^2 + 100x - 400 \quad (5)$$

$$f_2(x) = e^{-x} - \frac{0.1}{1+x} \quad (6)$$

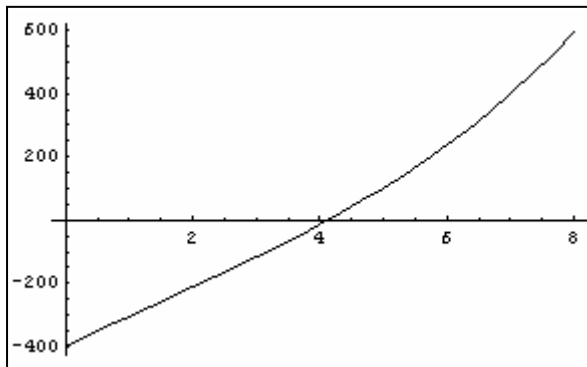


Abb. 1: $f_1(x)$

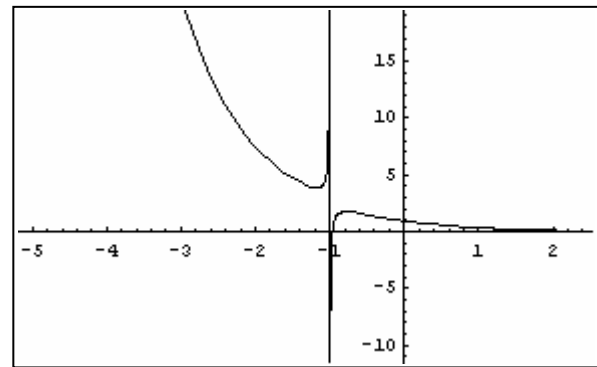


Abb. 2: $f_2(x)$

(Abb. erstellt mit Mathematica 5.0)

Für das Fixpunktverfahren müssen diese nach dem Muster $x = \phi(x)$ umgeformt werden:

$$x = 4 + 0.05x^2 - 0.01x^3 \quad (7)$$

$$x = 0.1e^x - 1 \quad (8)$$

Programmierung

Programmcode siehe Anhang.

Auswertung

Bisektionsverfahren

Das Bisektionsverfahren hat den Vorteil, dass es im Gegensatz zu anderen Methoden *immer* konvergiert. Dies rührt daher, dass bei dieser Methode von vornherein eine Nullstelle im

Intervall eingeschlossen ist, um die herum das Intervall sukzessive verkleinert wird. Allerdings handelt es sich nur um lineare Konvergenz, d.h. es sind viele Schritte notwendig um die Nullstelle zu erreichen. Für umfangreichere Berechnungen ist also das Bisektionsverfahren nicht unbedingt empfehlenswert, um die Rechenzeit möglichst gering zu halten.

In Tabelle 1 sind die Berechnungsschritte für die Funktion f_1 mit Startwerten von (2.0, 5.0) angegeben. Man kann hier gut sehen, dass die Anzahl der signifikanten Stellen nur linear zunimmt.

Tabelle 1:

steps	x	f(x)
0	3.5000000000000000	-0.6837500000000000E+02
1	4.2500000000000000	0.1145312500000000E+02
2	3.8750000000000000	-0.2939257812500000E+02
3	4.0625000000000000	-0.9222412109375000E+01
4	4.1562500000000000	0.1049713134765625E+01
5	4.1093750000000000	-0.4102451324462891E+01
6	4.1328125000000000	-0.1530433177947998E+01
7	4.1445312500000000	-0.2413808703422546E+00
8	4.1503906250000000	0.4039103165268898E+00
9	4.1474609375000000	0.8120084460824728E-01
10	4.1459960937500000	-0.8010597305838019E-01
11	4.1467285156250000	0.5434445483842865E-03
12	4.1463623046875000	-0.3978226191429712E-01
13	4.1465454101562500	-0.1961965811619848E-01
14	4.1466369628906250	-0.9538169144519770E-02
15	4.1466827392578125	-0.4497377888508680E-02
16	4.1467056274414063	-0.1976970567708403E-02
17	4.1467170715332031	-0.7167639840781059E-03
18	4.1467227935791016	-0.8665996145149069E-04

In den Abbildungen 3 bis 6 ist der in Tabelle 1 gezeigte Verlauf der Berechnung für verschiedene Methoden und Testfunktionen graphisch dargestellt. Auf der x-Achse sind die Ergebnisse der Berechnung schrittweise aufgetragen, die Anzahl der Schritte ist hierbei farbkodiert von rot (=0) bis blau.

In Abb. 3 ist leicht zu sehen, dass das Bisektionsverfahren gegenüber dem Newton-Algorithmus oder dem Fixpunktverfahren sehr lange braucht, nämlich 18 Iterationen, um zur Nullstelle zu gelangen, während das Newton-Verfahren nur 3 Schritte benötigt.

Newton-Verfahren

Das Newton-Verfahren bietet einen leistungsfähigen Algorithmus, der aufgrund seiner Iterationsvorschrift mit quadratischer Konvergenz zur Nullstelle führt. Der Abstand der Zwischenwerte zur wahren Nullstelle, ε_i , wird durch folgende Formel beschrieben, wobei x_0 die wahre Nullstelle ist:

$$\varepsilon_{i+1} = -\varepsilon_i^2 \cdot \frac{f''(x_0)}{2f'(x_0)} \quad (9)$$

Daraus geht hervor, dass das Newton-Verfahren quadratisch konvergiert, d.h. nahe an der wahren Nullstelle x_0 wird die Anzahl der signifikanten Stellen mit jedem Schritt verdoppelt. Graphisch dargestellt ist diese Eigenschaft besonders gut in Abb. 5. Die quadratische Konvergenz macht den Newton-Algorithmus zu einem geeigneten Instrument für numerische

Nullstellensuche, wenn die Konvergenzbedingung erfüllt ist, da dann das Verfahren sehr schnell zum Ergebnis kommt.

Die Konvergenzbedingung lautet für das Newtonverfahren:

$$\left| \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'(x)^2} \right| < 1 \quad (10)$$

Wenn diese Bedingung für alle $x \in (a,b)$ gegeben ist, konvergiert das Verfahren.

