

Nichtlineare photonische Kristalle: Computerunterstützter Beweis einer spektralen Bandlücke

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN

von der Fakultät für Mathematik der
Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte

DISSERTATION

von
Dipl.-Math. oec. Melanie Reimers
aus Stuttgart

Tag der mündlichen Prüfung: 04.05.2011

Referent: Prof. Dr. Michael Plum

Korreferent: Prof. Dr. Christian Wieters

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Projekts “Analysis, Simulation und Design nanotechnologischer Prozesse” an der Fakultät für Mathematik des Karlsruher Instituts für Technologie. Dafür wurde das Graduiertenkolleg 1294 mit mehreren das Gesamtthema bearbeitenden Doktoranden und Post–Doktoranden geschaffen.

Insbesondere möchte ich mich bei meinem Referenten Herrn Prof. Dr. Michael Plum bedanken, der mir die Möglichkeit gegeben hat diese Arbeit anzufertigen. Für die vielfältigen Anregungen zu dieser Arbeit und die Unterstützung bei der Durchführung danke ich ihm vielmals. Herrn Prof. Dr. Christian Wiens danke ich sehr für die hilfreichen und zielführenden Gespräche und für die Übernahme des Korreferates. Außerdem danke ich meinen Kolleginnen und Kollegen des Graduiertenkollegs für die interessanten und vielfältigen Diskussionen.

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit sollen dispersive zweidimensionale photonische Kristalle auf die Existenz einer spektralen Bandlücke untersucht werden, was letztlich auf eine Familie von λ -nichtlinearen Eigenwertproblemen führt. Zunächst sollen unter geeigneter Wahl der Permittivitätsfunktion $\epsilon(x, \lambda)$ ($x \in (0, 1)^2$, $\lambda \in \mathbb{R}$) numerische Näherungslösungen gefunden werden, die eine Bandlücke vermuten lassen. Im Anschluss werden verifizierte Schranken unter Berücksichtigung aller numerischer Fehler bestimmt.

Grundlage bildet die Arbeit [Hoa] zum Beweis einer Bandlücke für einen zweidimensionalen nicht-dispersiven photonischen Kristall mit einer periodischen, unstetigen Permittivitätsfunktion $\epsilon(x)$, $x \in (0, 1)^2$.

Mit Hilfe von computerunterstützten Methoden wird in einem Beispiel die Existenz zweier solcher Bandlücken bewiesen.

Es werden hierzu numerische Berechnungen mit Hilfe von MATLAB durchgeführt und basierend auf Sätzen von Rayleigh-Ritz und Lehmann-Goerisch verifizierte obere und untere Schranken mittels INTLAB bestimmt. Diese Berechnungen werden für ein endliches Gitter in der Brillouinzone K durchgeführt. Um die Eigenwertausschließung auf ganz K zu erweitern, wird ein Störungsargument entwickelt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Aufgabenstellung	1
1.3	Aufbau der Arbeit	2
2	Grundlagen	4
2.1	Physikalischer Hintergrund	4
2.1.1	Photonische Kristalle	4
2.1.2	Dielektrische Funktion	6
2.2	Computerunterstützter Beweis	8
2.3	Rayleigh–Ritz–Schranken	9
2.4	Lehmann–Goerisch–Schranken	12
2.5	Homotopieverfahren	17
3	Modellspezifikation	21
3.1	Eigenwertproblem und Maxwell–Gleichungen	21
3.2	Dielektrische Funktion	26
3.3	Irreduzible Brillouinzone	28
4	Schwache Formulierung des Problems	30
5	Numerische Approximation	33
5.1	Ansatzfunktionen	33
5.2	Berechnung des Integrals über der Kreisscheibe	38

5.3	Ergebnis der numerischen Approximation	43
6	Beweis einer Bandlücke	47
7	Nichtlineares Störungsargument	51
7.1	Störung in k	51
7.2	Berechnung des Abstands der Gitterpunkte	60
8	Rayleigh–Ritz–Verfahren	63
8.1	Rayleigh–Ritz (approximativ)	63
8.2	Rayleigh–Ritz (Schranken)	64
9	Lehmann–Goerisch–Verfahren	66
9.1	Goerischerweiterung	66
9.2	Homotopie	70
10	Beispiele	77
11	Programme	87
12	Zusammenfassung	109
13	Anhang A	111
14	Anhang B	113

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Gegenstand der Untersuchungen sind zweidimensionale dispersive photonische Kristalle. Die Bedeutung der Arbeit liegt darin, dass die Frequenzabhängigkeit der Permittivitätsfunktion ϵ , auch dielektrische Funktion genannt, berücksichtigt wird. Dies ist physikalisch wichtig, da in realen Medien der Brechungsindex von der Frequenz ω abhängt.

Die Permittivitätsfunktion ϵ kann z. B. mit Hilfe des Lorentz-Oszillator-Modells beschrieben werden. Mathematisch führt dies auf ein λ -nichtlineares Eigenwertproblem, da der Parameter $\lambda = \omega^2$ sowohl als Eigenwertparameter als auch als Parameter in der Permittivitätsfunktion ϵ vorkommt.

1.2 Aufgabenstellung

Ausgangspunkt sind die Maxwell-Gleichungen, mit denen die Lichtausbreitung beschrieben werden kann. Betrachtet werden transvers magnetisch polarisierte monochromatische Wellen und zweidimensionale periodische Strukturen, was auf folgende Gleichung führt:

$$-\Delta u = \lambda \epsilon(x, \lambda) u, \quad x \in \mathbb{R}^2. \quad (1.1)$$

Die detaillierte Herleitung erfolgt in Kapitel 3.1.

Unter der Annahme, dass die Floquet–Bloch–Theorie auch in der hier behandelten λ –nichtlinearen Situation anwendbar ist, werden die spektralen Bänder des Ganzraumproblems (1.1) durch die Schar von Eigenwertproblemen

$$\begin{aligned} -\Delta u &= \lambda \epsilon(x, \lambda) u, & x \in \Omega = (0, 1)^2, & u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2) \\ u(x + e_j) &= e^{ik \cdot e_j} u(x), & j &= 1, 2. \end{aligned} \quad (1.2)$$

auf der Periodizitätszelle Ω von $\epsilon(\cdot, \lambda)$ beschrieben, wobei Ω als von λ unabhängig angenommen wird und k die Brillouinzone $K = (-\pi, \pi]^2$ durchläuft.

Die Permittivitätsfunktion ϵ wird in dieser Arbeit als reellwertig und positiv angenommen (keine Absorption, kein Energieverlust), damit der zugrundeliegende elliptische Operator mit Definitionsbereich $H^2(\mathbb{R}^2)$ selbstadjungiert ist und somit Variationscharakterisierungen von Eigenwerten zur Verfügung stehen. Auf die Permittivitätsfunktion wird in den Kapiteln 2.1.2 und 3.2 näher eingegangen.

Ziel dieser Arbeit ist es, spektrale Bandlücken mit computerunterstützten Methoden nachzuweisen. Dies zu zeigen verlangt sowohl den Einsatz analytischer Methoden zur Entwicklung der Einschließungstheorie als auch numerische Verfahren, welche zum Teil verifizierend mit Intervallarithmetik durchzuführen sind.

Methoden und Arbeiten zu Eigenwerteinschließungen mittels computerunterstützter Beweismethoden findet man in [Plu] und speziell für selbstadjungierte Operatoren in [PluE], [Behn] und [Zim].

1.3 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 werden zunächst die benötigten Grundlagen beschrieben und die Frage beantwortet, was photonische Kristalle sind und was unter der dielektrischen Funktion zu verstehen ist. Es wird in groben Zügen erklärt, welche Grundgedanken ein computerunterstützter Beweis beinhaltet. Außerdem werden die in der Arbeit verwendeten numerischen Konzepte näher erläutert.

Anschließend behandelt Kapitel 3 die Modellierung des hier betrachteten Pro-

blems. Dazu gehören die Gewinnung des untersuchten Problems aus den Maxwell-Gleichungen, die Modellierung der dielektrischen Funktion und die mögliche Einschränkung der Berechnungen auf die irreduzible Brillouinzone.

Im 4. Kapitel wird die schwache Formulierung des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems vorgestellt, die insbesondere für die numerische Vorgehensweise benötigt wird und Ausgangspunkt für die im Anschluss folgenden Berechnungen bildet.

Das 5. Kapitel beschreibt, wie numerische Näherungslösungen gefunden wurden, die auf eine Bandlücke hinweisen. Gesondert betrachtet wird in diesem Kapitel die Berechnung des Integrals über der Kreisscheibe, das für die Aufstellung des zu lösenden Matrixeigenwertproblems benötigt wird.

Kapitel 6 liefert schließlich die Idee für den Beweis einer Bandlücke basierend auf den Sätzen von Rayleigh–Ritz und Lehmann–Goerisch für λ -lineare Eigenwertprobleme.

Im 7. Kapitel wird ein nichtlineares Störungsargument entwickelt, das die Eigenwerteinschließung innerhalb der gesamten irreduziblen Brillouinzone K garantiert, obwohl die Berechnung nur für eine endliche Anzahl an Gitterpunkten $(k_1, k_2) \in K$ erfolgt. Zudem werden die Abstände zwischen den Gitterpunkten quantifiziert.

Die Berechnung der oberen und unteren Schranken wird in Kapitel 8 und 9 erläutert.

Letztlich folgen Beispiele (Kapitel 10), die geschriebenen Programme (Kapitel 11) und abschließend noch eine kurze Zusammenfassung der Arbeit (Kapitel 12).

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Physikalischer Hintergrund

2.1.1 Photonische Kristalle

Glasfasern leiten Lichtsignale beinahe mit Lichtgeschwindigkeit, während für Strom in Kupferkabeln nur ein Zehntel dieser Geschwindigkeit erreichbar ist. Durch den hohen Widerstand sind bei Strom die Leitungsverluste vor allem bei langen Kabeln groß, wohingegen in Glasfasern nur wenig Information verloren geht. Da sich die einzelnen Lichtwellen im Gegensatz zu Elektronenwellen gegenseitig kaum beeinflussen, können beliebig viele Glasfasern gebündelt werden. Dies ist in Kupferkabeln nur eingeschränkt möglich, denn das Magnetfeld, das durch den Strom induziert wird, beeinflusst die Information in den Nachbaradern ([Qua]).

Allerdings wird ein Material benötigt, mit dem die Lichtwellen gesteuert und in die gewünschten Bahnen gelenkt werden können. Glasfasern leiten das Licht zwar gut, eine zu starke Krümmung führt jedoch zum Entweichen des Lichts. Somit könnte ein Chip mit Glasfasern nicht optisch verdrahtet werden ([Pro]).

Gesucht wird ein optischer Schalter, der die Lichtimpulse so umschalten und verteilen kann, wie ein Transistor die Ströme in elektrischen Schaltungen lenkt. Er müsste in Abhängigkeit von der Wellenlänge des eingestrahlten Lichts in der Lage sein, Lichtströme zu reflektieren, umzulenken und weiterzuleiten. Ein Schaltelement

mit dieser Eigenschaft wird photonischer Kristall genannt.

Ein zweidimensionaler photonischer Kristall ist eine in zwei Dimensionen periodische Anordnung, vorstellbar beispielsweise als Stäbe in Luft oder längliche Poren in einem Medium. Enthält ein solcher Kristall einen linienförmigen Defekt, kann er als idealer Wellenleiter verwendet werden. Eine Lichtwelle, deren Frequenz in der Bandlücke des Kristalls liegt, kann sich nur längs des Defekts ausbreiten ohne in die umliegende, periodisch geordnete Struktur eindringen zu können. Licht lässt sich auf diese Weise leiten.

Um eine Bandlücke erwarten zu können, braucht man ein Material, das sehr spezielle und aufeinander abgestimmte dielektrische Eigenschaften hat. Eine geeignete periodische Anordnung von Luft und Halbleitern wie Silizium, Germanium, Galliumarsenid und Indiumphosphid ist eine mögliche Realisierung, da innerhalb des Materials Bereiche mit großem und kleinem Brechungsindex periodisch abwechseln müssen. Die räumliche Periode muss die gleiche Größenordnung haben wie die Wellenlänge des Lichts.

Ein photonischer Kristall ist ein künstlich angeordnetes, periodisches, dielektrisches Medium, in dem Licht geleitet werden kann. Er ist ein optisches Gitter, bei dem die Gitterabstände im Bereich der Wellenlänge des Lichts um 500 nm liegen. In ihm verhalten sich elektromagnetische Wellen ganz ähnlich wie Elektronenwellen in einem Halbleiterkristall.

Mit dem Einsatz von photonischen Kristallen kann beispielsweise die Abstrahlung von planaren Antennen verbessert werden. Dazu wird eine solche Antenne auf einem photonischen Kristall befestigt, wobei die von der Antenne abgestrahlten Frequenzen in einer Bandlücke liegen. Die Antenne strahlt dann nur in die Umgebung und nicht in das Trägermaterial.

Weitere Anwendung sind Transistoren auf der Grundlage photonischer Kristalle. Ein Lichtimpuls soll die optischen Eigenschaften des Kristalls vorübergehend so verändern können, dass es ihm in der Bandlücke möglich wird, den Kristall zu durchqueren.

2.1.2 Dielektrische Funktion

Das dielektrische und somit das optische Verhalten eines Festkörpers wird durch seine Dielektrizitätsfunktion, auch dielektrische Funktion oder Permittivitätsfunktion genannt, bestimmt. Grundsätzlich besteht bei einem Festkörper ein Zusammenhang zwischen der Dielektrizitätskonstanten, die durch das Material des Festkörpers bestimmt wird, und der Polarisierbarkeit seiner Gitteratome, also einer atomaren Eigenschaft des Festkörpers. Werden dielektrische Substanzen in ein elektrisches Feld gebracht, dann erfahren die Elektronen gegenüber den Atomkernen eine Auslenkung aus der Gleichgewichtslage, wodurch elektrische Dipole entstehen. Dieser Vorgang wird als elektronische Polarisation bezeichnet ([Kop], S. 206 ff.).

Um zu sehen, wie die Dielektrizitätsfunktion von der Frequenz abhängig ist, kann das Lorentz-Oszillator-Modell herangezogen werden. Ein Elektron wird durch ein zeitlich periodisches elektrisches Wechselfeld mit der Kreisfrequenz ω aus seiner Gleichgewichtslage gebracht und zu einer Schwingung angeregt. Diese wird durch gleichzeitige Energieabstrahlung des schwingenden Dipols gedämpft. Aus der Bewegungsgleichung des Lorentz-Oszillator-Modells erhält man die Formel zur Berechnung der elektronischen Polarisierbarkeit:

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega - i\beta\omega}$$

(e : Ladung des Elektrons, ϵ_0 : Elektrische Feldkonstante ($8.8541 \cdot 10^{-12} \text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$), m : Masse des Elektrons, ω_0 : Kreisfrequenz des ungedämpften Oszillators, β : Dämpfungskonstante).

Mit Hilfe der Clausius-Mossottischen-Beziehung,

$$\frac{1}{3} N_V \alpha(\omega) = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2}$$

(N_V : Anzahl der Moleküle je Volumeneinheit),

auch Maxwell-Garnett-Theorie genannt, kann die makroskopische Größe $\epsilon(\omega)$, die dielektrische Funktion, mit der mikroskopischen Größe $\alpha(\omega)$ in Verbindung gesetzt

werden:

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega) &= 1 + \frac{N_V e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega - i\beta\omega - \frac{1}{3}N_V \frac{e^2}{\epsilon_0 m}} \\ &= 1 + \frac{N_V e^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_1^2 - \omega - i\beta\omega} \\ \text{mit } \omega_1^2 &= \omega_0^2 - \frac{1}{3}N_V \frac{e^2}{\epsilon_0 m} .\end{aligned}$$

Zerlegt man die dielektrische Funktion in Real- und Imaginärteil,

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_R(\omega) + i\epsilon_I(\omega),$$

so sind diese für nichtmagnetische Isolatoren durch die Beziehung

$$(n + i\kappa)^2 = \epsilon_R(\omega) + i\epsilon_I(\omega)$$

mit den optischen Konstanten Brechungsindex n und Absorptionskoeffizient κ miteinander verbunden, also

$$\epsilon_R = n^2 - \kappa^2 \text{ und } \epsilon_I = 2n\kappa.$$

Der Bereich, in dem die Resonanzfrequenz ω_1 der dielektrischen Funktion liegt und in dem der Imaginärteil $\epsilon_I(\omega)$ nicht verschwindet, also Absorption stattfindet, wird Resonanzbereich genannt. Außerhalb dieses Resonanzbereiches nimmt der Absorptionskoeffizient κ den Wert Null an. Dort gilt somit für den Brechungsindex $n = \sqrt{\epsilon_R(\omega)}$. Ein Medium, in dem keine Absorption stattfindet, wird transparent genannt.

Die Erscheinung, dass elektromagnetische Wellen mit unterschiedlicher Frequenz verschieden stark gebrochen werden, heißt Dispersion. Wenn die Brechzahl stetig vom roten bis zum violetten Ende des Spektrums ansteigt, spricht man von normaler Dispersion. Anomale Dispersion bedeutet, dass die Brechzahl mit größer werdender Frequenz kleiner wird. Diese tritt in der Nähe der Resonanzfrequenz ω_1 auf, dort wo der Imaginärteil $\epsilon_I(\omega)$ der dielektrischen Funktion ungleich Null ist.

Im Bereich normaler Dispersion, also nicht in der Nähe einer Oszillatorresonanz, kann $\epsilon_I(\omega)$ vernachlässigt werden. Zur Beschreibung der Abhängigkeit des Brechungsindex n eines isotropen, transparenten Mediums von der Wellenlänge des

Lichts, stellt die Sellmeier-Reihe eine mögliche Alternative zum Lorentz-Oszillator-Modell dar. Setzt man $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, wobei λ die Wellenlänge und c die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle bezeichne, so kann sie wie folgt beschrieben werden:

$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_t \chi_{0_t} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_t^2}$$

mit den Sellmeier-Koeffizienten χ_{0_t} und λ_t ([Sal], S. 79 f.).

Wir gehen in der vorliegenden Arbeit davon aus, dass normale Dispersion vorliegt, was bedeutet, dass der Realteil von $\epsilon(\omega)$ monoton in ω wächst. Da wir außerdem annehmen, dass keine Absorption vorliegt, also $\epsilon(\omega)_I = 0$ gilt, wird $\epsilon(\omega)$ als positive, monoton wachsende und beschränkte Funktion modelliert.

2.2 Computerunterstützter Beweis

Folgende Fixpunktmethodologie soll ein einführendes Beispiel dafür sein, was unter einem computerunterstützten Beweis zu verstehen ist.

Sei $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Gesucht wird eine Nullstelle von F . Angenommen es seien $v, w \in \mathbb{R}$ mit $F(v)F(w) < 0$, $v < w$ bekannt. Nach dem Zwischenwertsatz existiert ein $u \in \mathbb{R}$ mit $F(u) = 0$ und $v < u < w$.

Computerunterstützung ist nun sinnvoll, wenn v und w erst noch gesucht werden: Zunächst wird mit 'klassischer' Numerik eine Näherungslösung $\tilde{u} \in \mathbb{R}$ (d. h. $|F(\tilde{u})|$ 'klein') berechnet. Dann wird ein 'kleines' $z > 0$ gewählt und $v := \tilde{u} - z$, $w := \tilde{u} + z$ gesetzt. Liefert ein anschließender Test, dass $F(v)F(w) < 0$ (unter der Annahme, dass ein präziser Algorithmus zur Auswertung von F zur Verfügung steht, der hier zumindest das richtige Vorzeichen liefert), dann sind die Voraussetzungen des Zwischenwertsatzes erfüllt.

Dieses einfache Beispiel beinhaltet bereits die wesentlichen Elemente eines computergestützten Existenz- und Einschließungssatzes:

1. Ein analytisches Theorem dient als Basis.
2. Eine Näherungslösung wird mit Hilfe 'klassischer' Numerik berechnet.
3. Ein a posteriori - Einschließungsschritt wird benötigt. In diesem Beispiel entspricht das der Konstruktion von v und w und der Überprüfung von $F(v)F(w) < 0$.

(siehe [PluV])

2.3 Rayleigh–Ritz–Schranken

Da die Schar λ -nichtlinearer Eigenwertprobleme (1.2) nicht geschlossen gelöst werden kann, erfolgt die Herangehensweise zunächst approximativ, also mit Hilfe numerischer Methoden. Hierfür muss der unendlichdimensionale Raum $H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$ durch einen endlichdimensionalen ersetzt werden.

Wir wollen innerhalb eines Intervalls I eine Eigenwertausschließung einer Familie von λ -nichtlinearen Eigenwertproblemen (1.2) für alle $k \in K$ beweisen. Dafür benötigen wir bei geeignetem m Eigenwertschließungen der $(m-1)$ -sten und m -ten Eigenwerte und somit obere und untere Schranken für diese. Zur Berechnung der oberen Schranken verwenden wir das Verfahren von Rayleigh–Ritz (siehe [Plu]).

Sei $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ ein unendlichdimensionaler Hilbertraum. \mathcal{M} sei eine hermitesche, positiv semidefinite Sesquilinearform auf $D(\mathcal{M}) \subset H$. Wir betrachten das Eigenwertproblem: Suche $\phi \in D(\mathcal{M}) \setminus \{0\}$, $\lambda \in \mathbb{R}$, so dass

$$\mathcal{M}(\phi, \psi) = \lambda \langle \phi, \psi \rangle \tag{2.1}$$

für alle $\psi \in D(\mathcal{M})$.

Es existiere ein vollständiges Orthonormalsystem $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ aus Eigenelementen $\varphi_n \in D(\mathcal{M})$ mit zugehöriger Folge von Eigenwerten $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$, so dass $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$

mit $\lambda_n \rightarrow \infty$.

Satz 2.3.1. (Rayleigh-Ritz)

$\phi_1, \dots, \phi_n \in D(\mathcal{M})$ seien linear unabhängig. Definiere

$$A_1 = (\mathcal{M}(\phi_j, \phi_l))_{j,l=1,\dots,N}, \quad A_2 = (\langle \phi_j, \phi_l \rangle)_{j,l=1,\dots,N}$$

Die Eigenwerte des Matrixeigenwertproblems $A_1 u = \Lambda A_2 u$ seien mit $\Lambda_1 \leq \dots \leq \Lambda_N$ bezeichnet. Dann gilt

$$\lambda_m \leq \Lambda_m \quad (m = 1, \dots, N).$$

Der Beweis (siehe Anhang A) des Satzes von Rayleigh-Ritz zur Berechnung oberer Schranken basiert auf der folgenden variationellen Charakterisierung der Eigenwerte:

Satz 2.3.2. (Min-Max-Prinzip von Poincaré)

Für allen $n \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\lambda_n = \min_{U \subset D(\mathcal{M}), \dim U = n} \max_{\phi \in U \setminus \{0\}, \langle \phi, \phi \rangle = 1} \mathcal{M}(\phi, \phi)$$

Mit Hilfe des Rayleigh-Ritz-Verfahrens können wir Näherungen für die Eigenwerte und die zugehörigen oberen Schranken berechnen. Da wir verifizierte obere Schranken suchen, führen wir die Rayleigh-Ritz-Methode zweimal durch.

Die numerische Prozedur erfolgt in folgenden zwei Schritten:

- (RR1) Wähle M linear unabhängige Ansatzfunktionen $\phi_1, \dots, \phi_M \in D(\mathcal{M})$ und bilde die $M \times M$ -Matrizen A_1 und A_2 wie in Satz 2.3.1. Nachdem das Eigenwertproblem $A_1 u = \tilde{\Lambda} A_2 u$ mit Hilfe einer bekannten numerischen Methode wie beispielsweise mittels des QR-Algorithmus näherungsweise gelöst ist, sollte für die Eigenwerte $\tilde{\Lambda}_1, \dots, \tilde{\Lambda}_M$ und die zugehörigen Eigenvektoren $u^{(1)}, \dots, u^{(M)} \in \mathbb{C}^M$ Folgendes gelten:

$$(u^{(j)})^T A_2 \bar{u}^{(l)} \approx \delta_{jl} \quad \text{und} \quad (u^{(j)})^T A_1 \bar{u}^{(l)} \approx \tilde{\Lambda}_j \delta_{jl} \quad (\delta_{kl} : \text{Kronecker-Delta}).$$

Denn dann sind die ersten N Werte $\tilde{\Lambda}_1, \dots, \tilde{\Lambda}_N$, wobei N viel kleiner als M ist, gute Näherungen für die Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ und die

$$\tilde{u}_n := \sum_{t=1}^M u_t^{(n)} \phi_t \quad (n = 1, \dots, N) \quad (2.2)$$

gute Näherungen für die Eigenelemente $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ von (2.1). Um solche Näherungen zu erhalten, sollte man die Ansatzfunktionen ϕ_1, \dots, ϕ_M so wählen, dass die wahren Eigenelemente “nicht weit” von $\text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_M\}$ entfernt sind.

(RR2) Schritt (RR1) wird unter folgenden Änderungen wiederholt: Diesmal wird $M := N$ gesetzt und als Ansatzfunktionen werden die approximativen Eigenelemente $\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N$ genommen. Alle Berechnungen in diesem Schritt werden mit Intervallarithmetik implementiert. Das zugehörige Matrixeigenwertproblem muss verifiziert gelöst werden.

Die Ergebnisse in diesem zweiten Schritt sind die verifizierten oberen Schranken $\Lambda_1, \dots, \Lambda_N$ für die Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ des Eigenwertproblems (2.1).

Für die zu verifizierenden Rechnungen verwenden wir die MATLAB (MATrix-LABoratory) Toolbox INTLAB (INTervalLABoratory), um die Rundungsfehler zu berücksichtigen, die bei Zahlen auftreten, die im Binärsystem nicht exakt dargestellt werden können. Es werden Intervalle erzeugt und ausgegeben, innerhalb derer sich der exakte Wert befindet. Desweiteren ermöglicht INTLAB das Rechnen mit Intervalleingaben, wenn beispielsweise ein Parameter nicht genau bekannt ist, von dem man aber weiß, dass er in einem bestimmten Intervall liegt. INTLAB verwendet die Unterroutinen BLAS (BasicLinearAlgebraSubroutines) zur Durchführung von Intervallberechnungen wie beispielsweise Vektor- und Matrixoperationen mit Intervalleinträgen.

2.4 Lehmann–Goerisch–Schranksen

Zur Eigenwerteinschließung benötigen wir neben einer oberen Schranke auch eine zugehörige untere Schranke. Zur Berechnung dieser verwenden wir das Verfahren von Lehmann–Goerisch. Dieses erweist sich in der praktischen Anwendung vorteilhaft gegenüber dem Temple–Lehmann–Verfahren. Durch die Verwendung des Lehmann–Goerisch–Verfahrens werden allerdings die unteren Schranken ein wenig schlechter. Diesen Nachteil kann man jedoch durch geeignete Wahl der im Folgenden mit \hat{w}_j bezeichneten Hilfwerte klein halten.

Wir betrachten das geshiftete Eigenwertproblem

$$\mathcal{M}_\gamma(\phi, \psi) := \mathcal{M}(\phi, \psi) + \gamma\langle\phi, \psi\rangle = (\lambda + \gamma)\langle\phi, \psi\rangle$$

was äquivalent zu

$$\mathcal{M}(\phi, \psi) = \lambda\langle\phi, \psi\rangle$$

ist.

Satz 2.4.1. (Temple–Lehmann). *Seien $\phi_1, \dots, \phi_n \in D(\mathcal{M})$ linear unabhängig und $\Lambda_1 \leq \dots \leq \Lambda_N$ die oberen Rayleigh–Ritz–Schranksen. Seien ferner $w_1, \dots, w_N \in D(\mathcal{M})$ mit*

$$\mathcal{M}_\gamma(w_i, \psi) = \langle\phi_i, \psi\rangle \quad (\psi \in D(\mathcal{M})) \quad (2.3)$$

gegeben. Es sei $\gamma > 0$ ein beliebiger Shift–Paramter. Außerdem sei $\rho \in \mathbb{R}$ bekannt mit

$$\Lambda_N < \rho - \gamma \leq \lambda_{N+1}. \quad (2.4)$$

Mit

$$A_3 = (\mathcal{M}_\gamma(w_i, w_j))_{i,j=1,\dots,N}$$

seien $\mu_1 \leq \dots \leq \mu_n < 0$ die Eigenwerte von

$$\underbrace{(A_1 + (\gamma - \rho)A_2)}_{\text{negativ definit}} u = \mu \underbrace{(A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3)}_{\text{positiv definit}} u.$$

Dann gilt:

$$\lambda_n \geq \rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \mu_{N+1-n}} \quad (n = 1, \dots, N)$$

Der Beweis ist in Anhang B aufgeführt.

Bemerkung: Die Bestimmung der w_i , die (2.3) erfüllen sollen, erfordert die exakte Lösung einer Randwertaufgabe, wenn das zu Grunde liegende Problem ein Differentialgleichungsproblem ist. Dies kann durch die Goerischerweiterung vereinfacht werden.

Die Festlegung von ρ , das der Bedingung (2.4) genügt, erfolgt mit Hilfe eines Homotopieverfahrens, auf das im nächsten Kapitel 2.5 eingegangen wird.

Sowohl die Temple–Lehmann–Schranken als auch die Rayleigh–Ritz–Schranken sind in dem Sinne optimal, dass allein aus der Kenntnis von ϕ_1, \dots, ϕ_N und $\mathcal{M}(\phi_j, \phi_l)$ für $j, l = 1, \dots, N$ keine besseren Schranken ermittelt werden können.

Satz 2.4.2. (Lehmann–Goerisch)

Seien $\phi_1, \dots, \phi_N \in D(\mathcal{M})$ linear unabhängig und $\Lambda_1 \leq \dots \leq \Lambda_N$ die oberen Rayleigh–Ritz–Schranken. Es existiere ein $\rho \in \mathbb{R}$, so dass $\Lambda_N < \rho - \gamma \leq \lambda_{N+1}$ (2.4). Es sei $\gamma > 0$ ein beliebiger Shift–Parameter. Sei X ein Vektorraum, b eine positiv semidefinite hermitesche Sesquilinearform auf X , und $T : D(\mathcal{M}) \rightarrow X$ sei ein linearer Operator, so dass:

$$b(T\phi, T\psi) = \mathcal{M}_\gamma(\phi, \psi) \quad (\phi, \psi \in D(\mathcal{M})).$$

Es existieren $w^{(1)}, \dots, w^{(N)} \in D(\mathcal{M})$, die

$$\mathcal{M}_\gamma(w^{(j)}, \psi) = \langle \phi_j, \psi \rangle, \quad (\psi \in D(\mathcal{M})) \quad (j = 1, \dots, N).$$

erfüllen. Es seien $\hat{w}^{(1)}, \dots, \hat{w}^{(N)} \in X$ mit

$$b(\hat{w}^{(j)}, T\psi) = \langle \phi_j, \psi \rangle, \quad (\psi \in D(\mathcal{M})) \quad (j = 1, \dots, N)$$

bekannt. Mit $\hat{A}_3 = (b(\hat{w}^{(j)}, \hat{w}^{(l)}))_{j,l=1,\dots,N}$ seien $\hat{\mu}_1 \leq \dots \leq \hat{\mu}_N < 0$ die Eigenwerte des Matrixeigenwertproblems:

$$\underbrace{(A_1 + (\gamma - \rho)A_2)}_{=:B_1, \text{ negativ definit}} u = \hat{\mu} \underbrace{(A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 \hat{A}_3)}_{=:B_2, \text{ positiv definit}} u.$$

Dann gilt:

$$\lambda_j \geq \rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \hat{\mu}_{N+1-j}} \quad (j = 1, \dots, N)$$

Die Goerisch–Erweiterung unterscheidet sich vom Temple–Lehmann–Verfahren in folgenden Punkten:

1. X ist ein $\mathbb{R}(\mathbb{C})$ -VR, $b : X \times X \rightarrow \mathbb{R}(\mathbb{C})$ eine positiv semidefinite hermitesche Sesquilinearform, $T : D(\mathcal{M}) \rightarrow X$ ein linearer Operator mit

$$b(T\phi, T\psi) = \mathcal{M}_\gamma(\phi, \psi) \quad (\phi, \psi \in D(\mathcal{M}))$$

2. $w_1, \dots, w_N \in D(\mathcal{M})$, die (2.3) genügen, müssen nur existieren, nicht aber explizit bekannt sein. Bei geeigneter Wahl von γ liefert der Alternativsatz für lineare Randwertprobleme die Existenz.
3. Es seien $\hat{w}_1, \dots, \hat{w}_N \in X$ bekannt mit

$$b(\hat{w}_j, T\psi) = \langle \phi_j, \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D(\mathcal{M}) \text{ und } j = 1, \dots, N.$$

Diese Bedingung ersetzt Bedingung (2.3).

4. $\hat{A}_3 = (b(\hat{w}_j, \hat{w}_l))_{j,l=1,\dots,N}$ ersetzt $A_3 = (\mathcal{M}_\gamma(w_j, w_l))_{j,l=1,\dots,N}$.

Da Temple–Lehmann–Schranken optimal unter gegebenen Voraussetzungen sind, möchte man die Differenz $\hat{A}_3 - A_3$ klein halten. Für den Beweis ist zu zeigen, dass $\hat{A}_3 - A_3$ positiv semidefinit ist. Eine detaillierte Erklärung dazu erfolgt im Anhang B. Die unteren Schranken des Lehmann–Goerisch–Verfahrens sind also schlechter beziehungsweise nicht besser als die des Verfahrens von Lehmann, aber sie sind berechenbar.

Falls ϕ_n gute Näherungseigenenlemente mit zugehörigen Näherungseigenwerten Λ_n sind, so gilt

$$\mathcal{M}_\gamma(\phi_n, \psi) \approx (\Lambda_n + \gamma) \langle \phi_n, \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D(\mathcal{M}).$$

Außerdem ist

$$\mathcal{M}_\gamma(w_n, \psi) = b(\hat{w}_n, T\psi) = \langle \phi_n, \psi \rangle \quad \text{für alle } \psi \in D(\mathcal{M}),$$

also

$$w_n \approx \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \phi_n.$$

Damit $\hat{A}_3 - A_3$ möglichst klein ist (siehe Ungleichung (14.1) im Anhang B), sollte $\hat{w}_n - Tw_n$ klein sein. Die Bedingung $\hat{w}_n \approx Tw_n$ kann deshalb durch

$$\hat{w}_n \approx \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} T\phi_n$$

ersetzt werden.

Für die Anwendung auf einen einzelnen einfachen Eigenwert λ_j reduziert sich das Theorem auf folgendes Korollar (siehe [Beh], S. 2719 - 2721). Dabei ist $A_1(j, j) = \mathcal{M}(\phi_j, \phi_j)$, $A_2(j, j) = \langle \phi_j, \phi_j \rangle$ und $\hat{A}_3(j, j) = b(\hat{w}_j, \hat{w}_j)$.

