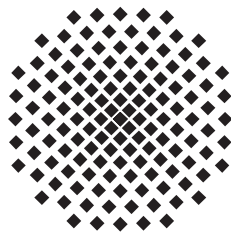


# Harmonic-Inversion-Analyse exzeptioneller Punkte in Resonanzspektren

Bachelorarbeit von  
**Jacob Cornelius Fuchs**

6. August 2013

Prüfer: Apl. Prof. Dr. Jörg Main



1. Institut für Theoretische Physik  
Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Harmonische Inversion</b>	<b>3</b>
2.1. Ziel der Harmonischen Inversion . . . . .	3
2.2. Harmonische Inversion im nicht entarteten Fall . . . . .	3
2.2.1. Fouriertransformation des Signals . . . . .	6
2.2.2. Lösung der nichtlinearen Gleichungen . . . . .	7
2.3. Erweiterung der Harmonischen Inversion auf den entarteten Fall . . . . .	10
2.3.1. Fouriertransformation des Signals . . . . .	10
2.3.2. Lösung der nichtlinearen Gleichungen . . . . .	12
2.3.3. Zusammenfassung: Harmonische Inversion im entarteten Fall . . . . .	19
2.3.4. Allgemeines zur Handhabung . . . . .	21
<b>3. Anwendung der Harmonischen Inversion auf Beispielspektren</b>	<b>25</b>
3.1. Vergleich der Anzahl der verwendeten Koeffizienten . . . . .	25
3.2. Erkennen der zusätzlichen Resonanzen . . . . .	29
<b>4. Resonanzspektren des Wasserstoffatoms</b>	<b>33</b>
4.1. Exzeptionelle Punkte beim Wasserstoffatom in gekreuzten Feldern . . . . .	33
4.2. Analyse des Photoionisationswirkungsquerschnittes . . . . .	35
<b>5. Zusammenfassung</b>	<b>41</b>
<b>A. Mathematische Hilfsmittel und Herleitungen</b>	<b>43</b>
A.1. Stirlingzahlen zweiter Art . . . . .	43
A.2. Herleitung der Ableitungsformel . . . . .	44
A.3. Herleitung der Reihenformel . . . . .	45
A.4. Koeffizienten . . . . .	46
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>47</b>
<b>Danksagung</b>	<b>49</b>



# 1. Einleitung

In der gesamten Physik treten immer wieder Lorentzkurven auf. Zum Beispiel sind aufgrund der endlichen Lebensdauer der Zustände die Spektrallinien nicht beliebig scharf, sondern weisen ein Lorentzprofil auf. Außerdem liegen oft durch experimentelle Messungen oder numerische Berechnungen Spektren vor, die aus solchen Lorentzkurven bestehen. Aus diesen Spektren sollen dann die entsprechenden Parameter der enthaltenen Peaks (wie Lage oder Breite) bestimmt werden. Eine Möglichkeit, dies zu tun, bietet die Harmonische Inversion (siehe auch [1–3]).

In der Quantenmechanik werden auch Systeme betrachtet, die sich durch nicht hermitesche Operatoren beschreiben lassen. An sog. exzeptionellen Punkten können dabei Entartungen auftreten, bei denen nicht nur die Eigenwerte, sondern auch die Eigenzustände entarten. Diese wirken sich auf die entsprechenden Spektren aus, sodass nicht nur Lorentzkurven, sondern auch Entartungen von diesen auftreten können. In dieser Arbeit soll die Harmonische Inversion so erweitert werden, dass sie sich auch auf Spektren anwenden lässt, die Entartungen beinhalten (Genauerer zu den hier untersuchten Entartungen wird in Abschnitt 2.3 beschrieben). Dazu werden die auftretenden Formeln zur Berechnung der Parameter entsprechend erweitert.

Die Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: In Kapitel 2 wird die Methode der Harmonischen Inversion dargelegt. Nach einer kurzen Einführung (Abschnitt 2.1) und anschließender Darstellung der Harmonischen Inversion im nicht entarteten Fall (Abschnitt 2.2) wird in Abschnitt 2.3 die Methode auf den entarteten Fall verallgemeinert. Im darauffolgenden Kapitel wird die Analyse von zwei selbst erstellten Beispielspektren aufgeführt. Dies dient zum einen dem Zweck, das erweiterte Verfahren zu testen, zum anderen, um sich mit deren Umgang ein wenig vertraut zu machen. Schließlich wird (in Kapitel 4) die Untersuchung eines Spektrums aus der Physik vorgenommen, nämlich eines Resonanzspektrums eines Wasserstoffatoms in statischen elektrischen und magnetischen Feldern. Bei diesem physikalischen System treten die oben erwähnten exzeptionellen Punkte auf (siehe [4–6]).



## 2. Harmonische Inversion

### 2.1. Ziel der Harmonischen Inversion

Die Harmonische Inversion ist ein nichtlineares (numerisches) Verfahren mit dem Ziel, aus einem gegebenen Spektrum sowohl die Lage als auch die Amplituden der enthaltenen Resonanzen mit hoher Auflösung zu entnehmen. Das Spektrum soll dabei auf äquidistanten Gitterpunkten gegeben sein. Die enthaltenen Resonanzen sollten komplexe Lorentzkurven sein oder zumindest sollte deren Fouriertransformierte (näherungsweise) die Form einer komplexen Exponentialfunktion besitzen. Eine genauere Diskussion der Form des Eingangssignals ist in den Abschnitten 2.2 und 2.3 zu finden.

Ein Vorteil der Harmonischen Inversion ist derjenige, dass die Harmonische Inversion auch solche Resonanzen gut auflöst, die nahe beieinander liegen oder sogar denselben Realteil besitzen. Zudem muss die Anzahl der erhaltenen Resonanzen nicht unbedingt bekannt sein (vgl. Abschnitt 2.3.4). Da bei der Harmonischen Inversion das Signal zuerst fouriertransformiert wird (wobei z. B. die Position eines Lorentzpeaks im Spektrum in die Frequenz einer Schwingung umgewandelt wird, vgl. Abschnitt 2.2), werden die Position und die Breite der Resonanzen sehr gut aufgelöst. Allerdings ist sie dafür auf Spektren mit obiger Form beschränkt.

Die Harmonische Inversion kann auch zur semiklassischen Quantisierung chaotischer Systeme verwendet werden. Näheres dazu ist in [2] und [1] zu finden.

### 2.2. Harmonische Inversion im nicht entarteten Fall

Wie oben gesagt, soll an ein gegebenes Spektrum  $G(w)$  eine Anpassung durchgeführt werden. Dabei geht man davon aus, dass das Spektrum eine Summe von (nicht entarteten) komplexen Lorentzkurven ist, sodass die Anpassung (im nicht entarteten Fall) von der Form

$$G(w) = \sum_{k=1}^K \frac{d_k}{w - w_k} \quad (2.1)$$

ist. Ziel der Anpassung ist es, die Parameter  $w_k$  und  $d_k$  zu bestimmen. Dabei beschreibt  $K$  die Anzahl der enthaltenen Resonanzen und die Parameter  $w_k$  und  $d_k$  die Position bzw. Amplitude der  $k$ -ten Resonanz. Um Divergenzen zu vermeiden, sollten die Resonanzen nicht auf der reellen Achse liegen, d. h., es sollte  $\text{Im}(w_k) \neq 0$  sein. Auch die Amplituden können komplex sein, sodass auch das Spektrum komplex sein kann, auch wenn es nur an reellen Stellen ausgewertet wird ( $\text{Im}(w) = 0$ ).

Betrachtet man eine einzelne Resonanz  $w_k$ , so erhält man als Spektrum

$$\begin{aligned}
 G(w) &= \frac{d_k}{w - w_k} = \frac{(d_{k,r} + i d_{k,i}) \cdot (w - w_{k,r} + i w_{k,i})}{(w - w_{k,r})^2 + (w_{k,i})^2} \\
 &= \underbrace{\frac{d_{k,r}(w - w_{k,r}) - d_{k,i}w_{k,i}}{(w - w_{k,r})^2 + (w_{k,i})^2}}_{\text{Re}(G(w))} + i \underbrace{\frac{d_{k,r}w_{k,i} + d_{k,i}(w - w_{k,r})}{(w - w_{k,r})^2 + (w_{k,i})^2}}_{\text{Im}(G(w))}, \tag{2.2}
 \end{aligned}$$

wobei  $w_{k,r} = \text{Re}(w_k)$  und  $w_{k,i} = \text{Im}(w_k)$  usw. Ist nun  $d_{k,r} = 0$ , so stellt der Realteil  $\text{Re}(G(w))$  gerade eine (reelle) Lorentzkurve dar. Ein Beispiel einer solchen Kurve mit  $d_{k,r} = 0$  ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Der Imaginärteil lässt sich in diesem Fall eliminieren durch Addieren einer zweiten Resonanz, die das komplex konjugiert obiger Resonanz darstellt (d. h. sowohl die Amplitude als auch die Position werden komplex konjugiert). Es ist aber zu beachten, dass sich dabei das Spektrum verdoppelt (also das so erhaltene reelle Spektrum das doppelte des Realteils obigen Spektrums ist).

In der Darstellung von Gleichung (2.2) lässt sich außerdem erkennen, dass der Realteil von  $w_k$  die Position der Resonanz bestimmt und der Imaginärteil von  $w_k$  die Breite. Bei einer reellen Lorentzkurve beträgt die Breite<sup>1</sup>  $|2 w_{k,i}|$ .

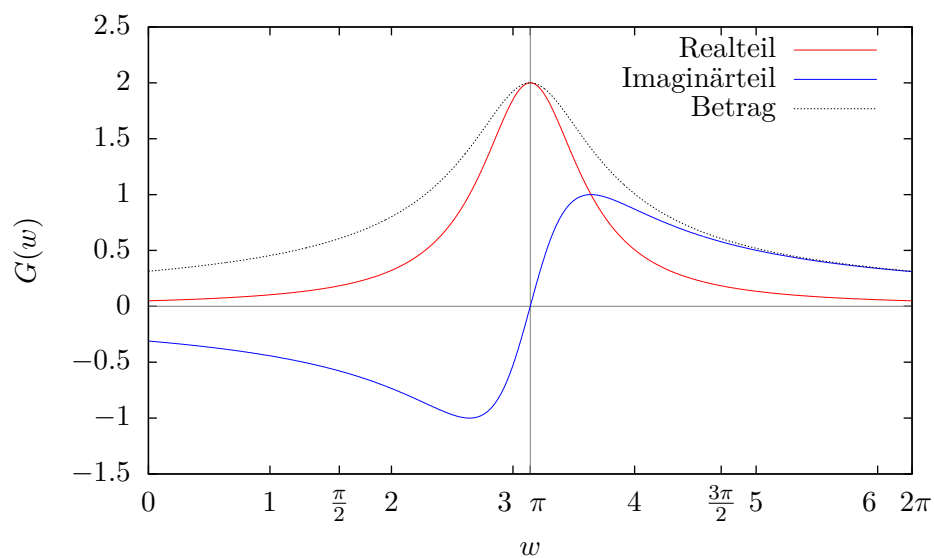
In der Physik (v. a. in der Quantenmechanik) sind oft Spektren in Abhängigkeit der Energie gegeben. Die Resonanzen sind dabei Energieeigenwerte, deren Imaginärteil die Breite der Resonanz beschreibt. In der Quantenmechanik stellt dann die Fouriertransformierte das entsprechende Zeitverhalten dar – hier eine gedämpfte<sup>2</sup> Schwingung (vgl. Abschnitt 2.2.1 oder [2]). Die Fouriertransformierte der Lorentzkurve aus Abbildung 2.1 ist in Abbildung 2.1b dargestellt. Der Realteil  $\text{Re}(w_k)$ , der vorher die Lage der Resonanz beschrieben hat, bestimmt nun die Frequenz dieser Schwingung; der Imaginärteil  $\text{Im}(w_k)$ , der vorher die Breite beschrieben hat, bestimmt nun die Dämpfung (bzw. in der Quantenmechanik die Lebensdauer des Zustandes).

Die generelle Vorgehensweise bei der Harmonischen Inversion ist folgende: Zuerst wird das Spektrum fouriertransformiert; die Fouriertransformierte ist wieder auf einem äquidistanten Gitter gegeben. Durch Vergleich der Fouriertransformierten des gegebenen Signals mit der Transformierten des Spektrums aus Gleichung (2.1) erhält man ein nichtlineares Gleichungssystem. Aus dessen Lösung ergeben sich die gesuchten Parameter  $w_k$  und  $d_k$ . Die Darstellung des Verfahrens in diesem Abschnitt 2.2 orientiert sich an [2].

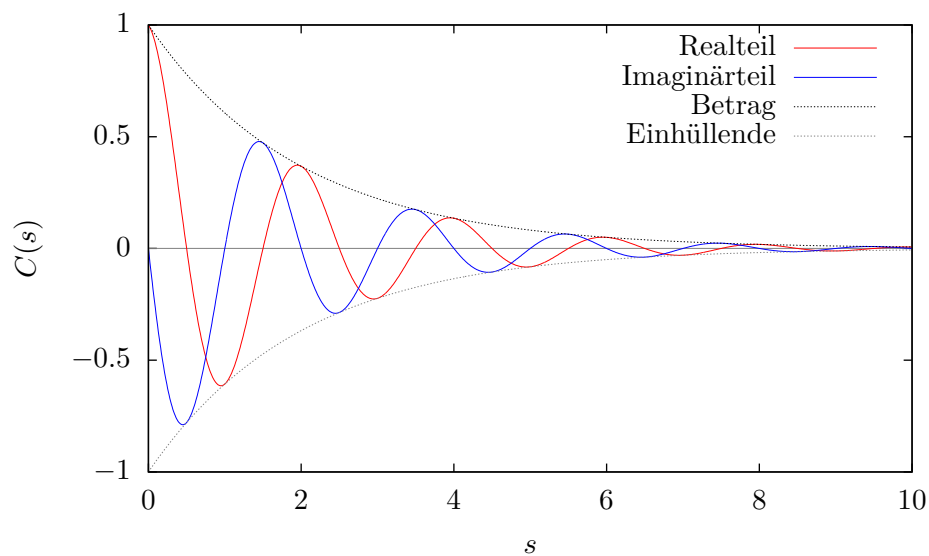
<sup>1</sup>Mit „Breite“ ist die volle Halbwertsbreite gemeint.

<sup>2</sup>Die Schwingung ist gedämpft für  $\text{Im}(w_k) < 0$ . Für  $\text{Im}(w_k) > 0$  wächst die Schwingung exponentiell mit der Zeit, was i. d. R. unphysikalisch ist.