In diesem Zusammenhang ist anzumerken, dass das Newton-Verfahren für die Funktion f_2 nur sehr langsam konvergiert (?), während Bisektionsverfahren und Regula falsi schon nach einigen Iterationen die Nullstelle erreichen. Die beim Newton-Verfahren erreichte Nullstelle entspricht auch nicht exakt der vom Bisektions-Algorithmus errechneten. Es muss daher angenommen werden, dass für diese Funktion das Newton-Verfahren nicht bis zur exakten Nullstelle konvergiert, und/oder dass die Präzisionsabfrage in der Programmierung nicht geeignet ist (Abfrage der Genauigkeit in x laut Angabe) und man daher besser eine Abfrage der Genauigkeit in y vornehmen sollte.

Fixpunktverfahren

Das Fixpunktverfahren hat den Nachteil, dass es eine relativ eingeschränkte

Konvergenzbedingung bietet, nämlich $\left| \frac{d\phi}{dx} \right| < 1$. Das heißt, es muss sich um eine

kontrahierende Abbildung handeln, damit das Verfahren konvergieren kann. Dabei kommt es noch auf die Art der Umformung an, da diese nicht eindeutig ist. Für die von uns gewählte Darstellung von $\phi(x)$ (siehe Formel 8) ist $|\phi'(x)| > 1$. Daher konvergiert dieses Verfahren nicht für Funktion 2, wie in den Abbildungen 5 und 6 bzw. 9 und 10 zu sehen ist.

Regula Falsi

Das Regula Falsi- oder Sekanten-Verfahren zeigt in seinem Konvergenzverhalten sehr große Ähnlichkeit zum Bisektionsverfahren. Dies ist sehr gut in den Abbildungen 7 bis 10 zu erkennen. Wie beim Bisektionsverfahren wird ein Start-Intervall gewählt, in dem die Nullstelle eingeschlossen ist, und der jeweils nächste Iterationswert wird in einer Abwandlung des Newton-Verfahrens berechnet. Da die Vorgehensweise dem Bisektionsverfahren ähnelt, zeigt sich bei der Regula Falsi ebenfalls lineares Konvergenzverhalten. Anhand der Abbildungen ist die Ähnlichkeit der beiden Verfahren in ihrem Konvergenzverhalten offensichtlich.

Tabelle 2: Anzahl der benötigten Iterationsschritte

	$f_1(2.0, 5.0)$	$f_1(3.5, 5.0)$	$f_2(2.0, 5.0)$	$f_2(3.0, 4.0)$
Bisektion	18	17	7	5
Newton	3	3	72	66
Fixpunkt	3	3	-	-
Regula Falsi	18	17	7	5

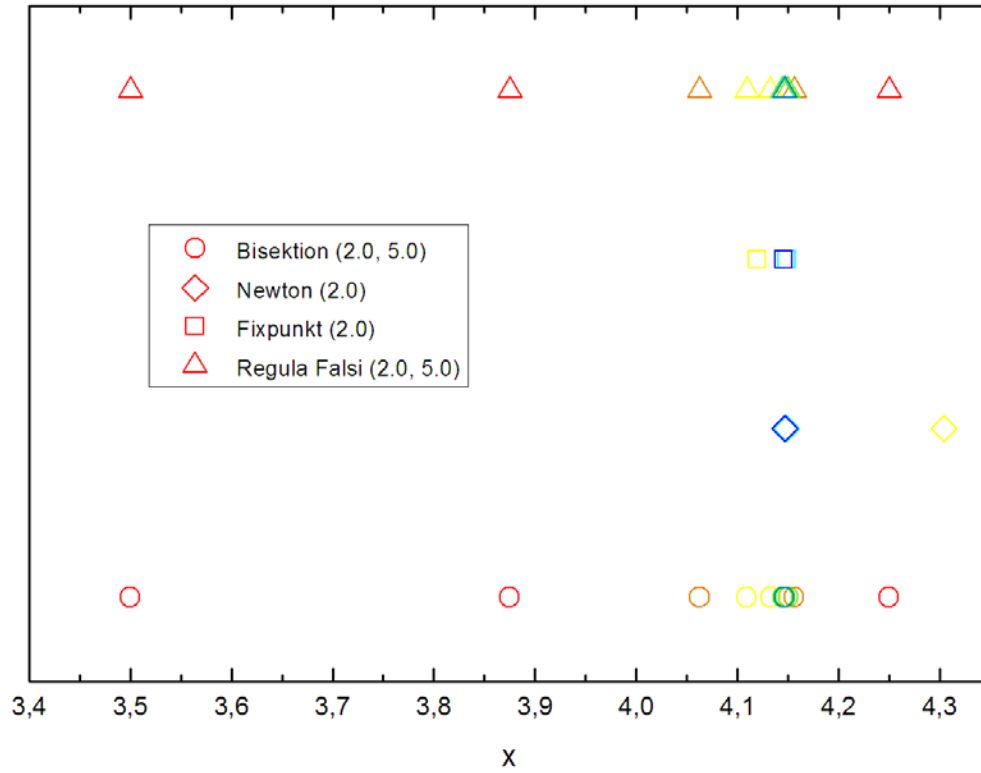


Abb. 3: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f_1 und Startwerten bzw. -Intervallen von 2.0, (5.0)