Korollar 1. *Sei*

$$\frac{A_1(j, j)}{A_2(j, j)} < \rho - \gamma \leq \lambda_{j+1}$$

erfüllt. Dann gilt:

$$\frac{(\rho - \gamma)A_2(j, j) - A_1(j, j)}{\rho\hat{A}_3(j, j) - A_2(j, j)} - \gamma \leq \lambda_j$$

Beweis. Setzt man $\hat{\mu}_j = B_1(j, j)/B_2(j, j)$ mit $B_1(j, j) = A_1(j, j) + (\gamma - \rho)A_2(j, j)$ und $B_2(j, j) = A_1(j, j) + (\gamma - 2\rho)A_2(j, j) + \rho^2\hat{A}_3(j, j)$, so ergibt sich für die untere Schranke aus Satz 2.4.2:

$$\begin{aligned} \lambda_j &\geq \rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \frac{B_1(j, j)}{B_2(j, j)}} = \rho - \gamma - \frac{\rho B_2(j, j)}{B_2(j, j) - B_1(j, j)} \\ &= \frac{(B_2(j, j) - B_1(j, j)) \cdot (\rho - \gamma) - \rho B_2(j, j)}{B_2(j, j) - B_1(j, j)} \\ &= \frac{\rho B_2(j, j) - \gamma B_2(j, j) - \rho B_1(j, j) + \gamma B_1(j, j) - \rho B_2(j, j)}{B_2(j, j) - B_1(j, j)} \\ &= \frac{(\gamma - \rho)B_1(j, j) - \gamma B_2(j, j)}{B_2(j, j) - B_1(j, j)} \end{aligned}$$

Der Zähler berechnet sich zu:

$$\begin{aligned} (\gamma - \rho)B_1(j, j) - \gamma B_2(j, j) &= (\gamma - \rho)(A_1(j, j) + (\gamma - \rho)A_2(j, j)) \\ &\quad - \gamma(A_1(j, j) + (\gamma - 2\rho)A_2(j, j) + \rho^2\hat{A}_3(j, j)) \\ &= -\rho A_1(j, j) + \rho^2 A_2(j, j) - \rho^2 \gamma \hat{A}_3(j, j) \end{aligned}$$

Der Nenner berechnet sich zu:

$$\begin{aligned} B_2(j, j) - B_1(j, j) &= A_1(j, j) + (\gamma - 2\rho)A_2(j, j) + \rho^2 \hat{A}_3(j, j) \\ &\quad - (A_1(j, j) + (\gamma - \rho)A_2(j, j)) \\ &= -\rho A_2(j, j) + \rho^2 \hat{A}_3(j, j) \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für den Bruch:

$$\begin{aligned} \frac{(\gamma - \rho)B_1(j, j) - \gamma B_2(j, j)}{B_2(j, j) - B_1(j, j)} &= \frac{-\rho A_1(j, j) + \rho^2 A_2(j, j) - \rho^2 \gamma \hat{A}_3(j, j)}{-\rho A_2(j, j) + \rho^2 \hat{A}_3(j, j)} \\ &= \frac{-A_1(j, j) + \rho A_2(j, j) - \rho \gamma \hat{A}_3(j, j) - \gamma A_2(j, j) + \gamma A_2(j, j)}{-A_2(j, j) + \rho \hat{A}_3(j, j)} \\ &= \frac{(\rho - \gamma)A_2(j, j) - A_1(j, j)}{\rho \hat{A}_3(j, j) - A_2(j, j)} - \gamma \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich nun nach Satz 2.4.2, dass

$$\rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \hat{\mu}_j} = \frac{(\rho - \gamma)A_2(j, j) - A_1(j, j)}{\rho \hat{A}_3(j, j) - A_2(j, j)} - \gamma$$

eine untere Schranke für λ_j ist. □

Zusammenfassend wird die numerische Prozedur des Lehmann–Goerisch–Verfahrens wie folgt durchgeführt:

- (LG1) Für Satz 2.4.2 (Lehmann–Goerisch) werden als ϕ_1, \dots, ϕ_N die Näherungseigenelemente aus dem ersten Rayleigh–Ritz–Schritt verwendet und für $\Lambda_1, \dots, \Lambda_N$ die oberen Schranken aus dem zweiten Rayleigh–Ritz–Schritt.
- (LG2) Es müssen $\hat{w}^{(1)}, \dots, \hat{w}^{(N)}$ gefunden werden, die $b(\hat{w}^{(i)}, T\psi) = N(\phi_j, \psi)$ erfüllen.
- (LG3) Zusätzlich zu den $N \times N$ -Matrizen A_1 und A_2 (aus dem zweiten Schritt des Rayleigh–Ritz–Verfahrens) wird eine $N \times N$ -Matrix $\hat{A}_3 = (b(\hat{w}^{(i)}, \hat{w}^{(j)}))_{i, j=1, \dots, N}$ konstruiert und anschließend das Eigenwertproblem $(A_1 - \rho A_2)u = \mu(A_1 - 2\rho A_2 + \rho^2 \hat{A}_3)u$ mit Hilfe oben beschriebener, bekannter Methoden gelöst.

2.5 Homotopieverfahren

Bezeichne $(H_0, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ einen unendlichdimensionalen Hilbertraum mit $H_0 \supseteq H$.

$\mathcal{M}_0 \supseteq \mathcal{M}$ sei eine hermitesche, positiv semidefinite Sesquilinearform auf $D(\mathcal{M}_0) \subset H_0$. Es existiere ein vollständiges Orthonormalsystem $(\varphi_n^{(0)})_{n \in \mathbb{N}}$ aus Eigenelementen $\varphi_n^{(0)} \in D(\mathcal{M}_0)$ mit zugehöriger Folge von Eigenwerten $(\lambda_n^{(0)})_{n \in \mathbb{N}}$, so dass $0 < \lambda_1^{(0)} \leq \lambda_2^{(0)} \leq \dots$ mit $\lambda_n^{(0)} \rightarrow \infty$ gilt.

Das Problem, die für Satz 2.4.2 nötige a priori Information ρ zu erhalten, kann mit Hilfe eines Vergleichsproblems $(EP)_0$ gelöst werden:

Suche $\phi \in D(\mathcal{M}_0) \setminus \{0\}$, $\lambda \in \mathbb{R}$, so dass

$$\mathcal{M}_0(\phi, \psi) = \lambda \langle \phi, \psi \rangle_0$$

für alle $\psi \in D(\mathcal{M}_0)$ erfüllt ist.

Es gelte

$$\frac{\mathcal{M}(\phi, \phi)}{\langle \phi, \phi \rangle} \geq \frac{\mathcal{M}_0(\phi, \phi)}{\langle \phi, \phi \rangle_0} \quad \phi \in D(\mathcal{M}) \setminus \{0\}.$$

Dann folgt mit Hilfe des Min–Max–Prinzips (Satz 2.3.2)

$$\lambda_n^{(0)} \leq \lambda_n \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Insbesondere ist $(EP)_0$ so zu wählen, dass $(\lambda_n^{(0)})_{n \in \mathbb{N}}$ in geschlossener Form berechenbar sind (oder zumindest zugehörige untere Schranken). Wenn Λ_N die obere Rayleigh–Ritz–Schranke des N -ten Eigenwertes des Ausgangsproblems $(EP)_1$ (Gleichung (2.1)) bezeichnet und $\Lambda_N < \lambda_{N+1}^{(0)}$ gilt, kann $\rho := \lambda_{N+1}^{(0)} + \gamma$ gesetzt werden, da $\lambda_{N+1}^{(0)} \leq \lambda_{N+1}$ ist. Dies bedeutet, dass das Vergleichsproblem nicht “zu weit weg” von dem Ausgangsproblem gewählt werden kann. Eine solche Wahl ist in der Praxis nicht immer möglich. Diese starke Restriktion kann mit Hilfe der Homotopiemethode abgeschwächt werden, deren Hauptidee darin besteht, das Basisproblem $(EP)_0$ mit dem Ausgangsproblem $(EP)_1$ durch eine Schar von Eigenproblemen $(EP)_s$, $s \in [0, 1]$, miteinander zu verknüpfen. Die Serie “startet” bei dem Basisproblem ($s = 0$) und “endet” bei dem gegebenen Problem ($s = 1$). In diesem Fall

können das Basisproblem und das Ausgangsproblem weit voneinander entfernt sein, d. h. die Bedingung $\Lambda_N < \lambda_{N+1}^{(0)}$ fällt weg, wobei $\Lambda_N \equiv \Lambda_N^{(1)}$ ist. Die Familie $(EP)_s$ mit $H_s \subseteq H_t$, $D(\mathcal{M}_s) \subseteq D(\mathcal{M}_t)$ erfülle für $0 \leq t \leq s \leq 1$ die Ungleichung

$$\frac{\mathcal{M}_s(\phi, \phi)}{\langle \phi, \phi \rangle_s} \geq \frac{\mathcal{M}_t(\phi, \phi)}{\langle \phi, \phi \rangle_t} \quad \phi \in D(\mathcal{M}_s) \setminus \{0\},$$

damit nach dem Min–Max–Prinzip für alle $0 \leq t \leq s \leq 1$

$$\lambda_n^{(0)} \leq \lambda_n^{(t)} \leq \lambda_n^{(s)} \leq \lambda_n^{(1)} \quad (n = 1, \dots, N + 1)$$

gilt. Die Eigenwerte wachsen somit längs der Homotopie. $\lambda_n^{(s)}$ sollten stetig von s abhängen (oder wenigstens nicht zu große Sprünge machen).

Ist die Familie $(EP)_s$ einmal konstruiert, wird der Homotopie Schritt für Schritt gefolgt (indem s vergrößert wird) und in jedem Schritt die Vergleichsmethode (das Problem, das in dem vorherigen Schritt konstruiert wurde, wird als Vergleichsproblem verwendet) angewendet. Schließlich erhält man, bei $s = 1$, die gewünschten Schranken.

Zur Berechnung der unteren Schranken der ersten N Eigenwerte, ist von folgenden Anfangsbedingungen auszugehen: Sei M größer als N und so gewählt, dass der Abstand zwischen dem M -ten und dem $(M + 1)$ -sten Eigenwert des Vergleichsproblems $(EP)_0$, $\lambda_M^{(0)}$ und $\lambda_{M+1}^{(0)}$, nicht zu klein ist und so, dass der N -te Eigenwert λ_N des Ausgangsproblems $(EP)_1$ kleiner als der $(M + 1)$ -ste Eigenwert $\lambda_{M+1}^{(0)}$ des Vergleichsproblems ist. Letzteres wird angenommen, da bei jedem Homotopieschritt mindestens ein Eigenwert "verloren" geht und bei dieser Wahl von M zu erwarten ist, dass man untere Schranken für die ersten N Eigenwerte erhält. Überprüft wird diese Anfangsbedingung mittels der aus dem Rayleigh–Ritz–Verfahren gewonnenen obere Schranke Λ_N von λ_N .

Die Homotopie erfolgt nun in folgenden Schritten:

Zunächst müssen approximative Eigenpaare $(\tilde{\lambda}_j^{(s_1)}, \tilde{u}_j^{(s_1)})$ ($j = 1, \dots, M$) berechnet werden. Dabei wird s_1 nahe bei $\sup \left\{ s \in [0, 1] : \lambda_M^{(s)} < \lambda_{M+1}^{(0)} \right\}$ gewählt, so dass folgende Ungleichung gilt:

$$\Lambda_M^{(s_1)} < \lambda_{M+1}^{(0)}.$$

Da $\lambda_{M+1}^{(0)} \leq \lambda_{M+1}^{(s_1)}$ ist, kann für das Vergleichsproblem $(EP)_{s_1}$ $\rho_0 := \lambda_{M+1}^{(0)} + \gamma$ gesetzt werden.

Jetzt wird der Satz von Lehmann–Goerisch mit $\rho = \rho_0$ angewendet und das Ergebnis sind die ersten M unteren Schranken

$$\mu_n^{(s_1)} \leq \lambda_n^{(s_1)} \quad (n = 1, \dots, M).$$

Für den Fall, dass die Differenz von $\mu_{M-1}^{(s_1)}$ und $\mu_M^{(s_1)}$ nicht zu klein ist, werden im nächsten Schritt approximative Eigenpaare $(\tilde{\lambda}_j^{(s_2)}, \tilde{u}_j^{(s_2)})$ ($j = 1, \dots, M-1$) berechnet.

s_2 ist diesmal nahe bei $\sup \{s \in [0, 1] : \lambda_{M-1}^{(s)} < \mu_M^{(s_1)}\}$ zu wählen, in dem Sinne, dass die Ungleichung

$$\Lambda_{M-1}^{(s_2)} < \mu_M^{(s_1)}$$

gilt. Da $\mu_M^{(s_1)} \leq \lambda_M^{(s_1)} \leq \lambda_M^{(s_2)}$ ist, kann für das Vergleichsproblem $(EP)_{s_2}$ $\rho_1 := \mu_M^{(s_1)} + \gamma$ gesetzt werden.

Mit Hilfe des Satzes von Lehmann–Goerisch und $\rho = \rho_1$, können die ersten $(M-1)$ unteren Eigenwertschranken berechnet werden:

$$\mu_n^{(s_2)} \leq \lambda_n^{(s_2)} \quad (n = 1, \dots, M-1).$$

Für den Fall, dass $\mu_{M-1}^{(s_1)}$ und $\mu_M^{(s_1)}$ zu einem Cluster $\mu_{M-L}^{(s_1)}, \dots, \mu_M^{(s_1)}$ gehören, ist s_2 so zu wählen, dass die Ungleichung

$$\Lambda_{M-L-1}^{(s_2)} < \mu_{M-L}^{(s_1)}$$

erfüllt ist.

Da $\mu_{M-L}^{(s_1)} \leq \lambda_{M-L}^{(s_2)}$ ist, kann bezogen auf das Vergleichsproblem $(EP)_{s_2}$ $\rho_1 := \mu_{M-L}^{(s_1)} + \gamma$ gesetzt werden.

Diese Prozedur wird fortgesetzt bis $s = 1$ ist. Wenn R die Anzahl der Eigenwerte bezeichne, die während des Algorithmus verloren gehen und

$$\mu_n^{(1)} \leq \lambda_n^{(1)} \quad (n = 1, \dots, M - R)$$

mit $M - R \geq N$ gilt, liefert diese Vorgehensweise gesicherte untere Schranken für die ersten N Eigenwerte, ansonsten muss M von vornherein größer gewählt werden (siehe [Hoa]).

Falls das Korollar angewendet werden kann, reduziert sich das Homotopieverfahren auf 1×1 -Matrizen (siehe [Bre], S. 76) und wird wie folgt durchgeführt.

Zunächst muss ein approximatives Eigenpaar $(\tilde{\lambda}_M^{(s_1)}, \tilde{u}_M^{(s_1)})$ berechnet werden und dabei ist s_1 nahe bei $\sup \left\{ s \in [0, 1] : \lambda_M^{(s)} < \lambda_{M+1}^{(0)} \right\}$ zu wählen, so dass folgende Ungleichung gilt:

$$\Lambda_M^{(s_1)} < \lambda_{M+1}^{(0)}. \quad (2.5)$$

Da $\lambda_{M+1}^{(0)} \leq \lambda_{M+1}^{(s_1)}$, kann $\rho_0 := \lambda_{M+1}^{(0)} + \gamma$ für $(EP)_{s_1}$ gesetzt werden. Die Anwendung des Korollar 1 liefert eine untere Schranke $\mu_M^{(s_1)}$ für den M -ten Eigenwert $\lambda_M^{(s_1)}$.

Anschließend wird das Eigenpaar $(\tilde{\lambda}_{M-1}^{(s_2)}, \tilde{u}_{M-1}^{(s_2)})$ approximativ berechnet und dabei ist s_2 nahe bei $\sup \left\{ s \in [0, 1] : \lambda_{M-1}^{(s)} < \mu_M^{(s_1)} \right\}$ zu wählen, so dass die Ungleichung

$$\Lambda_{M-1}^{(s_2)} < \mu_M^{(s_1)} \quad (2.6)$$

gilt. Da $\mu_M^{(s_1)} \leq \lambda_M^{(s_2)}$ ist, kann $\rho_2 := \mu_M^{(s_1)} + \gamma$ für $(EP)_{s_2}$ gesetzt werden. Die Anwendung des Korollar 1 liefert eine untere Schranke $\mu_{M-1}^{(s_2)}$ für den $(M - 1)$ -sten Eigenwert $\lambda_{M-1}^{(s_2)}$.

Es ist entsprechend weiterzufahren bis $s=1$ erreicht ist.

Bei der Anwendung des Korollar 1 besteht eine enorme Reduzierung des numerischen Aufwands, denn es müssen nur die Bedingungen der Art (2.5) und (2.6) verifiziert berechnet werden und nicht, wie bei Theorem 2.4.2 (Lehmann-Goerisch), Matrizen der Dimension $N \times N$.

Kapitel 3

Modellspezifikation

3.1 Herleitung des Eigenwertproblems aus den Maxwell-Gleichungen

In diesem Kapitel wird gezeigt wie die Helmholtz-Gleichung (1.1), die unser Problem beschreibt, aus den Maxwell-Gleichungen hergeleitet werden kann ([Mon], S. 2 ff.).

Der klassische makroskopische Elektromagnetismus kann im Rahmen der Maxwell-Gleichungen mittels folgender vier Vektorfunktionen, die von dem Ort $x \in \mathbb{R}^3$ und der Zeit $t \in \mathbb{R}$ abhängig sind, beschrieben werden:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathcal{D}(x, t) &= \varrho(x, t) \\ \nabla \times \mathcal{E}(x, t) &= -\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial t}(x, t) \\ \nabla \cdot \mathcal{B}(x, t) &= 0 \\ \nabla \times \mathcal{H}(x, t) &= \mathcal{J}(x, t) + \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t}(x, t).\end{aligned}$$

(\mathcal{E} : elektrisches Feld, \mathcal{D} : dielektrische Verschiebung, ρ : freie Ladungsdichte, \mathcal{B} : magnetische Induktion, \mathcal{H} : magnetisches Feld, \mathcal{J} : freie Stromdichte)

Wir interessieren uns für zeitharmonische Maxwell-Gleichungen, d. h. wir interessieren uns für elektromagnetische Wellenausbreitung bei einer festen Frequenz. In diesem Zusammenhang wird auch von monochromatischer Welle

$$(\mathcal{E}(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} E(x)), \mathcal{H}(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} H(x)), \mathcal{D}(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} D(x)), \\ \mathcal{B}(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} B(x)), \mathcal{J}(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} J(x)), \varrho(x, t) = \operatorname{Re}(e^{-i\omega t} \rho(x)))$$

gesprochen:

$$\begin{aligned} \nabla \times E(x) &= i\omega B(x) \\ \nabla \cdot D(x) &= \varrho(x, t) \\ \nabla \times H(x) &= \mathcal{J}(x, t) - i\omega D(x) \\ \nabla \cdot B(x) &= 0 \end{aligned}$$

Diese vier Gleichungen müssen um zwei Materialgesetze erweitert werden, die von den Eigenschaften des Mediums in dem von dem elektromagnetischen Feld besetzten Gebiet abhängen. Das Medium sei sowohl transparent, d. h. $J = 0$, $\rho = 0$ und $\operatorname{Im}(\epsilon) = 0$ als auch nichtmagnetisch, also $\mu = 1$. Diese Bedingung ist für viele dielektrische Materialien, die von Interesse sind, realistisch (siehe [Fig], S. 1563). Unter der weiteren Annahme, dass inhomogenes, isotropes, lineares und absorptionsfreies Material zu Grunde liegt, erhält man:

$$\begin{aligned} D(x) &= \epsilon(x, \omega) E(x) \\ B(x) &= \mu(x, \omega) H(x), \end{aligned}$$

wobei die dielektrische Funktion $\epsilon = \epsilon(x, \omega)$ (siehe Kapitel 2.1.2) und die Permeabilität $\mu = \mu(x, \omega)$ positive und beschränkte Funktionen sind.

Dabei bedeutet inhomogenes Medium, dass verschiedene Materialien das Gebiet des elektromagnetischen Feldes besetzen. Von isotropem Medium wird gesprochen, wenn die Materialeigenschaften ϵ und μ unabhängig von der Richtung des Feldes

sind; insbesondere bedeutet dies, dass sich die Tensoren ϵ und μ , die Permittivitätsfunktion und die Permeabilitätsfunktion, auf reelle Skalare reduzieren. Lineares Medium bedeutet, dass eine lineare Beziehung zwischen der Polarisation und dem elektrischen Feld, sowie zwischen der Magnetisierung und dem magnetischen Feld zu Grunde liegt.

Setzen wir die Materialgesetze in die nun homogenen, zeitharmonischen Maxwell-Gleichungen ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}\nabla \times E(x) &= i\omega H(x) \\ \nabla \cdot (\epsilon(x, \omega)E(x)) &= 0 \\ \nabla \times H(x) &= -i\omega\epsilon(x, \omega)E(x) \\ \nabla \cdot H(x) &= 0.\end{aligned}$$

Die Anwendung von $\nabla \times$ auf die ersten zwei Gleichungen liefert zwei entkoppelte Systeme:

$$\begin{aligned}\nabla \times (\nabla \times E(x)) &= \omega^2\epsilon(x, \omega)E(x) \\ \nabla \cdot (\epsilon(x, \omega)E(x)) &= 0\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\nabla \times \left(\frac{1}{\epsilon(x, \omega)} \nabla \times H(x) \right) &= \omega^2 H(x) \\ \nabla \cdot H(x) &= 0\end{aligned}$$

Betrachten wir nun die Gleichung für das elektrische Feld

$$\begin{cases} \frac{1}{\epsilon(x, \omega)} \nabla \times (\nabla \times E(x)) - \omega^2 E(x) = 0 \\ \nabla \cdot (\epsilon(x, \omega)E(x)) = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

mit frequenzabhängigem ϵ genauer. Wir sind an zweidimensionalen photonischen Kristallen interessiert. Diese sind vorstellbar als eine periodische Anordnung unendlich langer dielektrischer Stäbe in Luft oder Poren in dielektrischem Medium. Das bedeutet, in der (x_1, x_2) -Ebene ändert sich der Brechungsindex periodisch und in x_3 -Richtung ist das Material homogen, d. h. ϵ ist unabhängig von x_3 . Wir betrachten die Wellenausbreitung in der (x_1, x_2) -Ebene. In diesem Zusammenhang spricht man von ebenen Wellen, die wir im Folgenden mit u bezeichnen. Es kann hier zwischen transvers magnetischen und transvers elektrischen Moden unterschieden werden ([Kuc], S. 8). Von transvers magnetischer Polarisation (kurz: TM-Polarisation oder H-Polarisation) wird gesprochen, wenn das magnetische Feld in der Periodizitätsebene liegt bzw. das elektrische Feld parallel zur Achse der zweidimensionalen Struktur ist, also $E_{TM} = (0, 0, u)$. Bei der transvers elektrischen Polarisation (kurz: TE-Polarisation oder E-Polarisation) liegt das elektrische Feld in der (x, y) -Ebene ([Joa], S.39). Bei beiden Polarisationen stehen das magnetische Feld H und das elektrische Feld E senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung der Wellen u , daher bezeichnet man diese auch als Transversalwellen ([Ger], S. 426 f.).

Wir spezialisieren uns auf TM-Wellen u , die nur von x_1 und x_2 abhängig sind, was aus der Divergenzbedingung für $\epsilon(x, \lambda) = \epsilon(x_1, x_2, \lambda)$ und $E(x) = E(x_1, x_2, x_3)$ folgt:

$$0 = \operatorname{div}(\epsilon(x, \lambda)E(x)) = \frac{\partial}{\partial x_3}(\epsilon(x, \lambda)u(x)) = \epsilon(x, \lambda) \frac{\partial u(x)}{\partial x_3},$$

das bedeutet $\frac{\partial}{\partial x_3}u(x) = 0$, $u = u(x_1, x_2)$ und somit $\nabla \times (\nabla \times E(x)) = (0, 0, -\Delta u(x))^T$.

Aus (3.1) ergibt sich nun mit $\lambda := \omega^2$ folgende Gleichung:

$$-\Delta u(x) = \lambda \epsilon(x, \lambda) u(x), \quad x \in \mathbb{R}^2. \quad (3.2)$$

Wenn ϵ von λ unabhängig ist, lässt sich dieses Ganzraumproblem mit Hilfe der Floquet-Bloch-Theorie auf Berechnungen innerhalb der Periodizitätszelle $\Omega = (0, 1)^2$ reduzieren. Diese ist eine Elementarzelle (Wigner-Seitz-Zelle) des Bravais-Gitters $\Gamma = \mathbb{Z}^2$. $\Gamma^* := \{g \in \mathbb{R}^2 \mid \langle h, g \rangle \in 2\pi\mathbb{Z} \ \forall h \in \mathbb{Z}^2\}$ bezeichnet das reziproke Gitter zu \mathbb{Z}^2 . Die Brillouinzone ist eine durch $K = (-\pi, \pi]^2$ bestimmte Elementarzelle von

Γ^* . In einem solchen Fall (λ -unabhängiges ϵ) betrachten wir also das λ -lineare Eigenwertproblem:

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= \lambda \epsilon(x) u(x), & x \in \Omega = (0, 1)^2, & u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2), \\ u(x + e_j) &= e^{ik \cdot e_j} u(x), & k \in (-\pi, \pi]^2 = K, & j = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.3)$$

welches durch den Operator $A_k := -\frac{1}{\epsilon} \Delta$ mit Definitionsbereich

$$D(A_k) := \{u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2) : u(x + n) = e^{ik \cdot n} u(x) \forall n \in \mathbb{Z}^2 \text{ und f. a. } x \in \mathbb{R}^2\}$$

realisiert wird. A_k ist selbstadjungiert in $L^2(\Omega)$ bezüglich $\int_{\Omega} \epsilon u \bar{v} \, dx$ und besitzt wegen der Beschränktheit von Ω eine kompakte Resolvente und daher ein diskretes Spektrum $\sigma(A_k)$ mit o. B. d. A. der Größe nach geordneten Eigenwerten $\lambda_{1,k} \leq \lambda_{2,k} \leq \dots$

Der zu (3.2) (mit λ -unabhängigem ϵ) gehörige, durch $A := -\frac{1}{\epsilon} \Delta$, $D(A) = H^2(\mathbb{R}^2)$ definierte Ganzraum-Operator ist selbstadjungiert in $L^2(\mathbb{R}^2)$ bezüglich des gewichteten Skalarprodukts $\int_{\mathbb{R}^2} \epsilon u \bar{v} \, dx$.

Die Floquet-Bloch-Theorie liefert mit $B_m := \{\lambda_{m,k} : k \in K\}$:

$$\sigma(A) = \bigcup_{k \in K} \sigma(A_k) = \bigcup_{m \in \mathbb{N}} B_m.$$

Das Intervall $B_m = [\min_{k \in K} \lambda_{k,m}, \max_{k \in K} \lambda_{k,m}]$ ist kompakt und reell für alle $m \in \mathbb{N}$ und wird als m -tes Spektralband bezeichnet. Es gilt $\min B_m \rightarrow \infty$ für $m \rightarrow \infty$ (siehe [Hoa], [Eng]). Für mehr Details zur Floquet-Bloch-Theorie sei auf ([Kuc]) verwiesen.

In dieser Arbeit sei davon ausgegangen, dass auch im Falle der λ -Abhängigkeit eine Verallgemeinerung dieser Floquet-Bloch-Theorie existiert und es genügt das λ -nichtlineare Eigenwertproblem auf einer Periodizitätszelle zu betrachten, um auf das Spektrum des Ganzraumproblems (3.2) schließen zu können. Dies ist aktuelles Forschungsgebiet und wird zur Zeit im Rahmen einer Doktorarbeit von Dipl.-Math. Philipp Schmalkoke untersucht. Unter dieser Annahme lautet das Problem, das sich

aus Gleichung (3.2) ergibt:

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) &= \lambda \epsilon(x, \lambda) u(x), & x \in \Omega, u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2), \\ u(x + e_j) &= e^{ik \cdot e_j} u(x), & k \in K, j = 1, 2. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Anstelle dieses Eigenwertproblems mit semiperiodischen Randbedingungen kann wie folgt auch das geshiftete Problem betrachtet werden. Dazu wird

$$\hat{u}(x) := u(x) \cdot e^{-ik \cdot x}$$

gesetzt. Das Ergebnis ist, dass der Operator vom Wellenvektor k abhängt und die Randbedingungen periodisch sind:

$$\begin{aligned} -(\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik) \hat{u}(x) &= \lambda \epsilon(x, \lambda) \hat{u}(x), & x \in \Omega, u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2), k \in K \\ \hat{u}(x + e_j) &= \hat{u}(x), & j = 1, 2. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Dieses geshiftete Problem, was äquivalent zu (3.4) ist, wird von nun an Gegenstand der Untersuchungen sein. Im Folgenden nennen wir \hat{u} wieder u .

3.2 Dielektrische Funktion

Die dielektrische Funktion $\epsilon(x, \lambda)$, periodisch in $x = (x_1, x_2)$ mit Periode 1 (Gleichung 3.5), muss nun spezifiziert und geeignet gewählt werden, so dass spektrale Bandlücken zu erwarten sind beziehungsweise die Bandlücken möglichst groß werden. Es werden für $k \in K = (-\pi, \pi]^2$ aus der Brillouinzone die ersten M Eigenwerte des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (3.5) berechnet und der Größe nach geordnet. Wenn für festes $m \in \{1, \dots, M\}$ dann $\max_{k \in K}(\lambda_{k,m}) < \min_{k \in K}(\lambda_{k,m+1})$ gilt, nennen wir das Intervall

$$I = \left[\max_{k \in K}(\lambda_{k,m}), \min_{k \in K}(\lambda_{k,m+1}) \right]$$

spektrale Bandlücke.

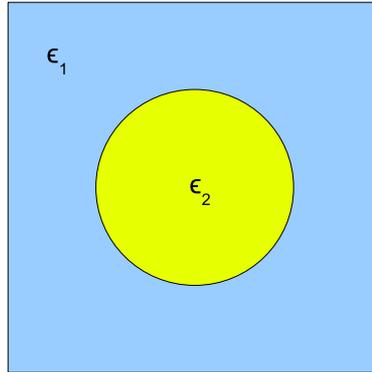


Abbildung 3.1: Draufsicht einer Periodizitätszelle

Man wählt beispielsweise die Periodizitätszelle siehe Figur (3.2) in Form eines dielektrischen Stabs (ϵ_2) in Luft (ϵ_1) und $\epsilon(x, \lambda)$ für $S = 16$, $a = 11$, $b = 0.02$ als gegeben durch:

$$\epsilon(x, \lambda) = \begin{cases} \epsilon_2(\lambda) = S - (S - a) \cdot \exp(-b \cdot \lambda) & \text{für } x \in \Omega_2 \\ & (\Omega_2 := \{x \in \mathbb{R}^2 : |x| < r\}) \\ \epsilon_1(\lambda) = 1 & \text{für } x \in \Omega_1 := \Omega \setminus \Omega_2 \end{cases} \quad (3.6)$$

Wir beschränken uns mit diesem Modell auf den Frequenzbereich der normalen Dispersion, also auf Frequenzen unterhalb des Resonanzgebietes. In dem Bereich, in dem Resonanz auftritt und Absorption stattfindet (siehe [Kop], S. 209), d. h. in dem $\text{Im}(\epsilon(\lambda)) \neq 0$ ist, fällt $\text{Re}(\epsilon(\lambda))$ ab, was die Modellierung von $\epsilon_2(\lambda)$ als beschränkte Funktion begründet. Um außerdem der λ -Abhängigkeit von ϵ insbesondere im Hinblick auf die Kapitel 6 und 7 verstärkt Rechnung zu tragen, wählen wir den Wertebereich von $\epsilon_2(\lambda)$ entsprechend groß.

3.3 Irreduzible Brillouinzone

Der kleinste Bereich innerhalb der Brillouinzone $K = (-\pi, \pi]^2$, in der die Lösungen für $k \in K$ von (3.5) beziehungsweise von

$$-\Delta u - 2ik \cdot \nabla u + |k|^2 u = \lambda \epsilon(x, \lambda) u, \quad x \in \Omega, \quad u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^2),$$

$$u(x) = u(x + e_j), \quad j = 1, 2. \quad (3.7)$$

nicht durch symmetrische Beziehungen erhalten werden können, beträgt bei den in (3.6) angenommenen Symmetrien nur 1/8 der Fläche der ganzen Brillouinzone. Dieser kleinste Bereich ist das Dreieck mit den Ecken $(0, 0)$, $(0, \pi)$ und (π, π) und wird irreduzible Brillouinzone genannt (siehe [Joa], S. 37 und [Inu], S. 243 ff.).

Zur Erläuterung betrachten wir die Gruppe der orthonormalen Matrizen der Dimension 2, deren Einträge aus \mathbb{Z} sind. Sie besteht aus folgenden 8 Elementen:

$$G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, G_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, G_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, G_4 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$G_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, G_6 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, G_7 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, G_8 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Angenommen v ist Lösung von (3.7). Es lässt sich nachrechnen, dass dann auch für jedes $G_n \in O(2, \mathbb{Z})$, $n \in \{1, \dots, 8\}$,

$$\tilde{u}(x) = v(G_n x)$$

mit zugehörigem $\tilde{k} = G_n k$ Lösung von (3.7) ist. Dies gilt insbesondere wegen der Symmetrieeigenschaften von ϵ und dessen Invarianz gegenüber G_n , denn es ist

$$\epsilon(G_n x, \lambda) = \epsilon(x, \lambda).$$

Betrachten wir beispielsweise G_6 :

$$G_6 x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 \end{pmatrix}$$

Es ist $v(G_6 x) = v(x_2, -x_1) = \tilde{u}(x_1, x_2)$ für $\tilde{k} = G_6 k = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} =$
 $\begin{pmatrix} k_2 \\ -k_1 \end{pmatrix}$ Lösung von (3.7).

Kapitel 4

Die schwache Formulierung des Eigenwertproblems

Wir verwenden zur Diskretisierung und zum näherungsweisen Lösen unseres Problems (3.5) die Methode der Finiten Elemente. Um diese anwenden zu können, müssen wir unser Problem schwach formulieren.

Für das periodische Gitter \mathbb{Z}^2 bezeichne

$$H^m(\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) = \left\{ u \in H_{\text{loc}}^m(\mathbb{R}^2) : u(x+n) = u(x) \ \forall n \in \mathbb{Z}^2 \text{ und f. a. } x \in \Omega \right\}$$

den Raum periodischer H^m -Funktionen ($m = 1, 2$) in \mathbb{R}^2 . Für die Periodizitätszelle $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ von \mathbb{Z}^2 betrachten wir den Raum

$$H_{\text{per}}^m(\Omega) = \left\{ u|_{\Omega} : u \in H^m(\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) \right\}.$$

Die periodischen Randbedingungen auf $\partial\Omega$ sind in $H_{\text{per}}^m(\Omega)$ enthalten.

Für $\epsilon(\cdot, \lambda) \in H_{\text{per}}^1(\Omega)$ ist jeder Operator $A_k(\lambda)$ ($k \in K$, $\lambda \in \mathbb{R}$) mit Definitionsbereich $D(A_k(\lambda)) := H_{\text{per}}^2(\Omega)$ definiert durch

$$\begin{aligned} A_k(\lambda) &:= \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda)} (-\Delta - 2ik \cdot \nabla + |k|^2) \\ &= -\frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda)} (\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik) \end{aligned}$$

symmetrisch in $L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda)}(\Omega)$ bezüglich des gewichteten Skalarprodukts

$$\langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} = \int_{\Omega} \epsilon(\cdot, \lambda) u \bar{v} \, dx \quad \left(\|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} = \left(\int_{\Omega} \epsilon(\cdot, \lambda) u \bar{u} \, dx \right)^{1/2} \right),$$

da $\epsilon(\cdot, \lambda) > 0$ und reellwertig ist. Daraus kann mittels Theorem 2.7 (aus [Kat], S. 322/323) auf die Selbstadjungiertheit geschlossen werden.

Für $u, v \in H^1_{\text{per}}(\Omega)$ ist $a_k(u, v)$ definiert durch

$$\begin{aligned} a_k(u, v) &:= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \bar{v} - 2i(k \cdot \nabla u) \bar{v} + |k|^2 u \bar{v} \, dx \\ &= \int_{\Omega} (\nabla + ik)u \cdot \overline{(\nabla + ik)v} \, dx \end{aligned}$$

eine Sesquilinearform.

Die schwache Formulierung des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems

$$A_k(\lambda)u = \lambda u$$

lautet dann:

Für $k \in K$ sind $u \in H^1_{\text{per}}(\Omega) \setminus \{0\}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ gesucht, so dass

$$a_k(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \quad \text{für alle } v \in H^1_{\text{per}}(\Omega). \quad (4.1)$$

Die nichtlinearen Eigenwerte $\lambda_{k,n}$ ($n \in \mathbb{N}$) existieren, da für festes μ in $\epsilon(x, \mu)$ das dann λ -lineare Eigenwertproblem

$$a_k(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \mu)}$$

die Eigenwertfolge $(\lambda_n(\mu))_{n \in \mathbb{N}}$ besitzt. Da $\epsilon(\cdot, \mu)$ monoton wachsend in μ ist, sind die zugehörigen $\lambda_n(\mu)$ monoton fallend in μ und die Eigenwerte des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems sind gerade die Schnittpunkte der $\lambda_n(\mu)$ -Kurven mit der Winkelhalbierenden wie in Abbildung 4.1 verdeutlicht.

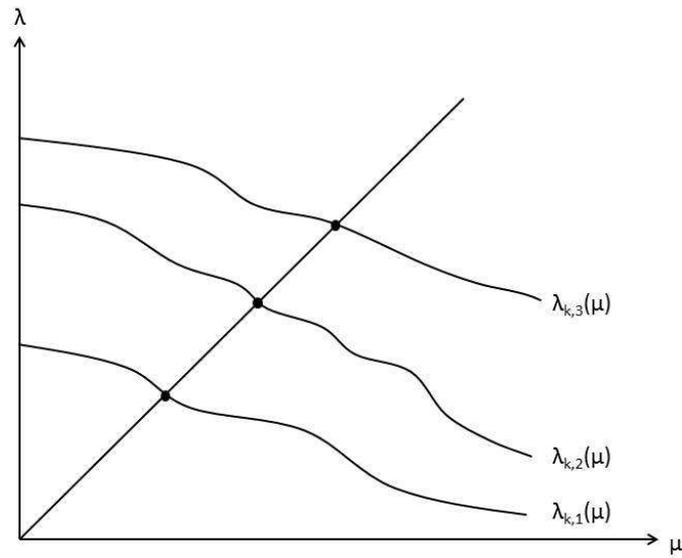


Abbildung 4.1: Schnittpunkte der ersten drei Eigenwertkurven des λ -linearen Eigenwertproblems zu $\epsilon(\cdot, \mu)$ für festes k mit der Winkelhalbierenden liefert die Eigenwerte $\lambda_{k,n}(\mu) = \mu$ des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems.