(a) komplexe Lorentzkurve



(b) Fouriertransformierte

**Abb. 2.1.:** Beispiel einer komplexen Lorentzkurve Gleichung (2.2) und deren Fouriertransformierte nach Gleichung (2.3) mit  $w_k = \pi - 0.5i$  und  $d_k = i$

### 2.2.1. Fouriertransformation des Signals

Wie oben beschrieben wird das Spektrum zuerst fouriertransformiert. Für die Fouriertransformierte  $C(s)$  von  $G(w)$  gilt:

$$\begin{aligned} C(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(w) \cdot \exp(-iws) dw \\ &= \sum_{k=1}^K d_k \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w - w_k} \cdot \exp(-iws) dw. \end{aligned}$$

Die Fouriertransformation lässt sich mittels der Residuen der einzelnen Summanden berechnen. Als Ergebnis erhält man (s. [2]):

$$C(s) = \sum_{k=1}^K d_k \cdot (-i) \exp(-i w_k s). \quad (2.3)$$

#### Begrenzung des Spektrums

Das gegebene Signal ist oftmals nicht auf der ganzen reellen Achse bekannt, sondern nur auf einem Intervall  $[w_-, w_+]$ , oder soll auf ein solches Intervall eingeschränkt werden. Sind die Resonanzen  $w_k$ , die in dem Intervall liegen, nicht zu breit (also an den Rändern schon stark genug abgefallen), so lässt sich für diese die Abschätzung

$$\int_{w_-}^{w_+} \frac{1}{w - w_k} \cdot \exp(-iws) dw \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{w - w_k} \cdot \exp(-iws) dw$$

vornehmen. Für die anderen Resonanzen gilt dann näherungsweise

$$\int_{w_-}^{w_+} \frac{1}{w - w_k} \cdot \exp(-iws) dw \approx 0.$$

Zur Summe geben dann jedoch nur diejenigen  $w_k$  einen Beitrag, die im Intervall  $[w_-, w_+]$  liegen. Damit folgt für die Fouriertransformierte:

$$\begin{aligned} C(s) &\approx \frac{1}{2\pi} \int_{w_-}^{w_+} G(w) \cdot \exp(-iws) dw \\ &\approx \sum_{k \in M} d_k \cdot (-i) \exp(-i w_k s) \end{aligned}$$

mit

$$M = \{k \in \mathbb{N} \mid 1 \leq k \leq K \text{ und } w_k \in [w_-, w_+]\}.$$

### Numerische Behandlung der Fouriertransformation

Da man numerisch die Fouriertransformation nicht exakt berechnen kann, muss man sich der FFT („fast Fourier transform“) behelfen. Dazu nähert man das Integral über das Intervall  $[w_-, w_+]$  als Summe über  $N$  Stützstellen  $w_- + \sigma \Delta w$ , wobei  $\sigma = 0, 1, \dots, N - 1$  und  $\Delta w = (w_+ - w_-)/N$ :

$$\begin{aligned} C(s) &\approx \frac{1}{2\pi} \int_{w_-}^{w_+} G(w) \cdot \exp(-iws) dw \\ &\approx \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma=0}^{N-1} G(w_- + \sigma \Delta w) \cdot \exp(-i s w_-) \exp(-i \sigma \Delta w). \end{aligned}$$

Die Schrittweite  $\Delta w$  ist (meistens) durch das äquidistante Gitter gegeben, auf dem das Spektrum bekannt ist, ebenso die Anzahl  $N$  der Stützstellen. Wertet man die Fouriertransformierte ebenfalls auf  $N$  Gitterpunkten  $n\tau$  aus, so erhält man:

$$C(n\tau) \approx \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma=0}^{N-1} G(w_- + \sigma \Delta w) \cdot \exp(-i s w_-) \exp(-i n \sigma \tau \Delta w)$$

bzw. durch die Wahl  $\tau \cdot (w_+ - w_-) = 2\pi$ :

$$C(n\tau) \approx \frac{\exp(-i s w_-)}{2\pi} \cdot \sum_{\sigma=0}^{N-1} G(w_- + \sigma \Delta w) \cdot \exp\left(-2\pi i \frac{n\sigma}{N}\right).$$

Dies entspricht – ohne den letzten Faktor – der FFT. Bei der Transformation des Signals kann der Faktor  $\exp(-i s w_-)$  auch vernachlässigt werden, wenn man ihn später als Verschiebung der erhaltenen Resonanzen berücksichtigt.

#### 2.2.2. Lösung der nichtlinearen Gleichungen

Bei der Transformation des gegebenen Spektrums erhält man also wieder ein Signal  $c_n$ , das auf einem äquidistanten Gitter gegeben ist. Dieses lässt sich gleichsetzen mit der Transformation der Funktion  $G(w)$ , die an den gleichen Stellen ausgewertet wird:

$$c_n = C(n\tau) = \sum_{k=1}^K (-i d_k) \cdot (\exp(-i w_k \tau))^n.$$

Dadurch erhält man ein nichtlineares Gleichungssystem von  $N$  Gleichungen. Mit den Abkürzungen  $\hat{d}_k = -i d_k$  und  $z_k = \exp(-i w_k \tau)$  kann dieses folgendermaßen geschrieben werden:

$$c_n = \sum_{k=1}^K \hat{d}_k z_k^n \quad \text{für } n = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (2.4)$$

Da es insgesamt  $2K$  Unbekannte gibt, sollte  $N = 2K$  sein. Ist  $N$  größer, so kann man z. B. auch nur die ersten  $2K$  Werte zur Lösung der Gleichung verwenden.

Zur Lösung dieser Gleichungen gibt es verschiedene Ansätze. Im folgenden wird jedoch nur die Padé-Näherung kurz dargelegt, da sich diese Methode sehr gut zur Verallgemeinerung auf den entarteten Fall eignet. Andere Methoden werden z. B. in [2] oder [3] aufgezeigt.

### Padé-Näherung

Bei der Padé-Näherung geht man davon aus, man hätte unendlich viele Koeffizienten  $c_n$ , aus denen sich eine konvergente Laurent-Reihe formen lässt. Dadurch erhält man eine Funktion  $g(z)$  mit

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{-n}.$$

Setzt man Gleichung (2.4) ein, so erhält man im entsprechenden Konvergenzgebiet mithilfe der geometrischen Reihe:

$$\begin{aligned} g(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^K \hat{d}_k (z_k/z)^n = \sum_{k=1}^K \frac{\hat{d}_k}{1 - z_k/z} \\ &= \sum_{k=1}^K \frac{\hat{d}_k z}{z - z_k}. \end{aligned}$$

Diese Funktion lässt sich ebenso darstellen als Quotient zweier Polynome, die beide den Grad  $K$  besitzen:

$$g(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}. \quad (2.5)$$

Dabei ist

$$P(z) = \sum_{k=1}^K b_k z^k \quad \text{und} \quad Q(z) = \sum_{k=1}^K a_k z^k - 1. \quad (2.6)$$

Die Koeffizienten dieser Polynome erhält man mit der Padé-Approximation. Nach [2] gilt (vgl. auch [7, S. 200ff]):

$$c_n = \sum_{k=1}^K a_k c_{n+k} \quad \text{und} \quad b_k = \sum_{m=0}^{K-k} a_{k+m} c_m; \quad (2.7)$$

die Koeffizienten  $a_k$  lassen sich also als Lösung obigen linearen Gleichungssystems errechnen und die Koeffizienten  $b_k$  direkt aus den Koeffizienten  $a_k$  und  $c_n$ .

Die Lösungen  $z_k$  von Gleichung (2.4) sind dann die Polstellen der Funktion  $g(z)$ , also die Nullstellen des Polynoms  $Q(z)$ . Diese lassen sich durch einen geeigneten Algorithmus numerisch berechnen. Eine Möglichkeit dazu ist das Bestimmen der Eigenwerte der oberen Hessenbergmatrix

$$A = \begin{pmatrix} -a_{K-1}/a_K & -a_{K-2}/a_K & \cdots & -a_1/a_K & 1/a_K \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

(s. [7, S. 375f]): Da das charakteristische Polynom der Matrix gerade das Polynom  $Q(z)$  ist, sind die Eigenwerte der Matrix die gesuchten Nullstellen. Nach [2] soll diese Methode für einen großen Grad  $K$  (ungefähr  $K > 60$ ) numerisch stabiler sein als z. B. die Laguerre-Methode.

Sind die Polstellen  $z_k$  bekannt, so lassen sich die Amplituden aus den Residuen der Funktion  $g(z)$  bestimmen. Das Residuum  $\text{Res}(g(z); z_k)$  an der Stelle  $z_k$  beträgt nämlich  $\hat{d}_k z_k$ , sodass man für  $\hat{d}_k$  die Gleichung

$$\hat{d}_k = \frac{1}{z_k} \text{Res}(g(z); z_k) = \frac{P(z_k)}{z_k \cdot Q'(z_k)} \quad (2.9)$$

erhält ( $Q'(z_k)$  bezeichnet die erste Ableitung von  $Q(z)$  an der Stelle  $z_k$ ; da  $z_k$  hier eine Nullstelle erster Ordnung von  $Q(z)$  ist, ist  $Q'(z_k)$  ungleich null, sodass die Division möglich ist).

Durch diese Schritte wurde die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystem (im Wesentlichen) reduziert auf die Lösung eines linearen Gleichungssystem und die Nullstellenbestimmung eines Polynoms. Letztere sind dabei bekannte Probleme – im Gegensatz zur Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystem.

### Bestimmung der gesuchten Parameter

Sind die Lösungen  $\hat{d}_k$  und  $z_k$  der Gleichungen (2.4) bekannt, so erhält man die Parameter  $d_k$  und  $w_k$  aus

$$d_k = i \hat{d}_k \quad \text{und} \quad w_k = \frac{i}{\tau} \ln(z_k). \quad (2.10)$$

Wurde bei der Fouriertransformation der Faktor  $\exp(-i s w_-)$  vernachlässigt (s. Abschnitt 2.2.1), so muss man zu den nun erhaltenen Werten von  $w_k$  noch  $w_-$  hinzuaddieren.

Zusätzlich ist zu beachten, dass der natürliche Logarithmus in der komplexen Ebene nicht eindeutig ist. Somit kann es sein, dass der erhaltene Realteil von  $w_k$  um Vielfache von  $\frac{2\pi}{\tau} = w_+ - w_-$  verschoben ist. Wurde der Hauptzweig des Logarithmus so gewählt,

dass nach  $\mathbb{R} \times [0, 2\pi)$  abgebildet wird, so liegen die Realteile  $\operatorname{Re}(w_k)$  in dem Intervall  $[w_-, w_+)$ . Andernfalls müssen die  $w_k$  noch um Vielfache von  $\frac{2\pi}{\tau} = w_+ - w_-$  verschoben werden, sodass sie im Intervall  $[w_-, w_+)$  liegen.<sup>3</sup>

## 2.3. Erweiterung der Harmonischen Inversion auf den entarteten Fall

Nun soll das Verfahren der Harmonische Inversion erweitert werden auf den Fall, dass auch entartete Resonanzen im Spektrum auftreten. Diese besitzen die Form von höheren Ordnungen:

$$G(w) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} \frac{d_{k,\alpha}}{(w - w_k)^\alpha}. \quad (2.11)$$

Dabei ist der  $k$ -te Eigenwert  $r_k$ -fach entartet; insgesamt gibt es also

$$\sum_{k=1}^K r_k$$

verschiedene Summanden. Analog zum nicht entarteten Fall sollen die Parameter  $d_{k,\alpha}$  und  $w_k$  bestimmt werden. Geht man wie in vorigem Abschnitt 2.2 vor, so ist zu vermuten, dass man die Parameter  $w_k$  auch über die Nullstellen eines Polynoms erhält. Die Formeln zur Berechnung der Amplituden  $d_{k,\alpha}$  müssen jedoch entsprechend angepasst werden.

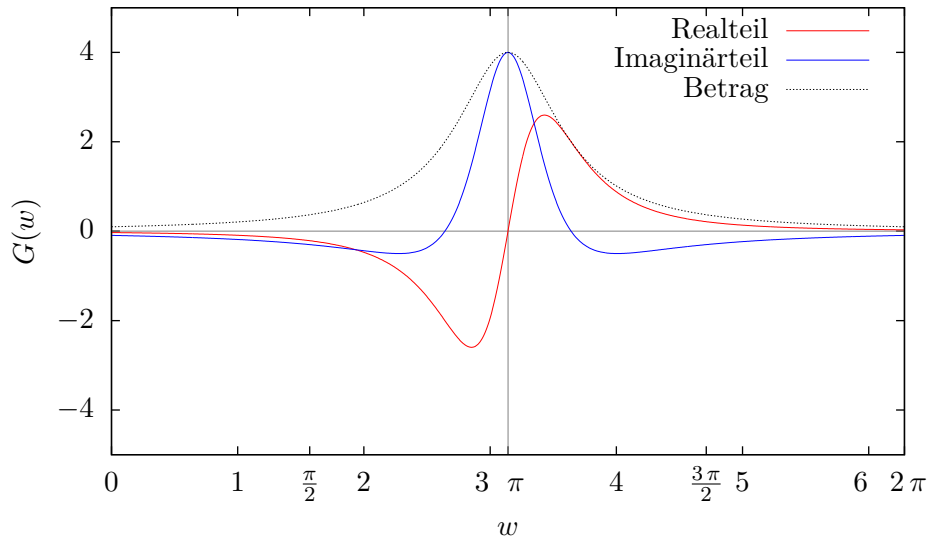
Ein Beispiel einer komplexen Lorentzkurve mit zweifacher Entartung ist in Abbildung 2.2a dargestellt. Man erkennt, dass der Imaginärteil zwei Nullstellen aufweist, also genauso viele wie der Grad der Entartung.

Bei der Fouriertransformierten erhält man zusätzlich noch einen polynomiellen Anteil zum konstanten Vorfaktor auf (vgl. nachfolgenden Abschnitt 2.3.1), wie man es auch schon von aperiodischen Grenzfall beim klassischen Harmonischen Oszillator kennt. In Abbildung 2.2b ist die Fouriertransformierte einer zweifach entarteten Resonanz dargestellt. Da bei dieser Resonanz der Term erster Ordnung null ist (d. h.  $d_{k,1} = 0$ ), ist auch der konstante Anteil des polynomiellen Vorfaktors null, sodass für  $s = 0$  die Fouriertransformierte  $C(s)$  auch null ergibt. Dies ist sehr deutlich in Abbildung 2.2b zu erkennen, nicht zuletzt auch beim Vergleich der Abbildungen 2.1b und 2.2b.

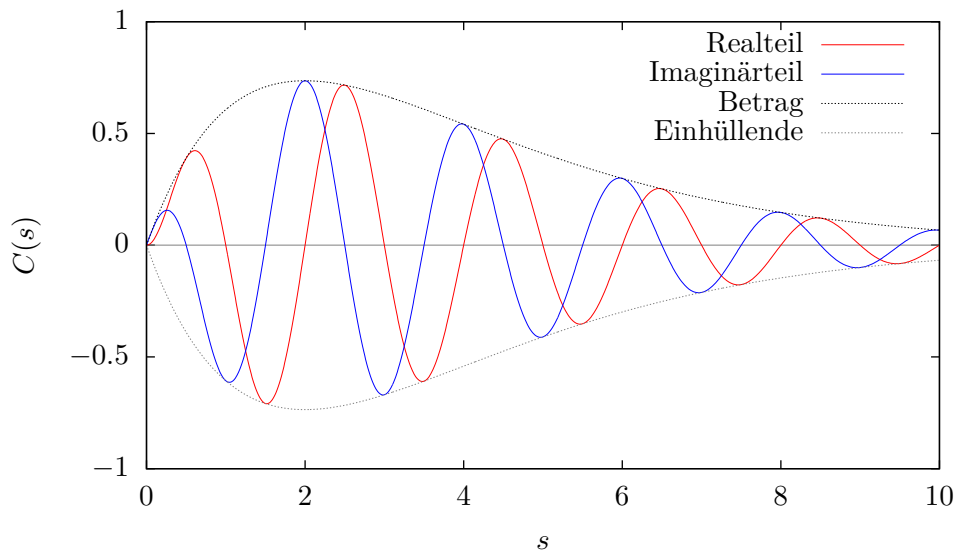
### 2.3.1. Fouriertransformation des Signals

Zuerst muss die Fouriertransformierte von  $G(w)$  berechnet werden. Diese erhält man mithilfe der Ableitungsregel für die Fouriertransformation, nach der die Differentiation

<sup>3</sup>Es sollte nicht wichtig sein, ob das Intervall linksoffen oder rechtsoffen ist, da die Fouriertransformation i. d. R. nur auf dem Intervall  $[w_-, w_+]$  erfolgt mit der Bedingung, dass die Resonanzen am Rand stark genug abgefallen sind. Somit können sie auch nicht auf dem Rand liegen.