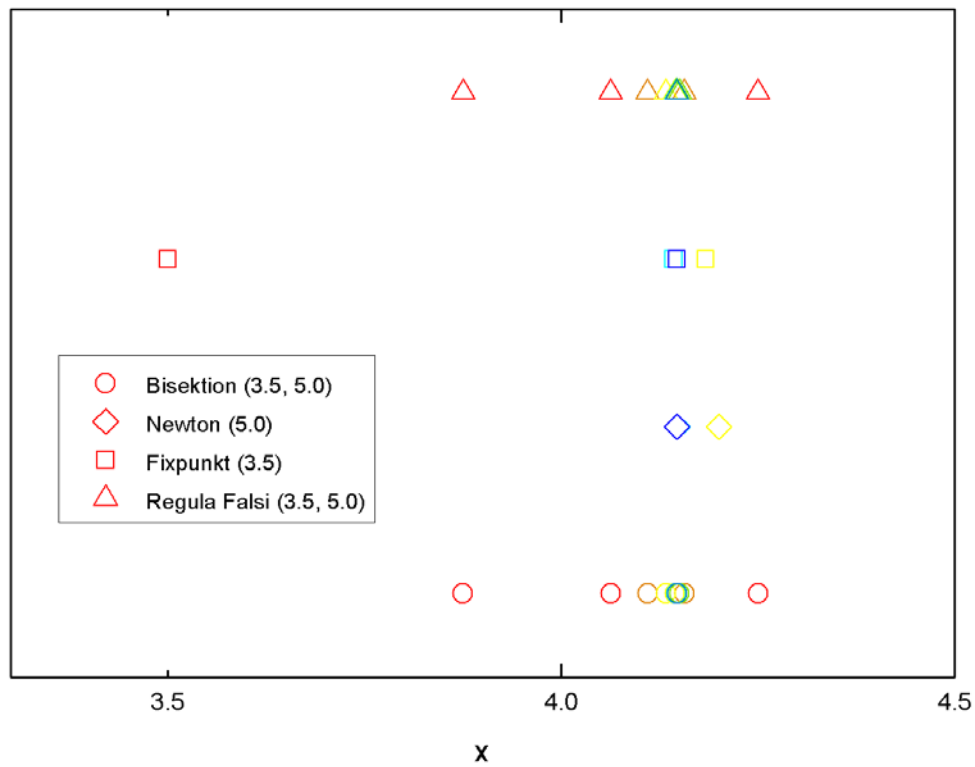


Abb. 4: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f_1 und Startwerten bzw. -Intervallen von 3.5, (5.0)

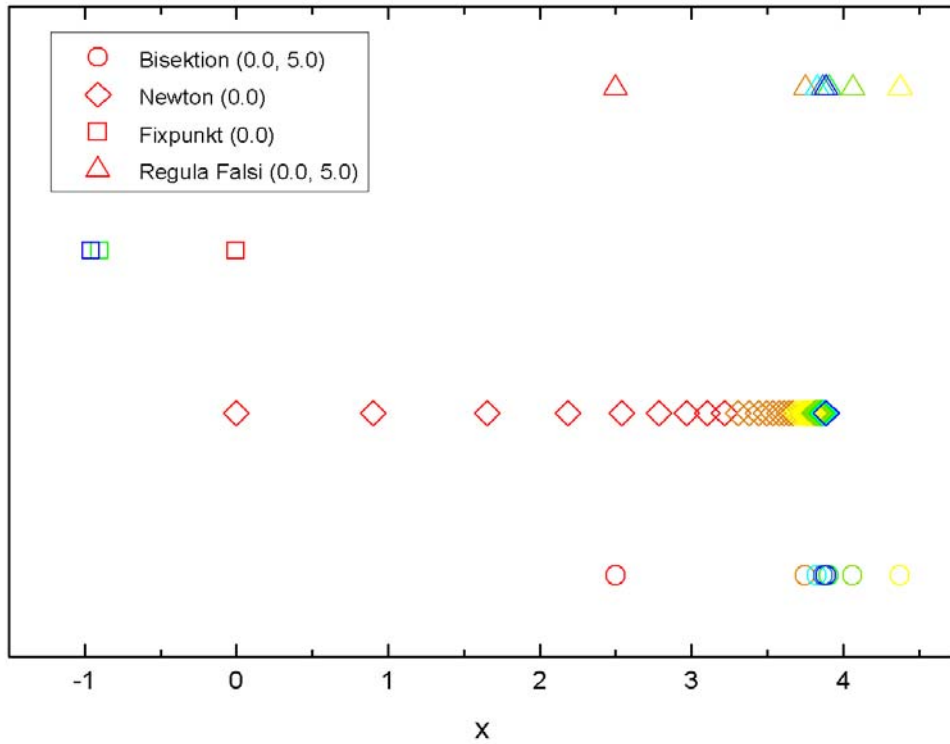


Abb. 5: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f_2 und Startwerten bzw. -Intervallen von 0.0, (5.0)