Kapitel 5

Numerische Approximation

5.1 Ansatzfunktionen

Wie in Kapitel 2.3 beschrieben, werden für das Rayleigh–Ritz–Verfahren $M \in \mathbb{N}$ Ansatzfunktionen $\phi_1, \dots, \phi_M \in H_{\text{per}}^1(\Omega)$ benötigt, so dass die Eigenvektoren des schwach formulierten λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (4.1) in Sesquilineargestalt nicht zu weit von $\text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_M\}$ entfernt sind. Zu diesem Zweck konzentrieren wir uns zunächst auf das entsprechende Eigenwertproblem mit konstantem ϵ_0 , was physikalisch bedeutet, dass homogenes Material zu Grunde liegt. Dadurch kann dieses Problem geschlossen gelöst werden.

Wir berechnen zunächst die Eigenwerte und Eigenvektoren für folgendes eindimensionales Eigenwertproblem mit konstantem ϵ_0 und festem $k \in (-\pi, \pi]$:

$$u'' + 2iku' - k^2u + \lambda\epsilon_0u = 0, \quad u(x+1) = u(x), \quad x \in (0, 1).$$

Für den Fall, dass $\lambda \neq 0$ ist, gilt:

1. Das zugehörige charakteristische Polynom

$$p^2 + 2ikp + \lambda\epsilon_0 - k^2 = 0$$

hat die beiden Nullstellen

$$p_1 = -ik + i\sqrt{\lambda\epsilon_0}$$

und

$$p_2 = -ik - i\sqrt{\lambda\epsilon_0}.$$

2. $\psi_1(x) = e^{-i(k+\sqrt{\lambda\epsilon_0})x}$ und $\psi_2(x) = e^{-i(k-\sqrt{\lambda\epsilon_0})x}$ bilden ein Fundamentalsystem. Die allgemeine Lösung hat die Form:

$$\Psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x).$$

3. Die Randbedingungen $\Psi(x+1) = \Psi(x)$ und $\Psi'(x+1) = \Psi'(x)$ liefern

$$e^{-i(k+\sqrt{\lambda\epsilon_0})} = 1 \text{ und } c_2 = 0$$

oder

$$e^{-i(k-\sqrt{\lambda\epsilon_0})} = 1 \text{ und } c_1 = 0.$$

4. Diese Bedingungen sind äquivalent zu

$$\sqrt{\lambda\epsilon_0} = k + 2\pi n \text{ für ein } n \in \mathbb{Z}$$

beziehungsweise

$$\sqrt{\lambda\epsilon_0} = -(k + 2\pi n) \text{ für ein } n \in \mathbb{Z},$$

weshalb die von 0 verschiedenen Eigenwerte durch

$$\lambda_n = \frac{1}{\epsilon_0}(2\pi n + k)^2, \quad n \in \mathbb{Z}$$

gegeben sind.

5. Die zugehörigen Eigenvektoren sind bestimmt durch:

$$\Psi(x) = e^{-i(k-\sqrt{\lambda\epsilon_0})x} = e^{-i(k-(k+2\pi n))x} = e^{i2\pi nx}.$$

Für den Fall, dass $\lambda = 0$ ist, hat die allgemeine Lösung die Form

$$\Psi(x) = c_1 e^{-ikx} + x c_2 e^{-ikx}$$

Zusammen mit den Randbedingungen folgt, dass $c_2 = 0$ sein muss, da xc_2e^{-ikx} nicht periodisch ist und dass 0 für $k = 0$ Eigenwert ist, jedoch nicht für $k \neq 0$.

Die Eigenwerte für ein festes $k \in K$ von

$$-\Delta u - 2ik\nabla u + |k|^2 u = \lambda \epsilon_0 u \quad (u \in H_{\text{per}}^2(\Omega)), \quad (5.1)$$

sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \frac{1}{\epsilon_0} |2\pi j + k|^2 \\ &= \frac{1}{\epsilon_0} \left((2\pi j_1 + k_1)^2 + (2\pi j_2 + k_2)^2 \right), \quad j = (j_1, j_2)^T \in \mathbb{Z}^2 \end{aligned}$$

mit den zugehörigen Eigenfunktionen

$$\begin{aligned} \phi_j(x) &= \exp\left(2\pi i \langle j, x \rangle\right) \\ &:= \exp\left(2\pi i (j_1 x_1 + j_2 x_2)\right). \end{aligned}$$

Mit $\langle j, x \rangle := j_1 x_1 + j_2 x_2$ wird das Skalarprodukt aus j und x bezeichnet.

Da das System $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{Z}^2}$ in $L^2((0, 1)^2)$ orthogonal und vollständig wegen der Vollständigkeit der eindimensionalen Eigenfunktionen ist, haben wir alle Eigenräume gefunden.

Mit Hilfe des Ritz–Galerkin–Ansatzes suchen wir nach Näherungslösungen $\tilde{u}_n \in H_{\text{per}}^1(\Omega)$, $n \in \mathbb{N}$, des λ –nichtlinearen Eigenwertproblems (4.1) von folgender Form:

$$\tilde{u}_n(x) = \sum_{j \in \mathbb{Z}^2: |j| \leq M} u_j^{(n)} \phi_j(x), \quad (5.2)$$

wobei wir als Ansatzfunktionen die eben berechneten Eigenelemente $\phi_j(x) = \exp\left(2\pi i \langle j, x \rangle\right)$ von (5.1) wählen.

Hierzu müssen wir basierend auf dem in Kapitel 5.1 beschriebenen Rayleigh–Ritz–Verfahren das Matrixeigenwertproblem

$$(a_k(\phi_j, \phi_l)) u = \lambda (\langle \phi_j, \phi_l \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}) u$$

der Dimension $(2M + 1)^2 \times (2M + 1)^2$ für $j, l \in \mathbb{Z}^2$ mit $|j|, |l| \leq M$ lösen.

Wir bezeichnen im Folgenden die Matrix $(a_k(\phi_j, \phi_l))_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}$ auch kurz mit $A(k)$ und die Matrix $(\langle \phi_j, \phi_l \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)})_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}$ mit $B(\lambda)$.

Dabei ist $(a_k(\phi_j, \phi_l))_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}
& \left(\int_{\Omega} \left(\nabla \phi_j(x) \cdot \nabla \overline{\phi_l(x)} - 2ik \cdot \nabla \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} + |k|^2 \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} \right) dx \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M} \\
&= \left(\int_{\Omega} \left(\nabla \phi_j(x) \cdot \nabla \overline{\phi_l(x)} dx - 2i \left(k_1 \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x_1} \overline{\phi_l(x)} dx \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + k_2 \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x_2} \overline{\phi_l(x)} dx \right) + |k|^2 \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} dx \right) \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M} \\
&= \left(\int_{\Omega} (2\pi i j_1 \exp[2\pi i \langle j, x \rangle], 2\pi i j_2 \exp[2\pi i \langle j, x \rangle]) \right. \\
&\quad \left. \cdot (-2\pi i l_1 \exp[-2\pi i \langle l, x \rangle], -2\pi i l_2 \exp[-2\pi i \langle l, x \rangle])^T dx \right. \\
&\quad - 2i \left(k_1 \int_{\Omega} 2\pi i j_1 \exp[2\pi i \langle j, x \rangle] \cdot \exp[-2\pi i \langle l, x \rangle] dx \right. \\
&\quad \left. + k_2 \int_{\Omega} 2\pi i j_2 \exp[2\pi i \langle j, x \rangle] \cdot \exp[-2\pi i \langle l, x \rangle] dx \right) \\
&\quad \left. + (k_1^2 + k_2^2) \int_{\Omega} \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\int_0^1 \int_0^1 4\pi^2 j_1 l_1 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] + 4\pi^2 j_2 l_2 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx_1 dx_2 \right. \\
&\quad - 2i \left(k_1 \int_0^1 \int_0^1 2\pi i j_1 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx_1 dx_2 \right. \\
&\quad \quad \left. \left. + k_2 \int_0^1 \int_0^1 2\pi i j_2 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx_1 dx_2 \right) \right. \\
&\quad \left. + (k_1^2 + k_2^2) \int_0^1 \int_0^1 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx_1 dx_2 \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}.
\end{aligned}$$

Es ist zu beachten, dass ϵ eine unstetige, von dem Eigenwertparameter abhängige Funktion ist (siehe Kapitel 3.2). Auf der Kreisscheibe Ω_2 ist die dielektrische Funktion nur noch von λ abhängig (3.6), d. h. $\epsilon(x, \lambda) = \epsilon_2(\lambda)$ für $x \in \Omega_2$. Außerhalb der Kreisscheibe ist sie konstant gleich eins, d.h. $\epsilon(x, \lambda) = \epsilon_1 = 1$ für $x \in \Omega_1$.

Daher ist $(\langle \phi_j, \phi_l \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)})_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}$ gegeben durch:

$$\begin{aligned}
&\left(\epsilon_1 \int_{\Omega_1} \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} dx + \epsilon_2(\lambda) \int_{\Omega_2} \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} dx \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M} \\
&= \left(\epsilon_1 \int_{\Omega} \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} dx + (\epsilon_2(\lambda) - \epsilon_1) \int_{\Omega_2} \phi_j(x) \overline{\phi_l(x)} dx \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M} \\
&= \left(\epsilon_1 \int_{\Omega} \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx + (\epsilon_2(\lambda) - \epsilon_1) \int_{\Omega_2} \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M} \\
&= \left(\epsilon_1 \int_0^1 \int_0^1 \exp[2\pi i \langle j - l, x \rangle] dx_1 dx_2 \right. \\
&\quad \left. + (\epsilon_2(\lambda) - \epsilon_1) \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp[2\pi i \langle j - l, \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle] \rho d\rho dt \right)_{j, l \in \mathbb{Z}^2: |j|, |l| \leq M}.
\end{aligned}$$

Zusammenfassend ergibt sich für die Einträge der Matrix $A(k)$:

$$a_k(\phi_j, \phi_l) = \begin{cases} 0 & \text{für } j \neq l \\ 4\pi^2(j_1^2 + j_2^2) + 4\pi(k_1j_1 + k_2j_2) + (k_1^2 + k_2^2) & \text{für } j = l \end{cases} \quad (5.3)$$

und für die Matrixeinträge von $B(\lambda)$:

$$\langle \phi_j, \phi_l \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} = \begin{cases} (\epsilon_2(\lambda) - \epsilon_1(\lambda)) \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp[2\pi i \langle j - l, \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle] \rho \, d\rho \, dt & \text{für } j \neq l \\ \epsilon_1 + (\epsilon_2(\lambda) - \epsilon_1)\pi r^2 & \text{für } j = l \end{cases} \quad (5.4)$$

Wir haben also ein Matrixeigenwertproblem der Form

$$A(k) \cdot u = \lambda \cdot B(\lambda) \cdot u \quad (5.5)$$

zu lösen, wobei $A(k)$ und $B(\lambda)$ Matrizen der Dimension $(2M+1)^2 \times (2M+1)^2$ sind.

Beim Aufstellen der Matrix $B(\lambda)$, die zur Berechnung des Matrixeigenwertproblems (5.5) benötigt wird, müssen wir ein Integral über der Kreisscheibe mit dem Radius r berechnen. Da wir die Eigenwertschranken des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (4.1) verifiziert ermitteln wollen, also den Integrationsfehler mit berücksichtigen müssen, sollte dieses Integral möglichst genau mit berechenbaren Fehlerschranken bestimmt werden.

5.2 Berechnung des Integrals über der Kreisscheibe

Wir werden das Integral

$$\int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \langle (j-l), \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \rho \, d\rho \, dt, \quad j, l \in \mathbb{Z}^2 \quad (5.6)$$

bestimmen.

5.2. BERECHNUNG DES INTEGRALS ÜBER DER KREISSCHEIBE 39

Zunächst kann man für $j_1, j_2, l_1, l_2 \in \mathbb{Z}$ den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \exp \left[2\pi i \langle j - l, \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \rangle \right] \\ &= \exp[\pi i(j_1 - l_1 + j_2 - l_2)] \\ &= (-1)^{j_1 - l_1 + j_2 - l_2} \end{aligned}$$

vor das Integral ziehen und erhält folgende Gleichheit:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \langle (j - l), \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \rho \, d\rho \, dt \\ &= (-1)^{j_1 - l_1 + j_2 - l_2} \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \langle (j - l), \begin{pmatrix} \rho \cos t \\ \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \cdot \rho \, d\rho \, dt. \end{aligned}$$

Für die Integration von

$$\int_0^r \exp \left[2\pi i \langle (j - l), \begin{pmatrix} \rho \cos t \\ \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \rho \, d\rho \tag{5.7}$$

setzen wir

$$\alpha(t) := 2\pi i \langle (j - l), \begin{pmatrix} \cos t \\ \sin t \end{pmatrix} \rangle$$

und erhalten, falls $\alpha(t) \neq 0$:

$$\begin{aligned} \int_0^r \exp[\alpha(t)\rho] \rho \, d\rho &= \frac{1}{\alpha(t)} \exp[\alpha(t)\rho] \rho \Big|_0^r - \int_0^r \frac{1}{\alpha(t)} \exp[\alpha(t)\rho] \, d\rho \\ &= \frac{1}{\alpha(t)^2} \{ \exp[\alpha(t)r] (\alpha(t)r - 1) + 1 \}. \end{aligned}$$

Falls $\alpha(t) = 0$, so ist:

$$\begin{aligned} & \int_0^r \exp[2\pi i \langle (j - l), \begin{pmatrix} \rho \cos t \\ \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle] \rho \, d\rho \\ &= \int_0^r \rho \, d\rho \\ &= \frac{1}{2} r^2. \end{aligned}$$

Wir formulieren den erhaltenen Ausdruck mit Hilfe der Exponentialreihendarstellung um:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\alpha(t)^2} (\alpha(t)r \cdot e^{\alpha(t)r} - e^{\alpha(t)r} + 1) \\
&= \frac{1}{\alpha(t)^2} (\alpha(t)r + (\alpha(t)r)^2 + \frac{(\alpha(t)r)^3}{2!} + \dots - 1 - \alpha(t)r - \frac{(\alpha(t)r)^2}{2!} - \dots + 1) \\
&= \frac{1}{\alpha(t)^2} \left((\alpha(t)r)^2 - \frac{(\alpha(t)r)^2}{2!} + \frac{(\alpha(t)r)^3}{2!} - \frac{(\alpha(t)r)^3}{3!} + \frac{(\alpha(t)r)^4}{3!} - \frac{(\alpha(t)r)^4}{4!} + \dots \right) \\
&= r^2 - \frac{r^2}{2!} + \frac{r^3\alpha(t)}{2!} - \frac{r^3\alpha(t)}{3!} + \frac{r^4\alpha(t)^2}{3!} - \frac{r^4\alpha(t)^2}{4!} + \dots \\
&= \frac{r^2}{2} + \frac{\alpha(t)r^3}{3} + \frac{3r^4\alpha(t)^2}{24} + \dots \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) \alpha(t)^{(n+1)-2} r^{n+1} \\
&= r^2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) \alpha(t)^{n-1} r^{n-1}.
\end{aligned}$$

Diese Darstellung gilt auch für $\alpha(t) = 0$ und es muss keine Fallunterscheidung mehr gemacht werden.

Wir setzen $a := j_1 - l_1$ und $b := j_2 - l_2$ und müssen also noch

$$\int_0^{2\pi} r^2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) [2\pi i (a \cos(t) + b \sin(t)) r]^{n-1} dt \quad (5.8)$$

5.2. BERECHNUNG DES INTEGRALS ÜBER DER KREISSCHEIBE 41

integrieren. Dazu betrachten wir zunächst

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2\pi} (a \cos(t) + b \sin(t))^{n-1} dt \\
 &= \int_0^{2\pi} \left(a \frac{e^{it} + e^{-it}}{2} + b \frac{e^{it} - e^{-it}}{2i} \right)^{n-1} dt \\
 &= \int_0^{2\pi} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} \left(\frac{a-ib}{2} \right)^{n-1-k} \left(\frac{a+ib}{2} \right)^k \underbrace{(e^{it})^{n-1-k} (e^{-it})^k}_{=e^{(n-1-2k)it}} dt \\
 &= \begin{cases} 0 & , \text{ falls } n \text{ gerade} \\ 2\pi \binom{n-1}{\frac{n-1}{2}} \underbrace{\left(\frac{a-ib}{2} \right)^{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{a+ib}{2} \right)^{\frac{n-1}{2}}}_{\left(\frac{a^2+b^2}{4} \right)^{\frac{n-1}{2}}} & , \text{ falls } n \text{ ungerade.} \end{cases}
 \end{aligned}$$

Für

$$f_n(t) := \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) [2\pi i (a \cos(t) + b \sin(t)) r]^{n-1}$$

gilt

$$|f_n(t)| \leq \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) [2\pi \sqrt{a^2 + b^2} r]^{n-1} =: g_n$$

und

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{g_{n+1}}{g_n} = 0.$$

Daraus folgt die absolute und gleichmäßige Konvergenz von $\sum_{n=1}^{\infty} f_n(t)$. Das Integral (5.8) nimmt insgesamt folgenden Wert an:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{2\pi} r^2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n!} - \frac{1}{(n+1)!} \right) [2\pi i (a \cos(t) + b \sin(t)) r]^{n-1} dt \\
 &= 2\pi r^2 \sum_{s=1}^{\infty} \left(\frac{1}{(2s-1)!} - \frac{1}{(2s)!} \right) \binom{2s-2}{s-1} \left(\frac{a^2+b^2}{4} \right)^{s-1} (-1)^{s-1} (2\pi r)^{2s-2}. \\
 &= 2\pi r^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{2s} \frac{1}{[(s-1)!]^2} (-1)^{s-1} [\pi^2 r^2 (a^2 + b^2)]^{s-1} \tag{5.9}
 \end{aligned}$$

Diese Reihe ist alternierend. Ihre Summanden bilden eine betragslich monoton fallende Nullfolge, falls

$$\begin{aligned} & \frac{|(s+1)\text{-tes Folgenglied}|}{|s\text{-tes Folgenglied}|} \\ &= \frac{\frac{1}{2s+2} \frac{1}{(s!)^2} [\pi^2 r^2 (a^2 + b^2)]^s}{\frac{1}{2s} \frac{1}{[(s-1)!]^2} [\pi^2 r^2 (a^2 + b^2)]^{s-1}} \\ &= \frac{1}{s(s+1)} \pi^2 r^2 (a^2 + b^2) \\ &\leq 1 \end{aligned}$$

Für den Abbruchindex N muss also

$$N(N+1) \geq \pi^2 r^2 (a^2 + b^2)$$

gelten.

Die Intervallbreite zwischen der N -ten und $(N+1)$ -sten Partialsumme ist gerade der Betrag des $(N+1)$ -sten Summanden:

$$\begin{aligned} & \left| 2\pi r^2 \left(\frac{1}{(2N+1)!} - \frac{1}{(2N+2)!} \right) \frac{(2N)!}{N!N!} \left(\frac{a^2 + b^2}{4} \right)^N (-1)^N (2\pi r)^{2N} \right| \quad (5.10) \\ &= 2\pi r^2 \frac{2N+1}{(2N+2)!} \frac{(2N)!}{N!N!} \left(\frac{a^2 + b^2}{4} \right)^N (2\pi r)^N (2\pi r)^N \\ &= 2\pi r^2 \frac{1}{(2N+2)N!N!} [(a^2 + b^2)(\pi r)^2]^N \end{aligned}$$

und kann durch entsprechende Wahl von N bei gegebenen a und b beliebig klein bestimmt werden. Um eine Idee von der Größenordnung zu bekommen, ist eine Näherung mit Hilfe der Stirling-Formel $n! \sim \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n$ möglich:

$$2\pi r^2 \frac{1}{(2N+2)N!N!} [(a^2 + b^2)(\pi r)^2]^N \approx 2\pi r^2 \frac{1}{(2N+2)} \frac{1}{(2\pi N)} \left(\frac{e}{N}\right)^{2N} [(a^2 + b^2)(\pi r)^2]^N.$$

Satz 5.2.1. Für $N(N+1) \geq \pi^2 r^2 (a^2 + b^2)$ liegt der Grenzwert der Reihe (5.9),

$$2\pi r^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{2s} \frac{1}{[(s-1)!]^2} (-1)^{s-1} [\pi^2 r^2 (a^2 + b^2)]^{s-1},$$

zwischen der N -ten und der $(N+1)$ -ten Partialsumme. Diese bilden somit obere und untere Schranken für das zu bestimmende Integral (5.8).

Wir können das Integral (5.6),

$$\int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \langle (j-l), \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \rho \, d\rho \, dt, \quad j, l \in \mathbb{Z}^2,$$

das sich von der Reihe (5.9) höchstens durch ein Vorzeichen unterscheidet, nun bis auf eine beliebige Nachkommastelle genau berechnen.

Damit können wir die Matrix $B(\lambda)$ für das Matrixeigenwertproblem (5.5) aufstellen.

5.3 Ergebnis der numerischen Approximation

Wir wenden das Newton-Verfahren auf das Matrixeigenwertproblem (5.5) zur näherungsweise Berechnung des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (4.1) an.

Dabei führen wir eine Homotopie in ϵ durch, um die λ -Abhängigkeit von B in den Griff zu bekommen. Diese ist nicht zu verwechseln mit der in Kapitel 2.5 beschriebenen Homotopie zur Bestimmung des Parameters ρ , der für die Berechnung von Lehmann-Goerisch-Schranken benötigt wird. Es werden Gitterpunkte $0 = s_0 < s_1 < \dots < s_t = 1$ gewählt, so dass für s_0 zunächst ϵ unabhängig von λ ist, d. h. zusätzlich zum konstant gewählten ϵ_1 auf Ω_1 , wie im Modell (3.6) angenommen, wird ϵ_2 auf der Kreisscheibe Ω_2 ebenfalls konstant gewählt. ϵ_2 wird gleich 12 gesetzt, da wir in (3.6) ϵ_2 als monoton wachsende, beschränkte Funktion mit Anfangswert $a = 11$ und Sättigungsmanko $S = 16$ modelliert haben.

Um die Eigenwerte des λ -nichtlinearen Matrixeigenwertproblems (5.5),

$$A(k) \cdot u = \lambda \cdot B(\lambda) \cdot u,$$

naherungsweise zu berechnen, wenden wir das Newton–Verfahren auf

$$F(\lambda, u) = \begin{pmatrix} \bar{u}^T u - 1 \\ (A(k) - \lambda B^{(s_r)}(\lambda)) \cdot u \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

an. Das zugehorige Homotopieergebnis bei s_{r-1} wird jeweils als neuer Startwert verwendet. Dabei soll die Hochstellung s_r in $B^{(s_r)}(\lambda)$ die Wahl der dielektrischen Funktion

$$\epsilon^{(s_r)}(x, \lambda) = \begin{cases} \epsilon_2^{(s_r)}(\lambda) = 12 \cdot (1 - s_r) + s_r \cdot \epsilon_2(\lambda) & (x \in \Omega_2) \\ \epsilon_1 = 1 & (x \in \Omega_1) \end{cases}$$

in dem entsprechenden Homotopieschritt verdeutlichen.

Fur die Berechnungen der Naherungseigenwerte $\tilde{\Lambda}_m$ und der zugehorigen Naherungseigenvektoren $u^{(m)}$ ($m = 1, \dots, (2M+1)^2$) von (5.5) haben wir MATLAB verwendet. Die aus dieser Rechnung erhaltenen Naherungseigenpaare $(\tilde{\Lambda}_m, u^{(m)})$, ($m = 1, \dots, (2M+1)^2$), liefern gute Werte fur die ersten N Naherungseigenpaare $(\tilde{\Lambda}_n, \tilde{u}_n)$, $N \ll (2M+1)^2$, $\tilde{u}_n(x) = \sum_{t=1}^{(2M+1)^2} u_t^{(n)} \phi_t(x)$ ($n = 1, \dots, N$) des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (4.1).

Diese Prozedur ist fur verschiedene k aus einem endlichen Gitter $\mathcal{K} \subset K$ zu wiederholen. Fur die Wahl des Gitters sei auf Kapitel 7 verwiesen.

Weitere Moglichkeiten zur naherungsweisen Berechnung von λ -nichtlinearen Eigenwertproblemen sind in [Meh], [Mar] und [Spe] zu finden.

Die Abbildung 5.1 zeigt ein Beispiel fur eine naherungsweise berechnete Bandluckenstruktur der ersten sechs Eigenwertbander $\lambda_{k,1}, \dots, \lambda_{k,6}$. Abbildung 5.2 visualisiert dieses Beispiel fur $\lambda_{k,n}$ ($n = 1, \dots, 6$) uber dem Rand der irreduziblen Brillouinzone. Hieraus wird ersichtlich, dass zwischen den ersten und den zweiten Eigenwerten, $\lambda_{k,1}$ und $\lambda_{k,2}$, fur $k = (k_1, k_2)$ aus der Brillouinzone $K = (-\pi, \pi]^2$ eine spektrale Bandlucke auftreten konnte. Ebenso deutet die numerische Berechnung eine Lucke zwischen dem dritten und vierten Eigenwertband an. Wir wollen nun prufen, ob diese tatsachlich existieren. Das nachste Kapitel zeigt das Vorgehen fur einen solchen Beweis.

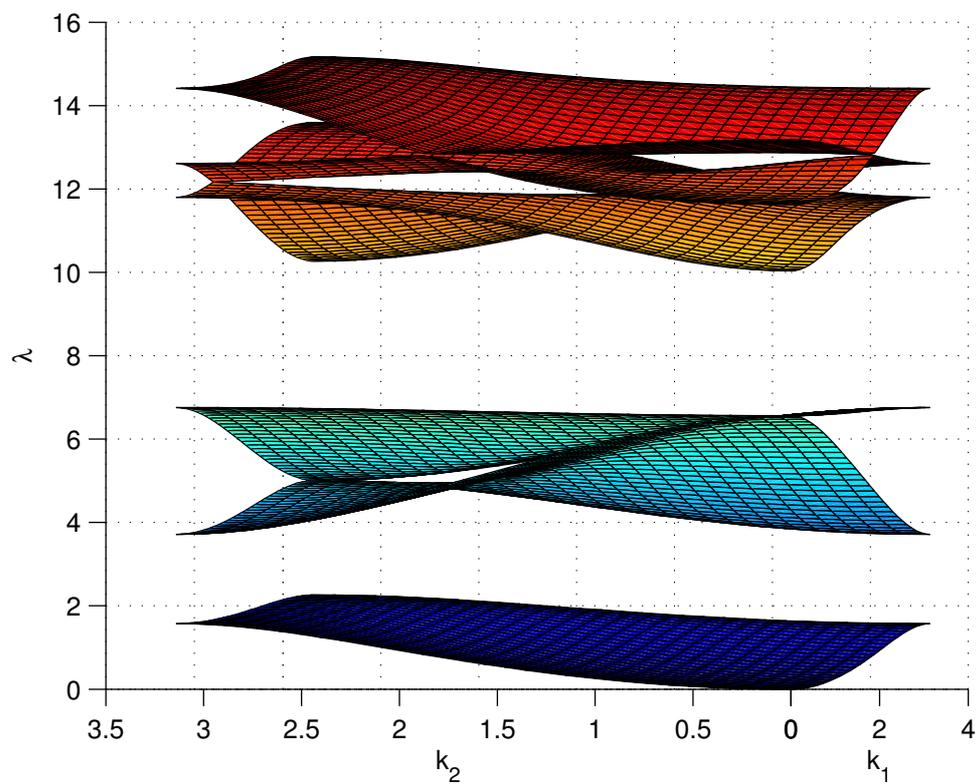


Abbildung 5.1: Beispiel für die ersten sechs Eigenwertbänder über $\mathcal{K} = (0, \pi]^2$ mit 900 äquidistanten Gitterpunkten $k \in \mathcal{K}$ unter Verwendung von 625 Ansatzfunktionen. Für den Radius r der Kreisscheibe wurde $r = 0.3$ gesetzt.

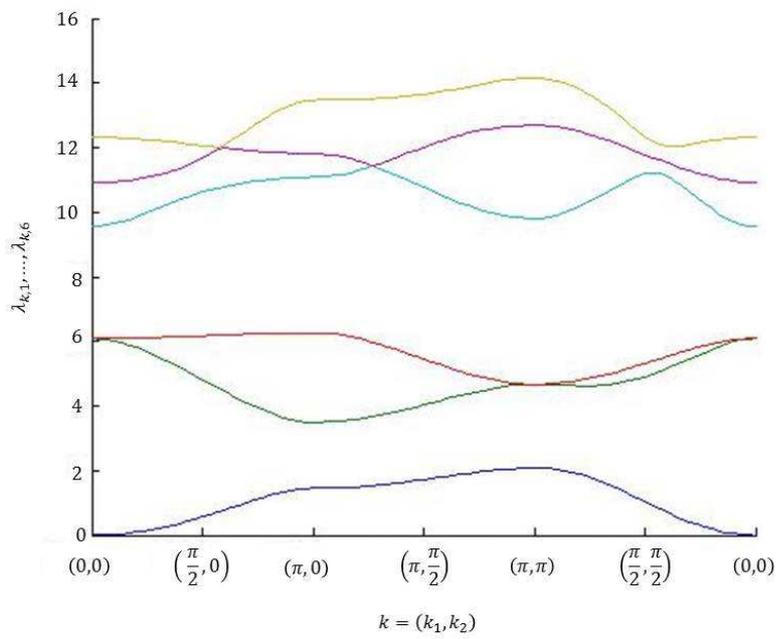


Abbildung 5.2: Beispiel für die ersten sechs Eigenwertkurven über dem Rand der irreduziblen Brillouinzone

Kapitel 6

Strategie für den Beweis einer Bandlücke

Wird durch die Numerik ein Intervall $[a, b]$ in einer Bandlücke angedeutet (siehe Abbildung 5.1), muss noch das tatsächliche Vorhandensein, wie im Folgenden aufgezeigt, nachgewiesen werden. Deshalb fixieren wir zunächst k und wählen $a = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_N = b$. Nun ist zu zeigen, dass kein Eigenwert des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems

$$-(\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik) u = \lambda \epsilon(x, \lambda) u \quad (u \in H_{\text{per}}^2(\Omega)), \quad (6.1)$$

im Intervall $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ liegt. Zu diesem Zweck definieren wir für $x \in \Omega$

$$\bar{\epsilon}_j(x) := \max_{\lambda_j \leq \lambda \leq \lambda_{j+1}} \epsilon(x, \lambda) \quad \text{und} \quad \underline{\epsilon}_j(x) := \min_{\lambda_j \leq \lambda \leq \lambda_{j+1}} \epsilon(x, \lambda).$$

Dies bedeutet in unserem Fall, da wir $\epsilon(\cdot, \lambda)$ monoton wachsend gewählt haben:

$$\bar{\epsilon}_j(x) = \epsilon(x, \lambda_{j+1}) \quad \text{und} \quad \underline{\epsilon}_j(x) = \epsilon(x, \lambda_j).$$

Wir betrachten nun die λ -linearen Eigenwertprobleme:

$$-(\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik) u = \mu \underline{\epsilon}_j(x) u \quad (u \in H_{\text{per}}^2(\Omega)) \quad (6.2)$$

$$-(\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik)u = \nu \bar{\epsilon}_j(x)u \quad (u \in H_{\text{per}}^2(\Omega)) \quad (6.3)$$

mit den zugehörigen Eigenwertfolgen $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ und $(\nu_n)_{n \in \mathbb{N}}$.

Zum Widerspruch geführt werden soll die Annahme, dass das λ -nichtlineare Problem (6.1) einen Eigenwert $\lambda^* \in [\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ besitzt.

Unter dieser Annahme ist λ^* auch ein Eigenwert des λ -linearen Eigenwertproblems

$$-(\nabla + ik) \cdot (\nabla + ik)u = \lambda \epsilon(x)u \quad (u \in H_{\text{per}}^2(\Omega)) \quad (6.4)$$

mit $\epsilon(x) := \epsilon(x, \lambda^*)$ und mit der Eigenwertfolge $(\hat{\lambda}_n)_{n \in \mathbb{N}}$.

Sei $m \in \mathbb{N}$ mit $\lambda^* = \hat{\lambda}_m$.

Nach Poincarés Min–Max–Prinzip gilt:

$$\lambda^* = \hat{\lambda}_m = \min_{U \subset H_{\text{per}}^1(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon(x, \lambda^*) |u|^2 dx}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \leq \min_{U \subset H_{\text{per}}^1(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon_j(x) |u|^2 dx} = \mu_m \\ \geq \min_{U \subset H_{\text{per}}^1(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon_j(x) |u|^2 dx} = \nu_m \end{array} \right.$$

Daraus ergibt sich: $\nu_m \leq \lambda^* \leq \mu_m$.

Wird gezeigt, dass $[\nu_m, \mu_m] \cap [\lambda_j, \lambda_{j+1}] = \emptyset$, existiert der Widerspruch und das λ -nichtlineare Problem (6.1) hat folglich keinen Eigenwert in $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$.

Es sind dafür folgende Schritte durchzuführen:

1. Wir berechnen mit dem Rayleigh–Ritz–Verfahren obere Schranken für das λ -lineare Eigenwertproblem (6.2) mit $\epsilon = \epsilon_j(x)$.

2. Mit dem Lehmann–Goerisch–Verfahren berechnen wir untere Schranken für das λ -lineare Eigenwertproblem (6.3) mit $\epsilon = \bar{\epsilon}_j(x)$.
3. Wir müssen prüfen, ob die Bedingungen

$$\bar{\mu}_n < \lambda_j \quad \text{und} \quad \underline{\nu}_{n+1} > \lambda_{j+1}$$

für ein $n \in \{1, \dots, N-1\}$ erfüllt sind.

Dann gilt

$$\begin{aligned} \mu_l &\leq \bar{\mu}_n < \lambda_j && \text{für } l = 1, \dots, n \\ \nu_l &\geq \underline{\nu}_{n+1} > \lambda_{j+1} && \text{für } l \geq n+1 \end{aligned}$$

und somit $[\nu_l, \mu_l] \cap [\lambda_j, \lambda_{j+1}] = \emptyset$ für alle $l \in \mathbb{N}$. Dies ist beispielhaft in Abbildung 6.1 dargestellt.

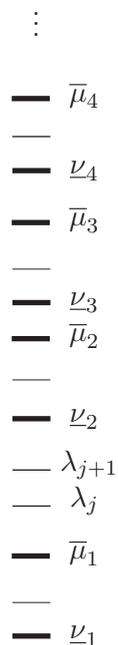


Abbildung 6.1: Beispiel für eine bewiesene Lücke im Intervall $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ zwischen dem ersten und zweiten Eigenwert für ein festes k , da $\bar{\mu}_1 < \lambda_j$ und $\underline{\nu}_2 > \lambda_{j+1}$ und somit $[\nu_m, \mu_m] \cap [\lambda_j, \lambda_{j+1}] = \emptyset$ für alle $m \in \mathbb{N}$.

Folglich haben wir bewiesen, dass in $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ für das fest gewählte k kein Eigenwert des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (6.1) liegt.

Wenn wir nachweisen wollen, dass die Lücke das ganze Intervall $[a, b]$ ausfüllt, müssen wir zeigen, dass in $[\lambda_j, \lambda_{j+1}]$ für alle $j = 0, \dots, N-1$ kein Eigenwert liegt. Dies bedeutet, dass wir die ganze Prozedur für alle j wiederholen müssen.

Diese Strategie muss für alle k aus einer endlichen Menge $\mathcal{K} \subset K$ an Gitterpunkten durchgeführt werden.

Um letztlich die Eigenwertausschließung in $[a, b]$ auf alle $k \in K$ erweitern zu können, also auch für k zwischen den Gitterpunkten, benötigen wir ein Störungsargument, das im nächsten Kapitel ausführlich beschrieben wird.

Kapitel 7

Nichtlineares Störungsargument

Die Übertragung der Eigenwertausschließung von einem Gitter $\mathcal{K} \subset K$ auf ganz K erfolgt über eine Störung der Sesquilinearform a_k in k durch h . Ziel ist es h zu quantifizieren, so dass Folgendes gilt: Liegt λ in der Resolventenmenge von $A_k(\lambda)$, so liegt λ auch in der Resolventenmenge von $A_{k+h}(\lambda)$.

7.1 Störung in k

Wir betrachten den Operator

$$A_k(\lambda) : H_{\text{per}}^2(\Omega) \rightarrow L_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2(\Omega)$$
$$A_k(\lambda)u := \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda)}(-\Delta - 2ik \cdot \nabla + |k|^2)u$$

zunächst für ein festes $\lambda = \mu_0$ in $\epsilon(\cdot, \lambda)$ und formulieren folgendes λ -lineare Eigenwertproblem:

Für $k \in K$ sind $(\lambda, u) \in \mathbb{R} \times D(A_k(\mu_0)) \setminus \{0\}$ gesucht, so dass

$$A_k(\mu_0)u = \lambda u. \tag{7.1}$$

Dann hat dieser selbstadjungierte Operator wie in [Hoa] beschrieben eine kompakte Resolvente und damit ein $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\epsilon(\mu_0)}$ -ONS aus Eigenvektoren $u_{n,k}(\mu_0)$ mit Eigenwerten $\lambda_{n,k}(\mu_0)$.