(a) komplexe Lorentzkurve



(b) Fouriertransformierte

**Abb. 2.2.:** Beispiel einer komplexen Lorentzkurve nach Gleichung (2.11) und deren Fouriertransformierte nach Gleichung (2.12) mit einer zweifach entarteten Resonanz bei  $w_k = \pi - 0.5i$  mit den Amplituden  $d_{k,2} = -i$  und  $d_{k,1} = 0$

einer Multiplikation der Fouriertransformierten mit  $i s$  entspricht. Alle höheren Terme  $(w - w_k)^{-\alpha}$  lassen sich nämlich als Ableitung von  $(w - w_k)^{-1}$  schreiben:

$$G(w) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} d_{k,\alpha} \frac{(-1)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} \cdot \left(\frac{d}{dw}\right)^{\alpha-1} (w - w_k)^{-1}.$$

Somit erhält man:

$$\begin{aligned} C(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(w) \exp(-i w s) dw \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} d_{k,\alpha} \frac{(-1)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} (i s)^{\alpha-1} \cdot (-i) \exp(-i w_k s) \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} (-i d_{k,\alpha}) \frac{(-i s)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} \cdot \exp(-i w_k s). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Wertet man diese Funktion nun an den Stützstellen  $s = n\tau$  aus (wobei  $n \in \mathbb{N}$ ), so erhält man:

$$\begin{aligned} C(n\tau) &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} (-i d_{k,\alpha}) \frac{(-i n\tau)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!} \cdot \exp(-i w_k n\tau) \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=0}^{r_k-1} \hat{d}_{k,\alpha+1} n^\alpha z_k^n. \end{aligned}$$

Dabei ist

$$\hat{d}_{k,\alpha+1} = -i d_{k,\alpha+1} \cdot \frac{(-i \tau)^\alpha}{\alpha!}$$

und

$$z_k = \exp(-i w_k \tau).$$

### 2.3.2. Lösung der nichtlinearen Gleichungen

Wie in Abschnitt 2.2.2 erhält man  $N$  nichtlineare Gleichungen:

$$c_n = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=0}^{r_k-1} \hat{d}_{k,\alpha+1} n^\alpha z_k^n \quad \text{mit } n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.13)$$

jedoch treten hier zusätzlich Potenzen von  $n$  als Vorfaktor auf.

Die Zahl der Unbekannten  $z_k$  und  $\hat{d}_{k,\alpha}$  beträgt hierbei  $\sum_{k=1}^K (r_k + 1)$ . Da das Gleichungssystem auf eine ähnliche Art und Weise wie im vorigen Abschnitt gelöst werden soll, werden jedoch  $2 \cdot \sum_{k=1}^K r_k$  Koeffizienten benötigt. Die Funktion  $g(z)$  lässt sich nämlich



als Quotient zweier Polynome vom Grad  $\sum_{k=1}^K r_k$  schreiben, und um diese mit der Padé-Approximation zu bestimmen, wird die Kenntnis des Signals  $c_n$  für  $0 \leq n < 2 \cdot \sum_{k=1}^K r_k$  benötigt. Ist  $c_n$  auch für größere  $n$  als  $2 \cdot \sum_{k=1}^K r_k$  bekannt, so lässt sich das Signal wie im vorigen Abschnitt „abschneiden“ (d. h., es werden nur die  $c_n$  mit  $0 \leq n < 2 \cdot \sum_{k=1}^K r_k$  verwendet).

Das Lösen der Gleichungen (2.13) geschieht analog zu Abschnitt 2.2.2, jedoch müssen die Formeln entsprechend erweitert werden. Diese sollen im Folgenden hergeleitet werden.

### Padé-Näherung

Für die Funktion  $g(z)$  setzt man das gleiche wie in Abschnitt 2.2.2 an, ebenso wird Gleichung (2.13) eingesetzt. Es gilt also:

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{-n} = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=0}^{r_k-1} \hat{d}_{k,\alpha+1} \sum_{n=0}^{\infty} n^\alpha (z_k/z)^n.$$

Zur Auswertung der Reihe genügt nun nicht mehr die geometrische Reihe, sondern es muss eine erweiterte Formel verwendet werden. Für diese werden die Stirlingzahlen zweiter Art benötigt, welche sich für  $n, k \in \mathbb{N}$  durch

$$\mathcal{S}(n, k) = \frac{1}{k!} \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \binom{k}{\mu} \mu^n$$

definieren lassen, wobei aber die Konvention  $0^0 = 1$  gilt. Genauer findet man im Anhang A.1. Die Reihe ergibt dann (im entsprechenden Konvergenzgebiet)

$$\sum_{n=0}^{\infty} n^\alpha x^n = \sum_{n=0}^{\alpha} n! \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \frac{x^n}{(1-x)^{n+1}}$$

(s. Anhang A.3). Für  $g(z)$  erhält man damit

$$g(z) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=0}^{r_k-1} \hat{d}_{k,\alpha+1} \sum_{n=0}^{\alpha} n! \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \frac{(z_k/z)^n}{(1-z_k/z)^{n+1}}$$

bzw. durch Erweitern und Zusammenfassen des Zählers (ebenfalls ausführlich in Anhang A.3 zu finden)

$$\begin{aligned} g(z) &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=0}^{r_k-1} \hat{d}_{k,\alpha+1} \cdot \frac{f_{k,\alpha+1}(z)}{(1-z/z_k)^{\alpha+1}} \\ &= \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} \cdot \frac{f_{k,\alpha}(z)}{(1-z/z_k)^\alpha}. \end{aligned}$$

Die Funktion  $f_{k,\alpha}(z)$  ist dabei ein Polynom vom Grad  $\alpha$ , welches gegeben ist durch

$$f_{k,\alpha}(z) = (-1)^\alpha \cdot \sum_{\nu=0}^{\alpha-1} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot \left(\frac{z}{z_k}\right) \left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{\alpha-\nu-1}. \quad (2.14)$$

Eine genaue Herleitung ist in Anhang A.3 zu finden. Das Ergebnis lässt sich auch mithilfe der Binomischen Reihe so umformen, dass die Koeffizienten des Polynoms gut erkennbar sind. Es ist nämlich

$$\left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{\alpha-\nu-1} = \sum_{\mu=0}^{\alpha-\nu-1} \binom{\alpha-\nu-1}{\mu} \left(\frac{z}{z_k}\right)^\mu \cdot (-1)^{\alpha-\nu-1-\mu} \cdot \binom{\alpha-\nu-1}{\mu}$$

und somit erhält man für  $f_{k,\alpha}(z)$ :

$$f_{k,\alpha}(z) = \sum_{\mu=1}^{\alpha} \left(\frac{z}{z_k}\right)^\mu \cdot \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\mu+\nu} \cdot \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu}. \quad (2.15)$$

Die Funktion  $g(z)$  lässt sich auch hier auf einen gemeinsamen Hauptnenner bringen, sodass sie wieder als der Quotient zweier Polynome  $P(z)$  und  $Q(z)$  vom Grad  $\sum_{k=1}^K r_k$  dargestellt werden kann. Es gelten auch hier die Gleichungen (2.5) bis (2.7). Die gesuchten  $z_k$  sind die Nullstellen des Nennerpolynoms  $Q(z)$ , sodass sie sich wie in Abschnitt 2.2.2 berechnen lassen.

### Lösung für eine Resonanz

Zuerst sollen ein paar Schreibweisen eingeführt werden, von denen später Gebrauch gemacht wird. Die  $n$ -te Ableitung einer Funktion  $f(z)$  an der Stelle  $\omega$  wird bezeichnet durch

$$f^{(n)}(\omega) = \left(\frac{d}{dz}\right)^n f(z) \Big|_{z=\omega}.$$

Außerdem sei

$$f^{[n]}(\omega) = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\omega) = \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dz}\right)^n f(z) \Big|_{z=\omega}.$$

Mit dieser Schreibweise lautet die Leibniz-Regel für die Ableitungen höherer Ordnungen einer Funktion  $f(z) = g(z) \cdot h(z)$ :

$$f^{[l]}(\omega) = \sum_{\mu=0}^l g^{[\mu]}(\omega) \cdot h^{[l-\mu]}(\omega).$$

In Abschnitt 2.2.2 war es möglich, die Koeffizienten  $\hat{d}_{k,\alpha}$  über die Residuen von  $g(z)$  zu bestimmen. Nun ist das nicht mehr möglich, da man über das Residuum ja maximal

eine Gleichung zur Bestimmung von mehreren Unbekannten erhalte. Deshalb soll der Einfachheit halber zuerst eine einzelne Resonanz bei  $z = \omega$  betrachtet werden, die  $r$ -fach entartet ist. Außerdem wird in diesem Unterabschnitt statt  $\hat{d}_{k,\alpha}$  nur noch  $d_\alpha$  und statt  $f_{k,\alpha}(z)$  nur noch  $f_\alpha(z)$  geschrieben. Um eine spätere Verallgemeinerung auf mehrere Nullstellen zu ermöglichen, wird noch ein Summand hinzugefügt, sodass  $g(z)$  die Form

$$g(z) = \sum_{\alpha=1}^r d_\alpha f_\alpha(z) \cdot (1 - z/\omega)^{-\alpha} + \frac{p(z)}{q(z)} = \frac{P(z)}{Q(z)} \quad (2.16)$$

besitzt. Dabei wird die Annahme getroffen, dass  $p(z)$  und  $q(z)$  holomorph sind, desgleichen auch  $P(z)$  und  $Q(z)$ . Für die Berechnung der Amplituden  $d_\alpha$  ist außerdem notwendig, dass  $q^{(l)}(\omega) \neq 0$  ist für  $0 \leq l \leq r$ . Auch  $f_\alpha(z)$  ist holomorph, da es ein Polynom ist; ebenso ist  $f_\alpha(\omega) \neq 0$ , wie aus der Gleichung (2.14) bzw. den Gleichungen (2.18) und (2.19) ersichtlich ist. Durch die geeignete Wahl des freien Faktors in  $P(z)$  und  $Q(z)$  soll

$$Q(z) = -(1 - z/\omega)^r \cdot q(z)$$

gelten, damit eine ähnlich Form wie in Gleichung (2.6) gegeben ist. Für  $P(z)$  folgt dann:

$$P(z) = - \sum_{\alpha=1}^r d_\alpha f_\alpha(z) \cdot q(z) \cdot (1 - z/\omega)^{r-\alpha} - p(z) \cdot (1 - z/\omega)^r. \quad (2.17)$$

Die Funktionen  $p(z)$  und  $q(z)$  sind nicht bekannt, sodass das Ziel sein sollte, die Koeffizienten  $d_\alpha$  direkt aus den Polynomen  $P(z)$  und  $Q(z)$  zu berechnen (die Kenntnis von  $\omega$  kann hierbei vorausgesetzt werden).

Betrachtet man Gleichung (2.17), so sieht man, dass durch die Erweiterung Faktoren  $(1 - z/\omega)^\beta$  auftreten ( $\beta \in \mathbb{N}$ ). Diese besitzen eine Nullstelle bei  $\omega$ , außer für  $\beta = 0$ . Somit gibt z. B. für  $P(\omega)$  nur noch der Summand einen Beitrag, der  $d_r$  enthält:

$$\begin{aligned} P(\omega) &= - \sum_{\alpha=1}^r d_\alpha f_\alpha(\omega) \cdot q(\omega) \cdot (1 - \omega/\omega)^{r-\alpha} - p(\omega) \cdot (1 - \omega/\omega)^r \\ &= -d_r \cdot f_r(\omega) \cdot q(\omega). \end{aligned}$$

Um auch die anderen  $d_\alpha$  berechnen zu können, benötigt man jedoch eine Größe, zu der auch die anderen  $d_\alpha$  einen Beitrag ergeben. Dafür eignen sich die Ableitungen von  $P(z)$  an der Stelle  $z = \omega$ . Dabei treten Ableitungen des Faktors  $(1 - z/\omega)^\beta$  auf. Die  $l$ -te Ableitung von  $(1 - z/\omega)^\beta$  ist gleich null, wenn  $l$  größer als der Grad des Polynoms ist (also  $l > \beta$ ) und wenn immer noch Faktoren von  $(1 - z/\omega)$  auftauchen, was wegen der Kettenregel für  $l < \beta$  stets der Fall ist. Für  $l = \beta$  jedoch ist die  $l$ -te Ableitung von  $(1 - z/\omega)^\beta$  gleich der  $l$ -ten Ableitung der höchsten Potenz von  $z$ , also

$$\left(\frac{d}{dz}\right)^\beta (1 - z/\omega)^\beta = \left(\frac{d}{dz}\right)^\beta (-z/\omega)^\beta = \beta! \cdot (-\omega)^{-\beta}.$$

Bei den Ableitungen von  $P(z)$  muss jedoch die Produkt- bzw. die Leibniz-Regel berücksichtigt werden, sodass auch Ableitungen von  $f_\alpha(z)$  und  $q(z)$  auftreten. Die  $l$ -te Ableitung von  $f_\alpha(z)$  an der Stelle  $z = \omega$  beinhaltet stets einen Faktor  $\omega^{-l}$  und ist genau dann negativ, wenn  $\alpha$  ungerade ist. Somit erhält man

$$f_\alpha^{[l]}(\omega) = (-1)^\alpha \omega^{-l} \gamma_\alpha^{[l]}. \quad (2.18)$$

In Anhang A.4 wird gezeigt, dass die Koeffizienten  $\gamma_\alpha^{[l]}$  geschrieben werden können als

$$\gamma_\alpha^{[l]} = \sum_{\mu=l}^{\alpha} \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \binom{\mu}{l} \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu} \cdot \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\alpha+\mu+\nu};$$

für den Spezialfall  $l = 0$  erhält man aus Gleichung (2.14):

$$\begin{aligned} \gamma_\alpha^{[0]} &= (-1)^\alpha f_\alpha^{[0]}(\omega) = \sum_{\nu=0}^{\alpha-1} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot \underbrace{\lim_{z \rightarrow \omega} \left( \frac{z}{\omega} \right) \left( \frac{z}{\omega} - 1 \right)^{\alpha-\nu-1}}_{=\delta_{\nu, \alpha-1}} \\ &= (\alpha-1)! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \alpha-1) \\ &= (\alpha-1)! \end{aligned} \quad (2.19)$$

Das verwendete Symbol  $\delta_{\mu, \nu}$  ist das Kronecker-Delta und ergibt 1 für  $\mu = \nu$ , sonst aber 0.