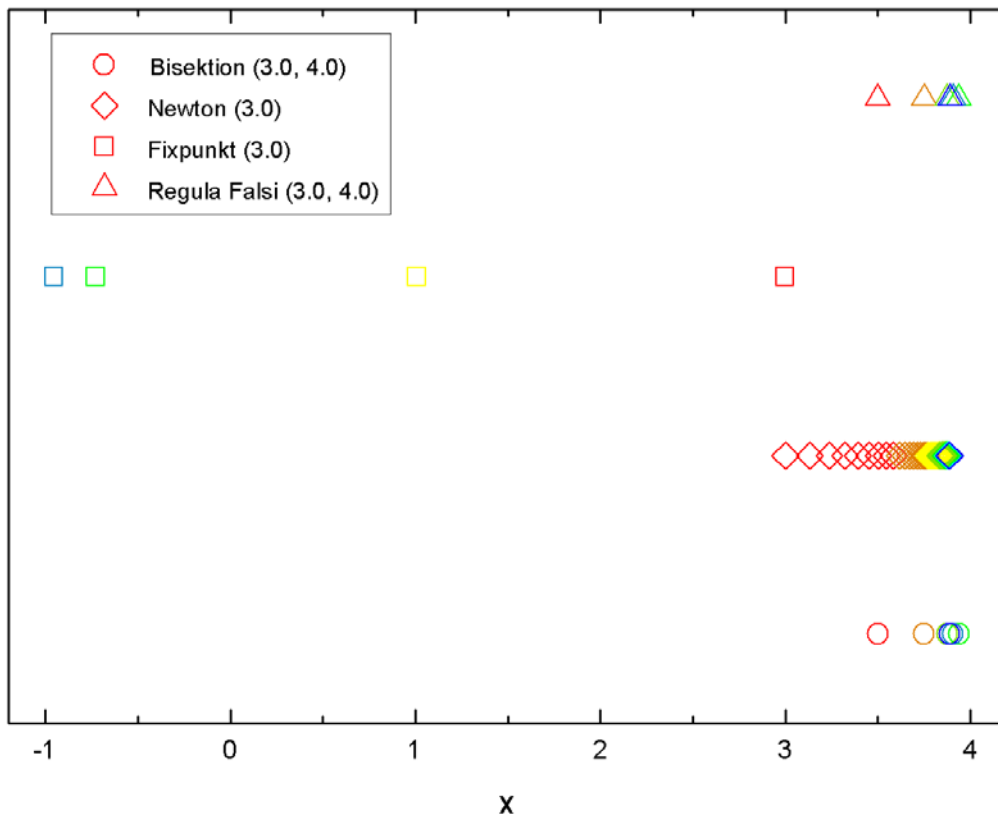


Abb. 6: Vergleich der Berechnung der Nullstelle mit der Funktion f_2 und Startwerten bzw. -Intervallen von 3.0, (4.0)

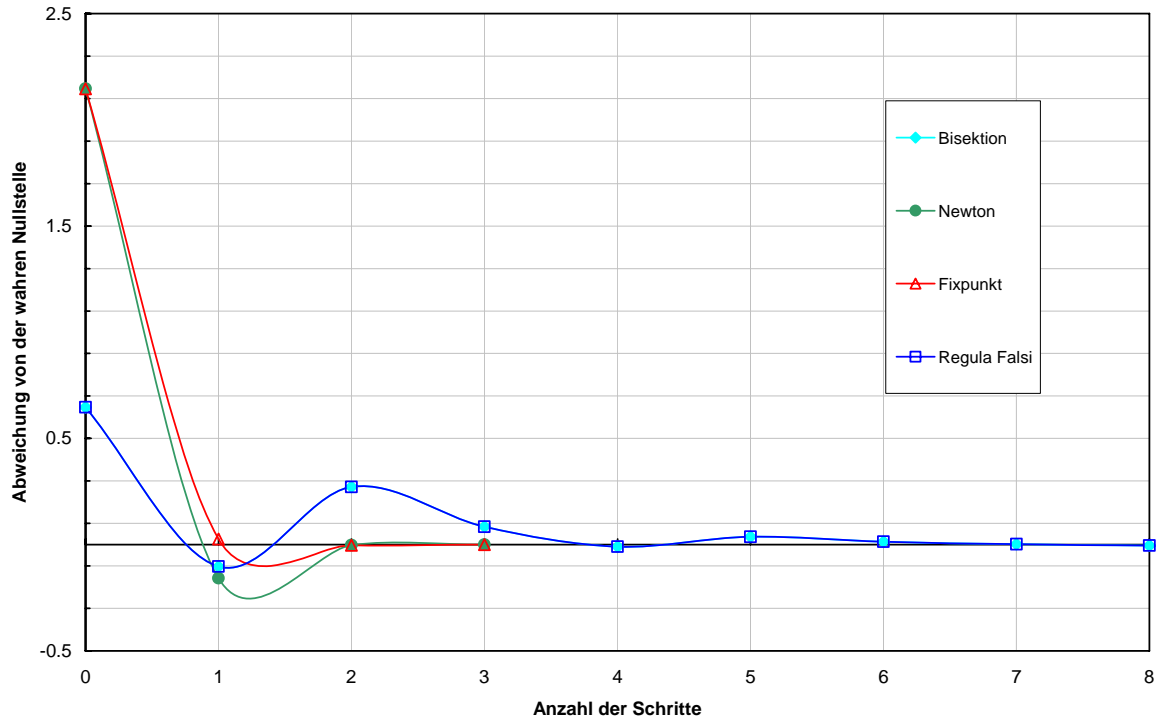


Abb. 7: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f1 und Startwerten bzw. – Intervallen von 2.0, (5.0)

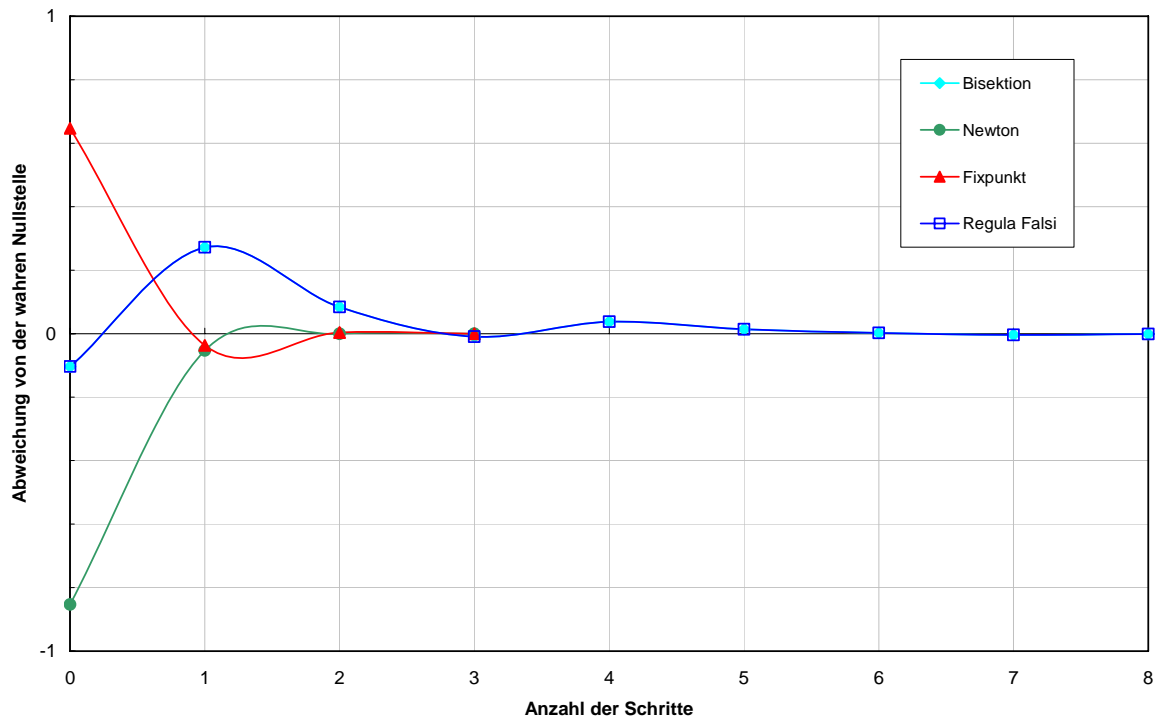


Abb. 8: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f1 und Startwerten bzw. – Intervallen von 3.5, (5.0)