$\rho(A_k(\mu_0))$ bezeichne die Resolventenmenge und $\sigma(A_k(\mu_0))$ das Spektrum.

Wir betrachten das λ -nichtlineares Eigenwertproblem:

Für $k \in K$ sind $(\lambda, u) \in \mathbb{R} \times D(A_k(\lambda)) \setminus \{0\}$ gesucht, so dass

$$A_k(\lambda)u = \lambda u \quad (7.2)$$

gilt.

Um nun Aussagen über das Spektrum von $A_k(\lambda)$ machen zu können, definieren wir das Spektrum der Familie $\{A_k(\mu)\}_{\mu \in (0, \infty)}$ durch

$$\forall k \in K : \quad \hat{\sigma}(\{A_k(\mu)\}_{\mu}) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \exists n : \lambda = \lambda_{n,k}(\lambda)\}$$

und die Resolventenmenge durch

$$\forall k \in K : \quad \hat{\rho}(\{A_k(\mu)\}_{\mu}) = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \forall n : \lambda \neq \lambda_{n,k}(\lambda)\}.$$

Offenbar gilt dann

$$\lambda \in \hat{\rho}(\{A_k(\mu)\}_{\mu}) \Leftrightarrow \lambda \in \rho(A_k(\lambda)).$$

Wenn wir $a_k(u, v)$ in k mit einem kleinen h stören, erhalten wir:

$$\begin{aligned} a_{k+h}(u, v) &= \int_{\Omega} (\nabla + i(k+h))u \cdot \overline{(\nabla + i(k+h))v} \, dx \\ &= \underbrace{\int_{\Omega} (\nabla + ik)u \cdot \overline{(\nabla + ik)v} \, dx}_{a_k(u, v)} + \int_{\Omega} (\nabla + ik)u \cdot \overline{ihv} \, dx + \int_{\Omega} ihu \cdot \overline{(\nabla + ik)v} \, dx \\ &\quad + \int_{\Omega} ihu \cdot \overline{ihv} \, dx \\ &\stackrel{\text{part. Integr.}}{=} a_k(u, v) + \int_{\Omega} (\nabla + ik)u(-ih)\bar{v} \, dx - \int_{\Omega} ih \cdot [(\nabla + ik)u]\bar{v} \, dx \\ &\quad + \int_{\Omega} |h|^2 u \bar{v} \, dx \\ &= a_k(u, v) + s_{kh}(u, v). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Die zu $a_k(u, v)$ gehörende sogenannten Energienorm (siehe [Hoa]) ist definiert durch

$$\|u\|_k = \sqrt{a_k(u, u)}.$$

Für $k = 0$ handelt es sich um eine Halbnorm.

Nach der Wahl von $\epsilon(x, \lambda)$ (siehe (3.6)) gilt

$$\epsilon(x, \lambda) \geq \min \{\epsilon_1, \epsilon_2(\lambda)\} = \min \{1, a\} =: \epsilon_{\min}. \quad (7.4)$$

Sei $u \in H_{per}^1(\Omega)$, $v \in L_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2(\Omega)$, dann gilt Folgendes

$$\begin{aligned} |s_{kh}(u, v)| &\leq 2 \left| \int_{\Omega} h \cdot [(\nabla + ik)u] \bar{v} \, dx \right| + |h|^2 \left| \int_{\Omega} u \bar{v} \, dx \right| \\ &= 2 \left| \int_{\Omega} \sqrt{\frac{\epsilon(\cdot, \lambda)}{\epsilon(\cdot, \lambda)}} h \cdot [(\nabla + ik)u] \bar{v} \, dx \right| + |h|^2 \left| \int_{\Omega} \frac{\epsilon(\cdot, \lambda)}{\epsilon(\cdot, \lambda)} u \bar{v} \, dx \right| \\ &\stackrel{(7.4)}{\leq} 2 \left(\int_{\Omega} |h \cdot [(\nabla + ik)u]|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \left(\int_{\Omega} |\sqrt{\epsilon(\cdot, \lambda)} \bar{v}|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad + |h|^2 \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \left(\int_{\Omega} |\sqrt{\epsilon(\cdot, \lambda)} u|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \left(\int_{\Omega} |\sqrt{\epsilon(\cdot, \lambda)} \bar{v}|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq 2 \left(\int_{\Omega} |h|^2 |(\nabla + ik)u|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \\ &= 2|h| \|u\|_k \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \\ &\leq \frac{2|h|}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \|u\|_k \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \|v\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Wie in [Hoa] hergeleitet, lässt sich A_{k+h} als Summe aus A_k und S_{kh} schreiben, wobei der Operator $S_{kh}(\lambda) : H_{per}^2(\Omega) \rightarrow L_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2(\Omega)$ gemäß dem Rieszschen Darstellungssatz für beschränkte lineare Funktionale durch

$$\langle S_{kh}(\lambda)u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} := s_{kh}(u, v) \text{ für alle } v \in L_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2(\Omega)$$

definiert ist.

Mit $R(A_k(\lambda), \mu) = (\mu \text{id} - A_k(\lambda))^{-1} : L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda)}(\Omega) \rightarrow H^2_{\text{per}}(\Omega)$ bezeichnen wir die Resolvente von $A_k(\lambda)$ und können nun folgenden Satz formulieren:

Satz 7.1.1. *Sei λ in der Resolventenmenge von $A_k(\lambda)$ und*

$$\|S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} < 1.$$

Dann gehört λ auch zu der Resolventenmenge von $A_{k+h}(\lambda)$.

Beweis.

$$\begin{aligned} A_{k+h}(\lambda) - \lambda \text{id} &= A_k(\lambda) + S_{kh}(\lambda) - \lambda \text{id} \\ &= [\text{id} + S_{kh}(\lambda)(A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}](A_k(\lambda) - \lambda \text{id}) \\ &= [\text{id} + S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)](A_k(\lambda) - \lambda \text{id}). \end{aligned}$$

□

Der praktischen Anwendung dieses Satzes auf unser Problem (7.2) liegen folgende Überlegungen zu Grunde.

Da $\epsilon(x, \mu)$ monoton wachsend in μ ist, folgt mit Hilfe des Min–Max–Prinzips von Poincaré (Satz 2.3.2) für $\mu < \nu$:

$$\begin{aligned} \lambda_{k,m}(\mu) &= \min_{U \subset H^1_{\text{per}}(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon(\mu, x) |u|^2 dx} \\ &\geq \min_{U \subset H^1_{\text{per}}(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon(\nu, x) |u|^2 dx} \\ &= \lambda_{k,m}(\nu). \end{aligned}$$

Folgende Überlegungen basieren nun darauf, dass $\lambda_{k,m}(\mu)$ in μ monoton fällt. Ausgehend von den berechneten Approximationen für die Eigenwerte $\lambda_{k,m-1}$ und $\lambda_{k,m}$ des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems wird ein Intervall $[\Lambda_{k,m-1}, \mu_{k,m}]$ innerhalb der Näherung für das Intervall $[\lambda_{k,m-1}, \lambda_{k,m}]$ gewählt. $\bar{\lambda}_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1})$ bezeichne eine obere Schranke des $(m-1)$ -sten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \Lambda_{k,m-1})$ und $\underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m})$ eine untere Schranke des m -ten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \mu_{k,m})$; beide werden mit Hilfe des

Rayleigh–Ritz– beziehungsweise des Lehmann–Goerisch–Verfahrens ermittelt. Nun ist zu überprüfen, ob

$$\bar{\lambda}_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) \leq \Lambda_{k,m-1} < \mu_{k,m} \leq \underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m}) \quad (7.6)$$

erfüllt ist. Dann gilt insbesondere $\lambda_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) \leq \Lambda_{k,m-1}$ und daher wegen der Antitonia der Eigenwertkurven: Der $(m-1)$ -te Eigenwert $\lambda_{k,m-1}$ des λ -nichtlinearen Problems erfüllt

$$\lambda_{k,m-1} \leq \Lambda_{k,m-1}. \quad (7.7)$$

Genauso schließt man aus (7.6) auch

$$\lambda_{k,m} \geq \mu_{k,m} \quad (7.8)$$

für den m -ten Eigenwert $\lambda_{k,m}$ des λ -nichtlinearen Problems.

Falls $\bar{\lambda}_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) > \Lambda_{k,m-1}$ für das anfangs gewählte $\Lambda_{k,m-1}$ gilt, ist der Wert von $\Lambda_{k,m-1}$ solange zu vergrößern bis die Bedingung $\bar{\lambda}_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) \leq \Lambda_{k,m-1}$ erfüllt ist. In dem Fall, dass $\mu_{k,m} > \underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m})$ gilt, ist $\mu_{k,m}$ solange zu verkleinern bis $\mu_{k,m} \leq \underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m})$ erfüllt ist.

Sei nun $\delta > 0$. Für jedes $\lambda \in [\Lambda_{k,m-1} + \delta, \mu_{k,m} - \delta]$, welches wegen (7.7) und (7.8) dann insbesondere in der Resolventenmenge von $A_k(\lambda)$ liegt, gilt

$$\begin{aligned} \lambda_{k,m}(\lambda) - \lambda &\geq \lambda_{k,m}(\mu_{k,m}) - \lambda \\ &\geq \underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m}) - \lambda \\ &\stackrel{(7.6)}{\geq} \mu_{k,m} - \lambda \\ &\geq \delta \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\lambda - \lambda_{k,m-1}(\lambda) &\geq \lambda - \lambda_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) \\
&\geq \lambda - \bar{\lambda}_{k,(m-1)}(\Lambda_{k,(m-1)}) \\
&\stackrel{(7.6)}{\geq} \lambda - \Lambda_{k,m-1} \\
&\geq \delta,
\end{aligned}$$

was in der Grafik 7.1 verdeutlicht ist.

Somit gelten für $n \in \mathbb{N}$ folgende Ungleichungen:

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda_{k,n}(\lambda)}{(\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda)^2} &= \frac{1}{\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda} + \frac{\lambda}{(\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda)^2} \\
&\leq \frac{1}{\delta} + \frac{\lambda}{\delta^2} = \frac{\delta + \lambda}{\delta^2} \\
&\leq \frac{\mu_{k,m}}{\delta^2} \tag{7.9}
\end{aligned}$$

und

$$\frac{1}{(\lambda_{k,m}(\lambda) - \lambda)^2} \leq \frac{1}{\delta^2},$$

die wir im anschließenden Lemma verwenden.

Lemma 7.1.1. *Es gelte (7.6). Sei $\lambda \in [\Lambda_{k,m-1} + \delta, \mu_{k,m} - \delta]$ für ein $\delta > 0$ und ein $m \in \mathbb{N}$. Dann ist*

$$\|S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \leq \frac{1}{\delta} \left(2|h| \sqrt{\frac{\mu_{k,m}}{\epsilon_{\min}}} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \right).$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
\|S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2 &= \langle S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u, S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \\
&= s_{kh}(R(A_k(\lambda), \lambda)u, S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u) \\
&\stackrel{(7.5)}{\leq} \left(\frac{2|h|}{\sqrt{\epsilon_{\min}}} \|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_k + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \right) \\
&\quad \cdot \|S_{kh}(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}.
\end{aligned}$$

Die Norm $\|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_k^2$ lässt sich wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned}
\|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_k^2 &= \langle A_k(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u, R(A_k(\lambda), \lambda)u \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle A_k(\lambda)R(A_k(\lambda), \lambda)u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \overline{\langle R(A_k(\lambda), \lambda)u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}} \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle A_k(\lambda)(A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \overline{\langle (A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}} \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle u, \frac{\lambda_{k,n}(\lambda)}{\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda} u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \overline{\langle u, \frac{1}{\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda} u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}} \\
&= \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{\lambda_{k,n}(\lambda)}{(\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda)^2} |\langle u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}|^2 \\
&\stackrel{(7.9)}{\leq} \frac{\mu_{k,m}}{\delta^2} \|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2.
\end{aligned}$$

Ferner gilt für $\|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2$ folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned}
\|R(A_k(\lambda), \lambda)u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2 &= \langle (A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}u, (A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}u \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)} \\
&= \sum_n |\langle (A_k(\lambda) - \lambda \text{id})^{-1}u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}|^2 \\
&= \sum_n |\langle u, (\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda)^{-1}u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}|^2 \\
&= \sum_n \frac{1}{(\lambda_{k,n}(\lambda) - \lambda)^2} |\langle u, u_{k,n}(\lambda) \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda)}|^2 \\
&\leq \frac{1}{\delta^2} \|u\|_{\epsilon(\cdot, \lambda)}^2.
\end{aligned}$$

□

Wegen Satz 7.1.1 muss h so bestimmt werden, dass

$$\frac{1}{\delta} \left(2|h| \sqrt{\frac{\mu_{k,m}}{\epsilon_{\min}}} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \right) < 1$$

gilt, woraus sich für $|h|$ die Bedingung

$$|h| < \sqrt{\epsilon_{\min}} (\sqrt{\mu_{k,m} + \delta} - \sqrt{\mu_{k,m}}).$$

ergibt.

Hieraus wird ersichtlich: Wenn mehr von der vermuteten Bandlücke weggenommen wird, also δ größer gewählt wird, dann werden weniger Gitterpunkte k zur Berechnung benötigt, da h größer gewählt werden kann, was numerisch weniger Aufwand bedeutet.

Für den folgenden Satz werden λ -lineare Vergleichsprobleme (7.1) herangezogen.

Satz 7.1.2. *Für $k \in \mathcal{K}$ wähle $\delta_k > 0$. Mit $\lambda_{k,m-1}$ und $\lambda_{k,m}$ seien der $(m-1)$ -ste und der m -te Eigenwert des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems (7.2) bezeichnet.*

Für ein Intervall $[\Lambda_{k,m-1}, \mu_{k,m}]$ seien die Voraussetzung (7.6)

$$\bar{\lambda}_{k,m-1}(\Lambda_{k,m-1}) \leq \Lambda_{k,m-1} < \mu_{k,m} \leq \underline{\lambda}_{k,m}(\mu_{k,m})$$

und folgende Annahmen für ein $m \in \mathbb{N}$ und ein Intervall I erfüllt:

1. $I \subset [\Lambda_{k,m-1} + \delta_k, \mu_{k,m} - \delta_k]$ für alle $k \in \mathcal{K}$.
2. $K \subset \bigcup_{k \in \mathcal{K}} B(k, r_k)$ mit $r_k = \sqrt{\epsilon_{\min}(\sqrt{\mu_{k,m} + \delta_k} - \sqrt{\mu_{k,m}})}$ und $B(k, r_k) = \{k' \in \mathbb{R} : |k' - k| < r_k\}$.

Dann ist I in einer spektralen Lücke enthalten, d.h. $I \subset (\lambda_{k,m-1}, \lambda_{k,m})$ für alle $k \in \mathcal{K}$.

Beweis. Aufgrund der Annahme 2 kann man für $k' \in \mathcal{K}$ ein $k \in \mathcal{K}$ mit $|h| < r_k$ für $h = k' - k$ finden. Somit gilt $|h| < \sqrt{\epsilon_{\min}(\sqrt{\mu_{k,m} + \delta_k} - \sqrt{\mu_{k,m}})}$, was zu $\frac{1}{\delta_k} \left(2|h| \sqrt{\frac{\mu_{k,m}}{\epsilon_{\min}}} + \frac{|h|^2}{\epsilon_{\min}} \right) < 1$ äquivalent ist. Schließlich implizieren die Annahme 1, der Satz 7.1.1 und das Lemma 7.1.1, dass $I \subset (\lambda_{k+h,m-1}, \lambda_{k+h,m})$. \square

7.2 Berechnung des Abstands der Gitterpunkte

Das im Satz 7.1.2 mit I bezeichnete Intervall sei wie in der Grafik 7.2 durch $I := [a, b]$ gegeben. $\lambda_{m,\min} := \min_{k \in \mathcal{K}} \lambda_{k,m}$ sei das Minimum des approximativ berechneten m -ten Eigenwertbandes und $\lambda_{m,\max} := \max_{k \in \mathcal{K}} \lambda_{k,m-1}$ das Maximum des approximativ berechneten $(m-1)$ -ten Eigenwertbandes über der irreduziblen Brillouinzone $\mathcal{K} \subset K$.

Das kleinste δ ist gegeben durch $\delta_{\min} := \min \{\delta_a, \delta_b\}$ und der kleinste Radius durch:

$$r_{\min} = \sqrt{\epsilon_{\min}(\sqrt{\lambda_{m,\min} + \delta_{\min}} - \sqrt{\lambda_{m,\min}})}.$$

Ziel ist es dann, die Bandlücke für das Intervall $I = [a, b] = [\lambda_{m-1,\max} + \delta_{\min}, \lambda_{m,\min} - \delta_{\min}]$ zu beweisen.

Mit $\Lambda_{k,m-1}$ und $\mu_{k,m}$ aus (7.6) gilt für dieses Intervall

$$I \subset [\Lambda_{k,m-1} + \delta_k, \mu_{k,m} - \delta_k] \text{ für alle } k \in \mathcal{K},$$

wobei wir δ_k folgendermaßen wählen:

$$\delta_k = \min \{a - \Lambda_{k,m-1}, \mu_{k,m} - b\}.$$

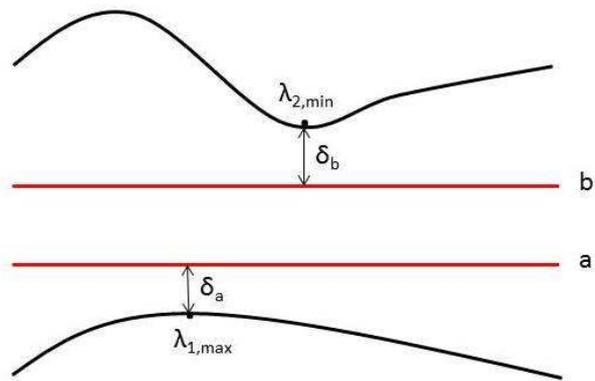


Abbildung 7.2: Längsschnitt durch die Brillouinzone durch die beiden Extrempunkte des m -ten und $(m - 1)$ -sten Eigenwertbandes.

Desweiteren bestimmen wir nach Lemma 7.1.1 und Satz 7.1.2 den Abstand der Gitterpunkte beziehungsweise den Radius r_k der Kreisscheibe, die festlegt, wie groß die Störung von $A_k(\lambda)$ in k sein darf, damit λ aus der Resolventenmenge von $A_k(\lambda)$ auch noch in der Resolventenmenge von $A_{k+h}(\lambda)$ liegt.

Geeignet angeordnete Kreisscheiben mit Radius r überdecken vollständig die Brillouinzone \mathcal{K} , wenn dessen Mittelpunkte den Abstand $d \leq \sqrt{2}r$ voneinander haben. Wir könnten also für das äquidistante quadratische Gitter $\tilde{\mathcal{K}}$ mit Gitterabstand $d = \sqrt{2}r_{\min}$ verifizierte obere und untere Schranken berechnen und so gegebenenfalls eine Bandlücke beweisen. Allerdings werden wir mit folgendem Vorgehen die Anzahl der Gitterpunkte k reduzieren. Wir setzen zunächst $\mathcal{K} = \emptyset$. Nun durchlaufen wir schrittweise in einer vorher festgelegten Reihenfolge alle $k \in \tilde{\mathcal{K}}$. Wir starten für ein $k \in \tilde{\mathcal{K}}$, nehmen es in die Menge \mathcal{K} mit auf und bezeichnen es mit k_G . Für dieses k_G berechnen wir sowohl $\Lambda_{k_G, m}$, als auch $\mu_{k_G, m-1}$ und mit diesen Werten dann sowohl

$$\delta_{k_G} = \min \{a - \Lambda_{k_G, m-1}, \mu_{k_G, m} - b\}$$

als auch

$$r_{k_G} = \sqrt{\epsilon_{\min}} (\sqrt{\mu_{k_G, m} + \delta_{k_G}} - \sqrt{\mu_{k_G, m}}).$$

Wir betrachten den nächsten Gitterpunkt $k \in \tilde{\mathcal{K}}$: Wenn $|k - k_G| \leq r_{k_G}$ für alle $k_G \in \mathcal{K}$, dann gehen wir zum nächsten Gitterpunkt $k \in \tilde{\mathcal{K}}$. Ansonsten nehmen wir k in das Gitter \mathcal{K} mit auf und berechnen $\Lambda_{k, m}$, $\mu_{k, m-1}$ und daraus dann δ_{k_G} und r_{k_G} .

Wenn alle Gitterpunkte $k \in \tilde{\mathcal{K}}$ durchlaufen sind, ist abschließend zu prüfen, ob $[a, b] \subset [\max_{k \in \mathcal{K}} (\Lambda_{k, m-1} + \delta_{k_G}), \min_{k \in \mathcal{K}} (\mu_{k, m} - \delta_{k_G})]$ für alle $k \in \mathcal{K}$ gilt und ob $\min_{k \in \mathcal{K}} r_{k_G} \geq \frac{d}{\sqrt{2}}$ ist. Dann sind die Voraussetzungen von Satz 7.1.2 erfüllt und $[a, b]$ ist in einer spektralen Bandlücke enthalten.

Kapitel 8

Berechnung der Rayleigh–Ritz–Schranken

Basierend auf dem Satz von Rayleigh-Ritz wie in Kapitel 2.3 beschrieben, berechnen wir nun verifizierte obere Schranken mittels INTLAB. Aufgrund der Zurückführung der Berechnung verifizierter Schranken auf λ -lineare Probleme (siehe Kapitel 6) fixieren wir im Gegensatz zu Kapitel 5.1 λ in ϵ und bezeichnen es mit λ_0 . Ferner fixieren wir $k \in K$.

Wir betrachten im Folgenden das λ -lineare Eigenwertproblem für festes λ_0 in $\epsilon(x, \lambda)$:

Es sind $u \in H_{\text{per}}^1(\Omega) \setminus \{0\}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ gesucht, so dass

$$a_k(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \quad \text{für alle } v \in H_{\text{per}}^1(\Omega) \quad (8.1)$$

gilt.

8.1 Rayleigh–Ritz (approximativ)

Als Ansatzfunktionen wählen wir die linear unabhängigen Eigenfunktionen

$$\phi_j(x) = \exp(2\pi i \langle j, x \rangle) \quad (j \in \mathbb{Z}^2 : |j| \leq M, x \in \Omega)$$

des geschlossen lösbaren Eigenwertproblems für konstantes ϵ_0 , wie in Kapitel 5.1 beschrieben.

Die Voraussetzungen des Satzes von Rayleigh-Ritz 2.3.1 sind erfüllt. Wir berechnen Näherungseigenwerte $\tilde{\Lambda}_m$ und zugehörige Näherungseigenvektoren $u^{(m)}$, $m = 1, \dots, (2M + 1)^2$, des Matrixeigenwertproblems

$$A_1(k)u = \tilde{\Lambda}A_2(\lambda_0)u$$

und erhalten daraus für die ersten N , $N \ll (2M + 1)^2$, gute Näherungseigenwerte $\tilde{\Lambda}_n$ und gute Näherungseigenelemente $\tilde{u}_n = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^2: |\nu| \leq M} u_\nu^{(n)} \phi_\nu$ ($n = 1, \dots, N$) für das λ -lineare Eigenwertproblem (8.1).

8.2 Rayleigh-Ritz (Schranken)

Wir gehen davon aus, dass die Näherungseigenelemente \tilde{u}_n gute Approximationen der ersten N Eigenelemente sind. Wir wählen dann \tilde{u}_n , $n = 1, \dots, N$, als neue Basiselemente und berechnen sowohl die Eigenwerte Λ_n , $n = 1, \dots, N$, als auch die zugehörigen Eigenvektoren $v^{(n)}$ des folgenden $N \times N$ -dimensionalen Matrixeigenwertproblems:

$$(a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n))_{m,n=1,\dots,N} v = \Lambda (\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N} v. \quad (8.2)$$

Dabei ist einerseits $(a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n))_{m,n=1,\dots,N}$ durch

$$\begin{aligned}
& (a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n))_{m,n=1,\dots,N} \\
&= \left(a_k \left(\sum_{\nu \in \mathbb{Z}^2: |\nu| \leq M} u_\nu^{(m)} \phi_\nu, \sum_{\theta \in \mathbb{Z}^2: |\theta| \leq M} u_\theta^{(n)} \phi_\theta \right) \right)_{m,n=1,\dots,N} \\
&= \left(\sum_{\nu, \theta \in \mathbb{Z}^2: |\nu|, |\theta| \leq M} u_\nu^{(m)} \overline{u_\theta^{(n)}} a_k(\phi_\nu, \phi_\theta) \right)_{m,n=1,\dots,N} \\
&\stackrel{(5.3)}{=} \left(\sum_{\nu \in \mathbb{Z}^2: |\nu| \leq M} u_\nu^{(m)} \overline{u_\nu^{(n)}} (4\pi^2 (\nu_1^2 + \nu_2^2) + 4\pi(k_1\nu_1 + k_2\nu_2) + (k_1^2 + k_2^2)) \right)_{m,n=1,\dots,N}.
\end{aligned}$$

gegeben.

Andererseits ist $(\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N}$ durch

$$\begin{aligned}
& (\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N} \\
&= \left(\left\langle \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^2: |\nu| \leq M} u_\nu^{(m)} \phi_\nu, \sum_{\theta \in \mathbb{Z}^2: |\theta| \leq M} u_\theta^{(n)} \phi_\theta \right\rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \right)_{m,n=1,\dots,N} \\
&= \left(\sum_{\nu, \theta \in \mathbb{Z}^2: |\nu|, |\theta| \leq M} u_\nu^{(m)} \overline{u_\theta^{(n)}} \langle \phi_\nu, \phi_\theta \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \right)_{m,n=1,\dots,N} \\
&\stackrel{(5.4)}{=} \left(\sum_{\nu, \theta \in \mathbb{Z}^2: |\nu|, |\theta| \leq M} u_\nu^{(m)} \overline{u_\theta^{(n)}} (\epsilon_1 + (\epsilon_2(\lambda_0) - \epsilon_1) \right. \\
&\quad \left. \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \left\langle \nu - \theta, \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \right\rangle \right] \rho \, d\rho \, dt \right)_{m,n=1,\dots,N}
\end{aligned}$$

gegeben.

Aus diesem Matrixeigenwertproblem berechnen wir unter Benutzung von INTLAB und unter Berücksichtigung der in Kapitel 5.2 beschriebenen Einschließung des Integrals über der Kreisscheibe verifizierte obere Schranken Λ_n für die ersten N Eigenwerte λ_n des λ -linearen Eigenwertproblems (8.1) mit Intervallmatrizen A_1 und A_2 .

Kapitel 9

Berechnung der Lehmann–Goerisch–Schranken

Mittels dem in Kapitel 2.4 beschriebenen Lehmann–Goerisch–Verfahren berechnen wir nun unter Verwendung von INTLAB verifizierte untere Schranken für festes λ_0 in ϵ .

Wir betrachten das geshiftete, λ -lineare Eigenwertproblem:

Für festes $k \in K$ sind $\lambda \in \mathbb{R}$ und $u \in H_{\text{per}}^1(\Omega) \setminus \{0\}$ gesucht, so dass

$$a_k(u, v) + \gamma \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} = (\lambda + \gamma) \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \quad \text{für alle } v \in H_{\text{per}}^1(\Omega)$$

gilt, was äquivalent zu gegebenem Problem (8.1) mit neuem Eigenwertparameter ist.

9.1 Voraussetzungen für die Goerischerweiterung

Für das Theorem von Lehmann–Goerisch werden ein Vektorraum X , eine positiv semidefinite hermitesche Sesquilinearform b auf X und ein linearer Operator $T : H_{\text{per}}^1(\Omega) \rightarrow X$ benötigt (siehe Kapitel 2.4).

Wir setzen:

$$X := L^2(\Omega)^3,$$

$$b := X \times X \rightarrow \mathbb{C}, (\hat{u}, \hat{v}) \mapsto \langle \hat{u}_1, \hat{v}_1 \rangle_{L_2} + \langle \hat{u}_2, \hat{v}_2 \rangle_{L_2} + \langle \gamma \hat{u}_3, \hat{v}_3 \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \bar{\lambda})}} \quad \text{und}$$

$$T : H^1_{\text{per}}(\Omega) \rightarrow X, u \mapsto ((\nabla + ik)u, u)^T = (u_{x_1} + ik_1 u, u_{x_2} + ik_2 u, u)^T.$$

Dann gilt für alle $u, v \in H^1_{\text{per}}(\Omega)$:

$$b(Tu, Tv) = \langle (\nabla + ik)u, (\nabla + ik)v \rangle_{L_2} + \gamma \langle u, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} = \mathcal{M}_\gamma(u, v)$$

Wir brauchen $\hat{w}_n \in X$ ($n = 1, \dots, N$) mit

$$b(\hat{w}_n, Tv) = \langle \tilde{u}_n, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} \quad \forall v \in H^1_{\text{per}}(\Omega)$$

und definieren $\sigma_n := (\hat{w}_{n,1}, \hat{w}_{n,2})^T$.

Dann muss gelten:

$$\langle \sigma_n, (\nabla + ik)v \rangle_{L_2} + \gamma \langle \hat{w}_{n,3}, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} = \langle \tilde{u}_n, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} \quad \forall v \in H^1_{\text{per}}(\Omega). \quad (9.1)$$

Zusätzlich müssen wir also

$$\sigma_n \in H((\text{div} + ik), \Omega) := \{\rho \in L_2(\Omega)^2 : (\nabla + ik) \cdot \rho \in L_2(\Omega)\}$$

fordern. (9.1) ist dann äquivalent zu

$$\langle -(\text{div} + ik)\sigma_n, v \rangle_{L_2} + \gamma \langle \hat{w}_{n,3}, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} = \langle \tilde{u}_n, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} \quad \forall v \in H^1_{\text{per}}(\Omega).$$

Da $H^1_{\text{per}}(\Omega)$ dicht in $L_2(\Omega)$ liegt, ist die letzte Gleichung äquivalent zu

$$-(\text{div} + ik)\sigma_n + \gamma \epsilon(\cdot, \lambda_0) \hat{w}_{n,3} = \epsilon(\cdot, \lambda_0) \tilde{u}_n.$$

Somit erfüllt jedes

$$\begin{aligned}\hat{w}_n &= (\hat{w}_{n,1}, \hat{w}_{n,2}, \hat{w}_{n,3}) \\ &= \left(\sigma_n, \frac{1}{\gamma} (\tilde{u}_n + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla + ik) \cdot \sigma_n) \right)\end{aligned}$$

mit $\sigma_n \in H(\operatorname{div} + ik, \Omega)$ für $n = 1, \dots, N$ die Gleichung

$$b(\hat{w}_n, Tv) = \langle \tilde{u}_n, v \rangle_{L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}} \quad \forall v \in H^1_{\text{per}}(\Omega).$$

Um möglichst gute Schranken zu bekommen, setzen wir

$$\sigma_n = \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} (\nabla + ik) \cdot \tilde{u}_n,$$

da dann $\hat{A}_3 - A_3$ möglichst klein ist (siehe Kapitel 2.4), d. h. $\hat{w}_n \approx Tw_n$ ($n = 1, \dots, N$) mit

$$\hat{w}_n = \left(\frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_1} + ik_1 \tilde{u}_n \right), \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_2} + ik_2 \tilde{u}_n \right), \frac{1}{\gamma} \left(\tilde{u}_n + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla + ik) \cdot \sigma_n \right) \right).$$

Nun ergibt sich für die Einträge der Matrix \hat{A}_3 :

$$\begin{aligned}b(\hat{w}_m, \hat{w}_n) &= \int_{\Omega} \frac{1}{\Lambda_m + \gamma} (\nabla + ik) \cdot \tilde{u}_m \overline{\frac{1}{\Lambda_n + \gamma} (\nabla + ik) \cdot \tilde{u}_n} \\ &\quad + \frac{1}{\gamma} \left(\tilde{u}_m + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla + ik) \cdot \sigma_m \right) \frac{1}{\gamma} \overline{\left(\tilde{u}_n + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla + ik) \cdot \sigma_n \right) \cdot \gamma \cdot \epsilon(\cdot, \lambda_0)} \, dx \\ &= \int_{\Omega} \frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_1} + ik_1 \tilde{u}_m \right) \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \overline{\left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_1} + ik_1 \tilde{u}_n \right)} \\ &\quad + \frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \left(\frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_2} + ik_2 \tilde{u}_m \right) \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \overline{\left(\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_2} + ik_2 \tilde{u}_n \right)} \\ &\quad + \frac{1}{\gamma} \overline{\left(\epsilon(\cdot, \lambda_0) \tilde{u}_m + (\nabla + ik) \cdot \sigma_m \right) \cdot \left(\tilde{u}_n + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla + ik) \cdot \sigma_n \right)} \, d(x_1, x_2)\end{aligned}$$

Im Hinblick auf Satz 2.4.2 (Lehmann–Goerisch) aus Kapitel 2.4 definieren wir zu-

sätzlich zu den Matrizen $A_1 = (a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n))_{m,n=1,\dots,N}$ und $A_2 = (\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N}$

die Matrizen

$$\begin{aligned} B_1 &:= A_1 + (\gamma - \rho)A_2 \\ &= (a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n))_{m,n=1,\dots,N} + (\gamma - \rho) (\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} B_2 &:= A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 \hat{A}_3 \\ &= (\langle (\nabla + \mathbf{i}k)\tilde{u}_m, (\nabla + \mathbf{i}k)\tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N} + (\gamma - 2\rho) (\langle \tilde{u}_m, \tilde{u}_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)})_{m,n=1,\dots,N} \\ &\quad + \rho^2 \left(\underbrace{(\langle \sigma_m, \sigma_n \rangle)_{m,n=1,\dots,N}}_{=:S} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\gamma} \left(\underbrace{\left(\langle \tilde{u}_m + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}(\nabla + \mathbf{i}k) \cdot \sigma_m, \tilde{u}_n + \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)}(\nabla + \mathbf{i}k) \cdot \sigma_n \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \right)_{m,n=1,\dots,N}}_{=:R} \right) \right). \end{aligned}$$

Damit sind alle Voraussetzungen von Satz 2.4.2 (Lehmann–Goerisch) erfüllt.

Die Matrix S lässt sich auch schreiben als:

$$S = \left(\frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \cdot \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \cdot \underbrace{a_k(\tilde{u}_m, \tilde{u}_n)}_{(\parallel)_{m,n=A_1}} \right)_{m,n=1,\dots,N}.$$

Die Matrix R kann ausgedrückt werden durch:

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{\gamma} \left(\int_{\Omega} \underbrace{\epsilon(\cdot, \lambda_0)\tilde{u}_m\bar{\tilde{u}}_n}_{=:A_2} + \underbrace{\tilde{u}_m(\nabla - \mathbf{i}k) \cdot \bar{\sigma}_n}_{=:R_1} + \underbrace{(\nabla + \mathbf{i}k) \cdot \sigma_m\bar{\tilde{u}}_n}_{=:R_2} \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{(\nabla + \mathbf{i}k) \cdot \sigma_m \frac{1}{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} (\nabla - \mathbf{i}k) \cdot \bar{\sigma}_n}_{=:R_3} \, dx \right)_{m,n=1,\dots,N}. \end{aligned}$$

Dabei ist

$$R_1 = \left(\frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \int_{\Omega} -\nabla \tilde{u}_m(x) \cdot \nabla \bar{\tilde{u}}_n(x) - 2ik \cdot \nabla \bar{\tilde{u}}_n(x) \tilde{u}_m(x) - |k|^2 \bar{\tilde{u}}_n(x) \tilde{u}_m(x) \, dx \right)_{m,n=1,\dots,N},$$

$$R_2 = \left(\frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \int_{\Omega} -\nabla \tilde{u}_m(x) \cdot \nabla \bar{\tilde{u}}_n(x) + 2ik \cdot \nabla \tilde{u}_m(x) \bar{\tilde{u}}_n(x) - |k|^2 \tilde{u}_m(x) \bar{\tilde{u}}_n(x) \, dx \right)_{m,n=1,\dots,N}$$

und

$$\begin{aligned} R_3 = & \left(\frac{1}{\epsilon_1} \frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \sum_{\nu \in \mathbb{Z}^2: |\nu| \leq M} u_{\nu}^{(m)} \bar{u}_{\nu}^{(n)} (-4\pi^2(\nu_1^2 + \nu_2^2) - 4\pi(k_1\nu_1 + k_2\nu_2) - |k|^2)^2 \right. \\ & + \left(\frac{1}{\epsilon_2(\lambda_0)} - \frac{1}{\epsilon_1} \right) \frac{1}{\Lambda_m + \gamma} \frac{1}{\Lambda_n + \gamma} \\ & \cdot \sum_{\nu, \theta \in \mathbb{Z}^2: |\theta|, |\nu| \leq M} \left\{ u_{\nu}^{(m)} \bar{u}_{\theta}^{(n)} \int_0^{2\pi} \int_0^r \exp \left[2\pi i \langle \nu - \theta, \begin{pmatrix} 1/2 + \rho \cos t \\ 1/2 + \rho \sin t \end{pmatrix} \rangle \right] \rho \, d\rho \, dt \right. \\ & \cdot \left. \left. (4\pi^2(\nu_1^2 + \nu_2^2) + 4\pi(k_1\nu_1 + k_2\nu_2) + |k|^2) (4\pi^2(\theta_1^2 + \theta_2^2) + 4\pi(k_1\theta_1 + k_2\theta_2) + |k|^2) \right\} \right)_{m,n=1,\dots,N}. \end{aligned}$$

9.2 Homotopie

Um den spektralen Parameter ρ in Satz 2.4.2 festzulegen, betrachten wir folgende Funktionen:

$$\epsilon_s(x, \lambda_0) := (1-s)\epsilon_{\max} + s\epsilon(x, \lambda_0) \quad x \in \Omega, \quad 0 \leq s \leq 1,$$

wobei $\epsilon_{\max} := \max \epsilon(x, \lambda_0)$.