Die Ableitungen von  $q(z)$  an der Stelle  $z = \omega$  lassen sich über das Nennerpolynom  $Q(z)$  berechnen. Für  $l \geq r$  gilt nämlich:

$$\begin{aligned} Q^{[l]}(\omega) &= - \sum_{\mu=0}^l q^{[l-\mu]}(\omega) \cdot \frac{1}{\mu!} \underbrace{\left( \left( \frac{d}{dz} \right)^\mu (1 - z/\omega)^r \Big|_{z=\omega} \right)}_{\text{nur dann ungleich 0, wenn } \mu = r} \\ &= - \sum_{\mu=0}^l q^{[l-\mu]}(\omega) \cdot \frac{r!}{\mu!} (-\omega)^{-r} \delta_{\mu, r} \\ &= -(-\omega)^{-r} \cdot q^{[l-r]}(\omega). \end{aligned}$$

Somit ist

$$q^{[l]}(\omega) = -(-\omega)^r \cdot Q^{[l+r]}(\omega) \quad \text{für alle } l \geq 0.$$

Nun zurück zur Ableitung von  $P(z)$  an der Stelle  $z = \omega$ . Die Ableitung des letzten Summanden in Gleichung (2.17) ergibt stets null, wenn der Grad der Ableitung kleiner ist als  $r$ . Auf den vorderen Term muss die Leibniz-Regel angewandt werden. Die dabei

auftretenden Terme sind

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(l-\mu)!} \left( \left( \frac{d}{dz} \right)^{l-\mu} q(z) f_\alpha(z) \Big|_{z=\omega} \right) \\
&= \sum_{\nu=0}^{l-\mu} q^{[\nu]}(\omega) \cdot f_\alpha^{[l-\mu-\nu]}(\omega) \\
&= - \sum_{\nu=0}^{l-\mu} (-\omega)^r \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot (-1)^\alpha \omega^{\mu+\nu-l} \gamma_\alpha^{[l-\mu-\nu]} \\
&= - \sum_{\nu=0}^{l-\mu} (-1)^{\alpha+r} \omega^{r+\mu+\nu-l} \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \gamma_\alpha^{[l-\mu-\nu]}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\mu!} \left( \left( \frac{d}{dz} \right)^\mu (1-z/\omega)^{r-\alpha} \Big|_{z=\omega} \right) \\
&= \frac{1}{\mu!} \cdot (r-\alpha)! (-\omega)^{\alpha-r} \delta_{\mu, r-\alpha} \\
&= (-\omega)^{\alpha-r} \delta_{\mu, r-\alpha}.
\end{aligned}$$

Man erhält somit nur einen Beitrag für  $\mu = r - \alpha$ . Da aber bei Anwendung der Leibniz-Regel stets  $0 \leq \mu = r - \alpha \leq l$  ist, so ist dies nur für  $r - l \leq \alpha \leq r$  möglich. Damit ergibt sich (für  $l < r$ ):

$$\begin{aligned}
P^{[l]}(\omega) &= \sum_{\alpha=r-l}^r \sum_{\mu=0}^l \sum_{\nu=0}^{l-\mu} d_\alpha \cdot \omega^{r+\mu+\nu-l} \omega^{\alpha-r} \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \gamma_\alpha^{[l-\mu-\nu]} \cdot \delta_{\mu, r-\alpha} \\
&= \sum_{\alpha=r-l}^r \sum_{\nu=0}^{l+\alpha-r} d_\alpha \cdot \omega^{r+\nu-l} \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \gamma_\alpha^{[l+\alpha-r-\nu]}
\end{aligned}$$

Für  $\alpha = r - l$  muss die zweite Summe nur für  $\nu = 0$  ausgeführt werden. Somit erhält man den Koeffizienten  $d_{r-l}$  durch:

$$d_{r-l} = \frac{P^{[l]}(\omega) - \sum_{\alpha=r-l+1}^r \sum_{\nu=0}^{l+\alpha-r} d_\alpha \cdot \omega^{r+\nu-l} Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \gamma_\alpha^{[l+\alpha-r-\nu]}}{\omega^{r+l} Q^{[r]}(\omega) \cdot \gamma_{r-l}^{[0]}}.$$

Die Koeffizienten  $d_l$  können also beginnend bei  $d_r$  rekursiv berechnet werden. Durch Umbenennen des Index  $r - l$  in  $l$  erhält man:

$$\begin{aligned}
d_l &= \frac{P^{[r-l]}(\omega) - \sum_{\alpha=l+1}^r \sum_{\nu=0}^{\alpha-l} d_\alpha \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \omega^{l+\nu} \gamma_\alpha^{[\alpha-l-\nu]}}{\omega^l Q^{[r]}(\omega) \cdot \gamma_l^{[0]}} \\
&= \frac{P^{[r-l]}(\omega)}{\omega^l Q^{[r]}(\omega) \cdot \gamma_l^{[0]}} - \sum_{\alpha=l+1}^r \sum_{\nu=0}^{\alpha-l} d_\alpha \cdot \frac{\omega^\nu \gamma_\alpha^{[\alpha-l-\nu]} \cdot Q^{[r+\nu]}(\omega)}{\omega^l Q^{[r]}(\omega) \cdot \gamma_l^{[0]}}.
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von Gleichung (2.19) erhält man die endgültige Formel zur Berechnung von  $d_l$  aus  $P(z)$  und  $Q(z)$ :

$$d_l = \frac{P^{[r-l]}(\omega)}{(l-1)! \cdot \omega^l Q^{[r]}(\omega)} - \sum_{\alpha=l+1}^r \sum_{\nu=0}^{\alpha-l} d_\alpha \cdot \frac{\omega^\nu Q^{[r+\nu]}(\omega) \cdot \gamma_\alpha^{[\alpha-l-\nu]}}{(l-1)! \cdot Q^{[r]}(\omega)}. \quad (2.20)$$

### Lösung für mehrere Resonanzen

Nun zurück zu dem eigentlichen Problem, dem Lösen von Gleichung (2.13). Für die einzelnen Pole  $z_k$  lassen sich die Terme, die zu diesem Pol gehören, jeweils auf den Hauptnenner  $(1 - z/z_k)^{r_k}$  bringen, sodass man Summanden der Form

$$(1 - z/z_k)^{-r_k} \cdot \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} f_{k,\alpha}(z) (1 - z/z_k)^{r_k-\alpha} = \frac{p_k(z)}{q_k(z)}$$

erhält, wobei

$$q_k(z) = (1 - z/z_k)^{r_k} \quad \text{und} \quad p_k(z) = \sum_{\alpha=1}^{r_k} \hat{d}_{k,\alpha} f_{k,\alpha}(z) (1 - z/z_k)^{r_k-\alpha}$$

ist. Fasst man die Brüche für  $k = 2, \dots, K$  zu einem Bruch  $\tilde{p}(z)/\tilde{q}(z)$  zusammen, so erhält man für  $g(z)$  eine analoge Form zu Gleichung (2.16):

$$g(z) = \sum_{\alpha=1}^{r_1} \hat{d}_{1,\alpha} f_{1,\alpha}(z) (1 - z/z_1)^{-\alpha} + \frac{\tilde{p}(z)}{\tilde{q}(z)},$$

wobei

$$\tilde{q}(z) = \prod_{k=2}^K q_k(z) = \prod_{k=2}^K (1 - z/z_k)^{r_k}$$

und

$$\tilde{p}(z) = \sum_{k=2}^K p_k(z) \cdot \frac{\prod_{l=2}^K q_l(z)}{q_k(z)} = \sum_{k=2}^K p_k(z) \cdot \frac{\prod_{l=2}^K (1 - z/z_l)^{r_l}}{(1 - z/z_k)^{r_k}}$$

ist. Offensichtlich erfüllen  $\tilde{q}(z)$  und  $\tilde{p}(z)$  die Bedingungen, die im vorigen Unterabschnitt für  $p(z)$  und  $q(z)$  aufgestellt wurden, sodass sich Gleichung (2.20) hierher übertragen lässt. Zudem besitzt das Polynom  $Q(z)$  dann die Form

$$Q(z) = - \prod_{k=1}^K (1 - z/z_k)^{r_k}.$$

Insbesondere ist also der konstante Term gleich  $-1$ , sodass sich die Polynome  $Q(z)$  und  $P(z)$  aus den Gleichungen (2.6) und (2.7) berechnen lassen.

### 2.3.3. Zusammenfassung: Harmonische Inversion im entarteten Fall

Im entarteten Fall geschieht das Vorgehen analog zu dem im nicht entarteten Fall. Zuerst transformiert man das gegebene Spektrum  $G(w)$  mithilfe der FFT, wie es in Abschnitt 2.2.1 beschrieben ist. Aus dem erhaltenen Signal  $c_n$  auf den äquidistanten Gitterpunkten  $n\tau$  mit  $n = 0, 1, \dots, N - 1$  (wobei  $N > 2K$ ) lassen sich die Polynome  $P(z)$  und  $Q(z)$  berechnen durch

$$P(z) = \sum_{k=1}^K b_k z^k \quad \text{und} \quad Q(z) = \sum_{k=1}^K a_k z^k - 1$$

mit den Koeffizienten  $a_k$  und  $b_k$ , die man aus

$$c_n = \sum_{k=1}^K a_k c_{n+k} \quad \text{und} \quad b_k = \sum_{m=0}^{K-k} a_{k+m} c_m$$

erhält. Durch berechnen der Nullstellen  $z_k$  des Polynoms  $Q(z)$  (z. B. als Eigenwerte der in Abschnitt 2.2.2 genannten Hessenbergmatrix  $A$ ) erhält man die Lagen der Resonanzen mittels

$$w_k = \frac{i}{\tau} \ln(z_k). \quad (2.21)$$

Auch hier müssen die Parameter  $w_k$  noch gegebenenfalls verschoben werden, s. Abschnitt 2.2.2, Seite 18. Die Amplituden erhält man nun nicht mehr aus den Gleichungen (2.9) und (2.10), sondern aus

$$d_{k,\alpha} = i \hat{d}_{k,\alpha} \cdot \frac{(\alpha - 1)!}{(-i\tau)^{\alpha-1}}, \quad (2.22)$$

wobei die  $\hat{d}_{k,\alpha}$  gegeben sind durch

$$\hat{d}_{k,\alpha} = \frac{P^{[r_k-\alpha]}(z_k)}{(\alpha - 1)! \cdot z_k^\alpha Q^{[r_k]}(z_k)} - \sum_{\mu=\alpha+1}^{r_k} \sum_{\nu=0}^{\mu-\alpha} \hat{d}_{k,\mu} \cdot \frac{z_k^\nu Q^{[r_k+\nu]}(z_k) \cdot \gamma_\mu^{[\mu-\alpha-\nu]}}{(\alpha - 1)! \cdot Q^{[r_k]}(z_k)}. \quad (2.23)$$

Wie oben bezeichnet  $Q^{[r_k]}(z_k)$  die  $r_k$ -te Ableitung  $Q^{(r_k)}(z_k)$  von  $Q(z)$  an der Stelle  $z = z_k$  geteilt durch  $r_k!$  usw. Die Koeffizienten  $\gamma_\alpha^{[l]}$  lassen sich berechnen durch

$$\gamma_\alpha^{[l]} = \sum_{\mu=l}^{\alpha} \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \binom{\mu}{l} \binom{\alpha - \nu - 1}{\alpha - \nu - \mu} \cdot \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha - 1, \nu) \cdot (-1)^{\alpha+\mu+\nu}.$$

Die Werte der Koeffizienten sind für  $\alpha, l \leq 5$  in Tabelle 2.1 dargestellt.

Im Folgenden wird Gleichung (2.23) für ein paar Spezialfälle explizit angegeben. Ist eine Resonanz nicht entartet ( $r_k = 1$ ), so ergibt sich aus Gleichung (2.23) die schon bekannte Gleichung

$$\hat{d}_{k,1} = \frac{P(z_k)}{z_k Q^{[1]}(z_k)} = \frac{P(z_k)}{z_k Q^{(1)}(z_k)}.$$

**Tab. 2.1.:** Die Werte der Koeffizienten  $\gamma_\alpha^{[l]}$  für  $\alpha, l \leq 5$ 

$\gamma_\alpha^{[l]}$	$l$				
	0	1	2	3	4
$\alpha = 1$	1	1			
$\alpha = 2$	1	1			
$\alpha = 3$	2	3	1		
$\alpha = 4$	6	12	7	1	
$\alpha = 5$	24	60	50	15	1

Im Falle einer zweifach entarteten Resonanz ( $r_k = 2$ ) erhält man aus Gleichung (2.23)

$$\hat{d}_{k,2} = \frac{P(z_k)}{z_k^2 Q^{[2]}(z_k)} = \frac{2P(z_k)}{z_k^2 Q^{(2)}(z_k)}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{d}_{k,1} &= \frac{P^{[1]}(z_k)}{z_k Q^{[2]}(z_k)} - \hat{d}_{k,2} \cdot \left(1 + \frac{z_k Q^{[3]}(z_k)}{Q^{[2]}(z_k)}\right) \\ &= \frac{2P^{(1)}(z_k)}{z_k Q^{(2)}(z_k)} - \hat{d}_{k,2} \cdot \left(1 + \frac{z_k Q^{(3)}(z_k)}{3Q^{(2)}(z_k)}\right) \end{aligned}$$

Wahrscheinlich seltener tritt der Fall einer dreifachen Entartung auf, bei dem sich die Amplituden berechnen durch:

$$\begin{aligned} \hat{d}_{k,3} &= \frac{P(z_k)}{2z_k^3 Q^{[3]}(z_k)} = \frac{3P(z_k)}{z_k^3 Q^{(3)}(z_k)}, \\ \hat{d}_{k,2} &= \frac{P^{[1]}(z_k)}{z_k^2 Q^{[3]}(z_k)} - \hat{d}_{k,3} \cdot \left(3 + \frac{2z_k Q^{[4]}(z_k)}{Q^{[3]}(z_k)}\right) \\ &= \frac{6P^{(1)}(z_k)}{z_k^2 Q^{(3)}(z_k)} - \hat{d}_{k,3} \cdot \left(3 + \frac{z_k Q^{(4)}(z_k)}{2Q^{(3)}(z_k)}\right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{d}_{k,1} &= \frac{P^{[2]}(z_k)}{z_k Q^{[3]}(z_k)} - \hat{d}_{k,2} \cdot \left(1 + \frac{z_k Q^{[4]}(z_k)}{Q^{[3]}(z_k)}\right) \\ &\quad - \hat{d}_{k,3} \cdot \left(1 + \frac{3z_k Q^{[4]}(z_k)}{Q^{[3]}(z_k)} + \frac{2z_k^2 Q^{[5]}(z_k)}{Q^{[3]}(z_k)}\right) \\ &= \frac{3P^{(2)}(z_k)}{z_k Q^{(3)}(z_k)} - \hat{d}_{k,2} \cdot \left(1 + \frac{z_k Q^{(4)}(z_k)}{4Q^{(3)}(z_k)}\right) \\ &\quad - \hat{d}_{k,3} \cdot \left(1 + \frac{3z_k Q^{(4)}(z_k)}{4Q^{(3)}(z_k)} + \frac{z_k^2 Q^{(5)}(z_k)}{10Q^{(3)}(z_k)}\right). \end{aligned}$$



### 2.3.4. Allgemeines zur Handhabung

Bei der numerischen Umsetzung der Harmonischen Inversion müssen manche Dinge beachtet werden. Zum Beispiel wurde in obiger analytischer Herleitung angenommen, dass der Entartungsgrad der jeweiligen Resonanz bekannt ist. In der Praxis ist dies jedoch nicht so, sondern man muss erst feststellen, welche Nullstellen des Polynoms  $Q(z)$  vielfache Nullstellen sind und wie groß der Entartungsgrad ist. Die einfachste Methode ist diejenige, alle Nullstellen zu bestimmen (z. B. als Eigenwerte der Hessenbergmatrix  $A$  aus Gleichung (2.8)) und zu vergleichen. Aufgrund numerischer und sonstiger Ungenauigkeiten werden auch die entarteten Nullstellen nicht genau gleich sein. Deshalb muss ein Parameter vorgegeben werden, der dann z. B. den maximalen Abstand zweier Nullstellen angibt, bis zu welchem die Nullstellen als entartet behandelt werden sollen. In den in den Kapiteln 3 und 4 untersuchten Spektren wurden dazu Parameter in der Größenordnung von  $10^{-2}$  bis  $10^{-7}$  verwendet, meist ergab  $10^{-5}$  ein brauchbares Ergebnis. Für die weitere Rechnung ist es natürlich sinnvoll, für eine entartete Nullstelle in die Gleichungen (2.21) und (2.23) stets denselben Wert für  $z_k$  einzusetzen. Dazu kann z. B. der Mittelwert der in der Berechnung erhaltenen Werte der Nullstellen verwendet werden.