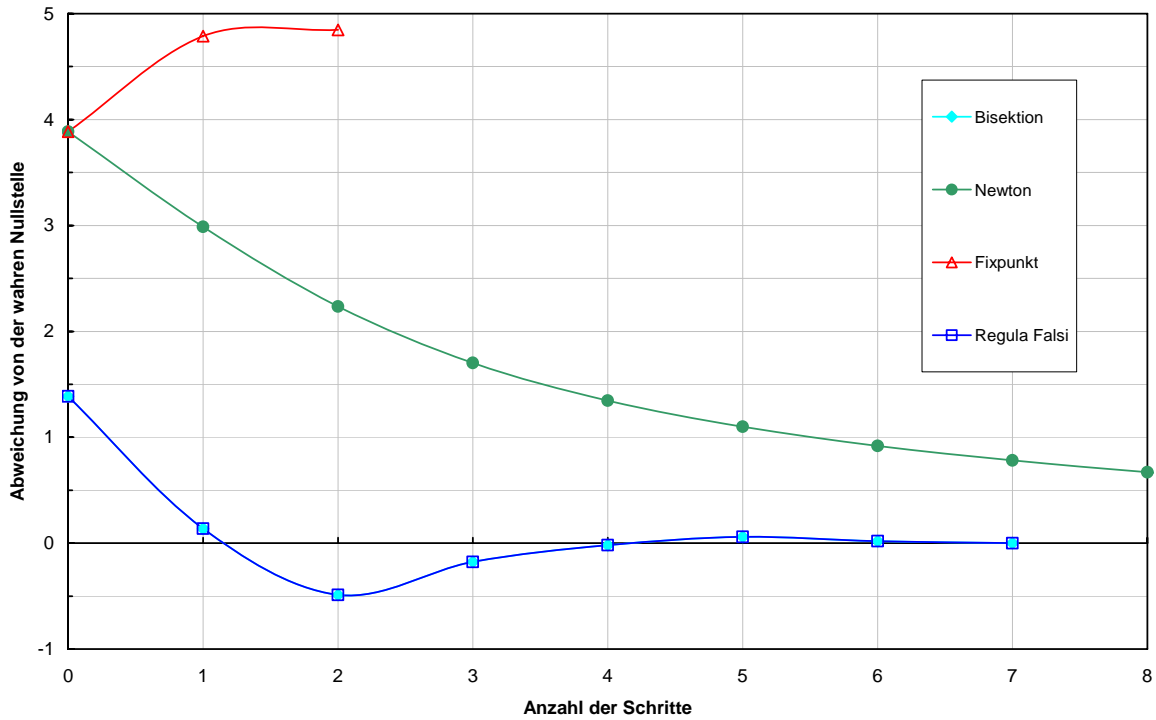


Abb. 9: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f2 und Startwerten bzw. – Intervallen von 0.0, (5.0)

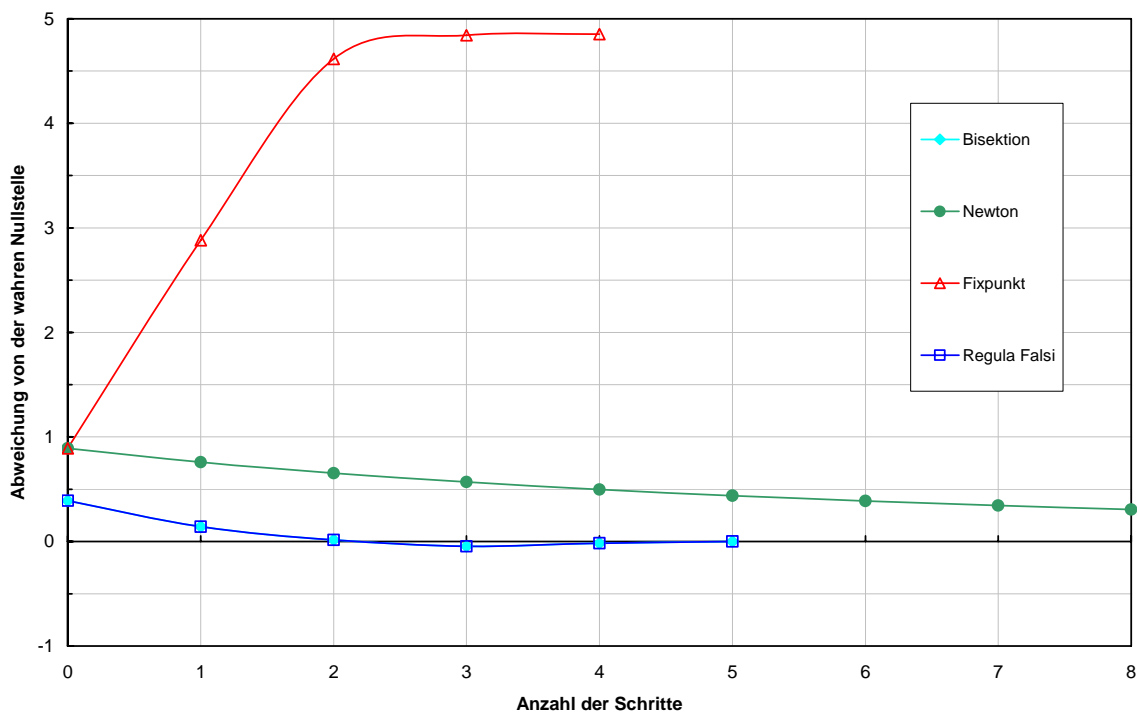


Abb. 10: Vergleich der Konvergenz der Verfahren anhand von Funktion f2 und Startwerten bzw. – Intervallen von 3.0, (4.0)

2. Teil: Ionisationsgleichgewicht von Helium

Aufgabenstellung

Wir mussten den Ionisationsgrad von Helium in Abhängigkeit von Temperatur und Anzahldichte bestimmen. Hierzu wurden Relationen, welche aus der Saha-Gleichung folgen, verwendet und die konkreten Ergebnisse sollten durch numerisches Lösen des nicht-linearen Gleichungssystem bestimmen werden.