Desweiteren betrachten wir die Familie der Eigenwertprobleme:

Für festes $k \in K$ und $0 \leq s \leq 1$ sind $u \in H_{\text{per}}^1(\Omega) \setminus \{0\}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ gesucht, so dass

$$a_k(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle_{\epsilon_s(\cdot, \lambda_0)} \quad \text{für alle } v \in H_{\text{per}}^1(\Omega). \quad (9.2)$$

Für $s \in [0, 1]$ sei $(\lambda_n^{(s)})_{n \in \mathbb{N}}$ die Folge der Eigenwerte von Problem (9.2) der Größe nach geordnet.

Nun kann für $s = 0$ das Problem (9.2) auf $\Omega = (0, 1)^2$ wie in Kapitel 5.1 geschlossen gelöst werden. Die Eigenwerte sind für $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ durch

$$\lambda_{(n_1, n_2)}^{(0)} = \frac{1}{\epsilon_0} ((2\pi n_1 + k_1)^2 + (2\pi n_2 + k_1)^2)$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren

$$u_{(n_1, n_2)}^{(0)}(x) = \exp(2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2))$$

gegeben.

Für $s = 1$ fällt das Problem (9.2) mit unserem λ -linearen Problem (8.1) mit festem λ_0 in ϵ zusammen, das wie folgt lautet:

Für festes $k \in K$ sind $u \in H_{\text{per}}^1(\Omega) \setminus \{0\}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ gesucht, so dass

$$a_k(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle_{\epsilon(\cdot, \lambda_0)} \quad \text{für alle } v \in H_{\text{per}}^1(\Omega). \quad (9.3)$$

Da ϵ_s als monoton fallend in s gewählt wurde, folgt für $s_1 < s_2$ ($s_1, s_2 \in [0, 1]$), vergleichsweise wie in Kapitel 6, mit Hilfe des Min–Max–Prinzips von Poincaré:

$$\begin{aligned} \lambda_m^{(s_1)} &= \min_{U \subset H_{\text{per}}^1(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon_{s_1}(x, \lambda_0) |u|^2 dx} \\ &\leq \min_{U \subset H_{\text{per}}^1(\Omega), \dim U = m} \max_{u \in U, u \neq 0} \frac{((\nabla + ik)u, (\nabla + ik)u)_{L^2}}{\int_{\Omega} \epsilon_{s_2}(x, \lambda_0) |u|^2 dx} \\ &= \lambda_m^{(s_2)} \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass für festes $m \in \mathbb{N}$, $\lambda_m^{(s)}$ in s wächst.

Wir können nun die in Kapitel 2.5 beschriebene Methode auf unser Problem anwenden.

Die Bestimmung von s_n , ($n \in \mathbb{N}$), so dass $\bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ ($s_{n-1} < s_n$) erfüllt ist, erfolgt mittels Bisektion: Zunächst wird $s_n := s_{n-1}$ gesetzt. Falls $\bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ gilt, wird $s_n = (s_n + 1)/2$ gesetzt. Gilt mit diesem neuen

s_n dann $\bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$, so wird $s_n = (s_n + 1)/2$ gesetzt und ansonsten $s_n = (s_{n-1} + s_n)/2$. Wenn $\underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) < \bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0)$ nach Berechnung von $\bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0)$ mit neuem s_n gilt, wird der erste Schritt wiederholt, also wird ein neues kleineres s_n bestimmt. Wenn $\bar{\lambda}_m^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ erfüllt ist, wird noch überprüft, ob $s_{neu} < s_{alt}$ und gleichzeitig $\underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) < \bar{\lambda}_m^{(s_{alt})}(\lambda_0)$ gilt. Hiermit wird eine Endlosschleife vermieden. Nun kann $\rho_{n-1} = \underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) + \gamma$ für das Vergleichsproblem $(EP)_{s_n}$ gesetzt werden. Die Anwendung des Korollar 1 liefert eine untere Schranke $\underline{\lambda}_m^{s_n}(\lambda_0)$.

Falls sich während des Bisektionsverfahrens $s_n = s_{n-1}$ ergibt und somit $\underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) \leq \bar{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ gilt, liegt ein Cluster vor, das bedeutet dass mindestens $\underline{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ und $\bar{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ geclustert sind und wir Satz 2.4.2 (Lehmann–Goerisch) anstelle des Korollar 1 anwenden müssen. Für die Anwendung von Satz 2.4.2 müssen wir nun einen Schritt zurückgehen, um $\underline{\lambda}_1^{(s_{n-1})}(\lambda_0), \dots, \underline{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ mit dem vorherigen ρ_{n-1} zu berechnen. Falls für ein $s_n > s_{n-1}$ dann $\bar{\lambda}_{m-1}^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ gilt, kann für das Vergleichsproblem $(EP)_{s_n}$ $\rho_{n-1} = \underline{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0) + \gamma$ gesetzt werden und die ersten $m - 1$ untere Eigenwertschranken $\underline{\lambda}_1^{s_n}(\lambda_0), \dots, \underline{\lambda}_{m-1}^{s_n}(\lambda_0)$ können berechnet werden. Ergibt sich im nächsten Durchlauf $\underline{\lambda}_{(m)}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) \leq \bar{\lambda}_{m-1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$, dann gehört auch $\underline{\lambda}_{m-1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ zum Cluster $\underline{\lambda}_m^{(s_{n-1})}(\lambda_0), \bar{\lambda}_{m+1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$. Falls für ein $s_n > s_{n-1}$ dann $\bar{\lambda}_{m-2}^{(s_n)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{m-1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0)$ gilt, setzen wir $\rho_{n-1} = \underline{\lambda}_{m-1}^{(s_{n-1})}(\lambda_0) + \gamma$ für das Vergleichsproblem $(EP)_{s_n}$ und berechnen unter Anwendung von Satz 2.4.2 die ersten $m - 2$ untere Eigenwertschranken $\underline{\lambda}_1^{s_n}(\lambda_0), \dots, \underline{\lambda}_{m-2}^{s_n}(\lambda_0)$.

Bei $s = 1$ angelangt und nach Erhalt von $m + 1$ unteren Schranken, wird abschließend mittels Rayleigh–Ritz–Schranken $\bar{\lambda}_{k,m}(\lambda_0)$ für Problem (9.3) sichergestellt, dass $\bar{\lambda}_{k,m}^{(1)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{k,m+1}^{(1)}(\lambda_0)$ gilt, damit die Voraussetzungen des Satzes 2.4.2, insbesondere die Bedingung 2.4 ($\Lambda_m < \rho - \gamma \leq \lambda_{m+1}$), erfüllt sind und kein Eigenwert während der Homotopie verloren gegangen ist.

Falls am Ende des Homotopieverfahrens bei $s = 1$ nicht mindestens vier Eigenwerte übrigbleiben, werden anstelle des m -ten Eigenwertes für $s = 0$ vom $m + 1$ -sten Eigenwert ausgegangen.

Abbildung 9.1 stellt beispielhaft für $\lambda_0 = \mu_{k,2} = 5.4277$, $k_1 = 0$, $k_2 = 0.9308$ (Tabelle 10.1 vierte Zeile) die Ergebnisse des oben beschriebenen Verfahrens dar. Anschließend sind in Tabelle 9.1 die zugehörigen Werte aufgeführt.

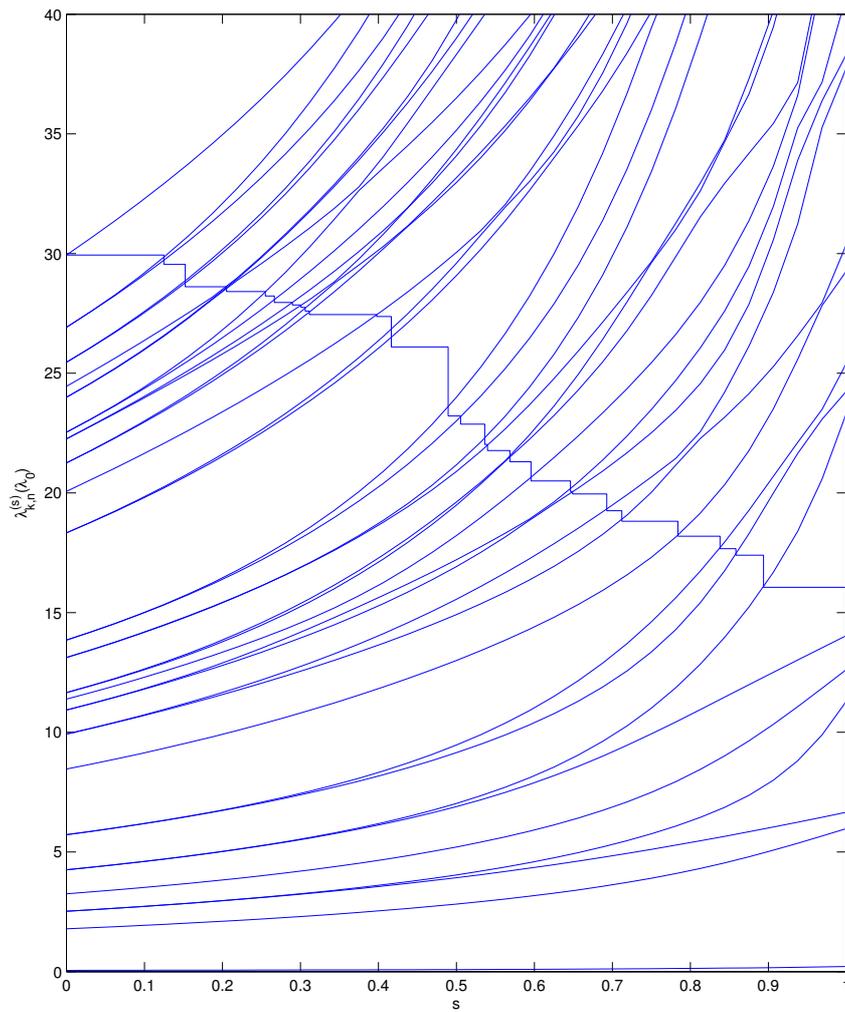


Abbildung 9.1: Beispiel für eine Homotopie in s für $k = (0, 0.9308)$ und für $\lambda_0 = \mu_{k,2} = 5.4277$ in $\epsilon(x, \lambda_0)$.

$(k_1, k_2) = (0, 0.9308)$		
m	s	$\lambda_{k,m}^{(s)}(\lambda_0)$
38	0	29.9371
37	0.1250	29.6511
36	0.1250	29.5462
35	0.1523	28.6923
34	0.1523	28.6112
33	0.2053	28.4570
32	0.2053	28.4513
31	0.2053	28.4104
30	0.2550	28.2295
29	0.2666	27.9552
28	0.2895	27.8540
27	0.3006	27.7527
26	0.3061	27.5999
25	0.3115	27.4526
24	0.3976	27.3683
23	0.4164	26.4124
22	0.4164	26.1008
21	0.4894	23.2140
20	0.5053	22.8739
19	0.5362	22.0270
18	0.5399	21.7686
17	0.5686	21.3243
16	0.5686	21.3047
15	0.5956	20.4993
14	0.6461	20.0617
13	0.6489	19.9565
12	0.6928	19.2580
11	0.7120	18.8168
10	0.7840	18.1928
9	0.8380	17.6710
8	0.8582	17.3992
7	0.8937	16.0577
6	1	14.0354
5	1	12.6188
4	1	11.3051
3	1	6.6627
2	1	5.9776

Tabelle 9.1: Wertetabelle zu Bild 9.1

In Tabelle 9.1 bezeichnet $\underline{\lambda}_{k,m}^{(s)}(\lambda_0)$ die untere Schranke des m -ten Eigenwertes $\lambda_{k,m}^{(s)}(\lambda_0)$ zum jeweiligen Homotopiewert s für $\lambda_0 = \mu_{k,2}$. Liegt bei s_n ein Cluster vor, so gibt die berechnete untere Schranke des kleinsten Eigenwertes innerhalb dieses Clusters die Höhe des nächsten Auftritts $s_{n+1} - s_n$ der Treppe an, wie beispielsweise $\underline{\lambda}_{k,22}^{(0.4146)}(\lambda_0)$ die Höhe des Auftritts 0.0730 ($= 0.4894 - 0.4164$) festlegt.

In Tabelle 9.2 wird ersichtlich, dass $\bar{\lambda}_{k,5}^{(1)}(\lambda_0) < \underline{\lambda}_{k,6}^{(1)}(\lambda_0)$ gilt. Die aufgeführten Rayleigh–Ritz–Schranken $\bar{\lambda}_{k,m}(\lambda_0)$ für Problem (9.3) vervollständigen die Homotopiemethode.

$k = (0, 0.9308)$			
m	s	$\underline{\lambda}_{k,m}^{(s)}(\lambda_0)$	$\bar{\lambda}_{k,m}^{(s)}(\lambda_0)$
6	1	14.0354	14.0395
5	1	12.6188	12.6231
4	1	11.3051	11.3067
3	1	6.6627	6.6634
2	1	5.9776	5.9783
1	1	0.2132	0.2133

Tabelle 9.2: Eigenwertschranken mittels Rayleigh–Ritz und Lehmann–Goerisch unter Verwendung der Homotopiemethode.

Kapitel 10

Beispiele

Die folgende Tabelle liefert ein Beispiel für eine bewiesene Lücke im Intervall $[a, b] = [2.7401, 2.8401]$ zwischen dem ersten und zweiten Eigenwertband. Der Radius der Kreisscheibe für die in Kapitel (3.2) modellierte dielektrische Funktion $\epsilon_2(\lambda)$ wurde $r=0.3$ gesetzt. Die Anzahl der Ansatzfunktionen beträgt 225. $\bar{\lambda}_{k,1}(\Lambda_{k,1})$ sind verifizierte obere Schranken des ersten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \Lambda_{k,1})$. $\underline{\lambda}_{k,2}(\mu_{k,2})$ sind verifizierte untere Schranken des zweiten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \mu_{k,2})$. Es ist $[a, b] \subset [\Lambda_{k,1} + \delta_k, \mu_{k,2} - \delta_k]$ für alle $k = (k_1, k_2) \in \mathcal{K}$, was mit $\max_{k \in \mathcal{K}} (\Lambda_{k,1} + \delta_k) = 2.7401$ und $\min_{k \in \mathcal{K}} (\mu_{k,2} - \delta_k) = 2.8401$ geprüft wurde. Für die in Kapitel 6 angegebene Unterteilung des Intervalls $[a, b]$ genügt $N = 3$ den Anforderungen. Für $k \in \mathcal{K}$ ist die Ungleichungskette $\bar{\lambda}_{k,1}(\Lambda_{k,1}) < \Lambda_{k,1} < \mu_{k,2} < \underline{\lambda}_{k,2}(\mu_{k,2})$ erfüllt. Sie genügt der Bedingung (7.6) aus Kapitel 7 für den Beweis einer Bandlücke. Im Zusammenhang mit dem nichtlinearen Störungsargument gibt der Wert $2\delta_k$ an, wieviel jeweils von der Bandlücke weggenommen wurde. Aus δ_k wird nach Satz 7.1.2 r_k berechnet. Die Kreisscheiben mit Radius r_k für die in der Tabelle aufgeführten $k \in \mathcal{K}$ überdecken vollständig die irreduzible Brillouinzone, da $0.0941 = \min_{k \in \mathcal{K}} r_k \geq \frac{d}{\sqrt{2}} = 0.0823$ gilt. Die Berechnung der Gitterpunkte k_1 und k_2 erfolgte wie in Kapitel 7.2 beschrieben anhand des äquidistanten quadratischen Gitters mit Gitterabstand $d = \sqrt{2}r_{\min}/2$.

k_1	k_2	$\lambda_{k_1,1}(\Lambda_{k_1,1})$	$\Lambda_{k_1,1}$	$\mu_{k_1,2}$	$\lambda_{k_1,2}(\mu_{k_1,2})$	δ_k	τ_k
0.1164	0.1164	0.0071	0.0171	5.9764	6.5803	2.7230	0.5048
0	0.6981	0.1257	0.1311	5.6457	6.2230	2.6089	0.4970
0	0.8145	0.1702	0.1777	5.5411	6.1051	2.5624	0.4927
0	0.9308	0.2211	0.2308	5.4277	5.9776	2.5093	0.4875
0	1.0472	0.2780	0.2903	5.3075	5.8424	2.4498	0.4814
0	1.1636	0.3406	0.3558	5.1818	5.7013	2.3417	0.4665
0	1.2799	0.4087	0.4298	5.0522	5.5558	2.2121	0.4475
0	1.3963	0.4818	0.5066	4.9198	5.4073	2.0797	0.4276
0	1.5126	0.5596	0.5881	4.7858	5.2571	1.9457	0.4069
0	1.6290	0.6414	0.6738	4.6511	5.1063	1.8110	0.3854
0	1.7453	0.7267	0.7632	4.5168	4.9560	1.6767	0.3634
0	1.8617	0.8149	0.8529	4.3838	4.8073	1.5437	0.3409
0	1.9780	0.9050	0.9475	4.2532	4.6613	1.4131	0.3181
0	2.0944	0.9960	1.0432	4.1261	4.5192	1.2860	0.2951
0	2.2108	1.0868	1.1386	4.0037	4.3825	1.1636	0.2722
0	2.3271	1.1759	1.2323	3.8875	4.2526	1.0474	0.2498
0	2.4435	1.2614	1.3223	3.7791	4.1316	0.9390	0.2281
0	2.5598	1.3413	1.4039	3.6807	4.0216	0.8406	0.2078
0	2.6762	1.4129	1.4782	3.5946	3.9253	0.7545	0.1895
0	2.7925	1.4732	1.5407	3.5234	3.8456	0.6833	0.1740
0	2.9089	1.5193	1.5884	3.4698	3.7857	0.6298	0.1620
0	3.0252	1.5484	1.6184	3.4365	3.7484	0.5964	0.1544
0	3.1416	1.5583	1.6286	3.4251	3.7357	0.5850	0.1518
0.1164	0.1164	0.0071	0.0074	5.9629	6.5809	2.7327	0.5069
0.1164	0.2327	0.0177	0.0184	5.9348	6.5492	2.7217	0.5060
0.1164	0.3491	0.0352	0.0368	5.8861	6.4943	2.7033	0.5046
0.1164	0.4654	0.0598	0.0623	5.8202	6.4199	2.6777	0.5026
0.1164	0.5818	0.0911	0.0950	5.7394	6.3286	2.6450	0.4999
0.1164	0.6981	0.1291	0.1347	5.6456	6.2230	2.6054	0.4964
0.1164	0.8145	0.1736	0.1812	5.5412	6.1054	2.5589	0.4921
0.1164	0.9308	0.2244	0.2343	5.4281	5.9781	2.5058	0.4869
0.1164	1.0472	0.2813	0.2937	5.3081	5.8431	2.4463	0.4808
0.1164	1.1636	0.3439	0.3592	5.1827	5.7022	2.3426	0.4667
0.1164	1.2799	0.4119	0.4332	5.0532	5.5569	2.2131	0.4477
0.1164	1.3963	0.4850	0.5099	4.9210	5.4087	2.0809	0.4278
0.1164	1.5126	0.5627	0.5913	4.7872	5.2587	1.9471	0.4071
0.1164	1.6290	0.6444	0.6770	4.6527	5.1081	1.8126	0.3857
0.1164	1.7453	0.7297	0.7662	4.5185	4.9580	1.6784	0.3637
0.1164	1.8617	0.8177	0.8558	4.3857	4.8094	1.5456	0.3412
0.1164	1.9780	0.9077	0.9504	4.2553	4.6636	1.4152	0.3184
0.1164	2.0944	0.9986	1.0459	4.1283	4.5217	1.2882	0.2955
0.1164	2.2108	1.0893	1.1413	4.0061	4.3851	1.1660	0.2727
0.1164	2.3271	1.1783	1.2348	3.8900	4.2554	1.0499	0.2503
0.1164	2.4435	1.2637	1.3247	3.7818	4.1345	0.9417	0.2287
0.1164	2.5598	1.3434	1.4062	3.6835	4.0247	0.8434	0.2084
0.1164	2.6762	1.4149	1.4803	3.5975	3.9286	0.7575	0.1901
0.1164	2.7925	1.4751	1.5427	3.5265	3.8491	0.6864	0.1746
0.1164	2.9089	1.5212	1.5903	3.4730	3.7893	0.6329	0.1627
0.1164	3.0252	1.5501	1.6202	3.4397	3.7520	0.5996	0.1552
0.1164	3.1416	1.5600	1.6305	3.4284	3.7394	0.5883	0.1526
0.2327	0.2327	0.0282	0.0294	5.9236	6.5365	2.7107	0.5046
0.2327	0.3491	0.0458	0.0477	5.8818	6.4894	2.6923	0.5029
0.2327	0.4654	0.0702	0.0733	5.8179	6.4172	2.6668	0.5008
0.2327	0.5818	0.1015	0.1059	5.7381	6.3272	2.6342	0.4981
0.2327	0.6981	0.1394	0.1455	5.6453	6.2226	2.5946	0.4945
0.2327	0.8145	0.1838	0.1919	5.5417	6.1059	2.5482	0.4902
0.2327	0.9308	0.2345	0.2449	5.4293	5.9794	2.4952	0.4850
0.2327	1.0472	0.2912	0.3041	5.3099	5.8451	2.4359	0.4788
0.2327	1.1636	0.3537	0.3695	5.1851	5.7050	2.3450	0.4670
0.2327	1.2799	0.4216	0.4433	5.0563	5.5604	2.2162	0.4481
0.2327	1.3963	0.4944	0.5198	4.9246	5.4127	2.0845	0.4283
0.2327	1.5126	0.5719	0.6010	4.7913	5.2633	1.9512	0.4077
0.2327	1.6290	0.6534	0.6864	4.6573	5.1133	1.8173	0.3864
0.2327	1.7453	0.7384	0.7754	4.5237	4.9638	1.6836	0.3646
0.2327	1.8617	0.8262	0.8648	4.3914	4.8158	1.5513	0.3422
0.2327	1.9780	0.9159	0.9590	4.2614	4.6705	1.4213	0.3195
0.2327	2.0944	1.0065	1.0542	4.1349	4.5291	1.2948	0.2967
0.2327	2.2108	1.0968	1.1492	4.0131	4.3930	1.1731	0.2740
0.2327	2.3271	1.1854	1.2424	3.8975	4.2638	1.0574	0.2518
0.2327	2.4435	1.2705	1.3319	3.7898	4.1434	0.9497	0.2303
0.2327	2.5598	1.3499	1.4128	3.6920	4.0341	0.8519	0.2102
0.2327	2.6762	1.4209	1.4866	3.6064	3.9384	0.7663	0.1920
0.2327	2.7925	1.4809	1.5486	3.5357	3.8593	0.6956	0.1767
0.2327	2.9089	1.5266	1.5959	3.4825	3.7998	0.6424	0.1648
0.2327	3.0252	1.5554	1.6257	3.4494	3.7628	0.6093	0.1574
0.2327	3.1416	1.5652	1.6359	3.4381	3.7502	0.5980	0.1548
0.3491	0.3491	0.0633	0.0660	5.8614	6.4664	2.6741	0.5005
0.3491	0.4654	0.0876	0.0914	5.8091	6.4074	2.6487	0.4980

k_1	k_2	$\lambda_{k,1}(\Lambda_{k,1})$	$\Lambda_{k,1}$	$\mu_{k,2}$	$\lambda_{k,2}(\mu_{k,2})$	δ_k	r_k
0.3491	0.5818	0.1188	0.1239	5.7338	6.3225	2.6161	0.4951
0.3491	0.6981	0.1566	0.1634	5.6435	6.2206	2.5767	0.4915
0.3491	0.8145	0.2008	0.2096	5.5416	6.1059	2.5305	0.4871
0.3491	0.9308	0.2513	0.2624	5.4307	5.9810	2.4777	0.4818
0.3491	1.0472	0.3078	0.3214	5.3126	5.8482	2.4186	0.4756
0.3491	1.1636	0.3700	0.3865	5.1889	5.7093	2.3488	0.4676
0.3491	1.2799	0.4375	0.4601	5.0611	5.5659	2.2211	0.4489
0.3491	1.3963	0.5101	0.5362	4.9305	5.4193	2.0904	0.4292
0.3491	1.5126	0.5872	0.6170	4.7981	5.2710	1.9580	0.4088
0.3491	1.6290	0.6684	0.7020	4.6650	5.1219	1.8250	0.3877
0.3491	1.7453	0.7529	0.7906	4.5323	4.9733	1.6922	0.3660
0.3491	1.8617	0.8403	0.8795	4.4008	4.8262	1.5607	0.3438
0.3491	1.9780	0.9295	0.9732	4.2716	4.6818	1.4315	0.3213
0.3491	2.0944	1.0195	1.0679	4.1459	4.5413	1.3058	0.2987
0.3491	2.2108	1.1093	1.1624	4.0249	4.4061	1.1848	0.2763
0.3491	2.3271	1.1973	1.2549	3.9101	4.2777	1.0700	0.2542
0.3491	2.4435	1.2818	1.3438	3.8031	4.1582	0.9630	0.2330
0.3491	2.5598	1.3605	1.4239	3.7060	4.0496	0.8659	0.2131
0.3491	2.6762	1.4310	1.4970	3.6211	3.9547	0.7810	0.1952
0.3491	2.7925	1.4904	1.5585	3.5509	3.8762	0.7109	0.1800
0.3491	2.9089	1.5356	1.6054	3.4983	3.8173	0.6582	0.1684
0.3491	3.0252	1.5641	1.6348	3.4655	3.7806	0.6254	0.1610
0.3491	3.1416	1.5739	1.6449	3.4543	3.7681	0.6142	0.1585
0.4654	0.4654	0.1119	0.1167	5.7807	6.3755	2.6234	0.4947
0.4654	0.5818	0.1429	0.1491	5.7207	6.3079	2.5910	0.4912
0.4654	0.6981	0.1804	0.1883	5.6375	6.2140	2.5517	0.4873
0.4654	0.8145	0.2244	0.2343	5.5397	6.1038	2.5058	0.4828
0.4654	0.9308	0.2747	0.2868	5.4315	5.9820	2.4533	0.4774
0.4654	1.0472	0.3308	0.3455	5.3156	5.8516	2.3945	0.4712
0.4654	1.1636	0.3927	0.4130	5.1938	5.7148	2.3271	0.4634
0.4654	1.2799	0.4598	0.4835	5.0676	5.5731	2.2275	0.4498
0.4654	1.3963	0.5319	0.5591	4.9384	5.4282	2.0984	0.4304
0.4654	1.5126	0.6086	0.6394	4.8074	5.2814	1.9673	0.4103
0.4654	1.6290	0.6892	0.7238	4.6756	5.1337	1.8355	0.3894
0.4654	1.7453	0.7732	0.8117	4.5440	4.9865	1.7040	0.3679
0.4654	1.8617	0.8598	0.9001	4.4137	4.8407	1.5736	0.3460
0.4654	1.9780	0.9483	0.9931	4.2857	4.6975	1.4456	0.3238
0.4654	2.0944	1.0377	1.0871	4.1611	4.5582	1.3210	0.3015
0.4654	2.2108	1.1267	1.1807	4.0412	4.4242	1.2011	0.2793
0.4654	2.3271	1.2139	1.2724	3.9274	4.2971	1.0874	0.2576
0.4654	2.4435	1.2975	1.3603	3.8215	4.1787	0.9814	0.2367
0.4654	2.5598	1.3753	1.4394	3.7254	4.0712	0.8853	0.2171
0.4654	2.6762	1.4450	1.5116	3.6415	3.9773	0.8014	0.1995
0.4654	2.7925	1.5036	1.5723	3.5722	3.8998	0.7321	0.1846
0.4654	2.9089	1.5482	1.6185	3.5201	3.8416	0.6801	0.1732
0.4654	3.0252	1.5763	1.6475	3.4878	3.8054	0.6477	0.1660
0.4654	3.1416	1.5859	1.6574	3.4768	3.7931	0.6367	0.1636
0.5818	0.5818	0.1736	0.1812	5.6861	6.2689	2.5589	0.4868
0.5818	0.6981	0.2110	0.2202	5.6209	6.1955	2.5199	0.4824
0.5818	0.8145	0.2546	0.2659	5.5327	6.0961	2.4742	0.4775
0.5818	0.9308	0.3045	0.3180	5.4301	5.9805	2.4221	0.4719
0.5818	1.0472	0.3603	0.3763	5.3179	5.8543	2.3638	0.4655
0.5818	1.1636	0.4216	0.4434	5.1990	5.7207	2.2967	0.4577
0.5818	1.2799	0.4883	0.5133	5.0752	5.5817	2.2268	0.4494
0.5818	1.3963	0.5598	0.5883	4.9481	5.4391	2.1080	0.4319
0.5818	1.5126	0.6358	0.6679	4.8189	5.2943	1.9789	0.4121
0.5818	1.6290	0.7157	0.7516	4.6889	5.1486	1.8488	0.3915
0.5818	1.7453	0.7989	0.8387	4.5589	5.0031	1.7188	0.3704
0.5818	1.8617	0.8848	0.9264	4.4301	4.8590	1.5900	0.3488
0.5818	1.9780	0.9724	1.0184	4.3036	4.7174	1.4635	0.3270
0.5818	2.0944	1.0608	1.1114	4.1804	4.5797	1.3403	0.3050
0.5818	2.2108	1.1488	1.2040	4.0619	4.4473	1.2219	0.2832
0.5818	2.3271	1.2350	1.2946	3.9496	4.3217	1.1095	0.2619
0.5818	2.4435	1.3174	1.3814	3.8450	4.2047	1.0049	0.2414
0.5818	2.5598	1.3942	1.4590	3.7502	4.0987	0.9101	0.2222
0.5818	2.6762	1.4628	1.5301	3.6674	4.0061	0.8273	0.2050
0.5818	2.7925	1.5204	1.5898	3.5992	3.9298	0.7591	0.1905
0.5818	2.9089	1.5643	1.6352	3.5480	3.8725	0.7079	0.1794
0.5818	3.0252	1.5918	1.6637	3.5162	3.8369	0.6761	0.1724
0.5818	3.1416	1.6013	1.6734	3.5053	3.8248	0.6652	0.1699
0.6981	0.6981	0.2480	0.2589	5.5820	6.1518	2.4812	0.4770
0.6981	0.8145	0.2913	0.3042	5.5138	6.0750	2.4359	0.4714
0.6981	0.9308	0.3407	0.3558	5.4228	5.9725	2.3842	0.4654
0.6981	1.0472	0.3959	0.4164	5.3176	5.8541	2.3237	0.4583
0.6981	1.1636	0.4567	0.4802	5.2034	5.7257	2.2599	0.4508
0.6981	1.2799	0.5227	0.5494	5.0832	5.5907	2.1906	0.4424
0.6981	1.3963	0.5936	0.6237	4.9590	5.4513	2.1164	0.4331
0.6981	1.5126	0.6688	0.7025	4.8323	5.3093	1.9922	0.4141
0.6981	1.6290	0.7478	0.7853	4.7045	5.1660	1.8644	0.3940
0.6981	1.7453	0.8302	0.8690	4.5766	5.0228	1.7365	0.3733

k_1	k_2	$\bar{\lambda}_{k_1,1}(\Lambda_{k_1,1})$	$\Lambda_{k_1,1}$	$\mu_{k_1,2}$	$\bar{\lambda}_{k_1,2}(\mu_{k_1,2})$	δ_k	τ_k
0.6981	1.8617	0.9150	0.9581	4.4497	4.8808	1.6096	0.3521
0.6981	1.9780	1.0016	1.0491	4.3250	4.7413	1.4849	0.3307
0.6981	2.0944	1.0888	1.1409	4.2037	4.6056	1.3636	0.3092
0.6981	2.2108	1.1756	1.2322	4.0869	4.4751	1.2468	0.2879
0.6981	2.3271	1.2604	1.3215	3.9762	4.3513	1.1361	0.2670
0.6981	2.4435	1.3416	1.4045	3.8733	4.2362	1.0332	0.2470
0.6981	2.5598	1.4170	1.4828	3.7800	4.1319	0.9399	0.2283
0.6981	2.6762	1.4843	1.5525	3.6987	4.0409	0.8586	0.2116
0.6981	2.7925	1.5408	1.6110	3.6317	3.9659	0.7916	0.1975
0.6981	2.9089	1.5837	1.6554	3.5815	3.9098	0.7415	0.1867
0.6981	3.0252	1.6107	1.6832	3.5504	3.8749	0.7103	0.1799
0.6981	3.1416	1.6198	1.6927	3.5397	3.8630	0.6997	0.1776
0.8145	0.8145	0.3341	0.3490	5.4725	6.0287	2.3911	0.4649
0.8145	0.9308	0.3830	0.4028	5.4029	5.9504	2.3373	0.4577
0.8145	1.0472	0.4377	0.4602	5.3110	5.8469	2.2799	0.4506
0.8145	1.1636	0.4978	0.5233	5.2049	5.7276	2.2168	0.4429
0.8145	1.2799	0.5630	0.5917	5.0903	5.5988	2.1484	0.4343
0.8145	1.3963	0.6330	0.6651	4.9703	5.4641	2.0750	0.4249
0.8145	1.5126	0.7073	0.7429	4.8470	5.3258	1.9972	0.4146
0.8145	1.6290	0.7854	0.8245	4.7220	5.1857	1.8820	0.3968
0.8145	1.7453	0.8666	0.9073	4.5967	5.0453	1.7566	0.3766
0.8145	1.8617	0.9503	0.9952	4.4723	4.9060	1.6322	0.3559
0.8145	1.9780	1.0356	1.0849	4.3498	4.7690	1.5097	0.3350
0.8145	2.0944	1.1215	1.1752	4.2306	4.6356	1.3905	0.3140
0.8145	2.2108	1.2068	1.2651	4.1159	4.5073	1.2758	0.2932
0.8145	2.3271	1.2901	1.3528	4.0072	4.3857	1.1671	0.2729
0.8145	2.4435	1.3698	1.4338	3.9061	4.2727	1.0661	0.2534
0.8145	2.5598	1.4436	1.5105	3.8147	4.1705	0.9746	0.2353
0.8145	2.6762	1.5094	1.5787	3.7351	4.0813	0.8950	0.2191
0.8145	2.7925	1.5646	1.6357	3.6696	4.0080	0.8295	0.2055
0.8145	2.9089	1.6064	1.6790	3.6206	3.9531	0.7805	0.1951
0.8145	3.0252	1.6326	1.7061	3.5901	3.9190	0.7500	0.1885
0.8145	3.1416	1.6416	1.7153	3.5798	3.9075	0.7397	0.1863
0.9308	0.9308	0.4313	0.4535	5.3608	5.9032	2.2866	0.4501
0.9308	1.0472	0.4852	0.5101	5.2914	5.8251	2.2300	0.4422
0.9308	1.1636	0.5446	0.5723	5.1999	5.7221	2.1678	0.4340
0.9308	1.2799	0.6089	0.6398	5.0944	5.6036	2.1003	0.4252
0.9308	1.3963	0.6780	0.7121	4.9807	5.4758	2.0280	0.4156
0.9308	1.5126	0.7512	0.7888	4.8621	5.3428	1.9513	0.4052
0.9308	1.6290	0.8281	0.8668	4.7410	5.2069	1.8733	0.3944
0.9308	1.7453	0.9081	0.9508	4.6189	5.0701	1.7788	0.3802
0.9308	1.8617	0.9904	1.0374	4.4973	4.9340	1.6572	0.3602
0.9308	1.9780	1.0742	1.1255	4.3775	4.7999	1.5375	0.3398
0.9308	2.0944	1.1585	1.2143	4.2608	4.6693	1.4207	0.3194
0.9308	2.2108	1.2422	1.3024	4.1485	4.5437	1.3084	0.2992
0.9308	2.3271	1.3238	1.3883	4.0421	4.4246	1.2021	0.2795
0.9308	2.4435	1.4017	1.4671	3.9433	4.3141	1.1032	0.2607
0.9308	2.5598	1.4738	1.5419	3.8540	4.2141	1.0139	0.2432
0.9308	2.6762	1.5379	1.6083	3.7763	4.1271	0.9362	0.2276
0.9308	2.7925	1.5915	1.6638	3.7124	4.0556	0.8723	0.2144
0.9308	2.9089	1.6322	1.7058	3.6647	4.0022	0.8246	0.2045
0.9308	3.0252	1.6576	1.7321	3.6351	3.9690	0.7950	0.1982
0.9308	3.1416	1.6663	1.7410	3.6250	3.9578	0.7849	0.1960
1.0472	1.0472	0.5384	0.5659	5.2498	5.7785	2.1742	0.4335
1.0472	1.1636	0.5968	0.6271	5.1817	5.7019	2.1130	0.4245
1.0472	1.2799	0.6602	0.6935	5.0918	5.6008	2.0466	0.4153
1.0472	1.3963	0.7281	0.7647	4.9881	5.4842	1.9754	0.4054
1.0472	1.5126	0.8002	0.8400	4.8764	5.3588	1.9001	0.3949
1.0472	1.6290	0.8757	0.9169	4.7604	5.2287	1.8232	0.3840
1.0472	1.7453	0.9543	0.9994	4.6425	5.0965	1.7407	0.3718
1.0472	1.8617	1.0350	1.0844	4.5245	4.9643	1.6557	0.3589
1.0472	1.9780	1.1172	1.1708	4.4079	4.8338	1.5678	0.3450
1.0472	2.0944	1.1998	1.2578	4.2941	4.7064	1.4540	0.3253
1.0472	2.2108	1.2816	1.3440	4.1846	4.5838	1.3445	0.3058
1.0472	2.3271	1.3613	1.4252	4.0808	4.4677	1.2407	0.2867
1.0472	2.4435	1.4372	1.5040	3.9845	4.3599	1.1444	0.2686
1.0472	2.5598	1.5074	1.5768	3.8975	4.2625	1.0574	0.2518
1.0472	2.6762	1.5696	1.6413	3.8219	4.1778	0.9818	0.2368
1.0472	2.7925	1.6216	1.6950	3.7598	4.1083	0.9198	0.2242
1.0472	2.9089	1.6609	1.7357	3.7136	4.0565	0.8735	0.2147
1.0472	3.0252	1.6854	1.7610	3.6849	4.0244	0.8448	0.2087
1.0472	3.1416	1.6938	1.7697	3.6751	4.0135	0.8350	0.2067
1.1636	1.1636	0.6543	0.6873	5.1418	5.6572	2.0528	0.4147
1.1636	1.2799	0.7165	0.7525	5.0759	5.5832	1.9876	0.4047
1.1636	1.3963	0.7832	0.8223	4.9886	5.4850	1.9178	0.3945
1.1636	1.5126	0.8539	0.8939	4.8876	5.3715	1.8462	0.3842
1.1636	1.6290	0.9280	0.9718	4.7790	5.2496	1.7683	0.3727
1.1636	1.7453	1.0049	1.0527	4.6666	5.1235	1.6874	0.3605
1.1636	1.8617	1.0840	1.1359	4.5531	4.9963	1.6042	0.3476
1.1636	1.9780	1.1643	1.2204	4.4403	4.8699	1.5197	0.3341