Manchmal könnte es auch nützlich sein, nicht die Nullstellen  $z_k$ , sondern direkt die Parameter  $w_k$  miteinander zu vergleichen. Da für die Berechnung der Parameter  $w_k$  die Amplituden  $d_{k,\alpha}$  nicht eingehen, kann dies problemlos gemacht werden (Es ist dabei aber zu beachten, dass, wenn man die Parameter  $w_k$  umordnet, auch die  $z_k$  entsprechend umgeordnet werden müssen).

Werden entartete Resonanzen nicht als entartet erkannt, so werden mehrere Resonanzen in der Nähe der entarteten Resonanz errechnet. In diesem Fall werden jedoch die Ableitungen des Nennerpolynoms  $Q(z)$ , die während des Verfahrens berechnet werden, an diesen Stellen meist recht klein. Dies führt dazu, dass die berechneten Amplituden relativ groß werden. Bei einer zweifach entarteten Resonanz kann außerdem der Fall auftreten, dass die eigentliche Resonanz zwischen den beiden errechneten Resonanzen liegt, sodass die beiden errechneten Amplituden betragsmäßig in der gleichen Größenordnung liegen, sich jedoch im Vorzeichen voneinander unterscheiden. Ein solches Verhalten ist ein Indiz dafür, dass eine Entartung evtl. nicht richtig erkannt wurde.

Außerdem ist die Zahl der Unbekannten  $\sum_{k=1}^K (r_k + 1)$  i. d. R. nicht bekannt, da ja die Anzahl und der Entartungsgrad der enthaltenen Amplituden unbekannt ist. Dadurch kann die Anzahl der Gleichungen in (2.13) bzw. der Grad der Polynome  $P(z)$  und  $Q(z)$  von dem Wert abweichen, den sie eigentlich annehmen. Somit muss man eine Annahme treffen, wie viele Resonanzen mit welcher Entartung enthalten sind, und dementsprechend  $2 \cdot \sum_{k=1}^{K'} r'_k \equiv N$  Koeffizienten zur Berechnung der gesuchten Parameter  $w_k$  und  $d_{k,\alpha}$  verwenden. Dabei kann es allerdings vorkommen, dass das Gleichungssystem „über-“ oder „unterbestimmt“ wird, d. h. mehr oder weniger Gleichungen benützt werden als es Unbekannte gibt.

Den Fall der Unterbestimmtheit gilt es zu vermeiden, da man dann kein brauchbares Ergebnis erhält (die Polynome  $P(z)$  und  $Q(z)$  werden durch die Padé-Approximation

nur sehr schlecht genähert). Dies lässt sich dadurch erreichen, dass entweder  $N$  größer gewählt wird oder das Spektrum auf einem kleineren oder anderen Intervall analysiert wird.

Ist das Gleichungssystem überbestimmt, so könnte man vermuten, dass man in der Rechnung ein paar zusätzliche Resonanzen bekommt, deren Amplitude null ist. Erfahrungsgemäß ist es auch so, dass dann Resonanzen (vornehmlich in der Nähe der reellen Achse) auftreten, deren Amplituden Beträge in der Größenordnung von ungefähr  $10^{-10}$  bis  $10^{-20}$  aufweisen. Allerdings treten am Rand auch Resonanzen mit größeren Amplituden auf. Diese Randeffekte lassen sich jedoch dadurch eliminieren, dass das Spektrum mehrmals auf verschiedenen Teilintervallen untersucht wird. Die „richtigen“ Resonanzen sollten dann in jedem Intervall enthalten sein (vorausgesetzt, sie liegen nicht außerhalb eines solchen).

Bei der Überbestimmtheit spielt jedoch eine weitere Sache eine Rolle: da in diesem Fall für die Polynome  $P(z)$  und  $Q(z)$  (vgl. Abschnitte 2.2.2 und 2.3.2) ein höherer Grad angenommen wird, erhält man  $g(z)$  „in erweiterter Form“, d. h., beide Polynome sind mit gleichen Polynomen  $z - z'_k$  multipliziert. Da diese jedoch beliebig sind, erhält man in Gleichung (2.7) für die Koeffizienten  $a_k$  ebenfalls ein überbestimmtes Gleichungssystem. Dies könnte bei der numerischen Lösung evtl. zu Ungenauigkeiten oder sonstigen Problemen führen.

$N$  sollte also nicht zu groß sein, sodass bei den Rechnungen die Gleichungssysteme nicht zu sehr überbestimmt werden. Außerdem wird bei zu großen Werten das Lösen des linearen Gleichungssystems aus Gleichung (2.7) und das Bestimmen der Eigenwerte ungenauer. Andererseits sollte  $N$  aber auch nicht zu klein gewählt werden, da sich sonst kleine Ungenauigkeiten in den Werten des fouriertransformierten Signals  $c_n$  stark auf die Genauigkeit des Ergebnisses auswirken. Erfahrungsgemäß erhält man gute Ergebnisse, wenn man für  $N$  einen (geraden) Wert zwischen 100 und 400 wählt. Ein Beispiel zu den Auswirkungen der Wahl von  $N$  ist auch in Abschnitt 3.1 aufgeführt.

Auch für die Fouriertransformation sollten nicht zu wenige Werte des Spektrums verwendet werden. Andernfalls könnte die Approximation des Integrals und damit die Fouriertransformierte zu ungenau werden. Da die Fouriertransformation mithilfe der FFT geschieht, sollte die Anzahl der verwendeten Punkte möglichst eine Potenz von 2 sein. Wie in Abschnitt 2.3.2 erwähnt, kann das transformierte Signal abgeschnitten werden, sodass es keine Rolle spielt, wenn das fouriertransformierte Signal länger ist als der oben gewählte Wert von  $N$ . „Abschneiden“ bedeutet in diesem Fall, dass nur die ersten  $N$  Werte zur Berechnung der Parameter verwendet werden. Alternativ könnte man z. B. auch alle  $M$ -ten Werte verwenden. Das entspricht einer Ersetzung von  $\tau$  durch  $\tau' = M\tau$  in den Gleichungen (2.21) und (2.22). Eine weitere Möglichkeit wäre, die Werte von  $M$  bis  $M + N - 1$  zu verwenden. In diesem Fall erhält man

$$\hat{d}_{k,\alpha} = z_k^M \cdot \sum_{\mu=\alpha}^{r_k} (-i d_{k,\mu}) (-i\tau)^{\mu-1} \cdot \binom{\mu-1}{\alpha-1} M^{\mu-\alpha},$$

sodass man daraus die  $d_{k,\alpha}$  rekursiv berechnen kann:

$$d_{k,r_k} = \frac{i \hat{d}_{k,r_k}}{z_k^M (-i\tau)^{r_k-1}}$$

$$d_{k,\alpha-1} = \frac{i \hat{d}_{k,\alpha-1}}{z_k^M (-i\tau)^{\alpha-1}} - \sum_{\mu=\alpha}^{r_k} d_{k,\mu} (-i\tau)^{\mu-\alpha} \cdot \binom{\mu-1}{\alpha-2} M^{\mu-\alpha+1};$$

die Berechnung der  $w_k$  ändert sich nicht.



## 3. Anwendung der Harmonischen Inversion auf Beispielspektren

In diesem Kapitel wird die Harmonische Inversion auf verschiedene Beispielspektren angewandt. Zweck dessen soll sein, die Harmonische Inversion einerseits zu testen, sich andererseits aber auch ein klein wenig mit deren Umgang vertraut zu machen. Die Beispielspektren wurden nach Gleichung (2.11) berechnet, meist auf den 1024 äquidistanten Stützpunkten  $n \cdot 2\pi/1024$  im Intervall  $[0, 2\pi)$ , also für  $n = 0, 1, \dots, 1023$ .

Wenn nicht anders angegeben, wurden zwei Nullstellen  $z_k$  als entartet betrachtet, wenn der Abstand der beiden nicht mehr als  $10^{-5}$  beträgt. Ebenso wurden normalerweise die ersten 200 Punkte des transformierten Signals  $c_n$  zur Berechnung der Lagen und Amplituden der Resonanzen verwendet (vgl. Abschnitt 2.3.4).

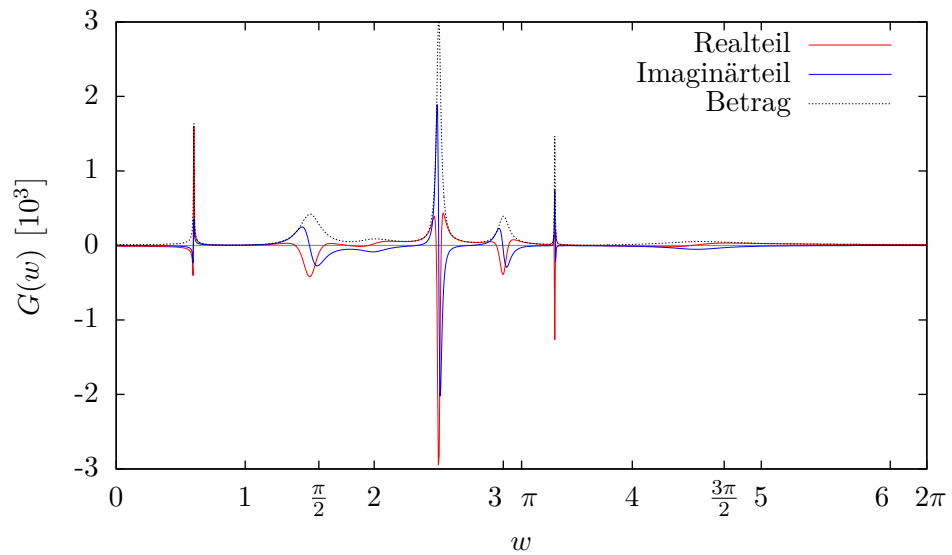
### 3.1. Vergleich der Anzahl der verwendeten Koeffizienten

Wie in Abschnitt 2.3.4 diskutiert, spielt die Anzahl  $N$  der Koeffizienten  $c_n$  des transformierten Signals, die zur Berechnung der Parameter verwendet werden, eine zwiefache Rolle bei der Untersuchung des Signals: Zum einen bestimmt sie, ob das Gleichungssystem unter- oder überbestimmt ist (oder weder noch), zum anderen nimmt sie Einfluss auf die Genauigkeit.

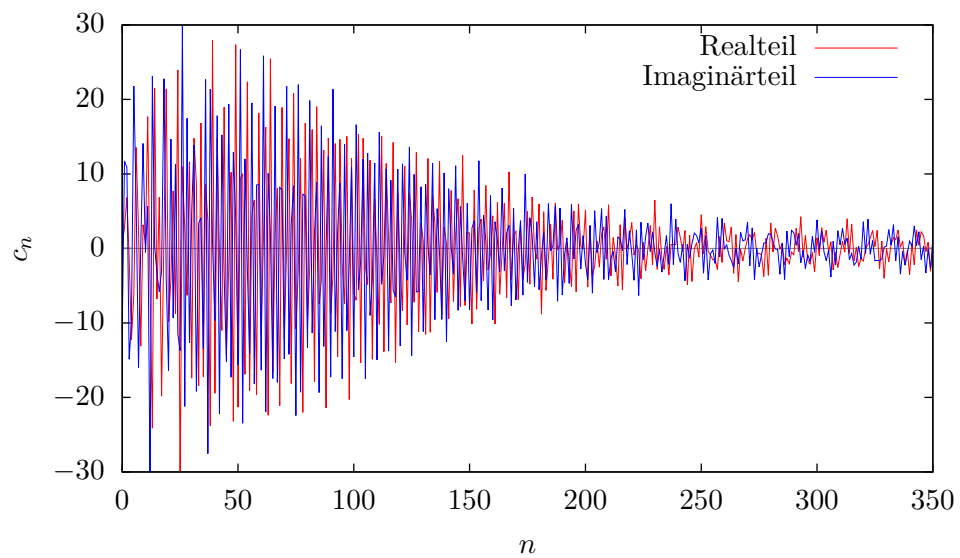
Unter diesem Aspekt wurde ein Beispielspektrum, welches vier nicht entartete und vier zweifach entartete Resonanzen enthält, untersucht. Die Resonanzen liegen dabei immer in der unteren Halbebene (in Abbildung 3.2 sind sie als Kreuze eingezeichnet). Das Spektrum und das transformierte Signal, welches während der Analyse berechnet wurde, sind in Abbildung 3.1 dargestellt. Schon beim transformierten Signal fällt auf, dass der Betrag nicht exponentiell abfällt, sondern zuerst anwächst und dann abfällt, ähnlich wie in Abbildung 2.2b. Dies deutet auf eine entartete Resonanz hin.

Damit das Gleichungssystem weder unter- noch überbestimmt ist, müsste die Untersuchung mit  $N = 24$  durchgeführt werden. Hier wurde die Analyse für  $N = 20$ ,  $N = 40$  und  $N = 200$  durchgeführt. Die Ergebnisse für die Positionen der Resonanzen in der komplexen Ebene (also die Parameter, die in Kapitel 2  $w_k$  genannt wurden) sind in Abbildung 3.2 eingezeichnet.

Man erkennt, dass für  $N = 20$  das Ergebnis größtenteils nicht mit den Referenzwerten übereinstimmt (das sind die Werte, mit denen das Spektrum erstellt wurde). Dies ist nicht verwunderlich, da in diesem Fall das Gleichungssystem (2.13) „unterbestimmt“ wird, d. h., es gibt mehr Unbekannte als Gleichungen. Die einzige Resonanz, bei der eine

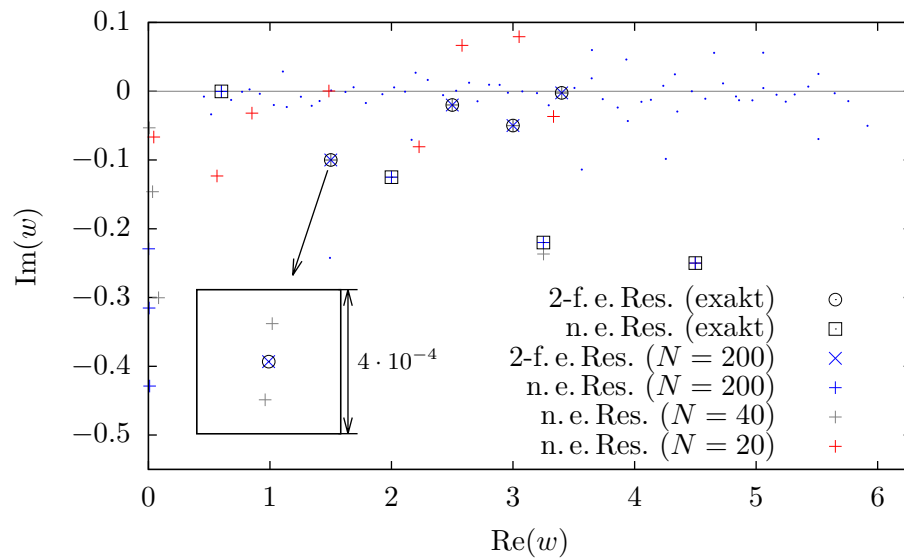


(a) Spektrum



(b) Fouriertransformierte

**Abb. 3.1.:** Erstes Beispielspektrum mit dem fouriertransformierten Signal  $c_n$ , wie man es während der Analyse erhält.



**Abb. 3.2.:** Analyse des ersten Beispielspektrums. Eingezeichnet sind die Lagen der Resonanzen, mit denen das Spektrum generiert wurde („exakt“), und die man aus den verschiedenen Analysen für  $N = 20, 40, 200$  erhält. „n. e. Res.“ ist die Abkürzung für „nicht entartete Resonanzen“, „2-f. e. Res.“ steht für „zweifach entartete Resonanzen“. Die kleinen Punkte stellen solche Resonanzen dar, deren Amplituden einen geringeren Betrag als  $10^{-8}$  aufweisen.