Physikalische Bedeutung

Helium kann in 3 verschiedenen Ionisationsgraden auftreten und zwar als neutrales Helium (He I), als einfach ionisiertes Helium (He II) und als zweifach/vollständig ionisiertes Helium (He III). Unter Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichts und weiters unter der bei Helium in erster Näherung gerechtfertigten Vereinfachung, dass es keine angeregten Niveaus, sonder nur den Grundzustand und die Ionisation gibt, kann man die Boltzmann-Gleichung wie folgt anschreiben:

$$(1) \frac{n_{up}}{n_{low}} = \frac{g_{up}}{g_{low}} e^{-\frac{E_{up}-E_{low}}{k.T}}$$

Durch betrachten des oberen Zustands sehen wir, dass seine Energie sich auch der nötigen Ionisationsenergie und der kinetischen Energie des freien Elektrons zusammensetzt. Jedoch das statistische Gewicht g_{up} lässt sich wie folgt schreiben:

$$(2) g_{up} = g_{up}^{ion} \cdot g_{up}^{el}$$

Nun müssen wir uns überlegen, wie viele Energiezustände für ein freies Elektron möglich sind. Gemäß dem Pauli-Verbot dürfen keine zwei Fermionen (z.B. Elektronen), den gleichen quantenmechanischen Zustand einnehmen. Im Fall eines freien Teilchens mit Spin $\frac{1}{2}$ heißt dies dass in jeder Phasenraumzelle nur 2 (wegen Spin up und down) ansonsten ununterscheidbare Teilchen (Elektronen) sitzen dürfen. Das Volumen der Phasenraumzelle ist durch die Heisenberg'sche Unschärferelation bestimmt. Wenn wir nun den Impuls in Kugelkoordinaten betrachten so erhalten wir für ein bestimmtes Geschwindigkeitsintervall Δv folgende Relation für das statistische Gewicht des freien Elektrons:

$$(3) g_{up}^{el} = \frac{8\pi m^3 v^2 \Delta v}{h^3 n_e}$$

Nun braucht man nur mehr diese Ergebnisse in die Boltzmann-Gleichung einsetzen und eine Integration über alle Geschwindigkeiten ausführen und erhält dann die Saha-Gleichung:

$$(4) \frac{n_{up}}{n_{low}} = \frac{g_{up}}{g_{low}} \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_{up}-E_{low}}{kT}}$$

Nun definieren wir den Ionisationsgrad als Verhältnis der freien Elektronen zu den Heliumatomen:

$$(5) \quad \chi = \frac{N_e}{N_{He}} \quad \chi \in [0; 2]$$

Unter der Annahme, dass ein Heliumion nur immer in den nächst höheren bzw. nächst niedrigeren Zustand übergehen kann, können wir mittels der Saha-Gleichung zwei Ausdrücke herleiten, welche uns den Zusammenhang zwischen den Anzahlen der Heliumionen in den jeweiligen Zuständen bei vorgegebener Temperatur und Dichte angeben:

$$(6) \quad \begin{aligned} C_1(n, T) N_{II} \chi &= N_I \\ C_2(n, T) N_{III} \chi &= N_{II} \end{aligned}$$

Weiters gilt auch noch die Teilchenerhaltung:

$$(7) \quad N_I + N_{II} + N_{III} = N_{He} = \text{konst.}$$

und die Ladungserhaltung:

$$(8) \quad N_e = N_{II} + 2N_{III} = \text{konst}$$

Wenn wir nun die Formeln (6), (7) und (8) betrachten haben ein Gleichungssystem aus 4 Gleichung für 4 Unbekannte ($N_I, N_{II}, N_{III}, \chi$), welches wir nun nach dem Ionisationsgrad χ auflösen.

$$(9) \quad \chi = \frac{N_e}{N_{He}} = \frac{N_{II} + 2N_{III}}{N_I + N_{II} + N_{III}}$$

$$(10) \quad N_I \chi + N_{II} \chi + N_{III} \chi = N_{II} + 2N_{III}$$

$$(11) \quad C_1 N_{II} \chi^2 + N_{II} \chi + N_{III} \chi - N_{II} - 2N_{III} = 0$$

$$(12) \quad C_1 C_2 N_{III} \chi^3 + C_2 N_{III} \chi^2 + N_{III} \chi - 2N_{III} - C_2 N_{III} \chi = 0$$

Nun muss man nur mehr durch N_{III} dividieren und die Terme sortieren und man kommt zum Endresultat, welches nur noch von χ abhängt:

$$(13) \quad C_1 C_2 \chi^3 + C_2 \chi^2 + (1 - C_2) \chi - 2 = 0$$

Die Parameter C_1 und C_2 hängen nur von Temperatur und Anzahldichte ab. Die genaue Gestalt dieser Parameter erhält man durch Vergleich mit der Saha-Gleichung:

$$(14) \quad C_i = \frac{g_{low}}{g_{up}} (N_{He} \cdot \text{cm}^3) \cdot 2,07 \cdot 10^{-16} \left(\frac{T}{K} \right)^{-3/2} e^{-\frac{1,44 \cdot 10^8 \text{ \AA} K}{\lambda_i \cdot T}} \quad i = 1, 2$$