k_1	k_2	$\lambda_{k,1}(\Lambda_{k,1})$	$\Lambda_{k,1}$	$\mu_{k,2}$	$\lambda_{k,2}(\mu_{k,2})$	δ_k	r_k
1.1636	2.0944	1.2449	1.3054	4.3299	4.7463	1.4347	0.3201
1.1636	2.2108	1.3247	1.3894	4.2236	4.6272	1.3507	0.3059
1.1636	2.3271	1.4023	1.4679	4.1227	4.5144	1.2722	0.2923
1.1636	2.4435	1.4760	1.5444	4.0292	4.4096	1.1891	0.2771
1.1636	2.5598	1.5440	1.6149	3.9448	4.3151	1.1047	0.2610
1.1636	2.6762	1.6043	1.6773	3.8715	4.2330	1.0314	0.2466
1.1636	2.7925	1.6544	1.7292	3.8114	4.1657	0.9714	0.2347
1.1636	2.9089	1.6923	1.7683	3.7667	4.1156	0.9266	0.2256
1.1636	3.0252	1.7159	1.7928	3.7390	4.0846	0.8989	0.2199
1.1636	3.1416	1.7239	1.8011	3.7296	4.0741	0.8895	0.2180
1.2799	1.2799	0.7775	0.8164	5.0387	5.5415	1.9237	0.3939
1.2799	1.3963	0.8429	0.8824	4.9759	5.4709	1.8577	0.3834
1.2799	1.5126	0.9120	0.9550	4.8919	5.3765	1.7851	0.3722
1.2799	1.6290	0.9845	1.0312	4.7945	5.2670	1.7089	0.3605
1.2799	1.7453	1.0596	1.1103	4.6899	5.1496	1.6298	0.3483
1.2799	1.8617	1.1368	1.1915	4.5822	5.0288	1.5486	0.3354
1.2799	1.9780	1.2151	1.2740	4.4741	4.9077	1.4661	0.3220
1.2799	2.0944	1.2936	1.3567	4.3678	4.7886	1.3834	0.3082
1.2799	2.2108	1.3712	1.4356	4.2650	4.6734	1.3045	0.2948
1.2799	2.3271	1.4464	1.5138	4.1675	4.5642	1.2263	0.2810
1.2799	2.4435	1.5178	1.5879	4.0770	4.4629	1.1522	0.2676
1.2799	2.5598	1.5835	1.6560	3.9954	4.3714	1.0841	0.2549
1.2799	2.6762	1.6416	1.7161	3.9246	4.2921	1.0240	0.2435
1.2799	2.7925	1.6898	1.7660	3.8667	4.2272	0.9741	0.2338
1.2799	2.9089	1.7262	1.8036	3.8236	4.1789	0.9365	0.2264
1.2799	3.0252	1.7488	1.8270	3.7970	4.1491	0.9131	0.2217
1.2799	3.1416	1.7565	1.8349	3.7879	4.1390	0.9051	0.2201
1.3963	1.3963	0.9067	0.9494	4.9422	5.4331	1.7907	0.3717
1.3963	1.5126	0.9742	1.0204	4.8832	5.3669	1.7197	0.3598
1.3963	1.6290	1.0448	1.0947	4.8032	5.2770	1.6454	0.3478
1.3963	1.7453	1.1181	1.1718	4.7102	5.1724	1.5683	0.3354
1.3963	1.8617	1.1931	1.2509	4.6105	5.0605	1.4892	0.3226
1.3963	1.9780	1.2692	1.3311	4.5084	4.9460	1.4090	0.3093
1.3963	2.0944	1.3454	1.4089	4.4070	4.8323	1.3312	0.2962
1.3963	2.2108	1.4206	1.4870	4.3084	4.7218	1.2531	0.2826
1.3963	2.3271	1.4933	1.5626	4.2146	4.6167	1.1775	0.2691
1.3963	2.4435	1.5622	1.6341	4.1274	4.5190	1.1060	0.2561
1.3963	2.5598	1.6255	1.6996	4.0488	4.4310	1.0404	0.2438
1.3963	2.6762	1.6813	1.7574	3.9808	4.3546	0.9827	0.2327
1.3963	2.7925	1.7275	1.8052	3.9251	4.2923	0.9349	0.2234
1.3963	2.9089	1.7623	1.8411	3.8837	4.2459	0.8990	0.2162
1.3963	3.0252	1.7839	1.8634	3.8582	4.2172	0.8767	0.2117
1.3963	3.1416	1.7912	1.8710	3.8495	4.2076	0.8691	0.2102
1.5126	1.5126	1.0399	1.0895	4.8536	5.3338	1.6506	0.3472
1.5126	1.6290	1.1086	1.1618	4.7991	5.2725	1.5783	0.3347
1.5126	1.7453	1.1797	1.2367	4.7238	5.1878	1.5033	0.3220
1.5126	1.8617	1.2525	1.3135	4.6358	5.0889	1.4266	0.3091
1.5126	1.9780	1.3263	1.3912	4.5419	4.9835	1.3489	0.2959
1.5126	2.0944	1.4000	1.4657	4.4465	4.8765	1.2744	0.2832
1.5126	2.2108	1.4725	1.5411	4.3529	4.7714	1.1990	0.2699
1.5126	2.3271	1.5427	1.6139	4.2633	4.6709	1.1262	0.2568
1.5126	2.4435	1.6089	1.6826	4.1798	4.5774	1.0575	0.2441
1.5126	2.5598	1.6696	1.7455	4.1045	4.4930	0.9946	0.2322
1.5126	2.6762	1.7230	1.8007	4.0393	4.4198	0.9394	0.2215
1.5126	2.7925	1.7671	1.8463	3.9860	4.3601	0.8938	0.2125
1.5126	2.9089	1.8002	1.8805	3.9464	4.3157	0.8595	0.2057
1.5126	3.0252	1.8208	1.9018	3.9220	4.2883	0.8383	0.2014
1.5126	3.1416	1.8278	1.9090	3.9137	4.2791	0.8311	0.1999
1.6290	1.6290	1.1752	1.2320	4.7744	5.2447	1.5081	0.3215
1.6290	1.7453	1.2440	1.3046	4.7248	5.1890	1.4355	0.3083
1.6290	1.8617	1.3145	1.3788	4.6547	5.1101	1.3613	0.2953
1.6290	1.9780	1.3857	1.4509	4.5725	5.0177	1.2892	0.2828
1.6290	2.0944	1.4568	1.5247	4.4853	4.9197	1.2153	0.2697
1.6290	2.2108	1.5266	1.5973	4.3976	4.8213	1.1428	0.2568
1.6290	2.3271	1.5939	1.6671	4.3129	4.7262	1.0729	0.2440
1.6290	2.4435	1.6574	1.7329	4.2335	4.6372	1.0071	0.2317
1.6290	2.5598	1.7154	1.7930	4.1617	4.5567	0.9471	0.2202
1.6290	2.6762	1.7663	1.8457	4.0995	4.4869	0.8944	0.2100
1.6290	2.7925	1.8083	1.8891	4.0487	4.4299	0.8510	0.2014
1.6290	2.9089	1.8397	1.9216	4.0110	4.3876	0.8185	0.1949
1.6290	3.0252	1.8592	1.9417	3.9877	4.3615	0.7984	0.1908
1.6290	3.1416	1.8658	1.9485	3.9798	4.3527	0.7915	0.1894
1.7453	1.7453	1.3105	1.3746	4.7054	5.1672	1.3654	0.2947
1.7453	1.8617	1.3784	1.4433	4.6613	5.1175	1.2968	0.2819
1.7453	1.9780	1.4469	1.5146	4.5969	5.0450	1.2255	0.2689
1.7453	2.0944	1.5152	1.5855	4.5212	4.9599	1.1546	0.2561
1.7453	2.2108	1.5821	1.6550	4.4414	4.8702	1.0851	0.2434
1.7453	2.3271	1.6466	1.7218	4.3624	4.7816	1.0183	0.2310
1.7453	2.4435	1.7071	1.7846	4.2877	4.6977	0.9555	0.2191
1.7453	2.5598	1.7624	1.8418	4.2197	4.6214	0.8983	0.2081

k_1	k_2	$\bar{\lambda}_{k,1}(\Lambda_{k,1})$	$\Lambda_{k,1}$	$\mu_{k,2}$	$\bar{\lambda}_{k,2}(\mu_{k,2})$	δ_k	τ_k
1.7453	2.6762	1.8107	1.8918	4.1607	4.5551	0.8483	0.1983
1.7453	2.7925	1.8505	1.9330	4.1124	4.5009	0.8071	0.1901
1.7453	2.9089	1.8803	1.9637	4.0766	4.4608	0.7764	0.1839
1.7453	3.0252	1.8987	1.9827	4.0545	4.4360	0.7574	0.1800
1.7453	3.1416	1.9049	1.9892	4.0470	4.4277	0.7509	0.1787
1.8617	1.8617	1.4436	1.5111	4.6475	5.1021	1.2290	0.2683
1.8617	1.9780	1.5093	1.5794	4.6092	5.0588	1.1607	0.2552
1.8617	2.0944	1.5746	1.6473	4.5510	4.9932	1.0928	0.2424
1.8617	2.2108	1.6386	1.7136	4.4823	4.9159	1.0265	0.2299
1.8617	2.3271	1.7000	1.7773	4.4108	4.8355	0.9628	0.2179
1.8617	2.4435	1.7576	1.8370	4.3414	4.7576	0.9031	0.2065
1.8617	2.5598	1.8101	1.8913	4.2777	4.6860	0.8488	0.1959
1.8617	2.6762	1.8558	1.9386	4.2220	4.6235	0.8015	0.1866
1.8617	2.7925	1.8934	1.9775	4.1763	4.5723	0.7626	0.1788
1.8617	2.9089	1.9215	2.0064	4.1425	4.5342	0.7336	0.1729
1.8617	3.0252	1.9388	2.0244	4.1216	4.5108	0.7157	0.1692
1.8617	3.1416	1.9447	2.0304	4.1145	4.5029	0.7097	0.1680
1.9780	1.9780	1.5720	1.6446	4.6015	5.0500	1.0955	0.2417
1.9780	2.0944	1.6343	1.7093	4.5691	5.0135	1.0308	0.2289
1.9780	2.2108	1.6952	1.7724	4.5173	4.9551	0.9677	0.2166
1.9780	2.3271	1.7536	1.8329	4.4562	4.8862	0.9072	0.2049
1.9780	2.4435	1.8082	1.8895	4.3936	4.8158	0.8506	0.1939
1.9780	2.5598	1.8578	1.9408	4.3346	4.7496	0.7993	0.1838
1.9780	2.6762	1.9010	1.9855	4.2825	4.6910	0.7546	0.1749
1.9780	2.7925	1.9364	2.0220	4.2396	4.6428	0.7180	0.1675
1.9780	2.9089	1.9628	2.0493	4.2076	4.6070	0.6908	0.1620
1.9780	3.0252	1.9790	2.0661	4.1879	4.5849	0.6740	0.1585
1.9780	3.1416	1.9845	2.0718	4.1812	4.5774	0.6683	0.1574
2.0944	2.0944	1.6935	1.7707	4.5674	5.0115	0.9694	0.2159
2.0944	2.2108	1.7513	1.8306	4.5410	4.9816	0.9095	0.2037
2.0944	2.3271	1.8065	1.8878	4.4958	4.9305	0.8523	0.1923
2.0944	2.4435	1.8582	1.9413	4.4425	4.8705	0.7988	0.1817
2.0944	2.5598	1.9049	1.9897	4.3894	4.8107	0.7504	0.1720
2.0944	2.6762	1.9456	2.0317	4.3413	4.7566	0.7084	0.1636
2.0944	2.7925	1.9788	2.0660	4.3012	4.7116	0.6741	0.1566
2.0944	2.9089	2.0035	2.0915	4.2712	4.6779	0.6486	0.1514
2.0944	3.0252	2.0188	2.1073	4.2526	4.6571	0.6328	0.1481
2.0944	3.1416	2.0239	2.1126	4.2463	4.6500	0.6275	0.1470
2.2108	2.2108	1.8059	1.8872	4.5452	4.9861	0.8529	0.1914
2.2108	2.3271	1.8581	1.9412	4.5246	4.9627	0.7989	0.1802
2.2108	2.4435	1.9067	1.9916	4.4858	4.9188	0.7485	0.1699
2.2108	2.5598	1.9507	2.0370	4.4406	4.8679	0.7030	0.1607
2.2108	2.6762	1.9888	2.0765	4.3971	4.8190	0.6636	0.1527
2.2108	2.7925	2.0200	2.1087	4.3601	4.7774	0.6314	0.1461
2.2108	2.9089	2.0431	2.1325	4.3321	4.7459	0.6075	0.1412
2.2108	3.0252	2.0573	2.1473	4.3146	4.7263	0.5928	0.1381
2.2108	3.1416	2.0621	2.1522	4.3087	4.7197	0.5878	0.1371
2.3271	2.3271	1.9072	1.9921	4.5341	4.9732	0.7480	0.1689
2.3271	2.4435	1.9529	2.0394	4.5186	4.9555	0.7007	0.1589
2.3271	2.5598	1.9942	2.0821	4.4859	4.9186	0.6580	0.1500
2.3271	2.6762	2.0300	2.1191	4.4488	4.8767	0.6210	0.1424
2.3271	2.7925	2.0591	2.1492	4.4152	4.8389	0.5909	0.1362
2.3271	2.9089	2.0807	2.1715	4.3892	4.8097	0.5685	0.1316
2.3271	3.0252	2.0940	2.1853	4.3729	4.7914	0.5548	0.1287
2.3271	3.1416	2.0985	2.1899	4.3673	4.7851	0.5501	0.1277
2.4435	2.4435	1.9959	2.0839	4.5326	4.9711	0.6562	0.1489
2.4435	2.5598	2.0347	2.1240	4.5215	4.9583	0.6161	0.1402
2.4435	2.6762	2.0682	2.1587	4.4945	4.9277	0.5814	0.1330
2.4435	2.7925	2.0955	2.1869	4.4653	4.8949	0.5532	0.1271
2.4435	2.9089	2.1157	2.2077	4.4415	4.8681	0.5323	0.1227
2.4435	3.0252	2.1281	2.2206	4.4262	4.8510	0.5195	0.1200
2.4435	3.1416	2.1323	2.2249	4.4210	4.8451	0.5151	0.1191
2.5598	2.5598	2.0711	2.1617	4.5387	4.9775	0.5784	0.1317
2.5598	2.6762	2.1026	2.1942	4.5308	4.9683	0.5458	0.1246
2.5598	2.7925	2.1282	2.2207	4.5090	4.9437	0.5194	0.1190
2.5598	2.9089	2.1472	2.2403	4.4878	4.9199	0.4998	0.1148
2.5598	3.0252	2.1588	2.2523	4.4737	4.9040	0.4877	0.1123
2.5598	3.1416	2.1627	2.2564	4.4687	4.8984	0.4837	0.1115
2.6762	2.6762	2.1323	2.2250	4.5498	4.9895	0.5151	0.1175
2.6762	2.7925	2.1564	2.2499	4.5438	4.9826	0.4902	0.1120
2.6762	2.9089	2.1743	2.2684	4.5271	4.9638	0.4717	0.1081
2.6762	3.0252	2.1853	2.2797	4.5141	4.9492	0.4604	0.1057
2.6762	3.1416	2.1890	2.2836	4.5094	4.9439	0.4565	0.1049
2.7925	2.7925	2.1794	2.2737	4.5627	5.0037	0.4664	0.1065
2.7925	2.9089	2.1964	2.2912	4.5577	4.9980	0.4489	0.1027
2.7925	3.0252	2.2068	2.3020	4.5466	4.9855	0.4381	0.1004

k_1	k_2	$\bar{\lambda}_{k,1}(\Lambda_{k,1})$	$\Lambda_{k,1}$	$\mu_{k,2}$	$\underline{\lambda}_{k,2}(\mu_{k,2})$	δ_k	r_k
2.7925	3.1416	2.2103	2.3056	4.5422	4.9806	0.4344	0.0996
2.9089	2.9089	2.2127	2.3081	4.5746	5.0169	0.4320	0.0987
2.9089	3.0252	2.2227	2.3184	4.5703	5.0120	0.4216	0.0964
2.9089	3.1416	2.2261	2.3220	4.5663	5.0074	0.4181	0.0957
3.0252	3.0252	2.2325	2.3286	4.5829	5.0260	0.4115	0.0941
3.0252	3.1416	2.2357	2.3320	4.5810	5.0238	0.4081	0.0933
3.1416	3.1416	2.2390	2.3354	4.5859	5.0293	0.4047	0.0925

Tabelle 10.1: Bandlücke zwischen den ersten und zweiten Eigenwerten des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems. Die zugehörigen Ergebnisse des Homotopieverfahrens sind unter http://www.math.kit.edu/user/mi1/Reimers/Homotopie_12.pdf zu finden.

Die folgende Tabelle liefert ein Beispiel für eine bewiesene Lücke zwischen dem dritten und vierten Eigenwertband, da zum einen $[a, b] = [7.8625, 7.9625] \subset [\Lambda_{k,3} + \delta_k, \mu_{k,4} - \delta_k]$ für alle $k \in \mathcal{K}$ gilt und zum anderen die Berechnung der Gitterabstände, wie in Kapitel 7.2 beschrieben, erfolgte. Die dielektrische Funktion $\epsilon_2(\lambda)$ bildet eine Kreisscheibe mit dem Radius $r = 0.3$. Es wurde mit 225 Ansatzfunktionen gerechnet. $\bar{\lambda}_{k,3}(\Lambda_{k,3})$ sind verifizierte obere Schranken des dritten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \Lambda_{k,3})$. $\underline{\lambda}_{k,4}(\mu_{k,4})$ sind verifizierte untere Schranken des vierten Eigenwertes des λ -linearen Eigenwertproblems für $\epsilon(x, \mu_{k,4})$. Für die in Kapitel 6 beschriebene Unterteilung des Intervalls $[a, b]$ wurde $N = 3$ benötigt. Die Bedingung (7.6) ist erfüllt, da $\bar{\lambda}_{k,3}(\Lambda_{k,3}) < \Lambda_{k,3} < \mu_{k,4} < \underline{\lambda}_{k,4}(\mu_{k,4})$ für festes $k \in \mathcal{K}$ gilt. Da $0.1236 = \min_{k \in \mathcal{K}} r_k \geq \frac{d}{\sqrt{2}} = 0.1169$ für das äquidistante quadratische Gitter mit Gitterabstand d ist, überdecken die Kreisscheiben mit Radius r_k für die in der Tabelle aufgeführten $k \in \mathcal{K}$ die irreduzible Brillouinzone vollständig (vgl. Kapitel 7.2).

k_1	k_2	$\lambda_{k,3}(\Lambda_{k,3})$	$\Lambda_{k,3}$	$\mu_{k,4}$	$\underline{\lambda}_{k,4}(\mu_{k,4})$	δ_k	r_k
0.1653	0.1653	6.5426	6.8302	9.3562	10.4797	1.0323	0.1643
0	0	6.5562	6.8302	9.3562	10.4296	1.0323	0.1643
0	0.1653	6.5575	6.8314	9.3771	10.4537	1.0311	0.1640
0	0.3307	6.5612	6.8353	9.4379	10.5235	1.0272	0.1629
0	0.4960	6.5673	6.8416	9.5332	10.6330	1.0209	0.1611
0	0.6614	6.5757	6.8502	9.6557	10.7732	1.0123	0.1588
0	0.8267	6.5861	6.8610	9.7967	10.9335	1.0015	0.1561
0	0.9921	6.6028	6.8736	9.9470	11.1026	0.9889	0.1531
0	1.1574	6.6121	6.8878	10.0972	11.2691	0.9747	0.1498
0	1.3228	6.6269	6.9032	10.2384	11.4235	0.9593	0.1466
0	1.4881	6.6426	6.9193	10.3656	11.5596	0.9432	0.1433
0	1.6535	6.6586	6.9359	10.4758	11.6761	0.9266	0.1401
0	1.8188	6.6745	6.9523	10.5696	11.7748	0.9102	0.1371
0	1.9842	6.6899	6.9683	10.6490	11.8585	0.8942	0.1342
0	2.1495	6.7043	6.9833	10.7159	11.9294	0.8792	0.1316
0	2.3149	6.7174	6.9968	10.7718	11.9888	0.8657	0.1293
0	2.4802	6.7287	7.0085	10.8169	12.0374	0.8540	0.1274
0	2.6456	6.7378	7.0181	10.8523	12.0753	0.8444	0.1258
0	2.8109	6.7446	7.0252	10.8779	12.1026	0.8373	0.1246
0	2.9762	6.7487	7.0296	10.8935	12.1190	0.8329	0.1239
0	3.1416	6.7501	7.0311	10.8990	12.1245	0.8313	0.1236
0.1653	0.1653	6.5432	6.8169	9.3979	10.4776	1.0456	0.1660
0.1653	0.3307	6.5423	6.8160	9.4584	10.5472	1.0465	0.1657
0.1653	0.4960	6.5482	6.8220	9.5534	10.6564	1.0405	0.1640
0.1653	0.6614	6.5567	6.8308	9.6755	10.7962	1.0317	0.1616
0.1653	0.8267	6.5674	6.8418	9.8161	10.9561	1.0207	0.1589
0.1653	0.9921	6.5800	6.8548	9.9659	11.1248	1.0077	0.1558
0.1653	1.1574	6.5941	6.8694	10.1157	11.2909	0.9930	0.1525
0.1653	1.3228	6.6095	6.8853	10.2556	11.4446	0.9772	0.1491
0.1653	1.4881	6.6256	6.9020	10.3831	11.5796	0.9605	0.1457
0.1653	1.6535	6.6422	6.9191	10.4921	11.6951	0.9434	0.1425
0.1653	1.8188	6.6586	6.9361	10.5851	11.7930	0.9264	0.1394
0.1653	1.9842	6.6745	6.9525	10.6638	11.8759	0.9099	0.1365
0.1653	2.1495	6.6894	6.9680	10.7302	11.9462	0.8945	0.1338
0.1653	2.3149	6.7029	6.9820	10.7857	12.0052	0.8805	0.1314
0.1653	2.4802	6.7146	6.9941	10.8307	12.0536	0.8684	0.1294
0.1653	2.6456	6.7240	7.0040	10.8661	12.0915	0.8585	0.1277
0.1653	2.8109	6.7310	7.0113	10.8918	12.1187	0.8512	0.1265
0.1653	2.9762	6.7353	7.0158	10.9074	12.1352	0.8467	0.1258
0.1653	3.1416	6.7367	7.0174	10.9129	12.1407	0.8451	0.1255
0.3307	0.3307	6.5048	6.7778	9.5182	10.6162	1.0847	0.1710
0.3307	0.4960	6.4967	6.7694	9.6123	10.7244	1.0931	0.1715
0.3307	0.6614	6.5028	6.7757	9.7333	10.8632	1.0868	0.1696
0.3307	0.8267	6.5134	6.7866	9.8728	11.0223	1.0759	0.1668
0.3307	0.9921	6.5266	6.8002	10.0215	11.1900	1.0623	0.1636
0.3307	1.1574	6.5418	6.8159	10.1698	11.3547	1.0466	0.1601
0.3307	1.3228	6.5584	6.8330	10.3091	11.5062	1.0295	0.1565
0.3307	1.4881	6.5759	6.8512	10.4327	11.6386	1.0113	0.1529
0.3307	1.6535	6.5939	6.8697	10.5394	11.7510	0.9927	0.1495
0.3307	1.8188	6.6119	6.8883	10.6301	11.8460	0.9742	0.1461
0.3307	1.9842	6.6292	6.9062	10.7068	11.9265	0.9563	0.1430
0.3307	2.1495	6.6455	6.9231	10.7718	11.9951	0.9394	0.1401
0.3307	2.3149	6.6602	6.9383	10.8260	12.0531	0.9241	0.1376
0.3307	2.4802	6.6730	6.9516	10.8710	12.1010	0.9109	0.1354
0.3307	2.6456	6.6833	6.9623	10.9066	12.1388	0.9002	0.1336
0.3307	2.8109	6.6909	6.9703	10.9325	12.1662	0.8922	0.1323
0.3307	2.9762	6.6956	6.9753	10.9484	12.1829	0.8872	0.1315
0.3307	3.1416	6.6972	6.9770	10.9541	12.1885	0.8855	0.1312
0.4960	0.4960	6.4430	6.7148	9.7050	10.8314	1.1477	0.1791
0.4960	0.6614	6.4266	6.6979	9.8246	10.9690	1.1646	0.1806
0.4960	0.8267	6.4313	6.7027	9.9626	11.1269	1.1598	0.1787
0.4960	0.9921	6.4433	6.7151	10.1097	11.2934	1.1474	0.1756
0.4960	1.1574	6.4591	6.7313	10.2560	11.4562	1.1312	0.1720
0.4960	1.3228	6.4771	6.7499	10.3923	11.6044	1.1126	0.1682
0.4960	1.4881	6.4965	6.7699	10.5120	11.7323	1.0926	0.1643
0.4960	1.6535	6.5166	6.7907	10.6145	11.8396	1.0718	0.1605
0.4960	1.8188	6.5368	6.8115	10.7009	11.9297	1.0510	0.1569
0.4960	1.9842	6.5563	6.8317	10.7742	12.0065	1.0308	0.1534
0.4960	2.1495	6.5748	6.8507	10.8368	12.0723	1.0118	0.1502
0.4960	2.3149	6.5914	6.8680	10.8898	12.1287	0.9945	0.1474
0.4960	2.4802	6.6059	6.8830	10.9345	12.1761	0.9795	0.1449
0.4960	2.6456	6.6176	6.8952	10.9706	12.2142	0.9673	0.1429
0.4960	2.8109	6.6263	6.9042	10.9976	12.2423	0.9583	0.1415
0.4960	2.9762	6.6316	6.9098	11.0145	12.2597	0.9527	0.1406
0.4960	3.1416	6.6334	6.9118	11.0206	12.2656	0.9507	0.1402
0.6614	0.6614	6.3607	6.6308	9.9426	11.1055	1.2317	0.1896
0.6614	0.8267	6.3367	6.6061	10.0790	11.2625	1.2564	0.1921
0.6614	0.9921	6.3393	6.6087	10.2243	11.4280	1.2537	0.1904

k_1	k_2	$\lambda_{k,3}(\Lambda_{k,3})$	$\Lambda_{k,3}$	$\mu_{k,4}$	$\lambda_{k,4}(\mu_{k,4})$	δ_k	r_k
0.6614	1.1574	6.3526	6.6224	10.3681	11.5887	1.2401	0.1871
0.6614	1.3228	6.3709	6.6412	10.5005	11.7327	1.2213	0.1833
0.6614	1.4881	6.3919	6.6629	10.6146	11.8540	1.1996	0.1792
0.6614	1.6535	6.4143	6.6860	10.7106	11.9539	1.1765	0.1751
0.6614	1.8188	6.4371	6.7094	10.7907	12.0371	1.1531	0.1711
0.6614	1.9842	6.4594	6.7325	10.8588	12.1082	1.1300	0.1672
0.6614	2.1495	6.4805	6.7543	10.9176	12.1701	1.1082	0.1636
0.6614	2.3149	6.4997	6.7741	10.9685	12.2244	1.0884	0.1604
0.6614	2.4802	6.5163	6.7914	11.0131	12.2714	1.0711	0.1576
0.6614	2.6456	6.5299	6.8054	11.0510	12.3109	1.0571	0.1554
0.6614	2.8109	6.5399	6.8159	11.0812	12.3416	1.0466	0.1537
0.6614	2.9762	6.5461	6.8223	11.1017	12.3615	1.0401	0.1526
0.6614	3.1416	6.5481	6.8246	11.1094	12.3685	1.0379	0.1522
0.8267	0.8267	6.2636	6.5294	10.2139	11.4190	1.3331	0.2022
0.8267	0.9921	6.2314	6.4985	10.3574	11.5841	1.3640	0.2054
0.8267	1.1574	6.2323	6.4994	10.4982	11.7429	1.3631	0.2039
0.8267	1.3228	6.2470	6.5144	10.6246	11.8815	1.3481	0.2006
0.8267	1.4881	6.2680	6.5359	10.7310	11.9938	1.3266	0.1966
0.8267	1.6535	6.2920	6.5607	10.8170	12.0830	1.3018	0.1923
0.8267	1.8188	6.3173	6.5868	10.8873	12.1559	1.2757	0.1880
0.8267	1.9842	6.3425	6.6128	10.9461	12.2180	1.2497	0.1838
0.8267	2.1495	6.3666	6.6377	10.9969	12.2727	1.2248	0.1798
0.8267	2.3149	6.3887	6.6605	11.0412	12.3219	1.2020	0.1762
0.8267	2.4802	6.4080	6.6804	11.0812	12.3665	1.1821	0.1731
0.8267	2.6456	6.4237	6.6967	11.1176	12.4074	1.1658	0.1705
0.8267	2.8109	6.4353	6.7088	11.1507	12.4448	1.1537	0.1685
0.8267	2.9762	6.4425	6.7163	11.1818	12.4772	1.1462	0.1672
0.8267	3.1416	6.4449	6.7190	11.2075	12.4935	1.1435	0.1666
0.9921	0.9921	6.1492	6.4147	10.4986	11.7489	1.4478	0.2162
0.9921	1.1574	6.1149	6.3794	10.6351	11.9055	1.4831	0.2200
0.9921	1.3228	6.1151	6.3794	10.7530	12.0368	1.4831	0.2188
0.9921	1.4881	6.1315	6.3962	10.8461	12.1355	1.4663	0.2156
0.9921	1.6535	6.1553	6.4206	10.9155	12.2077	1.4419	0.2114
0.9921	1.8188	6.1823	6.4484	10.9670	12.2624	1.4141	0.2070
0.9921	1.9842	6.2102	6.4772	11.0057	12.3054	1.3853	0.2026
0.9921	2.1495	6.2374	6.5052	11.0339	12.3395	1.3573	0.1984
0.9921	2.3149	6.2626	6.5312	11.0531	12.3656	1.3313	0.1945
0.9921	2.4802	6.2847	6.5541	11.0644	12.3842	1.3084	0.1912
0.9921	2.6456	6.3028	6.5729	11.0693	12.3958	1.2896	0.1885
0.9921	2.8109	6.3163	6.5869	11.0703	12.4018	1.2756	0.1865
0.9921	2.9762	6.3246	6.5956	11.0696	12.4042	1.2669	0.1852
0.9921	3.1416	6.3274	6.5986	11.0691	12.4048	1.2639	0.1848
1.1574	1.1574	6.0281	6.2906	10.7636	12.0573	1.5718	0.2314
1.1574	1.3228	5.9914	6.2529	10.8665	12.1756	1.6096	0.2357
1.1574	1.4881	5.9920	6.2533	10.9363	12.2512	1.6092	0.2350
1.1574	1.6535	6.0106	6.2724	10.9764	12.2935	1.5901	0.2319
1.1574	1.8188	6.0373	6.2998	10.9949	12.3136	1.5627	0.2278
1.1574	1.9842	6.0670	6.3304	10.9986	12.3183	1.5321	0.2235
1.1574	2.1495	6.0970	6.3612	10.9914	12.3117	1.5013	0.2192
1.1574	2.3149	6.1252	6.3904	10.9776	12.2977	1.4721	0.2152
1.1574	2.4802	6.1503	6.4163	10.9611	12.2801	1.4462	0.2116
1.1574	2.6456	6.1711	6.4378	10.9449	12.2627	1.4247	0.2087
1.1574	2.8109	6.1866	6.4538	10.9316	12.2481	1.4087	0.2066
1.1574	2.9762	6.1961	6.4638	10.9228	12.2386	1.3987	0.2052
1.1574	3.1416	6.1994	6.4673	10.9196	12.2354	1.3952	0.2048
1.3228	1.3228	5.9019	6.1613	10.9439	12.2691	1.7011	0.2478
1.3228	1.4881	5.8647	6.1230	10.9782	12.3077	1.7395	0.2528
1.3228	1.6535	5.8668	6.1250	10.9800	12.3076	1.7375	0.2526
1.3228	1.8188	5.8883	6.1469	10.9619	12.2854	1.7156	0.2497
1.3228	1.9842	5.9177	6.1771	10.9327	12.2513	1.6854	0.2457
1.3228	2.1495	5.9496	6.2100	10.8984	12.2117	1.6525	0.2415
1.3228	2.3149	5.9806	6.2420	10.8632	12.1714	1.6205	0.2373
1.3228	2.4802	6.0087	6.2709	10.8305	12.1339	1.5916	0.2335
1.3228	2.6456	6.0321	6.2952	10.8026	12.1020	1.5673	0.2304
1.3228	2.8109	6.0497	6.3134	10.7813	12.0778	1.5491	0.2280
1.3228	2.9762	6.0606	6.3248	10.7679	12.0627	1.5377	0.2265
1.3228	3.1416	6.0643	6.3287	10.7632	12.0576	1.5338	0.2260
1.4881	1.4881	5.7744	6.0305	10.9734	12.3035	1.8320	0.2658
1.4881	1.6535	5.7383	5.9933	10.9402	12.2642	1.8692	0.2714
1.4881	1.8188	5.7431	5.9980	10.8930	12.2088	1.8644	0.2713
1.4881	1.9842	5.7676	6.0230	10.8401	12.1473	1.8394	0.2684
1.4881	2.1495	5.7994	6.0558	10.7867	12.0855	1.8067	0.2644
1.4881	2.3149	5.8325	6.0899	10.7362	12.0274	1.7726	0.2602
1.4881	2.4802	5.8633	6.1216	10.6915	11.9759	1.7409	0.2562
1.4881	2.6456	5.8894	6.1486	10.6545	11.9335	1.7139	0.2527
1.4881	2.8109	5.9092	6.1691	10.6268	11.9018	1.6934	0.2501
1.4881	2.9762	5.9215	6.1819	10.6096	11.8823	1.6806	0.2485
1.4881	3.1416	5.9257	6.1864	10.6037	11.8758	1.6761	0.2479
1.6535	1.6535	5.6489	5.9017	10.8791	12.1938	1.9608	0.2849
1.6535	1.8188	5.6155	5.8672	10.8094	12.1132	1.9953	0.2906

k_1	k_2	$\bar{\lambda}_{k,3}(\Lambda_{k,3})$	$\Lambda_{k,3}$	$\mu_{k,4}$	$\bar{\lambda}_{k,4}(\mu_{k,4})$	δ_k	τ_k
1.6535	1.9842	5.6239	5.8755	10.7381	12.0309	1.9869	0.2903
1.6535	2.1495	5.6513	5.9036	10.6693	11.9516	1.9589	0.2872
1.6535	2.3149	5.6847	5.9380	10.6061	11.8789	1.9245	0.2832
1.6535	2.4802	5.7177	5.9720	10.5509	11.8155	1.8905	0.2790
1.6535	2.6456	5.7463	6.0015	10.5058	11.7638	1.8610	0.2754
1.6535	2.8109	5.7683	6.0243	10.4723	11.7255	1.8382	0.2725
1.6535	2.9762	5.7820	6.0386	10.4516	11.7020	1.8239	0.2707
1.6535	3.1416	5.7867	6.0436	10.4445	11.6941	1.8189	0.2701
1.8188	1.8188	5.5285	5.7779	10.7214	12.0121	2.0846	0.3042
1.8188	1.9842	5.4991	5.7476	10.6345	11.9122	2.1149	0.3096
1.8188	2.1495	5.5116	5.7601	10.5523	11.8177	2.1024	0.3089
1.8188	2.3149	5.5415	5.7908	10.4776	11.7320	2.0717	0.3056
1.8188	2.4802	5.5752	5.8255	10.4130	11.6578	2.0370	0.3015
1.8188	2.6456	5.6059	5.8572	10.3603	11.5975	2.0053	0.2977
1.8188	2.8109	5.6300	5.8821	10.3213	11.5529	1.9804	0.2947
1.8188	2.9762	5.6452	5.8979	10.2972	11.5256	1.9645	0.2928
1.8188	3.1416	5.6505	5.9035	10.2890	11.5164	1.9590	0.2921
1.9842	1.9842	5.4159	5.6622	10.5339	11.7968	2.2003	0.3229
1.9842	2.1495	5.3917	5.6370	10.4397	11.6887	2.2255	0.3278
1.9842	2.3149	5.4084	5.6540	10.3546	11.5911	2.2085	0.3266
1.9842	2.4802	5.4396	5.6861	10.2810	11.5069	2.1764	0.3231
1.9842	2.6456	5.4715	5.7189	10.2212	11.4385	2.1436	0.3193
1.9842	2.8109	5.4974	5.7457	10.1770	11.3880	2.1167	0.3161
1.9842	2.9762	5.5141	5.7631	10.1498	11.3570	2.0994	0.3140
1.9842	3.1416	5.5199	5.7691	10.1404	11.3466	2.0934	0.3133
2.1495	2.1495	5.3136	5.5568	10.3346	11.5684	2.3057	0.3406
2.1495	2.3149	5.2953	5.5378	10.2400	11.4599	2.2775	0.3380
2.1495	2.4802	5.3157	5.5587	10.1582	11.3664	2.1957	0.3276
2.1495	2.6456	5.3463	5.5902	10.0918	11.2905	2.1293	0.3191
2.1495	2.8109	5.3736	5.6183	10.0427	11.2344	2.0802	0.3128
2.1495	2.9762	5.3916	5.6370	10.0125	11.2000	2.0500	0.3089
2.1495	3.1416	5.3979	5.6436	10.0021	11.1884	2.0396	0.3075
2.3149	2.3149	5.2235	5.4641	10.1367	11.3418	2.1742	0.3249
2.3149	2.4802	5.2118	5.4519	10.0477	11.2399	2.0852	0.3134
2.3149	2.6456	5.2346	5.4752	9.9752	11.1571	2.0127	0.3040
2.3149	2.8109	5.2616	5.5031	9.9216	11.0959	1.9592	0.2970
2.3149	2.9762	5.2808	5.5229	9.8886	11.0584	1.9261	0.2926
2.3149	3.1416	5.2875	5.5300	9.8773	11.0457	1.9148	0.2911
2.4802	2.4802	5.1474	5.3857	9.9522	11.1306	1.9897	0.3010
2.4802	2.6456	5.1424	5.3805	9.8744	11.0418	1.9120	0.2908
2.4802	2.8109	5.1649	5.4036	9.8169	10.9762	1.8544	0.2831
2.4802	2.9762	5.1845	5.4239	9.7815	10.9359	1.8190	0.2784
2.4802	3.1416	5.1917	5.4314	9.7693	10.9223	1.8068	0.2768
2.6456	2.6456	5.0868	5.3233	9.7924	10.9480	1.8299	0.2799
2.6456	2.8109	5.0879	5.3243	9.7316	10.8787	1.7691	0.2717
2.6456	2.9762	5.1058	5.3429	9.6941	10.8360	1.7316	0.2667
2.6456	3.1416	5.1133	5.3507	9.6813	10.8217	1.7188	0.2649
2.8109	2.8109	5.0427	5.2779	9.6683	10.8065	1.7058	0.2632
2.8109	2.9762	5.0479	5.2830	9.6293	10.7621	1.6668	0.2579
2.8109	3.1416	5.0550	5.2907	9.6159	10.7471	1.6534	0.2560
2.9762	2.9762	5.0159	5.2503	9.5899	10.7166	1.6274	0.2525
2.9762	3.1416	5.0191	5.2537	9.5762	10.7013	1.6137	0.2506
3.1416	3.1416	5.0069	5.2412	9.5624	10.6858	1.5999	0.2487