Übereinstimmung zwischen den Eingangsdaten und der Analyse besteht, ist diejenige bei  $w = 4.5 - 0.25i$ .

Auffällig ist außerdem, dass für  $N = 40$  alle zweifach entarteten Resonanzen nicht als solche „erkannt“ wurden. Bei Vergrößerung (s. Abbildung 3.2) sieht man allerdings, dass hier zwei einfache Resonanzen dicht beieinander liegen. Somit ist für  $N = 40$  die Ungenauigkeit immer noch so groß, dass die zwei errechneten Nullstellen einen größeren Abstand als  $10^{-5}$  aufweisen. Erhöht man allerdings den Parameter, der den maximalen Abstand zweier Nullstellen angibt, ab dem sie als entartet gelten, so erhält man auch für  $N = 40$  die entarteten Resonanzen. Das soll hier jedoch nicht im Detail aufgezeigt werden.

Die bei dieser Analyse erhaltenen zwei Resonanzen, die in Abbildung 3.2 nochmals vergrößert dargestellt sind, liegen bei (ungefähr)  $1.5000 - 0.0999i$  bzw.  $1.5000 - 0.1001i$  und besitzen eine Amplitude von (ungefähr)  $1768 - 1876i$  bzw.  $-1767 + 1876i$ . Dabei ist auffällig, dass die Amplituden sehr groß sind, sie sich aber um einen Faktor von ca.  $-1$  unterscheiden. Das kann auch als Indiz dafür aufgefasst werden, dass die beiden errechneten Nullstellen eigentlich zu einer einzigen, zweifach entarteten Resonanz gehören (wie auch schon in Abschnitt 2.3.4 angedeutet). Jedoch müssen die beiden Amplituden auch nicht immer so groß werden (im Vergleich zu den anderen Amplituden). Anstatt der zweifach entarteten Resonanz bei  $3.4 - 2.5 \cdot 10^{-3}i$  erhält man z. B. zwei Resonanzen bei  $3.399 - 2.157 \cdot 10^{-3}i$  und  $3.401 - 2.907 \cdot 10^{-3}i$  mit Amplituden von  $-2.119 - 0.4496i$  und  $2.197 + 1.034i$ . Diese sind zwar im Vergleich zu den restlichen errechneten Amplituden nicht so groß, allerdings sind die tatsächlichen Amplituden dieser Resonanz auch kleiner als die der vorigen ( $d_{6,2} = 0.01$  und  $d_{6,1} = 0.07$  im Vergleich zu  $d_{5,2} = 4$  und  $d_{5,1} = 1$ ).

**Tab. 3.1.:** Vergleich der aus den Analysen für  $N = 20$ ,  $N = 40$  und  $N = 200$  erhaltenen Resonanz bei  $4.5 - 0.25i$  mit dem Referenzwert (d. i. der Wert, mit welchem das Spektrum erstellt wurde).

	Referenz	$N = 20$	$N = 40$	$N = 200$
$\text{Re}(w_1)$	4.5	4.499 83	4.499 999 999 993	4.499 999 999 999 993
$\text{Im}(w_1)$	-0.25	-0.250 082	-0.249 999 999 983	-0.250 000 000 000 004
$\text{Re}(d_{1,1})$	13	13.014	12.999 999 995 9	13.000 000 000 001 1
$\text{Im}(d_{1,1})$	0	$-1.6 \cdot 10^{-2}$	$-2.530 \cdot 10^{-9}$	$-8.513 \cdot 10^{-13}$

Vergleicht man die Lage und Amplitude der bei  $4.5 - 0.25i$  gelegenen Resonanz mit den aus den Analysen erhaltenen – wie in Tabelle 3.1 geschehen – so erkennt man, dass die Genauigkeit für  $N = 40$  schon sehr gut ist, die Werte für  $N = 200$  jedoch noch um drei bis vier Nachkommastellen mehr mit den Referenzwerten übereinstimmen. Ähnlich verhält es sich mit den übrigen Resonanzen, bei denen die Genauigkeit für  $N = 200$  stets höher ist als für  $N = 40$ .

Auch bei den zweifach entarteten Resonanzen erhält man mit der Analyse für  $N = 200$  sehr gute Ergebnisse. In Tabelle 3.2 werden die Ergebnisse für zwei solcher Resonanzen



**Tab. 3.2.:** Vergleich der aus der Analyse mit  $N = 200$  erhaltenen Resonanzen bei  $1.5 - 0.1i$  und  $3.4 - 2.5 \cdot 10^{-3}i$  mit den Referenzwerten.

	Referenz	$N = 200$
$\text{Re}(w_5)$	1.5	1.499 999 999 999 990 0
$\text{Im}(w_5)$	-0.1	-0.100 000 000 000 009 1
$\text{Re}(d_{5,2})$	4	4.000 000 000 025
$\text{Im}(d_{5,2})$	0	$-2.225 \cdot 10^{-11}$
$\text{Re}(d_{5,1})$	1	0.999 999 994 9
$\text{Im}(d_{5,1})$	0	$-5.804 \cdot 10^{-9}$
$\text{Re}(w_6)$	3.4	3.400 000 000 000 000 8
$\text{Im}(w_6)$	$-2.5 \cdot 10^{-3}$	$-2.500 000 000 000 37 \cdot 10^{-3}$
$\text{Re}(d_{6,2})$	0.01	0.006 558 8
$\text{Im}(d_{6,2})$	0	$4.050 \cdot 10^{-4}$
$\text{Re}(d_{6,1})$	0.07	0.078 236
$\text{Im}(d_{6,1})$	0	0.5848

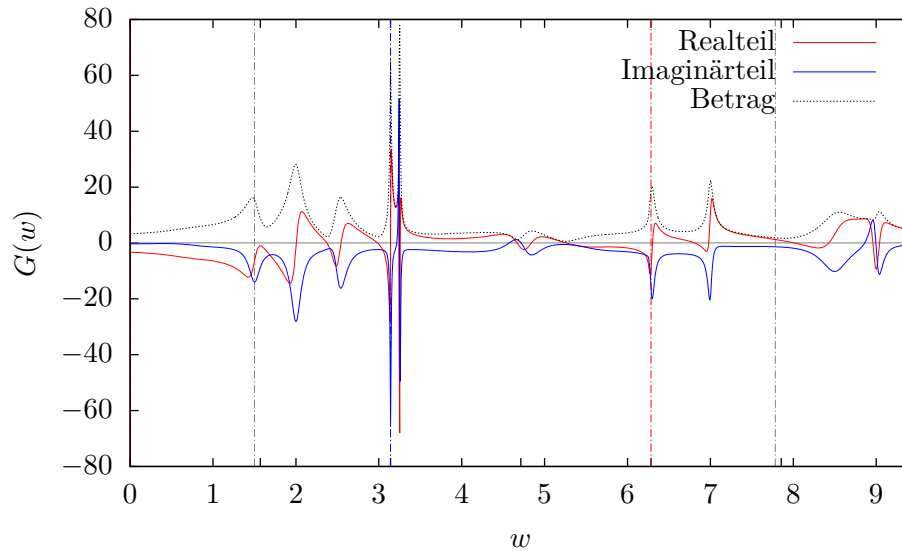
mit den Referenzwerten verglichen. Die Lagen der Resonanzen stimmen sehr gut mit den Referenzwerten überein, ebenso die Amplituden der ersten Resonanz. Bei der zweiten Resonanz weichen jedoch die Ergebnisse für die Amplituden stark von den Referenzwerten ab. Dies liegt daran, dass die Resonanz sehr nahe an der reellen Achse liegt und somit eine sehr geringe Breite besitzt. Die Breite einer nicht entarteten Lorentzkurve mit demselben Parameter  $w_6$  beträgt 0.005. Fast genauso groß ist jedoch der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten, auf denen das Spektrum gegeben war; dieser beträgt nämlich  $2\pi/1024 \approx 0.0061$ . Somit wurde diese Resonanz schon beim Erstellen des Spektrum schlecht aufgelöst. Bemerkenswert ist jedoch, dass die Lage der Resonanz trotzdem so gut mit dem Referenzwert übereinstimmt.

Hieran sieht man, dass auch beim gegebenen Spektrum die Distanz der Gitterpunkte nicht zu groß sein darf. Andererseits sollte sie aber auch nicht zu klein sein und das Intervall nicht zu klein, sodass eine Resonanz so breit ist, dass sie sich über das gesamte Spektrum erstreckt.

Ebenfalls in Abbildung 3.2 sehr schön erkennbar sind die zusätzlichen Resonanzen, die man für  $N > 24$  erhält. Für  $N = 40$  erhält man nur zusätzliche Resonanzen am Rand, für  $N = 200$  erhält man auch viele Punkte in der Nähe der reellen Achse, die jedoch eine kleine Amplitude aufweisen (in Abbildung 3.2 dargestellt als kleine Punkte).

## 3.2. Erkennen der zusätzlichen Resonanzen

Wie in Abschnitt 2.3.4 beschrieben, sollte man die zusätzlich erhaltenen Resonanzen dadurch eliminieren können, dass man das Spektrum auf verschiedenen Teilbereichen



**Abb. 3.3.:** Zweites Beispielspektrum. Die strichpunktierten Linien zeigen die Grenzen der verschiedenen Teilintervalle an, auf denen das Spektrum analysiert wurde.

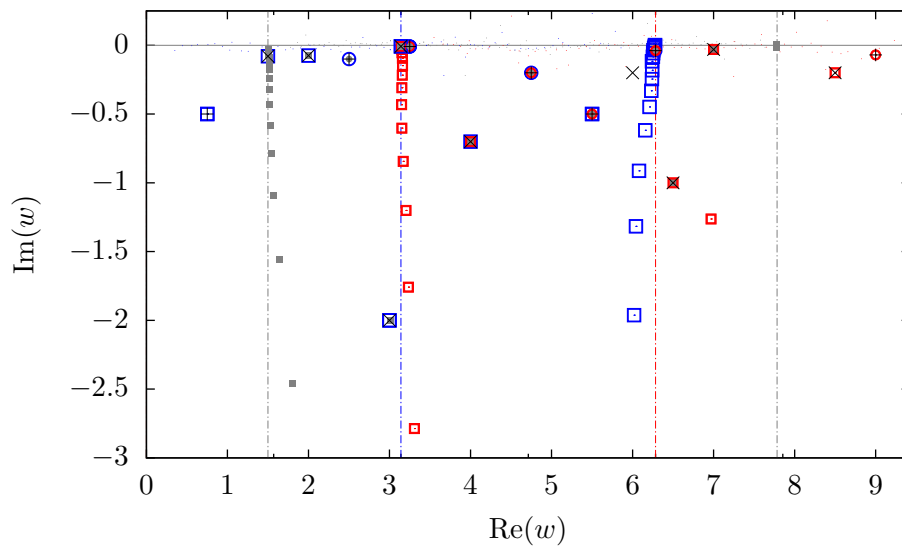
analysiert, die sich überschneiden. Dies soll in diesem Abschnitt verdeutlicht werden, indem ein Spektrum analysiert wird, welches sich über das Intervall  $[0, 3\pi)$  erstreckt. Die Gitterpunkte, die zur Analyse des Spektrums verwendet wurden, besitzen denselben Abstand wie beim vorigen Spektrum. Das analysierte Spektrum ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Es wurden die Intervalle  $[0, 2\pi)$ ,  $[1.5, 1.5 + 2\pi)$  und  $[\pi, 3\pi)$  analysiert, deren Ränder in Abbildung 3.3 als strichpunktierte Linien eingezeichnet sind.

In Abbildung 3.4 ist aufgetragen, wo sich die in den Analysen bestimmten Resonanzen befinden. Die unterschiedlichen Analysen sind durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet; die Ränder des jeweiligen Intervalls wurden auch hier als strichpunktierte Linien in der zugehörigen Farbe eingezeichnet.

Man erkennt, dass bei den Analysen an den Rändern des jeweiligen Intervalls wieder zusätzliche Resonanzen zu finden sind. Die Resonanzen, mit denen das Spektrum generiert wurde, werden jedoch bei allen Analysen erkannt (vorausgesetzt sie liegen im jeweiligen Intervall).

Bei der ersten Analyse (im linken Intervall) werden wieder zwei entartete Resonanzen nicht erkannt, nämlich diejenigen bei  $0.75 - 0.5i$  und  $5.5 - 0.5i$ . Wie oben liegen jedoch zwei nicht entartete Resonanzen in der Nähe, die jeweils große Amplituden aufweisen, welche sich um einen Faktor von ungefähr  $-1$  unterscheiden.

Auffallend ist, dass in keiner der Analysen die Resonanz bei  $6 - 0.2i$  gefunden wurde. Das liegt wahrscheinlich daran, dass die beiden in der Nähe liegenden Resonanzen das Spektrum zu stark dominieren, sodass die nicht gefundene im Vergleich zu diesen vernachlässigt werden kann. Auch in Abbildung 3.3 ist die Resonanz bei  $6 - 0.2i$  nicht



**Abb. 3.4.:** Analyse des zweiten Beispielspektrums. Die strichpunktierten Linien zeigen die Grenzen der verschiedenen Teilintervalle an, auf denen das Spektrum analysiert wurde. Dazwischen sind jeweils in der gleichen Farbe die erhaltenen Resonanzen dargestellt: zweifach entartete Resonanzen mit Kreisen, nicht entartete Resonanzen mit Kästchen. Die kleinen Punkte zeigen die bei der Analyse bestimmten Resonanzen an, deren Amplituden vernachlässigbar klein sind. Die  $\times$ -Symbole zeigen die Lage der zweifach entarteten Resonanzen und die  $+$ -Symbole die Lage der nicht entarteten Resonanzen an, mit denen das Spektrum generiert wurde.

zu erkennen, die benachbarte bei  $2\pi - \frac{\pi}{80}i \approx 6.283 - 3.927 \cdot 10^{-2}i$  ist jedoch deutlich zu sehen.

Die Resonanzen, die auf dem Rand eines Intervalls liegen, werden in der entsprechenden Analyse nicht erkannt, was daran liegt, dass sie am Rand stark genug abgefallen sind und somit die Bedingung aus Abschnitt 2.3.1 nicht erfüllt ist. Bei den anderen Analysen, wo sie im Inneren eines Intervalls liegt, wird sie hingegen erkannt.

## 4. Anwendung der Harmonischen Inversion auf Resonanzspektren des Wasserstoffatoms

### 4.1. Exzeptionelle Punkte beim Wasserstoffatom in gekreuzten Feldern

In diesem Kapitel soll die Harmonische Inversion auf ein Resonanzspektrum aus der Physik angewandt werden. Dazu wird ein Wasserstoffatom betrachtet, welches sich in gekreuzten elektromagnetischen Feldern befindet. Dies bedeutet, dass sowohl das elektrische als auch das magnetische Feld stationär sind, aber zueinander senkrecht stehen. Das elektrische Feld wird parallel zur  $x$ -Achse gewählt, das magnetische Feld (genauer: die magnetische Flussdichte) parallel zur  $z$ -Achse. Im folgenden werden stets atomare Einheiten verwendet. Dabei werden Massen in Einheiten der Elektronenmasse gemessen, Ladungen in Einheiten der Elementarladung  $e$ , Drehimpulse in Einheiten des reduzierten Planck'schen Wirkungsquantums  $\hbar$  und Längen in Einheiten des Bohr-Radiuses  $a_0$ . Dadurch ist die Energieeinheit die Hartree-Energie  $E_h = \alpha^2 m_e c^2 \approx 27.2 \text{ eV}$  ( $\alpha$  ist die Feinstrukturkonstante), die Einheit des elektrischen Feldes  $E_h/(e a_0) \approx 5.142 \cdot 10^{11} \text{ V/m}$  und die der magnetischen Flussdichte  $\hbar/(e a_0^2) \approx 2.351 \cdot 10^5 \text{ T}$ .<sup>1</sup>

In atomaren Einheiten nimmt der Hamiltonoperator dieses Systems folgende Form an:

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \gamma L_z + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) + f x.$$

Dabei ist  $\mathbf{p}$  der Impulsoperator,  $L_z$  die  $z$ -Komponente des Drehimpulsoperators,  $x$ ,  $y$  und  $z$  sind die Raumkoordinaten und  $r$  ist der Abstand zum Ursprung. Außerdem beschreibt  $f$  die elektrische Feldstärke und  $\gamma$  die magnetische Flussdichte. Sowohl die Bewegung des Kerns als auch relativistische Effekte werden vernachlässigt. Der erste Summand ( $\frac{1}{2} \mathbf{p}^2$ ) beschreibt die kinetische Energie des Elektrons, der  $1/r$ -Term das Coulomb-Potential zwischen Elektron und Kern; der dritte ( $\frac{1}{2} \gamma L_z$ ) und der vierte Summand ( $\frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2)$ ) beschreiben die Wechselwirkung mit dem externen Magnetfeld und der letzte Summand ( $f x$ ) die Wechselwirkung mit dem externen elektrischen Feld.