Durchführung

Die kubische Gleichung für χ kann sowohl numerisch als auch analytisch gelöst werden, deshalb entschieden wir uns beide Lösungsmöglichkeiten in das Programm einzubauen. Das Programm verfügt über ein Interface in dem man verschiedene Einstellung(wie z.B. Temperaturintervall) für die Berechnung auswählen kann. Im Falle der numerischen Lösung des Problems werden für die gewählte Temperatur und Dichte die Parameter C_1 und C_2 gemäß Formel (14) berechnet. Danach wird die Gleichung (13) mit Hilfe des Newtonverfahrens bis zur gewünschten Genauigkeit gelöst. Da eine physikalische Lösung für c nur zwischen 0 und 2 liegen kann, haben wir 1 als Startwert für das Lösungsverfahren gewählt. Eine graphische Darstellung des Polynoms (13) zeigt sehr deutlich, dass bei realistischen Werten für Temperatur und Dichte nur eine Nullstelle im physikalischen Lösungsbereich liegt. Darüber hinaus schließt die enorme Steigung des Polynoms in der Nähe der Nullstelle die Verwendung des Fixpunkt-Verfahrens aus. Auf Grund der gewünschten hohen Genauigkeit der Lösung von mindestens 10^{-4} ist das Bisektionsverfahren auch nicht optimal. Demnach erscheint das Newtonverfahren als eine geeignete Wahl, insbesondere da die analytische Ableitung von Gleichung (13) möglich und leicht durchzuführen ist:

$$(14) f'(\chi) = 3C_1C_2\chi^2 + 2C_2\chi + 1 - C_2$$

Zur analytischen Lösung der Gleichung (13) ist anzumerken, dass eine kubische Gleichung entweder 3 reelle Nullstellen(wobei auch doppelte möglich sind) oder nur eine reelle und 2 komplex konjugierte Nullstellen. In unseren Fall haben wir 3 reelle Nullstellen, wobei die Hauptnullstelle(wie man durch probieren feststellen kann) unserer physikalischen Lösung entspricht. Dies warf jedoch bei der Programmierung ein kleines Problem auf, da die Lösungsformel komplexe Zahlen in Zwischenschritten enthält. Da sie glücklicher Weise leicht als Wurzel einer negativen Zahl zu erkennen war, gingen wir wie folgt vor: Wir zogen die Wurzel des Betrags dieser Zahl und verwendet sie getrennt als Imaginärteil. Zum Ziehen einer dritten Wurzel aus der Summe dieser rein imaginären Größe und einer rein reellen Zahl, wandeln wir diese in komplexe Polarkoordinaten um, vollzogen die Rechenoperation dort und wandelten den sie wieder zurück um. Da danach für die Endlösung der Gleichung die Summe dieses Ergebnisses und des konjugiert komplexen desselben steht, fällt der Imaginärteil weg und unsere Lösung ist rein reell und somit auch physikalisch sinnvoll. Da wir im restlichen Programm DOUBLE PRECISION Variablen verwendeten wäre die Verwendung von Variablen des Typs COMPLEX nicht empfehlenswert, da jede Komponente dieser selbst nur dem Typ SINGLE entspricht und somit bei den extrem Größenordnungsunterschieden der Parameter C_1 und C_2 wichtige Rechengenauigkeit verloren geht.

Auswertung

Wenig überrascht nimmt der Ionisationsgrad mit zunehmender Temperatur zu. Auffällig ist der stufenförmige Verlauf der des Ionisationsgrad(siehe Abb.1). Ab einer gewissen Temperatur(abhängig von der Dichte) sind praktische alle Heliumatome einfach ionisiert. Dort tritt eine Sättigung ein, da die zusätzliche kinetische Energie(bei steigender Temperatur) noch nicht ausreicht um das Helium vollständig zu ionisieren. Ist aber wieder eine ausreichende Energie verfügbar so wird auch das letzten Elektron vom Helium „befreit“ bis bei einem c von ~ 2 fast nur noch Heliumkerne und freie Elektronen vorhanden sind. Dieses Plasma kann dann selbstverständlich nicht mehr weiter ionisiert werden und der Ionisationsgrad steigt dann nicht weiter mehr an. Der Anstieg bei den jeweiligen

Ionisationsstufen ist recht steil, da immer eine Schwellenenergie nötig ist um die Ionisation durchzuführen und sobald diese einmal vorhanden ist reichen schon gering größere Energiemengen um die restlichen Atome zu ionisieren. Dies ist analog zu Phasenübergängen in anderen Bereichen der Physik. Die zur Ionisation nötige Temperatur nimmt wie unsere Berechnungen zeigen mit der Dichte zu. Weiters nimmt auch die Ausprägung der Ionisationsstufen ab; die Kurve wird glatter (siehe Abb.2). Dies liegt daran, dass bei höheren Dichten die Rekombinationsmöglichkeiten der Elektronen höher sind und somit her kinetische Energie nötig ist um die Atome dauerhaft zu ionisieren. Da wir die Gleichung (13) für den Ionisationsgrad auch analytisch lösen konnten wir die Genauigkeit unserer numerischen Rechnung überprüfen. Bei unserer Berechnung hatten wir als Abbruchbedingung gewählt, dass die Werte zwischen zwei Iterationsschritten auf weniger als 10^{-4} übereinstimmen müssen. Somit wird der zu erwartenden Unterschied zwischen numerischen und analytischen Ergebnis in dieser Größenordnung liegen. Wie man in Abbildung 3 sehen kann, liegt der numerische Wert für weite Temperaturbereiche sogar noch weit genauer am analytischen. Nur bei geringen Temperaturen (vor der ersten Ionisationsstufe) erreicht die Abweichung zwischen bei den Werte das zulässige Maximum.