Tabelle 10.2: Bandlücke zwischen den dritten und vierten Eigenwerten des λ -nichtlinearen Eigenwertproblems. Die zugehörigen Ergebnisse des Homotopieverfahrens sind unter http://www.math.kit.edu/user/mi1/Reimers/Homotopie_34.pdf zu finden.

Kapitel 11

Programme

Im Folgenden sind die in dieser Arbeit entwickelten Programme aufgelistet. Ausgehend von den beiden Hauptprogrammen zur Berechnung einer Bandlücke sowohl zwischen dem ersten und zweiten Eigenwertband als auch zwischen dem dritten und vierten Eigenwertband folgen die Programme, die von den Hauptprogrammen aufgerufen werden.

```
1. function [Muray1,Nu2,Lambda1,Lambda2,k_G1,k_G2,a,b,delta_kG,r_kG] =
    Obere_Untere_Schranken_verif(n,r,gamma,emax,G)

%-----
%
% Programm berechnet verifizierte obere und untere Schranken mit
% Rayleigh-Ritz und Lehmann-Goerisch inklusive Homotopie unter Verwendung
% von INTLAB innerhalb der irreduziblen Brillouinzone. Gitterabstände werden
% wie in Kapitel 7.2 beschrieben berechnet.
%
% Eingabedaten:
% n      : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
%          A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% r      : Radius der Kreisscheibe innerhalb einer Periodizitätszelle
% gamma  : spektraler Shift-Parameter beim Lehmann-Goerisch-Verfahren
% emax   : Dielektrische Funktion des Vergleichsproblems mit konstantem,
%          maximalem epsilon
% G      : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
%          die in Integral_Kreisscheibe.m berechneten Integrale über der
%          Kreisscheibe Omega_2 mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% Muray1 : obere Schranke des ersten Eigenwertes für
%          underline{epsilon}(x,tilde{Lambda}_{k,1})
% Nu2    : untere Schranke des zweiten Eigenwertes für
%          overline{epsilon}(x,tilde{mu}_{k,2})
```

```

% Lambda1      := Lambda_{k,1}
% Lambda2      := mu_{k,2}
% (k_G1,k_G2) : Gitterpunkt der irreduziblen Brillouinzone
% [a,b]        : Bereich der bewiesenen spektralen Bandlücke
% delta_kG     : wird zur Berechnung von r_kG benötigt
% r_kG         : Radius um den Gitterpunkt kG=(k_G1,k_G2)
%
% so dass Muray1 <= Lambda1 < Lambda2 <= Nu2 erfüllt ist
%
% Verwendete Programme:
% Eigenwerteinschließung_k_fest_verif.m, Naeherungseigenwerte.m
%
%-----

l=20;
y=Naeherungseigenwerte(n,r,l,G);
y1=real(y(1:l+1,:));
y2=real(y((l+1)+1):(l+1)*2,:));

aa=max(max(y1));
bb=min(min(y2));
dist=bb-aa;
delta_k=dist/2 - 0.05;
a=aa+delta_k;
b=bb-delta_k;
%-----
% Bestimmung des minimalen Radius r_min
r_min = sqrt(b + 2*delta_k) - sqrt(b + delta_k);
%-----
% Gitterabstand dist für kleinstes äquidistantes Gitter
d=2*pi/(sqrt(2)*r_min);
l=0;
while l<=d
    l=l+1;
end
dist=pi/l;
%-----
% Durchlaufen des feinen Gitters K mit äquidistantem Gitterabstand dist
% der Gitterpunkte (k1,k2).
% Erzeugen des Gitters KG mit Gitterpunkten (k_G1,k_G2)
j=1;
sk=1; % Anzahl der Gitterpunkte in KG.
y=Naeherungseigenwerte(n,r,l,G);
Muray1=[]; Nu2=[]; muray1=[]; nu2=[]; Lambda1=[]; Lambda2=[]; lambda1=[];
lambda2=[]; Delta_k=[]; delta_k=[]; k_G1=[]; k_G2=[]; R_kG=[];
k1=pi/l;
k2=pi/l;
y1=real(y(1,1));
y2=real(y(1+(l+1),1));
lambda1 = 1.12*y1;
lambda2 = 0.98*y2;
[mu1,muray1]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda1,r,n,10,gamma,emax);
[nu2,nuray2]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda2,r,n,10,gamma,emax);
while muray1 > lambda1
    muray1=mid(muray1);
    lambda1 = muray1 + 0.01;
    [mu1,muray1]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda1,r,n,10,gamma,emax);
end
while lambda2 > nu2

```

```

nu2=mid(nu2);
lambda2 = nu2 - 0.01;
[nu2,nuray2]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda2,r,n,10,gamma,emax);
end
k_G1=[k_G1;k1]; k_G2=[k_G2;k2];
sk = size(k_G1);
sk = sk(:,1);
if a-lambda1<lambda2-b
    delta_k = a-lambda1;
else delta_k = lambda2-b;
end
r_kG = sqrt(lambda2+delta_k) - sqrt(lambda2);
R_kG=[R_kG;r_kG];
Muray1=[Muray1;muray1];
Nu2=[Nu2;nu2];
Lambda1=[Lambda1;lambda1];
Lambda2=[Lambda2;lambda2];
Delta_k=[Delta_k;delta_k];
for m1=0:1
    for m2=0:1
        k1=m1*pi/l;
        k2=m2*pi/l;
        l1=m1+1;
        l2=m2+1;
        if k1<=k2
            kG1=k_G1(1); kG2=k_G2(1); rkG=R_kG(1);
            while (sqrt((k1-kG1)^2+(k2-kG2)^2) <= rkG) && (j<=sk)
                kG1=k_G1(j); kG2=k_G2(j); rkG=R_kG(j);
                j=j+1;
            end
            j=1;
            if sqrt((k1-kG1)^2+(k2-kG2)^2) > rkG
                y1=real(y(l1,l2));
                y2=real(y(l1+(l1+1),l2));
                lambda1 = 1.12*y1;
                lambda2 = 0.98*y2;
                [mu1,muray1]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                    (k1,k2,lambda1,r,n,10,gamma,emax);
                [nu2,nuray2]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                    (k1,k2,lambda2,r,n,10,gamma,emax);
                while muray1 > lambda1
                    muray1=mid(muray1);
                    lambda1 = muray1 + 0.01;
                    [mu1,muray1]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                        (k1,k2,lambda1,r,n,10,gamma,emax);
                end
                while lambda2 > nu2
                    nu2=mid(nu2);
                    lambda2 = nu2 - 0.01;
                    [nu2,nuray2]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                        (k1,k2,lambda2,r,n,10,gamma,emax);
                end
            end
            k_G1=[k_G1;k1];k_G2=[k_G2;k2];
            sk = size(k_G1);
            sk = sk(:,1);
            if a-lambda1<lambda2-b
                delta_k = a-lambda1;
            else delta_k = lambda2-b;
            end
            r_kG = sqrt(lambda2+delta_k) - sqrt(lambda2);
            R_kG=[R_kG;r_kG];

```

```

        Muray1=[Muray1;muray1];
        Nu2=[Nu2;nu2];
        Lambda1=[Lambda1;lambda1];
        Lambda2=[Lambda2;lambda2];
        Delta_k=[Delta_k;delta_k];
    end
end
end
end
end
end

```

2.

```

function [Muray3,Nu4,Lambda3,Lambda4,k_G1,k_G2,a,b,delta_kG,r_kG] =
    Obere_Untere_Schranken_verif_34(n,r,gamma,emax,G)

%-----
%
% Programm berechnet verifizierte obere und untere Schranken mit
% Rayleigh-Ritz und Lehmann-Goerisch inklusive Homotopie unter Verwendung
% von INTLAB innerhalb der irreduziblen Brillouinzone. Gitterabstände
% werden wie in Kapitel 7.2 beschrieben berechnet.

% Eingabedaten:
% n      : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
%          A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% r      : Radius der Kreisscheibe innerhalb einer Periodizitätszelle
% gamma  : spektraler Shift-Parameter beim Lehmann-Goerisch-Verfahren
% emax   : Dielektrische Funktion des Vergleichsproblems mit konstantem,
%          maximalem epsilon
%          hier gleich 1 zu setzen (wegen Homotopie)
% G      : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
%          die in Integral_Kreisscheibe.m berechneten Integrale über der
%          Kreisscheibe Omega_2 mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% Muray3 : obere Schranke des ersten Eigenwertes für
%          underline{epsilon}(x,tilde{Lambda}_{k,3})
% Nu4     : untere Schranke des zweiten Eigenwertes für
%          overline{epsilon}(x,tilde{mu}_{k,4})
% Lambda3 : = Lambda_{k,3}
% Lambda4 : = mu_{k,4}
% (k_G1,k_G2) : Gitterpunkt der Brillouinzone
% [a,b]     : Bereich der bewiesenen spektralen Bandlücke
% delta_kG  : wird zur Berechnung von r_kG benötigt
% r_kG     : Radius um den Gitterpunkt kG
%
% so dass Muray3 <= Lambda3 < Lambda4 <= Nu4 erfüllt ist
%
% Verwendete Programme:
% Eigenwerteinschließung_k_fest_verif.m, Naehungseigenwerte.m
%-----

l=20;
y=Naehungseigenwerte(n,r,l,G);
y3=real(y(((l+1)*2+1):(l+1)*3,:));
y4=real(y(((l+1)*3+1):(l+1)*4,:));
aa=max(max(y3));
bb=min(min(y4));
dist=bb-aa;

```

```

delta_k=dist/2 - 0.05;
a=aa+delta_k;
b=bb-delta_k;
%-----
% Bestimmung des minimalen Radius r_min
r_min = sqrt(b + 2*delta_k) - sqrt(b + delta_k);
%-----
% Gitterabstand dist für kleinstes äquidistantes Gitter
d=2*pi/(sqrt(2)*r_min);
l=0;
while l<=d
    l=l+1;
end
dist=pi/l;
%-----
% Durchlaufen des feinen Gitters K mit äquidistantem Gitterabstand dist
% der Gitterpunkte (k1,k2).
% Erzeugen des Gitters KG mit Gitterpunkten (k_G1,k_G2)
j=1;
sk=1; % Anzahl der Gitterpunkte in KG.
y=Naeherungseigenwerte(n,r,l,G);
Muray3=[]; Nu4=[]; muray3=[]; nu4=[]; Lambda3=[]; Lambda4=[]; lambda3=[];
lambda4=[]; Delta_k=[]; delta_k=[]; k_G1=[]; k_G2=[]; R_kG=[];
k1=pi/l;
k2=pi/l;
y3=real(y(1+2*(1+1),1));
y4=real(y(1+3*(1+1),1));
lambda3 = 1.12*y3;
lambda4 = 0.98*y4;
[mu3,muray3]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda3,r,n,10,gamma,emax);
[nu4,nuray4]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda4,r,n,10,gamma,emax);
while muray3 > lambda3
    muray3=mid(muray3);
    lambda3 = muray3 + 0.01;
    [mu3,muray3]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda3,r,n,10,gamma,emax);
end
while lambda4 > nu4
    nu4=mid(nu4);
    lambda4 = nu4 - 0.01;
    [nu4,nuray4]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
(k1,k2,lambda4,r,n,10,gamma,emax);
end
k_G1=[k_G1;k1]; k_G2=[k_G2;k2];
sk = size(k_G1);
sk = sk(:,1);
if a-lambda3<lambda4-b
    delta_k = a-lambda3;
else delta_k = lambda4-b;
end
r_kG = sqrt(lambda4+delta_k) - sqrt(lambda4);
R_kG=[R_kG;r_kG];
Muray3=[Muray3;muray3];
Nu4=[Nu4;nu4];
Lambda3=[Lambda3;lambda3];
Lambda4=[Lambda4;lambda4];
Delta_k=[Delta_k;delta_k];
for m1=0:l
    for m2=0:l
        k1=m1*pi/l;

```

```

k2=m2*pi/l1;
l1=m1+1;
l2=m2+1;
if k1<=k2
    kG1=k_G1(1); kG2=k_G2(1); rkG=R_kG(1);
    while (sqrt((k1-kG1)^2+(k2-kG2)^2) <= rkG) && (j<=sk)
        kG1=k_G1(j); kG2=k_G2(j); rkG=R_kG(j);
        j=j+1;
    end
    j=1;
    if sqrt((k1-kG1)^2+(k2-kG2)^2) > rkG
        y3=real(y(l1+2*(l+1),l2));
        y4=real(y(l1+3*(l+1),l2));
        lambda3 = 1.12*y3;
        lambda4 = 0.98*y4;
        [mu3,muray3]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
            (k1,k2,lambda3,r,n,10,gamma,emax);
        [nu4,nuray4]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
            (k1,k2,lambda4,r,n,10,gamma,emax);
        while muray3 > lambda3
            muray3=mid(muray3);
            lambda3 = muray3 + 0.01;
            [mu3,muray3]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                (k1,k2,lambda3,r,n,10,gamma,emax);
        end
        while lambda4 > nu4
            nu4=mid(nu4);
            lambda4 = nu4 - 0.01;
            [nu4,nuray4]=Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif
                (k1,k2,lambda4,r,n,10,gamma,emax);
        end
        k_G1=[k_G1;k1];k_G2=[k_G2;k2];
        sk = size(k_G1);
        sk = sk(:,1);
        if a-lambda3<lambda4-b
            delta_k = a-lambda3;
        else delta_k = lambda4-b;
        end
        r_kG = sqrt(lambda4+delta_k) - sqrt(lambda4);
        R_kG=[R_kG;r_kG];
        Muray3=[Muray3;muray3];
        Nu4=[Nu4;nu4];
        Lambda3=[Lambda3;lambda3];
        Lambda4=[Lambda4;lambda4];
        Delta_k=[Delta_k;delta_k];
    end
end
end
end
end

```

3. function [y,X,Y]=Naehungseigenwerte(n,r,l,G)

```

%-----
%
% Programm berechnet die ersten m=6 Eigenwerte für (l+1)2 äquidistante
% Gitterpunkte (k1,k2) aus dem ersten Quadranten der Brillouinzone
%

```

```

% Eingabedaten:
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
%      A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% l : (l+1)^2 ist die Anzahl der äquidistanten Gitterpunkte k \in K
% G : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
%      die Integrale über der Kreisscheibe Omega_2 mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% y : ((l+1)*m) x (l+1) - dimensionale Matrix
% X : (l+1) x (l+1) - dimensionale Matrix mit k1 als Einträge
% Y : (l+1) x (l+1) - dimensionale Matrix mit k2 als Einträge
%
% Verwendete Programme:
% Eigenwert_approx_Homotopie.m, Matrix_Newton.m
%
%-----

y=[];
omeg(1,1)=0;
for m=1:6
    for m1=0:1
        for m2=0:1
            k1=m1*pi/l;
            k2=m2*pi/l;
            [D,V] = Eigenwert_approx_Homotopie(k1,k2,0,0,r,n,G);
            omega = D(m,m);
            u0 = V(:,m);
            u = u0 ./ norm(u0);
            s=0.01;
            A = Matrix_Newton(n,omega,k1,k2,r,s,G);
            while s < 1
                it=0;
                while (norm(A*u,inf)>0.01)
                    [A,dA] = Matrix_Newton(n,omega,k1,k2,r,s,G);
                    J=[0 2*u'; dA*u A];
                    f=[u'*u - 1; A*u];
                    ou=J\(J*[omega; u]-f);
                    omega=ou(1);
                    u0=ou(2:(2*n+1)^2+1);
                    u=u0./norm(u0,inf);
                    it=it+1;
                end
                s=s+0.01;
            end
            omeg(m1+1,m2+1)=omega;
        end
    end
    y=[y;omeg];
end
[X,Y] = meshgrid(0:pi/l:pi, 0:pi/l:pi);
Zr=real(y(1:l+1,:));
surf(X,Y,Zr);
xlabel('k1');
ylabel('k2');
zlabel('\lambda');
hold on;
for p=1:5
    Zr=real(y(((l+1)*p+1):(l+1)*(p+1),:));
    surf(X,Y,Zr);
end
hold off;

```

end

4.

```
function [mu,ray]=
    Eigenwerteinschliessung_k_fest_verif(k1,k2,lambda,r,n,l,gamma,emax)

%-----
%
% Programm berechnet für festes k=(k1,k2) verifizierte obere und untere
% Schranken mit Rayleigh-Ritz und Lehmann-Goerisch inklusive Homotopie
% unter Verwendung von INTLAB für festes lambda in der dielektrischen
% Funktion epsilon(x,lambda).
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% r      : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% n      : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
%          A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% l      : Startindex eines Eigenwertes für s=0
% gamma  : spektraler Shift-Parameter beim Lehmann-Goerisch-Verfahren
% emax   : Dielektrische Funktion des Vergleichsproblems mit konstantem
%          epsilon
%
% Ausgabedaten:
% mu     : Die ersten unteren Eigenwertschranken des lambda-linearen
%          Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
% ray    : Die ersten oberen Eigenwertschranken des lambda-linearen
%          Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
%
% Verwendete Programme:
% Integral_Kreisscheibe_verif.m, Obere_Schranken_approx.m, Lambda_N.m,
% Eigenwerte_approx_e_const.m, Untere_Schranken_Matrix_verif.m,
% Untere_Schranken_verif.m,
%
%-----

G=Integral_Kreisscheibe_verif(n,70,r);
[eigval,e1,e2,eigel,A,B] = Obere_Schranken_approx(k1,k2,lambda,r,n,mid(G));
lambdaj = Lambda_N(k1,k2,10,emax);
nm=1;
while nm >0
    Mu=[]; Rays=[]; SH=[];
    Bv=e1*eye((2*n+1)^2)+(e2-e1)*G;
    A1 = intval(conj(eigel(:,l)')*A*eigel(:,l));
    A2 = conj(eigel(:,l)')*Bv*eigel(:,l);
    ray=A1/A2;
    c=l+1;
    while ray >= lambdaj(c)
        c=c+1;
    end
    lalt=l;
    s=0;
    calt = c-1;
    while s < 1-eps
        c=calt+1;
        calt=c;
        lambdaM1s0=lambdaj(c-1);
        lambdaM2s0=lambdaj(c);
    end
end
```

```

if (lambdaM2s0-lambdaM1s0 < 0.02)
    c=c+1;
    lambdaM1s0=lambdaj(c-1);
    lambdaM2s0=lambdaj(c);
end
if (c<=l+1 && ray<lambdaM2s0)
    beta= lambdaM2s0+gamma;
    [mu,rays]=Untere_Schranken_verif
        (k1,k2,n,gamma,A1,A2,eigel,eigval,beta,l,e1,e2,G,ray);
    Mu=[Mu;mu];
    Rays=[Rays;rays];
else
    l=c-1;
    [D,V,Ac,A2_emax] = Eigenwerte_approx_e_const(k1,k2,n,mid(G),emax);
    s=0.5;
    A1=A;
    A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
    [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
    A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
    A1=intval(conj(rayel(:,l))'*A1*rayel(:,l));
    A2=conj(rayel(:,l))'*A2*rayel(:,l);
    ray=A1/A2;
    sl=0;
    sr=1;
    weitermachen = 1;
    while (weitermachen > 0 && s+eps<1)
        rayalt=ray;
        salt=s;
        if (ray-lambdaM2s0 < 0)
            s=(s+sr)/2;
        else s=(sl+s)/2;
        end
        sneu=s;
        A1=A;
        A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
        [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
        [rayt,index]=sort(diag(rayt));
        rayel=rayel(:,index);
        A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
        A1=intval(conj(rayel(:,l))'*A1*rayel(:,l));
        A2=conj(rayel(:,l))'*A2*rayel(:,l);
        ray=A1/A2;
        if lambdaM2s0-ray < 0
            weitermachen = 1;
        else if sneu < salt && lambdaM2s0 < rayalt
            weitermachen = 0;
        end
        end
    end
    sl=s;
    SH=[SH;s];
    beta= lambdaM2s0+gamma;
    [mu,rays]=Untere_Schranken_verif
        (k1,k2,n,gamma,A1,A2,rayel,diag(rayt),beta,l,e1,e2,G,ray);
    Mu=[Mu;mu];
    Rays=[Rays;rays];
    while (s<1-eps && l>=3)
        l=l-1;
        A1=A;
        A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
        [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
        [rayt,index]=sort(diag(rayt));

```

```

rayel=rayel(:,index);
A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
A1=intval(conj(rayel(:,l)')*A1*rayel(:,l)));
A2=conj(rayel(:,l)')*A2*rayel(:,l));
ray=A1/A2;
weitermachen = 1;
lv=0;
while weitermachen > 0
    rayalt=ray;
    salt=s;
    if (ray-mu < 0)
        s=(s+sr)/2;
    else s=(s1+s)/2;
    end
    sneu=s;
    A1=A;
    A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
    [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
    [rayt,index]=sort(diag(rayt));
    rayel=rayel(:,index);
    A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
    A1=intval(conj(rayel(:,l)')*A1*rayel(:,l)));
    A2=conj(rayel(:,l)')*A2*rayel(:,l));
    ray=A1/A2;
    if mu < ray
        weitermachen = 1;
    else if sneu < salt && mu < rayalt
        weitermachen = 0;
    end
end
rays=ray;
if s<=s1
    lv=lv+1;
    if lv <= 1
        l=l+1;
        Mu=Mu(1:size(Mu)-1);
        Rays=Rays(1:size(Rays)-1);
        [mu,raytt]=Untere_Schranken_Matrix_verif
            (k1,k2,lambda,r,n,l,gamma,beta,s,emax,G);
        Mu=[Mu;mu(1);mu(1-1)];
        Rays=[Rays;raytt(1);raytt(1-1)];
        mu=mu(1-1);
        l=l-2;
        A1=A;
        A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
        [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
        [rayt,index]=sort(diag(rayt));
        rayel=rayel(:,index);
        A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
        A1=intval(conj(rayel(:,l)')*A1*rayel(:,l)));
        A2=conj(rayel(:,l)')*A2*rayel(:,l));
        ray=A1/A2;
        weitermachen=1;
    else
        l=l+lv;
        Mu=Mu(1:size(Mu)-lv);
        Rays=Rays(1:size(Rays)-lv);
        [mu,raytt]=Untere_Schranken_Matrix_verif
            (k1,k2,lambda,r,n,l,gamma,beta,s,emax,G);
        lvm=lv+1;
        for lm=1:lvm
            Mu=[Mu;mu(1+1-lm)];
        end
    end
end

```

```

        Rays=[Rays;raytt(1+1-lm)];
    end
    mu=mu(1-lv);
    l=1-lv-1;
    A1=A;
    A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
    [rayel,rayt]=eig(A1,A2);
    [rayt,index]=sort(diag(rayt));
    rayel=rayel(:,index);
    A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
    A1=intval(conj(rayel(:,l))*A1*rayel(:,l)));
    A2=conj(rayel(:,l))*A2*rayel(:,l);
    ray=A1/A2;
    weitermachen=1;
end
SH=[SH;s];
end
if s>=1-eps
    weitermachen =0;
end
end
sl=s;
beta= mu+gamma;
if lv<1
    SH=[SH;s];
    [mu,rays]=Untere_Schranken_verif(k1,k2,n,gamma,A1,A2,rayel,
        diag(rayt),beta,l,e1,e2,G,ray);

    Mu=[Mu;mu];
    Rays=[Rays;rays];
end
end
[mun,rayn]=Untere_Schranken_Matix_verif
    (k1,k2,lambd,r,n,l,gamma,beta,s,emax,G);
mun=mun(1:l-1);
rayn=rayn(1:l-1);
end
if l<5
    l=lalt+1; lalt=1; nm=1;
else nm=0;
end
end
end
end

```

5. function [mu,rays]=Untere_Schranken_verif
(k1,k2,n,gamma,A1,A2,eig1,eigval,beta,l,e1,e2,G,ray)
- ```

%-----
%
% Programm berechnet verifizierte untere Schranken
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% gamma : spektraler Shift-Parameter beim Lehmann-Goerisch-Verfahren
% l : Index des einzuschließenden Eigenwertes
% G : Integral über der Kreisscheibe Omega_2, das für die Matrix A2
% benötigt wird
%
% Ausgabedaten:

```

```

% mu : Untere Eigenwertschranken des lambda-linearen
% Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
% ray : Obere Eigenwertschranken des lambda-linearen
% Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
%-----

rays=ray;
a=10000;
lauf=-(1-1/a);
m=0;
while lauf <= 1-1/a
 m=m+1;
 A1m(m)=midrad(mid(A1)+lauf*rad(A1),rad(A1)/a);
 A2m(m)=midrad(mid(A2)+lauf*rad(A2),rad(A2)/a);
 B1m(m)=A1m(m) + (gamma-beta)*A2m(m);
 if m >= 2
 B1m(m)=hull(B1m(m-1),B1m(m));
 end
 lauf=lauf+2/a;
end
B1=B1m(m);
B1=A1 + (gamma-beta)*A2;
% Matrix S
ga = intval(1/(eigval(1,1)+gamma));
S = ga^2.*A1;
% Matrix R
fet=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 fet=[fet;intval((-4*pi^2*(j1^2+j2^2)-4*pi*(k1*j1+k2*j2)-(k1^2+k2^2))^2)];
 end
end
R1 = 1/e1*ga^2*(eigel(:,1).*conj(eigel(:,1)))'*fet;
k=0; ll=0; a=[]; Pi=midrad(pi,1e-16);
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 k=k+1;
 for l1=-n:n
 for l2=-n:n
 ll=ll+1;
 Mm=[Mm;(-4*Pi^2*(j1^2+j2^2)- ...
 4*Pi*(k1*j1+k2*j2)-k1^2-k2^2)*(-4*Pi^2*(l1^2+l2^2)- ...
 4*Pi*(k1*l1+k2*l2)-k1^2-k2^2)];
 end
 end
 ll=ll-(2*n+1)^2;
 end
end
end
Mm=reshape(Mm,(2*n+1)^2,(2*n+1)^2);
M=G.*Mm;
tg1=conj(eigel(:,1)')*M*eigel(:,1);
R2=(1/e2-1/e1)*ga^2*tg1;
R=R1+R2;
% Matrix T
T = 1/gamma *(A2 - 2*ga*A1 + R);
A3 = S + T;
a=10000;
lauf=-(1-1/a);
m=0;
while lauf <= 1-1/a
 m=m+1;

```

```

A1m(m)=midrad(mid(A1)+lauf*rad(A1),rad(A1)/a);
A2m(m)=midrad(mid(A2)+lauf*rad(A2),rad(A2)/a);
A3m(m)=midrad(mid(A3)+lauf*rad(A3),rad(A3)/a);
B2m(m)=A1m(m) + (gamma-2*beta)*A2m(m) + beta^2*A3m(m);
if m >= 2
 B2m(m)=hull(B2m(m-1),B2m(m));
end
lauf=lauf+2/a;
end
B2=B2m(m);
B2=A1 + (gamma-2*beta)*A2 + beta^2*A3;
mu = beta-gamma- (beta/(1-B1/B2));
end

6. function [mu,ray]=Untere_Schranken_Matrix_verif
(k1,k2,lambda,r,n,t,gamma,beta,s,emax,G)
%-----
%
% Programm berechnet verifizierte untere Schranken
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% t : Anzahl der zu berechnenden verifizierten oberen und unteren
% Schranken
% gamma : spektraler Shift-Parameter beim Lehmann-Goerisch-Verfahren
% beta : spektraler Parameter der im Homotopieverfahren bestimmt wird
% s : \in [0,1]
% emax : Dielektrische Funktion des Vergleichsproblems mit konstantem
% epsilon
% G : Integral über der Kreisscheibe Omega_2, das für die Matrix A2
% benötigt wird
%
% Ausgabedaten:
% mu : Untere Eigenwertschranken des lambda-linearen
% Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
% ray : Obere Eigenwertschranken des lambda-linearen
% Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
%
% Verwendete Programme:
% Obere_Schranken_approx.m, Eigenwerte_approx_e_const.m,
% Obere_Schranken_verif.m
%-----

if s=1
 [ray,rayl,A1,A2,e1,e2,eigval,eigel]=Obere_Schranken_verif
(k1,k2,lambda,r,n,t,G)
else
 [D,V,Ac,A2_emax] = Eigenwerte_approx_e_const(k1,k2,n,mid(G),emax);
 [eigv,e1,e2,eigl,A,B] = Obere_Schranken_approx(k1,k2,lambda,r,n,N,mid(G));
 A1=A;
 A2=(1-s)*A2_emax + s*B;
 [eigel,eigval]=eig(A1,A2);
 A1=intval(conj(eigel(:,1:t))'*A1*eigel(:,1:t));
 Bv=e1*eye((2*n+1)^2)+(e2-e1)*G;
 A2=(1-s)*A2_emax + s*Bv;
end

```

```

A2=conj(eigel(:,1:t)')*A2*eigel(:,1:t);
[rayeltilde,raytilde]=eig(mid(A1),mid(A2));
[raytilde,index]=sort(diag(raytilde));
raytilde=diag(raytilde);
rayeltilde=rayeltilde(:,index);
r1=norm(conj(rayeltilde)'*A1*rayeltilde-conj(rayeltilde)'. . .
 *A2*rayeltilde*raytilde,inf);
r1=mid(r1)+rad(r1);
r2=norm(conj(rayeltilde)'*A2*rayeltilde-eye(t),inf);
r2=mid(r2)+rad(r2);
radr=r1/(1-r2);
ray=diag(midrad(raytilde,radr));
end
%S
BB=[];
for l=1:t
 for j=1:t
 BB=[BB;1/(eigval(l,l)+gamma)*1/(eigval(j,j)+gamma)];
 end
end
BB=reshape(BB,t,t);
S=BB.*A1;
k=0; ll=0; a=[]; Pi=midrad(pi,1e-16);
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 k=k+1;
 for l1=-n:n
 for l2=-n:n
 ll=ll+1;
 Mm=[Mm;(-4*Pi^2*(j1^2+j2^2)- . . .
 4*Pi*(k1*j1+k2*j2)-k1^2-k2^2)*(-4*Pi^2*(l1^2+l2^2)- . . .
 4*Pi*(k1*l1+k2*l2)-k1^2-k2^2)];
 end
 end
 ll=ll-(2*n+1)^2;
 end
end
Mm=reshape(Mm,(2*n+1)^2,(2*n+1)^2);
M=G.*Mm;
tg=[];
for m=1:t
 for i=1:t
 tg1=0;
 for l=1:(2*n+1)^2
 for j=1:(2*n+1)^2
 tg1=tg1+1/(eigval(m,m)+gamma)* 1/(eigval(i,i)+. . .
 gamma)*eigel(l,m)*conj(eigel(j,i))*M(j,l);
 end
 end
 tg=[tg;tg1];
 end
end
tg=reshape(tg,t,t);
R32=(1/e2-1/e1)*tg;
fet=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 fet=[fet;intval((-4*pi^2*(j1^2+j2^2)-4*pi*(k1*j1+k2*j2)-(k1^2+k2^2))^2)];
 end
end
fets=[];
for j=1:t

```

```

 for l=1:t
 fets=[fets;(1/(eigval(l,l)+gamma)*1/(eigval(j,j)+gamma))*(eigel(:,l).*...
 conj(eigel(:,j)))'*fet];
 end
end
fets=reshape(fets,t,t);
R31=1/e1*fets;
R3=R31+R32;
la=0;
for j=1:t
 for l=1:t
 la(j,l)= -1/(eigval(j,j)+gamma);
 end
end
R1=la.*A1;
laa=0;
for j=1:t
 for l=1:t
 laa(j,l)= -1/(eigval(l,l)+gamma);
 end
end
R2=laa.*A1;
R = 1/gamma * (A2 + R1 + R2 + R3);
lef = A1 + (gamma - beta)*A2;
rig = A1 + (gamma - 2*beta)*A2+beta^2*(S+R);
[goeel,goe]=eig(mid(lef),mid(rig));
[goetilde,index]=sort(diag(goetilde));
goetilde=diag(goetilde);
goeeltilde=goeeltilde(:,index);
r1=norm(conj(goeeltilde)*lef*goeeltilde-conj(goeeltilde)'...
 *rig*goeeltilde*goetilde,inf);
r1=mid(r1)+rad(r1);
r2=norm(conj(goeeltilde)*rig*goeeltilde-eye(t),inf);
r2=mid(r2)+rad(r2);
radr=r1/(1-r2);
goe=diag(midrad(goetilde,radr));
mu=[];
for theta=1:j
 mu=[mu;beta - gamma - beta/(1-goe(theta))];
end
[mum,index]=sort(mid(mu));
mu=mu(index);
end