Bei höheren Energien sind Resonanzzustände zu finden. Diese sind metastabile Zustände, die mit der Zeit zerfallen. Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion wird dabei näherungsweise beschrieben durch  $\psi(x, y, z, t) = \phi(x, y, z) \cdot \exp(-i Et/\hbar)$  (wie bei stationären Zuständen). Somit bestimmt der Imaginärteil  $\text{Im}(E)$  der Energie die Halbwertszeit

---

<sup>1</sup>Zu den verwendeten atomaren Einheiten siehe auch [8, Anhang A.1].

bzw. die Zerfallskonstante des Resonanzzustandes. Da für den Zerfall das Betragsquadrat der Wellenfunktion verantwortlich ist, beträgt die Zerfallskonstante  $-2 \operatorname{Im}(E)$ .

Um die Resonanzzustände und deren Energieeigenwerte zu bestimmen, müssen bestimmte Methoden angewandt werden. Dabei wird der bekannte hermitesche Hamiltonoperator modifiziert, da ja ein hermitescher Operator stets reelle Eigenwerte besitzt. Näheres zur Bestimmung der Resonanzzustände kann in [8] nachgelesen werden. Weitere Informationen zur Quantenmechanik mit nicht hermiteschen Operatoren und Resonanzzuständen findet man auch in [9].

Der Hamiltonoperator ist von den zwei Parametern  $f$  und  $\gamma$  der elektromagnetischen Felder abhängig. Somit sind auch die Energieeigenwerte der Resonanzzustände von diesen abhängig und lassen sich als Funktionen auf dem zweidimensionalen Parameterraum ansehen. Identifiziert man den Parameterraum mit der komplexen Ebene, so können manche Eigenwerte jeweils einen Zweig einer komplexen Funktion darstellen. Die Verzweigungspunkte nennt man dann *exzeptionelle Punkte* (englisch „exceptional points“; im Folgenden manchmal mit „EP“ abgekürzt). Bei diesen entarten neben den Eigenzuständen auch die Resonanzzustände. Das entsprechende Verhalten bei Matrizen ist, dass diese an den exzeptionellen Punkten nicht mehr diagonalisierbar sind, sondern nur noch in Jordan-Normalform überführt werden können. Dabei ist die Dimension des Eigenraumes, also die geometrische Vielfachheit, kleiner als die algebraische Vielfachheit der Eigenwerte.

Diese Entartung hat auch Auswirkung auf die Umgebung des exzeptionellen Punktes. Beschreibt man nämlich im Parameterraum einen Kreis um den exzeptionellen Punkt (oder eine andere geeignete geschlossene Kurve, die den exzeptionellen Punkt einmal umrundet) und verfolgt dabei einen Eigenwert, so wird man feststellen, dass dieser keinen geschlossenen Weg zurücklegt (siehe [4]). Während einer Umrundung „wechselt“ er nämlich den Zweig, sodass sein Anfangs- und Endpunkt nicht übereinstimmen. Damit der Eigenwert auch eine geschlossene Kurve zurücklegt, muss im Parameterraum der exzeptionelle Punkt öfters umrundet werden, jedoch maximal so oft, wie Zustände am exzeptionellen Punkt entarten. Bei einem exzeptionellen Punkt, an dem zwei Resonanzen entarten, muss dieser also zweimal umrundet werden; bei einer Umrundung vertauschen die Eigenwerte. Für die Resonanzzustände gilt etwas ähnliches. Jedoch vertauschen sie bei einer Umrundung eines EPs, an dem zwei Zustände entarten, nicht nur, sondern einer der beiden ändert auch das Vorzeichen. Dadurch werden insgesamt vier Umrundungen benötigt, um wieder zur Ausgangssituation zu gelangen.

Ein exzeptioneller Punkt wirkt sich auch auf andere physikalische Größen aus. Nach [6] z. B. zerfällt ein solcher entarteter Zustand nicht rein exponentiell, sondern es ist ein zusätzlicher polynomieller Faktor zu beobachten.

## 4.2. Analyse des Photoionisationswirkungsquerschnittes

Nach [4, 8] ist die Fouriertransformierte (hier: das Zeitsignal) des Photoionisationswirkungsquerschnittes im nicht entarteten Fall proportional zu

$$\sum_{k=1}^K a_k \exp(-i E_k t)$$

mit Konstanten  $a_k$ , sodass die Resonanzenergien mithilfe der Harmonischen Inversion errechnet werden können. Tritt nun ein exzeptioneller Punkt im Spektrum auf, so ist zu vermuten, dass dann zusätzlich zu dem jeweiligen exponentiellen Faktor auch noch ein polynomieller Faktor auftritt – wie es auch bei der Zerfallsrate der Fall ist (s. oben). In [6] wird gezeigt, dass dieses charakteristische Verhalten der Zerfallsrate auch dann beobachtet werden kann, wenn die Parameter  $\gamma$  und  $f$  nicht exakt auf dem exzeptionellen Punkt liegen, sondern ein klein wenig davon entfernt. Deshalb wurde das Spektrum des Wirkungsquerschnitts untersucht, welches auch zur Berechnung der in Abbildung 3 aus [6] dargestellten Größen verwendet wurden.<sup>2</sup>

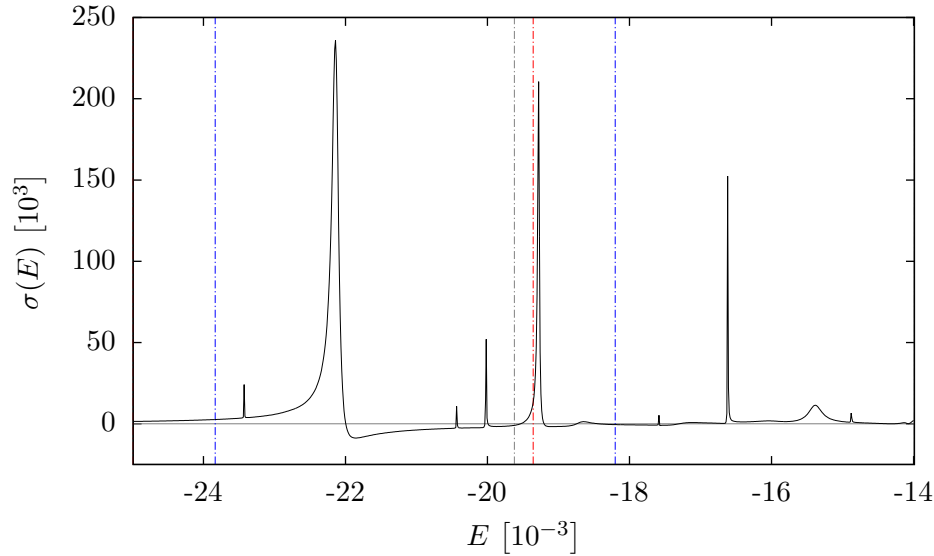
Bei der Analyse ist zu beachten, dass der Photoionisationswirkungsquerschnitt reell ist. Ein Spektrum ist jedoch genau dann reell, wenn mit jedem auftretenden Term auch dessen komplex Konjugiertes enthalten ist. Betrachtet man jedoch nur diejenigen Resonanzen, die bei Energien mit einem negativen Imaginärteil liegen, so beträgt der Realteil dieses Spektrums gerade die Hälfte des gesamten reellen Spektrums. Somit lässt sich das reelle Spektrum auch als der doppelte Realteil dieses „halben“ Spektrums berechnen, was in diesem Kapitel auch gemacht wird. Es gilt also:

$$\sigma(E) = \sum_{k=1}^K \sum_{\alpha=1}^{r_k} 2 \cdot \operatorname{Re} \left( \frac{d_{k,\alpha}}{(E - E_k)^\alpha} \right) \quad \text{mit } \operatorname{Im}(E_k) < 0 \text{ für alle } k. \quad (4.1)$$

Der Photoionisationswirkungsquerschnitt ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Es wurden drei Intervalle mit jeweils 512 Stützstellen ausgesucht, deren Grenzen als strichpunktierte Linien ebenfalls in Abbildung 4.1 eingezeichnet sind. Die Analyse wurde für jedes Intervall zweimal durchgeführt, einmal mit  $g_{\max} = 10^{-5}$  und einmal mit  $g_{\max} = 10^{-2}$ .  $g_{\max}$  bezeichnet dabei den Abstand der Nullstellen, bis zu welchem diese als gleich angenommen werden (vgl. Abschnitt 2.3.4). Die erhaltenen Resonanzenergien sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Man erkennt, dass die Ergebnisse der ersten beiden Analysen (dargestellt in den Farben rot und blau) gut übereinstimmen. Für die weitere Rechnung wurden stets die Mittelwerte dieser beiden Analysen verwendet.

In [6] wurde das Verhalten in der Nähe des exzeptionellen Punktes bei der Energie  $E = -2.2135 \cdot 10^{-2} - 6.878 \cdot 10^{-5} i$  untersucht. Bei der Analyse mit der Harmonischen Inversion, die hier durchgeführt wurde, erhält man einmal einen exzeptionellen Punkt bei  $E_{\text{EP}} = -2.2135 \cdot 10^{-2} - 6.877 \cdot 10^{-5} i$  und einmal drei exzeptionelle Punkte in der

<sup>2</sup>Die Daten wurden freundlicherweise von H. Cartarius bereitgestellt.



**Abb. 4.1.:** Der hier analysierte Photoionisationswirkungsquerschnitt des Wasserstoffatoms in gekreuzten Feldern. Die Daten stammen von H. Cartarius und sind dieselben, mithilfe denen auch Abbildung 3 aus [6] erstellt wurde.

**Tab. 4.1.:** Ergebnisse der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-2}$  für die Resonanzen in der Nähe von  $E = -2.2135 \cdot 10^{-2} - 6.878 \cdot 10^{-5} i$ .

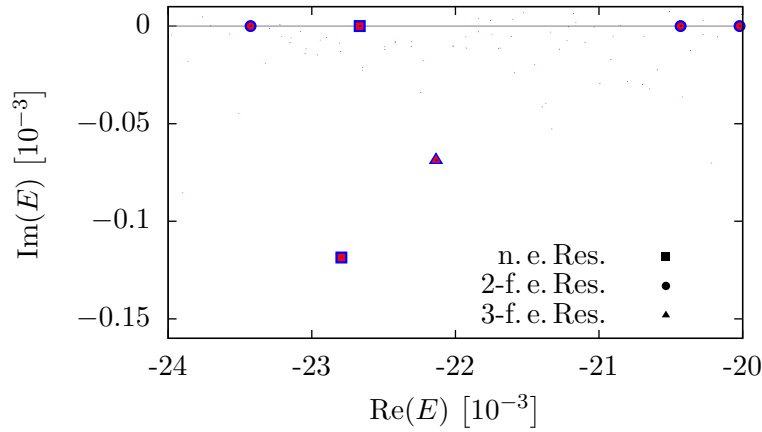
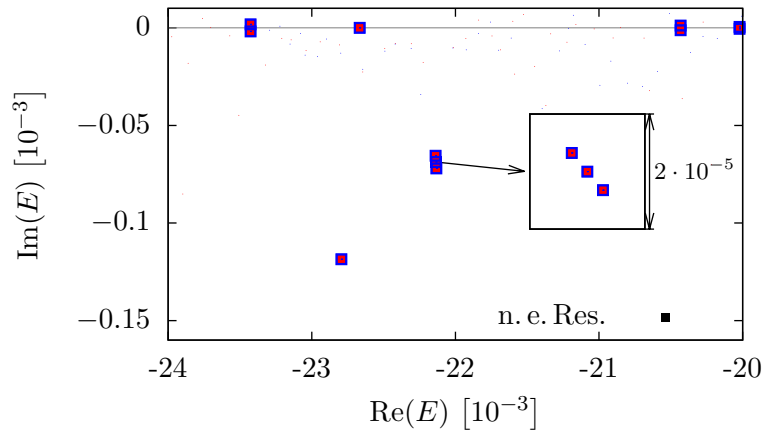
	Realteil	Imagiärteil
$E_{\text{EP}}$	$2.213\,487 \cdot 10^{-2}$	$6.876\,887 \cdot 10^{-5}$
$d_3$	$-7.736\,619 \cdot 10^{-11}$	$-2.772\,702 \cdot 10^{-11}$
$d_2$	$-1.393\,695 \cdot 10^{-4}$	$-7.246\,568 \cdot 10^{-6}$
$d_1$	$-2.297\,390$	$5.947\,155$

Nähe von  $E_{\text{EP}}$ . Die genauen Ergebnisse sind in den Tabellen 3.1 und 3.2 dargelegt. Man erkennt, dass das Ergebnis für die Resonanzenergie der ersten Analyse ziemlich gut mit der in [6] angegebenen Resonanzenergie des exzeptionellen Punktes übereinstimmt. Ebenso liegen die Resonanzenergien bei der zweiten Analyse in der Nähe desselben.

Die Lorentzkurven, die man mit den Ergebnissen der Analyse erhält, sind in Abbildung 4.3 dargestellt, ebenso die Beträge der einzelnen Terme. Man sieht, dass beide Analysen eine sehr gute Beschreibung der Kurve liefern. Dies bestätigt, dass in der Nähe eines exzeptionellen Punktes die Resonanzen zwar noch nicht entartet sind, aber das charakteristische Verhalten am exzeptionellen Punkt zum Teil schon beobachtet werden kann.

Bei der ersten Analyse, bei der man als Ergebnis eine dreifach entartete Resonanz erhält, ist auffällig, dass der Term erster Ordnung ( $d_1 \cdot (E - E_{\text{EP}})^{-1}$ ) am größten ist,



(a) Ergebnis der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-2}$ (b) Ergebnis der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-5}$ 

**Abb. 4.2.:** Die in der Analyse bestimmten Resonanzen im Spektrum des Photoionisationswirkungsquerschnittes aus Abbildung 4.1 in der Nähe von  $E = -2.2135 \cdot 10^{-2} - 6.878 \cdot 10^{-5} i$ , welche mit verschiedenen Parametern  $g_{\max}$  durchgeführt wurde (s. Abschnitt 4.2). Die Farbe wurde nach dem analysierten Bereich gewählt; die Abkürzungen  $n$ -f. e. Res. und n. e. Res. stehen für  $n$ -fach entartete Resonanz bzw. nicht entartete Resonanz; die numerischen Artefakte, also die zusätzlichen Resonanzen mit sehr kleiner Amplitude oder am Rand, sind als kleine Punkte eingezeichnet.