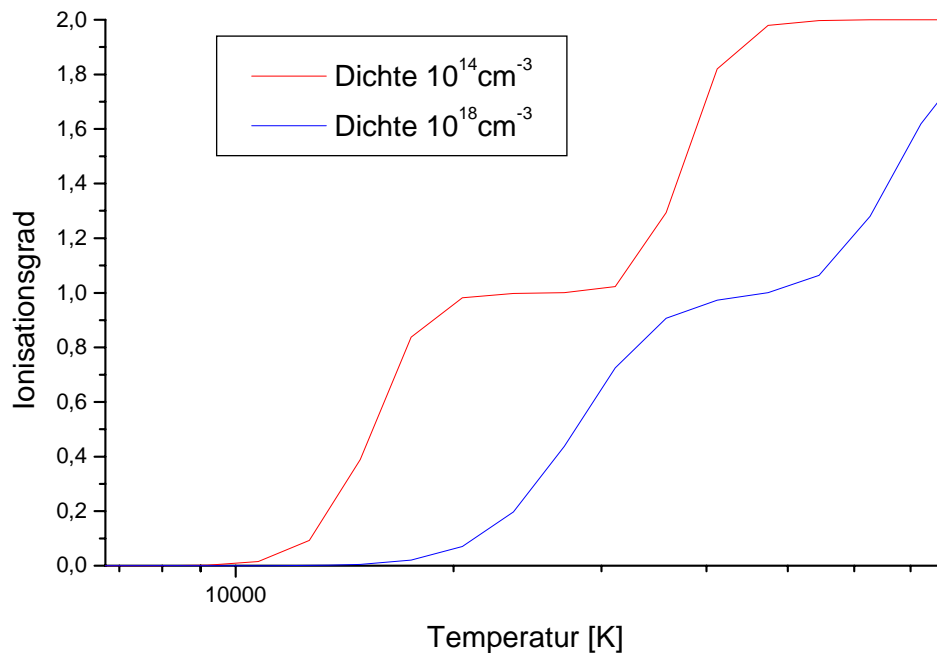


Abb.1: Verlauf des Ionisationsgrad in Abhängigkeit der Temperatur

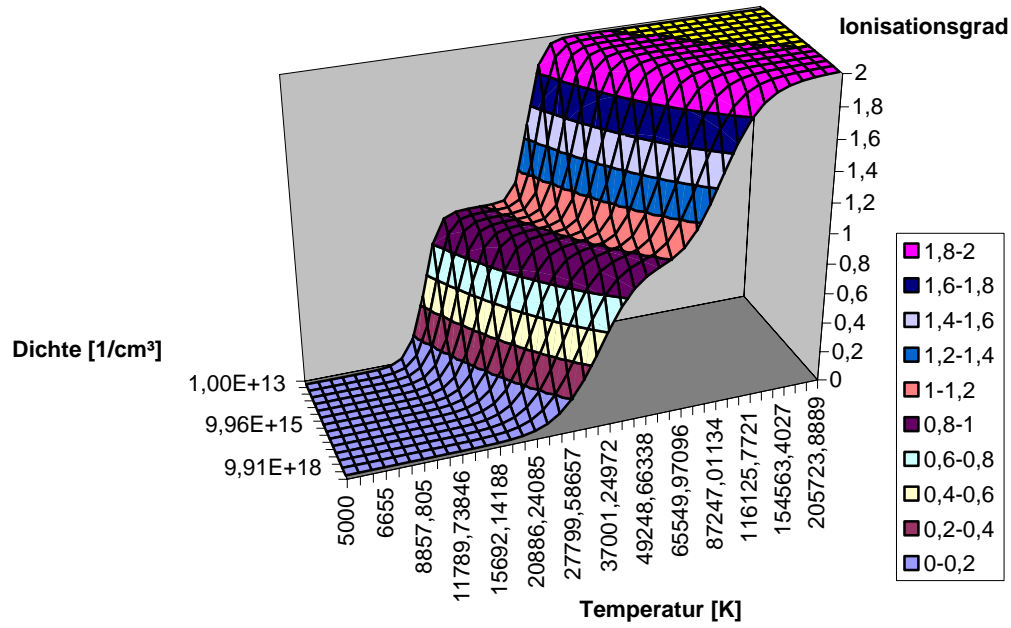


Abb.2: Temperatur-Dichten-Karte für den Ionisationsgrad

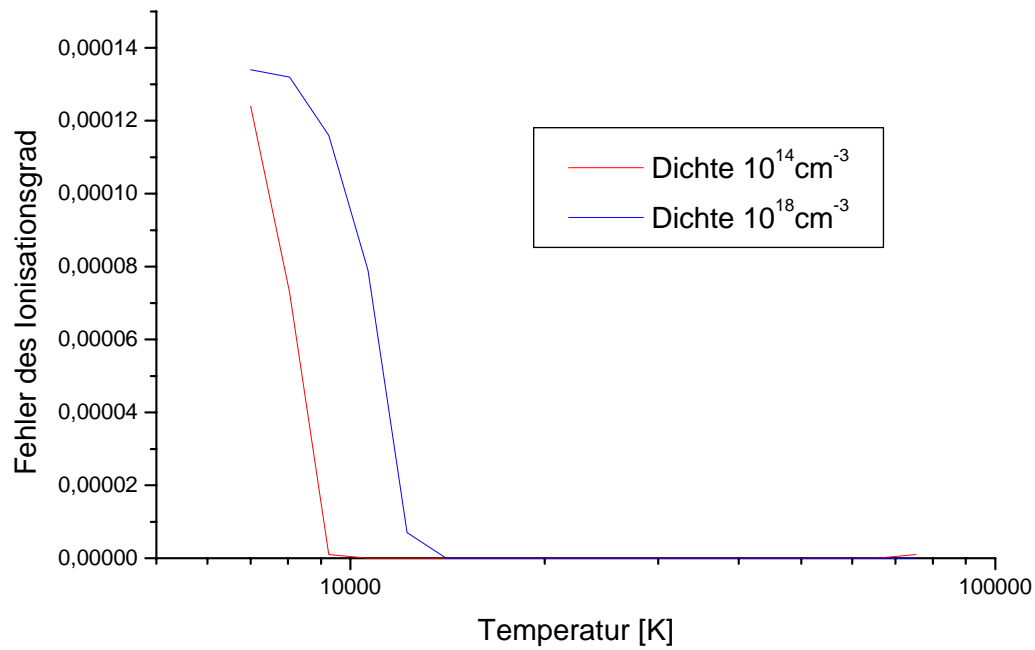


Abb.3: Fehler der numerischen Berechnung im Vergleich zum analytischen Ergebnis