```

7. function [ray,rayel,A1,A2,e1,e2,eigval,eigel]=Obere\_Schranken\_verif  
(k1,k2,lambda,r,n,t,G)

```

%-----
%
% Programm berechnet verifizierte obere Schranken
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% t : Anzahl der zu berechnenden verifizierten oberen und unteren
% Schranken
% G : Integral über der Kreisscheibe, das für die Matrix A2 benötigt

```

```

% wird
%
% Ausgabedaten:
% ray : Obere Eigenwertschranken des lambda-linearen
% Eigenwertproblems für epsilon(x,lambda)
% rayel : zu ray zugehörige Eigenelemente
%
% Verwendete Programme:
% Obere_Schranken_approx.m
%
%-----
s=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 s=[s;j1^2+j2^2];
 end
end
b=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 b=[b;k1*j1+k2*j2];
 end
end
[eigval,e1,e2,eigel,A,B] = Obere_Schranken_approx(k1,k2,lambda,r,n,mid(G));
eigel=intval(eigel);
as=[];
for j=1:t
 for l=1:t
 as = [as;(eigel(:,l).*conj(eigel(:,j)))'*s];
 end
end
as=reshape(as,t,t);
ab=[];
for j=1:t
 for l=1:t
 ab = [ab;(eigel(:,l).*conj(eigel(:,j)))'*b];
 end
end
ab=reshape(ab,t,t);
at=[];
for j=1:t
 for l=1:t
 at = [at; sum(eigel(:,l).*conj(eigel(:,j)))];
 end
end
at=reshape(at,t,t);
A1=4*pi^2*as + 4*pi*ab + (k1^2+k2^2)*at;
sg=[];
for m=1:t
 for i=1:t
 sg1=0;
 for l=1:(2*n+1)^2
 for j=1:(2*n+1)^2
 sg1=sg1+eigel(l,m)*conj(eigel(j,i))*G(j,l);
 end
 end
 sg=[sg;sg1];
 end
end
sg=reshape(sg,t,t);
re1=e1*at;

```

```

re2=(e2-e1)*sg;
A2=re1+re2;
[rayeltilde,raytilde]=eig(mid(A1),mid(A2));
[raytilde,index]=sort(diag(raytilde));
raytilde=diag(raytilde);
rayeltilde=rayeltilde(:,index);
r1=norm(conj(rayeltilde)'+A1*rayeltilde-conj(rayeltilde)'.
 *A2*rayeltilde*raytilde,inf);
r1=mid(r1)+rad(r1);
r2=norm(conj(rayeltilde)'+A2*rayeltilde-eye(t),inf);
r2=mid(r2)+rad(r2);
radr=r1/(1-r2);
ray=diag(midrad(raytilde,radr));
end

```

8.

```

function [D,V,A1,A2] = Eigenwert_approx_Homotopie(k1,k2,lambda,s,r,n,G)

%-----
%
% Programm berechnet Näherungseigenwert für das Matrixeigenwertproblem
% $A_1(k)x = \lambda A_2(\lambda)x$ unter Verwendung einer Homotopie in epsilon,
% um die lambda-Abhängigkeit von $A_2(\lambda)$ in den Griff zu bekommen.
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% s : $s \in [0,1]$ (Homotopieparameter)
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% n : $(2*n+1)^2 \times (2*n+1)^2$ ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% G : $(2*n+1)^2 \times (2*n+1)^2$ - dimensionale Matrix, deren Einträge
% die Integrale über der Kreisscheibe Ω_2 mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% D : Eigenwerte (Vektor der Dimension $(2*n+1)^2$)
% V : Eigenvektoren (Matrix der Dimension $(2*n+1)^2 \times (2*n+1)^2$)
% A1 : $(2*n+1)^2 \times (2*n+1)^2$ - dimensionale Matrix
% A2 : $(2*n+1)^2 \times (2*n+1)^2$ - dimensionale Matrix
%
% Verwendeten Programme:
% Dielektrische_Fkt_Homotopie.m
%-----

%Matrix A
A=zeros((2*n+1)^2,(2*n+1)^2);
%Diagonale für A
v=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 v=[v;4*pi^2*(j1^2+j2^2)+4*pi*(k1*j1+k2*j2)+k1^2+k2^2];
 end
end
A=diag(v)+A;
%Matrix B
[e1,e2] = Dielektrische_Fkt_Homotopie(lambda,s);
B=(e2-e1)*G;
%Diagonale für B
v=0;

```

```

for j=1:(2*n+1)^2
 v(j)=e1+(e2-e1)*pi*r^2-B(1,1);
end
B=diag(v)+B;
[V,D]=eig(A,B);

```

```

9. function [A,dA] = Matrix_Newton(n,lambda,k1,k2,r,s,G)

%-----
%
% Programm berechnet lambda-Matrix A(lambda) und Jacobische dA, die
% Grundlage zur Berechnung de Näherungseigenwerte mit Hilfe des
% Newton-Verfahrens bilden (A(k,lambda)x=0)
%
% Eingabedaten:
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizitätszelle
% s : s \in [0,1] (Homotopieparameter, siehe Kapitel 5.3)
% G : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
% die Integrale über der Kreisscheibe Omega_2 mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% A : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
% dA : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
%
% Verwendete Programme:
% Dielektrische_Fkt_Homotopie.m
%
%-----

%Matrix A
[e1,e2,de1,de2] = Dielektrische_Fkt_Homotopie(lambda,s);
A=-lambda*(e2-e1)*G;
%Diagonale für A
v=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 v=[v;4*pi^2*(j1^2+j2^2)+4*pi*(k1*j1+k2*j2)+k1^2+k2^2
 -lambda*(e1+(e2-e1)*pi*r^2)-A(1,1)];
 end
end
A=diag(v)+A;
%Matrix für dA
dA=-((de2-de1)*lambda+(e2-e1))*G;
%Diagonale für dA
v=[];
for j=1:(2*n+1)^2
 v(j)=- (e1+(e2-e1)*pi*r^2)-lambda*(de1+(de2-de1)*pi*r^2)-dA(1,1);
end
dA=diag(v)+dA;

```

```

10. function [D,V,A1,A2] = Eigenwerte_approx_e_const(k1,k2,n,G,emax)

```

```

%-----

```

```

%
% Programm berechnet Matrizen A1 und A2 für konstantes epsilon_0 und gibt
% die Eigenwerte, die geschlossen gelöst werden können, mit zugehörigen
% Eigenvektoren aus. A1, A2 und die Eigenvektoren V werden für das
% Homotopieverfahren benötigt, sobald das Vergleichsproblem mit dem
% Ausgangsproblem verknüpft wird.
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% G : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
% die berechneten Integrale über der Kreisscheibe Omega_2 mit
% Radius r sind.
% emax : Dielektrischer Funktion epsilon(x,lambda) wird ein konstanter
% Wert zugewiesen.
%
% Ausgabedaten:
% D : Eigenwerte (Vektor der Dimension (2*n+1)^2)
% V : Eigenvektoren (Matrix der Dimension (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2)
% A1 : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
% A2 : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
%
%-----

%Matrix A
A=zeros((2*n+1)^2,(2*n+1)^2);
%Diagonale für A
v=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 v=[v;4*pi^2*(j1^2+j2^2)+4*pi*(k1*j1+k2*j2)+k1^2+k2^2];
 end
end
A=diag(v)+A;
%Matrix B
e1=emax;
e2=emax;
B=(e2-e1)*G;
%Diagonale für B
v=e1*ones((2*n+1)^2,1);
B=diag(v)+B;
[V,D]=eig(A,B);
end

```

11.

```
function lambda_j = Lambda_N(k1,k2,n,emax)
```

```

%-----
%
% Programm berechnet die ersten (2*n+1)^2 Eigenwerte des geschlossen
% lösbaeren Vergleichsproblems für konstantes epsilon_0.
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und
% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% emax : Dielektrischer Funktion epsilon(x,lambda) wird ein konstanter
% Wert zugewiesen.
%

```

```

% Ausgabedaten:
% lambda_j : Ersten (2*n+1)^2 Eigenwerte als Vektor
%
%-----

lambda_j=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 lambda_j=[lambda_j;1/emax*((2*pi*j1 + k1)^2 + (2*pi*j2 + k2)^2)];
 end
end
lambda_j=sort(lambda_j);

```

12. `function [e1,e2,de1,de2]=Dielektrische_Fkt_Homotopie(lambda,s)`

```

%-----
%
% Programm berechnet lambda*epsilon(x,lambda) und die Ableitung von
% lambda*epsilon(x,lambda) unter Verwendung einer Homotopie von
% epsilon(x,lambda) in lambda

% Eingabedaten:
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% s : s \in [0,1] (Homotopieparameter)

% Ausgabedaten:
% e1 : dielektrische Funktion au\u00dfenhalb der Kreisscheibe
% e2 : dielektrische Funktion au\u00dfenhalb der Kreisscheibe
% de1 : Funktion e1 nach lambda differenziert
% de2 : Funktion e2 nach lambda differenziert

%-----

a=11;
S=16;
k=0.02;
e1 = (1-s)+s.*lambda;
ee2 = (S-(S-a)*exp(-k.*lambda)).*lambda;
e2=12.*((1-s)+s.*ee2./12);
de1=s*1;
de2 = s.*(k.*(S-a).*exp(-k.*lambda).*lambda + S-(S-a)*exp(-k.*lambda));

```

13. `function [eigval,e1,e2,eig1,A1,A2] = Obere_Schranken_approx(k1,k2,lambda,r,n,G)`

```

%-----
%
% Programm berechnet im Rahmen des ersten Rayleigh-Ritz-Schritts (2*n+1)^2
% N\u00e4herungseigenwerte eigval mit zugeh\u00f6rigen N\u00e4herungseigenelementen eig1
% f\u00fcr das Matrixeigenwertproblem A1*x=Lambda*A2*x (A1=A und A2=B) f\u00fcr festes
% lambda in epsilon(x,lambda).
%
% Eingabedaten:
% k1, k2 : Punkt innerhalb der Brillouinzone
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb der Periodizit\u00e4tszelle
% n : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 ist die Dimension der Matrizen A1 und

```

```

% A2 im ersten Rayleigh-Ritz-Schritt
% G : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix, deren Einträge
% die in Integral_Kreisscheibe.m berechneten Integrale über der
% Kreisscheibe mit Radius r sind.
%
% Ausgabedaten:
% eigval : Eigenwerte (Vektor der Dimension (2*n+1)^2)
% e1 : Dielektrische Funktion außerhalb der Kreisscheibe
% e2 : Dielektrische Funktion innerhalb der Kreisscheibe
% eigel : Eigenvektoren (Matrix der Dimension (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2)
% A1 : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
% A2 : (2*n+1)^2 x (2*n+1)^2 - dimensionale Matrix
%
% Verwendete Programme:
% Dielektrische_Funktion.m
%
%-----

%Matrix A
A=zeros((2*n+1)^2,(2*n+1)^2);
%Diagonale für A
v=[];
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 v=[v;4*pi^2*(j1^2+j2^2)+4*pi*(k1*j1+k2*j2)+k1^2+k2^2];
 end
end
A=diag(v)+A;
%Matrix B
[e1,e2] = Dielektrische_Funktion(lambda);
B=(e2-e1)*A;
%Diagonale für B
v=ones((2*n+1)^2,1); %diag(v)=e1*I
B=diag(v)+B;
[V,D]=eig(A,B);

14. function [e1,e2,de1,de2]=Dielektrische_Funktion(lambda)

%-----
% Programm berechnet den Wert e2 der dielektrischen Funktion epsilon für
% festes lambda. e2 wird als eine monoton wachsende beschränkte Funktion in
% lambda modelliert.
%
% Eingabedaten:
% lambda : Wert von lambda in epsilon(x,lambda)
%
% Ausgabedaten:
% e1 : dielektrische Funktion außerhalb der Kreisscheibe
% e2 : dielektrische Funktion innerhalb der Kreisscheibe
% de1 : Funktion e1 nach lambda differenziert
% de2 : Funktion e2 nach lambda differenziert
%
%-----

a=11;
S=16;
k=0.02;
e1=1;
e2=S-(S-a)*exp(-k.*lambda);
de1=0;

```

```
de2=k.*(S-a).*exp(-k.*lambda);
```

```
15. function [S,F]=S_Integral_Kreisscheibe_verif(m,M,r)
%-----
%
% Programm berechnet verifiziert mit INTLAB das Integral über der
% Kreisscheibe für alle $(2*n+1)^4$ Matrixeinträge, die für die Matrix A2
% benötigt werden.
%
% Eingabedaten:
% m : $(2*m+1)^2 \times (2*m+1)^2$ ist die Dimension der Matrix A2
% M : Anzahl der Summanden, um gewünschte Genauigkeit der Integrale zu
% erhalten
% r : Radius der Kreisscheibe innerhalb einer Periodizitätszelle
%
% Ausgabedaten:
% S : $(2*m+1)^2 \times (2*m+1)^2$ dimensionale Matrix
% F : größter Fehlerradius
%-----

k=0;
l=0;
g=(2*n+1)^2;
a(g,g)=0;
b(g,g)=0;
for j1=-n:n
 for j2=-n:n
 k=k+1;
 for l1=-n:n
 for l2=-n:n
 l=l+1;
 a(k,l)=j1-l1;
 b(k,l)=j2-l2;
 end
 end
 l=l-(2*n+1)^2;
 end
end

A=a+b;
B=(-1).^A;

s=0;
for n=1:M
 s=s+intval((1/factorial(2*n-1)-1/factorial(2*n))*(-1).^(n-1).*...
 factorial(2.*n-2)./(factorial(n-1)*factorial(n-1)).*...
 ((a.^2+b.^2)./4).^(n-1).*...
 (2.*pi.*r).^(2*n-2));
end
s=intval(s.*2.*pi.*r.^2);
S=B.*s;
RS=rad(S);
F=max(max(RS));
```

## Kapitel 12

# Zusammenfassung

Ausgangspunkt dieser Arbeit war die Frage nach der Existenz von Bandlücken für TM-polarisierte elektromagnetische Wellen in einem zweidimensionalen photonischen Kristall für frequenzabhängige dielektrische Funktion  $\epsilon$ . Dies führte uns auf eine Familie  $\lambda$ -nichtlinearer Eigenwertprobleme (1.2), in der der Parameter  $\lambda$  sowohl in  $\epsilon$  als auch zugleich als Eigenwertparameter auftritt. Hierfür mussten nun für einen zu bestimmenden Bereich verifizierte Eigenwertausschließungen durchgeführt werden.

Zunächst wurden numerische Näherungsrechnungen für das untersuchte  $\lambda$ -nichtlineare Eigenwertproblem mit ausgewählten Gitterpunkten  $k \in K$  durchgeführt und dabei  $\epsilon$  so gewählt, dass die Eigenwertapproximationen die Präsenz einer oder mehrerer Bandlücken vermuten lassen. Für die numerischen Näherungen wurde der Ritz-Galerkin-Ansatz verwendet. Als Ansatzfunktionen dafür wurden die Eigenfunktionen des zugehörigen linearen Eigenwertproblems gewählt ( $\epsilon \equiv \text{const}$ ). Das resultierende Matrixeigenwertproblem lieferte mittels Newton-Verfahren Näherungseigenwerte für das  $\lambda$ -nichtlineare Problem. Die Ergebnisse ließen vermuten, dass zwischen dem ersten und zweiten Band, sowie zwischen dem dritten und vierten Band Lücken auftreten.

Es wurde bewiesen, dass in Teilintervallen der beiden vermuteten Lücken tatsächlich kein Eigenwert des  $\lambda$ -nichtlinearen Problems liegt. Dazu wurde die Annahme zum

Widerspruch geführt, dass das  $\lambda$ -nichtlineare Problem einen Eigenwert in diesem Intervall hat. Wenn das  $\lambda$ -nichtlineare Eigenwertproblem

$$-\Delta u = \lambda \epsilon(\lambda, x)u$$

mit  $k$ -quasiperiodischen Randbedingungen einen Eigenwert  $\lambda^*$  hat, dann ist dieser Eigenwert auch Eigenwert des  $\lambda$ -linearen Eigenwertproblems

$$-\Delta u = \lambda \epsilon(\lambda^*, x)u.$$

Ausgehend von dieser Feststellung gelang es, durch Eigenwertschranken für  $\lambda$ -lineare Probleme Eigenwertausschließungen für das vorliegende  $\lambda$ -nichtlineare Problem zu gewinnen. Zur gesicherten Berechnung der erforderlichen Eigenwertschranken für  $\lambda$ -lineare Probleme wurde das Rayleigh–Ritz Verfahren zur Berechnung von oberen Schranken und das Lehmann–Goerisch Verfahren zur Berechnung von unteren Schranken angewandt. Alle Berechnungen wurden für sämtliche benötigten Gitterpunkte  $k \in K$  durchgeführt.

Ein Störungsargument lieferte die maximal erlaubte Größe der Abstände zwischen den einzelnen Gitterpunkten. Es ermöglichte somit die Schlussfolgerung von der Einschließung der Eigenwerte bezüglich des Gitters in  $K$  auf die Einschließung der Eigenwerte in ganz  $K$ . Die Ausschließungsintervalle verkleinern sich dabei abhängig von der Feinheit des Gitters geringfügig.

# Kapitel 13

## Anhang A

### Beweis des Satzes 2.3.1 (Rayleigh–Ritz)

*Beweis.* Seien  $(\Lambda_1, u^{(1)}), \dots, (\Lambda_N, u^{(N)})$  die Eigenpaare von

$$A_1 u = \Lambda A_2 u \quad (\Lambda_1 \leq \dots \leq \Lambda_N)$$

mit der Eigenschaft

$$(u^{(j)})^T A_1 \bar{u}^{(l)} = \Lambda_j \delta_{jl} \quad \text{und} \quad (u^{(j)})^T A_2 \bar{u}^{(l)} = \delta_{jl}.$$

Setze  $\tilde{u}_n := \sum_{t=1}^N u_t^{(n)} \phi_t$  ( $n = 1, \dots, N$ ). Dann ist

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\tilde{u}_j, \tilde{u}_l) &= (u^{(j)})^T A_1 \bar{u}^{(l)} \\ &= \Lambda_j \delta_{jl} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle \tilde{u}_j, \tilde{u}_l \rangle &= (u^{(j)})^T A_2 \bar{u}^{(l)} \\ &= \delta_{jl}. \end{aligned}$$

Sei  $n \in \{1, \dots, N\}$  und setze  $U := \text{span}\{\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_n\}$ .

Dann gilt

$$\begin{aligned}
 \lambda_n &\leq \max_{\tilde{u} \in U \setminus \{0\}} \frac{\mathcal{M}(\tilde{u}, \tilde{u})}{\langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle} && \text{(Min-Max-Prinzip (siehe [Plu]))} \\
 &= \max_{c \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\mathcal{M}\left(\sum_{j=1}^n c_j \tilde{u}_j, \sum_{l=1}^n c_l \tilde{u}_l\right)}{\left\langle \sum_{j=1}^n c_j \tilde{u}_j, \sum_{l=1}^n c_l \tilde{u}_l \right\rangle} \\
 &= \max_{c \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\sum_{j,l=1}^n c_j \bar{c}_l \mathcal{M}(\tilde{u}_j, \tilde{u}_l)}{\sum_{j,l=1}^n c_j \bar{c}_l \langle \tilde{u}_j, \tilde{u}_l \rangle} \\
 &= \max_{c \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}} \frac{\sum_{j=1}^n \Lambda_j |c_j|^2}{\sum_{j=1}^n |c_j|^2} \\
 &\leq \Lambda_n.
 \end{aligned}$$

□

# Kapitel 14

## Anhang B

### Beweis des Temple–Lehmann Verfahrens und der Goerisch–Erweiterung

Wir betrachten das geshiftete Eigenwertproblem

$$\mathcal{M}_\gamma(u, v) := \mathcal{M}(u, v) + \gamma \langle u, v \rangle = (\lambda + \gamma) \langle u, v \rangle$$

was äquivalent zu

$$\mathcal{M}(u, v) = \lambda \langle u, v \rangle$$

ist.

*Beweis des Satzes 2.4.1 (Temple-Lehmann).* Für  $u_t \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$  ( $n \leq N$ ) sei  $\tilde{u} := \sum_{t=1}^N u_t \phi_t$  und  $w := \sum_{t=1}^N u_t w_t$ . Es gilt

$$\begin{aligned} u^T (A_1 + (\gamma - \rho) A_2) \bar{u} &= \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{u}) - \rho \langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle \\ &= \mathcal{M}(\tilde{u}, \tilde{u}) + (\gamma - \rho) \langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle \\ &< 0 \quad \text{falls } \tilde{u} \neq 0, \end{aligned}$$

denn es ist

$$\begin{aligned} \max_{\tilde{u} \in [\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N], \tilde{v} \neq 0} \frac{\mathcal{M}(\tilde{u}, \tilde{u})}{\langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle} &= \max_{c \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}} \frac{\mathcal{M} \left( \sum_{j=1}^N c_j \phi_j, \sum_{l=1}^N c_l \phi_l \right)}{\langle \sum_{j=1}^N c_j \phi_j, \sum_{l=1}^N c_l \phi_l \rangle} \\ &= \max_{c \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}} \frac{c^* A_1 c}{c^* A_2 c} \\ &\leq \Lambda_N < \rho - \gamma. \end{aligned}$$

Somit ist  $A_1 - \rho A_2$  negativ definit. Betrachten wir

$$\begin{aligned} u^T (A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3) \bar{u} &= \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{u}) - 2\rho \langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle + \rho^2 \mathcal{M}_\gamma(w, w) \\ &= \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u} - \rho w, \tilde{u} - \rho w) \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

Gleichheit gilt, wenn  $\tilde{u} = \rho w$ . Dann ist  $(\tilde{u}, \rho)$  Eigenpaar von  $\mathcal{M}_\gamma$  (also von  $\mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{v}) = (\lambda + \gamma) \langle \tilde{u}, \tilde{v} \rangle$ ). Dann ist  $(\tilde{u}, \rho - \gamma)$  Eigenpaar von  $\mathcal{M}$  (also von  $\mathcal{M}(\tilde{u}, \tilde{v}) = \lambda \langle \tilde{u}, \tilde{v} \rangle$ ) und  $A_1 u = \lambda A_2 u$  besitzt den Eigenwert  $\rho - \gamma$ . Dies ist ein Widerspruch, da  $\Lambda_N < \rho - \gamma$ . Also ist  $A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3$  positiv definit.

Seien  $u^{(1)}, \dots, u^{(N)} \in \mathbb{C}^N$  Eigenvektoren mit

$$(u^{(j)})^* (A_1 + (\gamma - \rho)A_2) u^{(l)} = \mu_j \delta_{jl}$$

und

$$(u^{(j)})^* (A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3) u^{(l)} = \delta_{jl}.$$

Wir setzen

$$\tilde{U}_j = \sum_{t=1}^N u_t^{(j)} \phi_t, \quad W_j = \sum_{t=1}^N u_t^{(j)} w_t \quad (j = 1, \dots, N).$$

Dann ist

$$\mathcal{M}_\gamma(\tilde{U}_j, \tilde{U}_l) - \rho \langle \tilde{U}_j, \tilde{U}_l \rangle = \mu_j \delta_{jl}$$

und

$$\mathcal{M}_\gamma(\tilde{U}_j - \rho W_j, \tilde{U}_l - \rho W_l) = \delta_{jl}.$$

Sei  $n \in \{1, \dots, N\}$ . Wähle  $c = (c_1, \dots, c_n) \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$  derart, dass für  $\tilde{u} = \sum_j^n c_j \tilde{U}_j$  gilt:

$$\langle \tilde{u}, \varphi_l \rangle = 0 \quad (l = N+2-n, \dots, N).$$

Weiter setzen wir  $w := \sum_{j=1}^n c_j W_j$ .

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u} - \rho w, \tilde{u} - \rho w) &= \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{u}) - 2\rho \langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle + \rho^2 \mathcal{M}_\gamma(w, w) \\ &= \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{u}) - 2\rho \langle \tilde{v}, \tilde{v} \rangle + \rho^2 \langle \tilde{u}, w \rangle \\ &\geq \sum_{j=1}^{\infty} (\lambda_j + \gamma) |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 - 2\rho \sum_j^{\infty} |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 + \rho^2 \sum_{j=1}^{\infty} \langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle \underbrace{\overline{\langle w, \varphi_j \rangle}}_{\substack{= \frac{1}{\lambda_j + \gamma} \mathcal{M}_\gamma(\varphi_j, w) \\ \langle \varphi_j, \tilde{u} \rangle}} \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \left( \lambda_j + \gamma - 2\rho + \frac{\rho^2}{\lambda_j + \gamma} \right) |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 \\ &\geq \sum_{j=1}^{N+1-n} \frac{1}{\lambda_j + \gamma} (\lambda_j + \gamma - \rho)^2 |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 \\ &= \sum_{j=1}^{N+1-n} \underbrace{\left( \frac{\rho}{\lambda_j + \gamma} - 1 \right)}_{\geq \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1} (\rho - (\lambda_j + \gamma)) |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 \\ &\geq \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \sum_{j=1}^{N+1-n} (\rho - (\lambda_j + \gamma)) \underbrace{|\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2}_{=0 \text{ für } j=N+2-n, \dots, N} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \sum_{j=1}^N \underbrace{(\rho - (\lambda_j + \gamma))}_{\leq \lambda_{N+1} + \gamma} |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 \\
&\geq \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \sum_{j=1}^{\infty} (\rho - (\lambda_j + \gamma)) |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2 \\
&= \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \left[ \rho \langle \tilde{u}, \tilde{u} \rangle - \underbrace{\sum_{j=1}^{\infty} (\lambda_j + \gamma) |\langle \tilde{u}, \varphi_j \rangle|^2}_{\geq -\mathcal{M}_\gamma(\tilde{u}, \tilde{u})} \right] \\
&\geq \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \left[ \sum_{j,l=1}^n c_j \bar{c}_l \underbrace{(\rho \langle \tilde{U}_j, \tilde{U}_l \rangle - \mathcal{M}_\gamma(\tilde{U}_j, \tilde{U}_l))}_{=-\mu_j \delta_{jl}} \right] \\
&\geq - \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \mu_n \sum_{j,l=1}^n |c_j|^2 \\
&= -\mu_n \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \sum_{j,l=1}^n c_j \bar{c}_l \underbrace{\mathcal{M}_\gamma(\tilde{U}_j - \rho W_j, \tilde{U}_j - \rho W_j)}_{=\delta_{jl}} \\
&= -\mu_n \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right) \mathcal{M}_\gamma(\tilde{u} - \rho w, \tilde{u} - \rho w).
\end{aligned}$$

Die erhaltene Ungleichung

$$1 \geq -\mu_n \left( \frac{\rho}{\lambda_{N+1-n} + \gamma} - 1 \right)$$

ist äquivalent zu

$$\lambda_{N+1-n} \geq \rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \mu_n}$$

und der Satz ist bewiesen.  $\square$

*Beweis der Goerisch-Erweiterung (Satz 2.4.2).* Sei  $u \in \mathbb{C}^N$ . Wir setzen

$$\tilde{u} := \sum_{t=1}^N u_t \varphi_t \in D(\mathcal{M}), \quad w := \sum_{t=1}^N u_t w_t \in D(\mathcal{M}), \quad \hat{w} := \sum_{t=1}^N u_t \hat{w}_t \in X.$$

Da  $b$  positiv semidefinit ist, folgt:

$$\begin{aligned} 0 &\leq b(\hat{w} - Tw, \hat{w} - Tw) \\ &= b(\hat{w}, \hat{w}) - \underbrace{b(\hat{w}, Tw)}_{\mathcal{M}_\gamma(w, w)} - \underbrace{b(Tw, \hat{w})}_{\mathcal{M}_\gamma(w, w)} + \underbrace{b(Tw, Tw)}_{\mathcal{M}_\gamma(w, w)} \\ &= b(\hat{w}, \hat{w}) - \mathcal{M}_\gamma(w, w) \\ &= u^T \hat{A}_3 u - u^T A_3 \bar{u} = u^T (\hat{A}_3 - A_3) \bar{u}. \end{aligned} \tag{14.1}$$

Somit ist die Differenz  $\hat{A}_3 - A_3$  positiv semidefinit.

$\mu_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) seien die Eigenwerte von

$$(A_1 + (\gamma - \rho)A_2)u = \mu(A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3)$$

aus dem Temple-Lehmann-Verfahren und

$\hat{\mu}_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) seien die Eigenwerte von

$$(A_1 + (\gamma - \rho)A_2)u = \hat{\mu}(A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 \hat{A}_3)$$

aus dem Lehmann-Goerisch-Verfahren.

Da  $A_1 + (\gamma - \rho)A_2$  negativ definit,  $A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3$  positiv definit und  $\hat{A}_3 - A_3$  positiv semidefinit ist, gilt:

$$\begin{aligned} \mu_n &= \min_{U \subset \mathbb{C}^N, \dim U = n} \max_{u \in U \setminus \{0\}} \frac{u^T (A_1 + (\gamma - \rho)A_2) \bar{u}}{u^T (A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 A_3) \bar{u}} \\ &\leq \min_{U \subset \mathbb{C}^N, \dim U = n} \max_{u \in U \setminus \{0\}} \frac{u^T (A_1 + (\gamma - \rho)A_2) \bar{u}}{u^T (A_1 + (\gamma - 2\rho)A_2 + \rho^2 \hat{A}_3) \bar{u}} = \hat{\mu}_n \end{aligned}$$

Wegen  $\mu_n \leq \hat{\mu}_n$  für  $n \in 1, \dots, N$  folgt:

$$\rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \mu_n} \geq \rho - \gamma - \frac{\rho}{1 - \hat{\mu}_n}.$$

Deshalb liefert die Goerisch-Erweiterung des Temple-Lehmann-Verfahrens untere Schranken.  $\square$

# Symbolverzeichnis

|                                          |                                                                                                                                                                                                 |
|------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $K$                                      | $= (-\pi, \pi]^2$ : Brillouinzone                                                                                                                                                               |
| $\Omega$                                 | $= (0, 1)^2$ : Wigner-Seitz-Zelle bzw. Periodizitätszelle                                                                                                                                       |
| $L^2_{\epsilon(\cdot, \lambda)}(\Omega)$ | $= \left\{ u : \Omega \mapsto \mathbb{R}, u \text{ ist Lebesgue-messbar} : \int_{\Omega} \epsilon(x, \lambda)  u ^2 dx < \infty, \lambda \in \mathbb{R} \right\}$                               |
| $H^m(\Omega)$                            | $= \{ u \in L^2(\Omega) : u \text{ } \alpha\text{-mal schwach differenzierbar und}$<br>$D^\alpha u \in L^2(\Omega) \text{ für alle } \alpha \in \mathbb{N}_0^n \text{ mit }  \alpha  \leq m \}$ |
| $H^m_{\text{loc}}(\Omega)$               | $= \{ u : \Omega \mapsto \mathbb{R}, u \text{ ist Lebesgue-messbar} : \text{für jede kompakte Teilmenge}$<br>$K \subset \mathbb{R}^2 \text{ ist } u _K \in H^m(K) \}$                           |
| $H^m(\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2)$         | $= \{ u \in H^m_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2) : u(x+y) = u(x) \text{ für alle } y \in \mathbb{Z}^2 \text{ und fast alle } x \in \Omega \}$                                                         |
| $H^m_{\text{per}}(\Omega)$               | $= \{ u _{\Omega} : u \in H^m(\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) \}$                                                                                                                                    |

# Literaturverzeichnis

- [Beh] BEHNKE, H.; MERTINS, U. ; WIENERS, C.: Eigenvalue inclusions via domain decomposition. In: Proc. R Soc. Lond. A 456 (2000), S. 2717-2730
- [Behn] BEHNKE, H.; GOERISCH, F.: Inclusions for eigenvalues of selfadjoint problems. In: Topics in validated computations (1994), S. 277-322
- [Bra] BRAESS, D.: Finite Elemente - Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie. 4. Aufl. Berlin, Springer, 2007
- [Bre] BREUER, B.; HORÁK, J.; MCKENNA, P. J. ; PLUM, M.: A computer-assisted existence and multiplicity proof for travelling waves in a nonlinearly supported beam. In: Journal of Differential Equations 224 (2006), S. 60-97
- [Eng] ENGSTRÖM, C.; RICHTER, M.: On the Spectrum of an Operator Pencil with Applications to Wave Propagation in Periodic and Frequency Dependent Materials. In: SIAM Journal of Applied Mathematics 70 (2009), S. 231-247
- [Fig] FIGOTIN, A.; KUCHMENT, P.: Band-Gap Structure of Spectra of Periodic Dielectric and Acoustic Media. II. Two-Dimensional Photonic Crystals. In: SIAM Journal on Applied Mathematics 56(6) (1996), S. 1561-1620
- [Ger] GERTHSEN, C.: Physik. 20. Aufl., Berlin, Heidelberg, Springer, 1999
- [Hac] HACKBUSCH, W.: Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen. Stuttgart, Teubner, 1986

- [Hoa] HOANG, V.; PLUM, M. und WIENERS, C.: A computer-assisted proof for photonic band gaps. In: *Z. Angew. Math. Phys.* 60 (2009), S. 1-18
- [Inu] INUI, T.; TANABE, Y.; ONODERA, Y.: *Group theory and its applications in physics*. Berlin, Springer, 1990
- [Jac] JACKSON, J. D.: *Classical electrodynamics*. New York, Wiley, 1999
- [Joa] JOANNOPOULOS, J. D.; JOHNSON, S. G.; WINN, J. N. ; MEADE, R. D.: *Photonic Crystals - Molding the Flow of Light*. 2. Aufl. Princeton, Princeton University Press, 2008
- [Kat] KATO, T.: *Perturbation theory for linear operators*. Berlin, Springer, 1995
- [Kop] KOPITZKI, K.; HERZOG, P: *Einführung in die Festkörperphysik*. 5. Aufl. Stuttgart, Teubner, 2004
- [Kuc] KUCHMENT, P.: *The Mathematics of Photonic Crystals*. In: *Mathematical modeling in optical science*, Philadelphia, SIAM (2001), S. 207-266
- [Lar] LARSSON, S.; THOMÉE, V.: *Partielle Differentialgleichungen und numerische Methoden*. Berlin, Springer, 2005
- [Mar] MARKIEWICZ, M.; VOSS, H.: A local restart procedure for iterative projection methods for nonlinear symmetric eigenproblems. In: *Proceeding of ALGORITHMY (2005)*, S. 212-221
- [Meh] MEHRMANN, V.; VOSS, H.: Nonlinear Eigenvalue Problems: A Challenge for Modern Eigenvalue Methods. In: *Mitteilungen der Gesellschaft für Angewandte Mathematik and Mechanik* 27 (2005), S. 121-151.
- [Mon] MONK, P.: *Finite Element Methods for Maxwell's Equations*. Oxford, Clarendon Press, 2003
- [Plu] PLUM, M.: Guaranteed Numerical Bounds for Eigenvalues. In: *Lecture notes in pure and applied mathematics* 191 (1996), S. 313 ff.

- [PluE] PLUM, M.: Eigenvalue inclusions for second-order ordinary differential operators by a numerical homotopy method. In: ZAMP 41 (1990), S. 205-226.
- [PluV] PLUM, M.: Computer-assisted proofs for partial differential equations (Vorlesungsmitschrieb). KIT - Fakultät für Mathematik, Sommersemester 2008
- [Pro] SCHARF, R.: Photonische Kristalle - Optische Materialien für das 21. Jahrhundert. Stand: 1. Juli 2003. URL: <http://www.prophysik.de/Phy/leadArticle.do?laid=2543> (Abruf am 10. September 2008)
- [Qua] ROSENBERG, M.: Kieselalgen und photonische Kristalle. Stand: 17. Juni 2003. URL: <http://www.wdr.de/tv/quarks/sendungsbeitraege/2003/0617/007-licht.jsp> (Abruf am 10. September 2008)
- [Sal] SALEH, B. E.; TEICH, M. C.: Fundamentals of photonics. Hoboken, New Jersey, Wiley, 2007
- [Spe] SPENCE, A.; POULTON, C.: Photonic band structure calculations using nonlinear eigenvalue techniques. In: Journal of Computational Physics 204 (2005), S. 65-81.
- [Zim] ZIMMERMANN, S.; MERTINS, U.: Variational Bounds to Eigenvalues of Self-Adjoint Eigenvalue Problems with Arbitrary Spectrum. In: Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen 14(2) (1995), S. 327-345