**Tab. 4.2.:** Ergebnisse der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-5}$  für die Resonanzen in der Nähe von  $E = -2.2135 \cdot 10^{-2} - 6.878 \cdot 10^{-5} i$ .

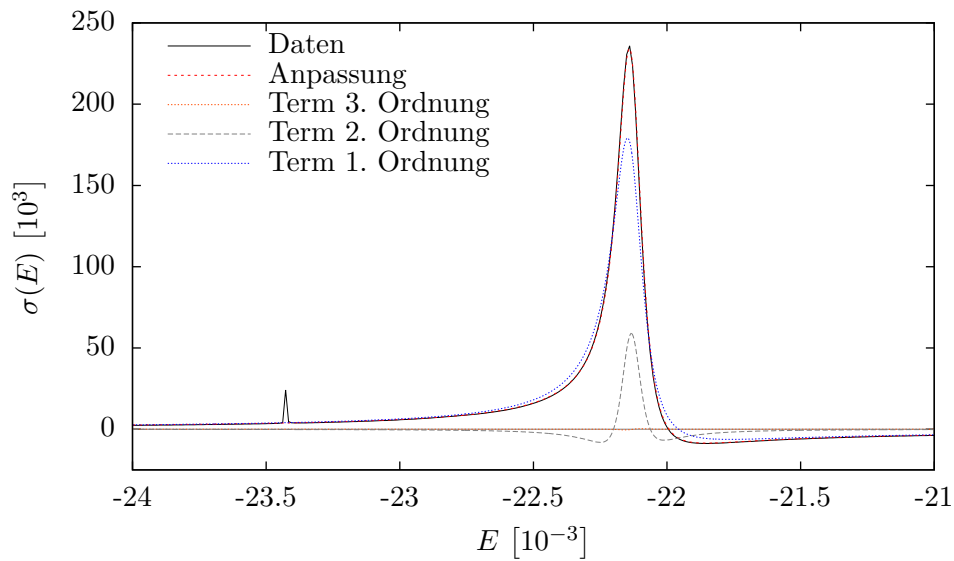
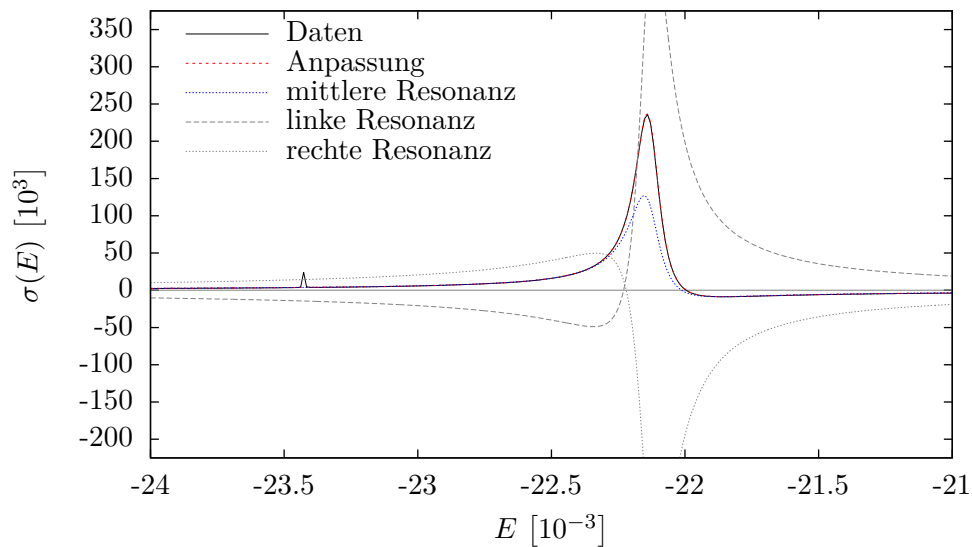
	Realteil	Imagiärteil
$E_1$	$-2.213\,758 \cdot 10^{-2}$	$-6.552\,978 \cdot 10^{-5}$
$d_1$	10.033 939	14.122 239
$E_2$	$-2.213\,487 \cdot 10^{-2}$	$-6.877\,005 \cdot 10^{-5}$
$d_2$	-2.279 486	4.066 855
$E_3$	$-2.213\,216 \cdot 10^{-2}$	$-7.201\,032 \cdot 10^{-5}$
$d_3$	-10.029 042	-12.224 087

während der Term zweiter Ordnung ( $d_2 \cdot (E - E_{\text{EP}})^{-2}$ ) deutlich kleiner ist. Der Term dritter Ordnung ist vernachlässigbar klein, sodass eine Beschreibung nur mit den ersten zwei Termen auch ein gutes Ergebnis liefern würde. Somit ist zu vermuten, dass an dem exzeptionellen Punkt zwei Resonanzen entarten, aber eine Resonanz in der Nähe liegt. Sie könnte sogar denselben Energieeigenwert besitzen, aber einen eigenen Eigenzustand, der nicht mit den beiden anderen entartet ist. Jedoch muss in der Rechnung die Resonanz wegen der Anzahl der Nullstellen trotzdem als dreifach entartete Resonanz behandelt werden.

Bei der zweiten Analyse, bei der man drei nicht entartete Resonanzen erhält, unterscheiden sich die beiden „äußeren“ Resonanzen (diejenigen bei  $E_1$  und  $E_3$ ) wieder um einen Faktor von ungefähr  $-1$ . Zudem ist der Maximalwert beider betragsmäßig größer als das Maximum des untersuchten Spektrums. Die „mittlere“ Resonanz hingegen ist kleiner als die beiden anderen. In [5, 8] wurde das Verhalten der Resonanzen untersucht, wenn man mit den Feldstärken immer näher an den exzeptionellen Punkt rückt. Dann besitzen die Energieeigenwerte auch einen immer geringeren Abstand zur Resonanzenergie der entarteten Zustände direkt am exzeptionellen Punkt. Die Dipolmatrixelemente der beiden Resonanzen, von denen auch der Wirkungsquerschnitt abhängt, werden immer größer, wobei aber der Wirkungsquerschnitt einem endlichen Wert entgegen strebt. Dies erklärt die großen Amplituden, die bei dieser Analyse bestimmt wurden.

Um den polynomiellen Anteil der bei der ersten Analyse erhaltenen Anpassung zu veranschaulichen, sollen hier anstatt des gesamten Wirkungsquerschnittes  $\sigma(E)$  nur ein paar der Summanden aus Gleichung (4.1) betrachtet werden. Diese sind die Terme der entarteten Resonanz bei  $E_{\text{EP}}$ . Außerdem wird nicht das reelle Spektrum betrachtet, sondern nur diejenigen Resonanzen, die in der unteren Halbebene liegen. Auf diese Weise erhält man eine Funktion  $f(E)$  mit

$$f(E) = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{d_{\alpha}}{(E - E_{\text{EP}})^{\alpha}} = \frac{d_1}{E - E_{\text{EP}}} + \frac{d_2}{(E - E_{\text{EP}})^2} + \frac{d_3}{(E - E_{\text{EP}})^3}.$$

(a) Ergebnis der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-2}$ : eine dreifach entartete Resonanz(b) Ergebnis der Analyse mit  $g_{\max} = 10^{-5}$ : drei nicht entartete Resonanzen

**Abb. 4.3.:** Ergebnisse der Analysen des Photoionisationswirkungsquerschnittes aus Abbildung 4.1, welche mit verschiedenen Parametern  $g_{\max}$  durchgeführt wurde. Der Parameter  $g_{\max}$  bezeichnet hier den maximalen Abstand zweier Punkte, bei dem angenommen wird, dass sie zur selben Nullstelle gehören. Neben den gegebenen Daten („Daten“) ist jeweils die Kurve eingezeichnet („Anpassung“), die man aus den Ergebnissen der Analyse erhält.

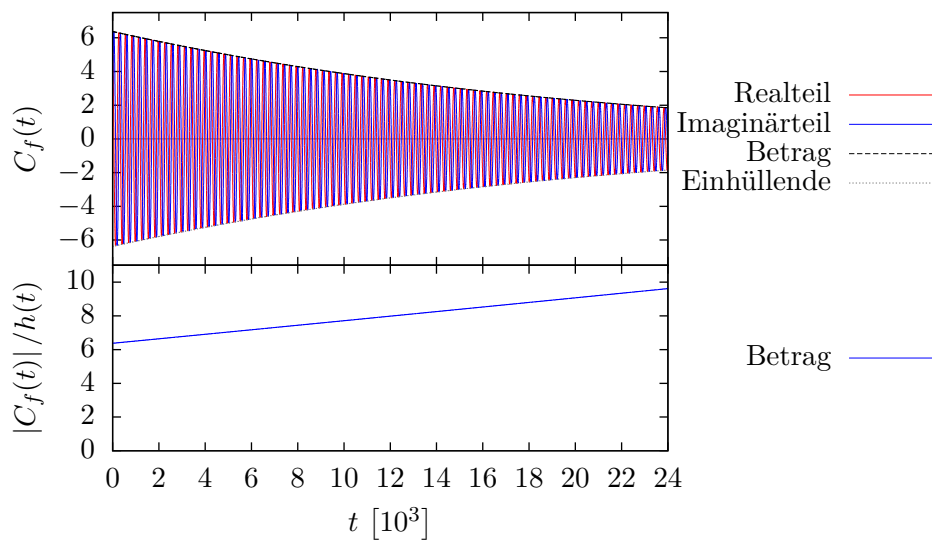
Für die Fouriertransformierte  $C_f(t)$  von  $f(E)$  erhält man mit Gleichung (2.12):

$$C_f(t) = -i \left( d_1 - i d_2 t - d_3 t^2 \right) \cdot \exp(-i E_{EP} t).$$

Diese ist auch in Abbildung 4.4 eingezeichnet. Man erkennt, dass es eine Schwingung ist, deren Betrag abfällt. Um den polynomiellen Anteil besser zu sehen, kann man die Fouriertransformierte  $C_f(t)$  durch den Betrag der enthaltenen Exponentialfunktion dividieren. Dieser wird in Abbildung 4.4  $h(t)$  genannt und lautet:

$$h(t) = \exp(\text{Im}(E_{EP})t).$$

Das Produkt enthält dann nur den Betrag des polynomiellen Anteiles. Dieses ist auch in Abbildung 4.4 dargestellt; man erkennt, dass der polynomielle Anteil einer Gerade ähnlich sieht. Dies liegt daran, dass der dritte Term vernachlässigbar klein ist. Wäre der dritte Term größer, so sähe man einen eher parabelförmigen Verlauf. Auf jeden Fall ist jedoch deutlich zu erkennen, dass ein polynomieller Anteil vorhanden ist und es sich somit um eine entartete Resonanz handelt.



**Abb. 4.4.:** Fouriertransformierte  $C_f(t)$  der Funktion  $f(E)$ .

## 5. Zusammenfassung

Zu Beginn dieser Arbeit wurde die Harmonische Inversion beschrieben. Diese stellt eine Methode dar, aus einem Spektrum, welches sich als Summe von komplexen Lorentzkurven beschreiben lässt, die Lagen und Amplituden der Peaks zu bestimmen. Danach wurde die Harmonische Inversion erweitert, sodass sie auch auf Spektren mit entarteten Resonanzen anwendbar ist, wobei die entarteten Resonanzen die Form von höheren Ordnungen besitzen. Die Vorgehensweise bleibt dabei gleich: zuerst wird das zu untersuchende Spektrum fouriertransformiert, dann lassen sich mit der Padé-Näherung die Koeffizienten zweier Polynome bestimmen, mit denen wiederum die gesuchten Parameter berechnet werden. Hierfür werden erweiterte Formeln benötigt, welche in dieser Arbeit allgemein hergeleitet wurden.

Danach wurden zwei selbst erstellte Beispielspektren untersucht, wobei die Parameter, mit denen das Spektrum erstellt wurde, gut reproduziert werden konnten. Außerdem konnten ein paar wichtige Dinge gesehen werden, worauf man bei der Untersuchung von Spektren mit der Harmonischen Inversion achten muss.

Zuletzt wurde der Photoionisationswirkungsquerschnitt eines Wasserstoffatoms in gekreuzten statischen elektrischen und magnetischen Feldern untersucht. Die Felder waren dabei so dimensioniert, dass sie in der Nähe eines exzeptionellen Punktes lagen. Dies ist im Parameterraum ein Verzweigungspunkt von Eigenwerten, an welchem nicht nur die Eigenwerte, sondern auch die Eigenzustände entarten. Nach [6] soll jedoch schon in der Nähe des exzeptionellen Punktes dessen Einfluss sichtbar sein. Dies konnte bei der Analyse des Spektrums dadurch bestätigt werden, dass die Beschreibung des entsprechenden Peaks als entartete Resonanz genauso gut ist wie die Beschreibung als Summe aus mehreren nicht entarteten Resonanzen.



# A. Mathematische Hilfsmittel und Herleitungen

## A.1. Stirlingzahlen zweiter Art

Die Stirlingzahlen zweiter Art können nach [10] – mit der Konvention, dass  $0^0 = 1$  ist – folgendermaßen definiert werden:

$$\mathcal{S}(n, k) = \frac{1}{k!} \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^n \binom{k}{\mu},$$

wobei  $n, k \in \mathbb{N}$  ist. Sie können interpretiert werden als die Anzahl der Möglichkeiten,  $n$  Objekte auf  $k$  Plätze zu verteilen, ohne dass dabei ein Platz leer bleibt.

Wie bei den Binomialkoeffizienten gibt es auch für die Stirlingzahlen eine rekursive Beziehung. Es gilt nämlich

$$\mathcal{S}(n+1, k) = \mathcal{S}(n, k-1) + k \cdot \mathcal{S}(n, k), \quad (\text{A.1})$$

wie man in folgender Rechnung sieht:

$$\begin{aligned} & \mathcal{S}(n, k-1) + k \mathcal{S}(n, k) \\ &= \frac{1}{(k-1)!} \left( \sum_{\mu=0}^{k-1} (-1)^{k-\mu-1} \mu^n \binom{k-1}{\mu} + \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^n \binom{k}{\mu} \right) \end{aligned}$$

da  $\binom{k-1}{k} = 0$  ist, erhält man:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(k-1)!} \left( \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^n \left( \binom{k}{\mu} - \binom{k-1}{\mu} \right) \right) \\ &= \frac{1}{(k-1)!} \left( \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^n \binom{k-1}{\mu-1} \right) \\ &= \frac{1}{k!} \left( \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^n \frac{\mu \cdot k!}{\mu! (k-\mu)!} \right) \\ &= \frac{1}{k!} \left( \sum_{\mu=0}^k (-1)^{k-\mu} \mu^{n+1} \binom{k}{\mu} \right) \\ &= \mathcal{S}(n+1, k) \end{aligned}$$

Die Stirlingzahlen können über die Rekursionsformel aus Gleichung (A.1) auch definiert werden – wie es auch bei den Binomialkoeffizienten der Fall ist. Als Startwerte dienen die Werte  $\mathcal{S}(0, 0) = 1$  und  $\mathcal{S}(0, n) = \mathcal{S}(n, 0) = 0$  für  $n > 0$ . Ein paar Stirlingzahlen zweiter Art sind in Tabelle A.1 aufgelistet.

**Tab. A.1.:** Ein paar der Stirlingzahlen zweiter Art

$\mathcal{S}(n, k)$	$k$				
	1	2	3	4	5
$n = 1$	1				
$n = 2$	1	1			
$n = 3$	1	3	1		
$n = 4$	1	7	6	1	
$n = 5$	1	15	25	10	1

## A.2. Herleitung der Ableitungsformel

Die Ableitungsformel, die in Abschnitt 2.3.2 verwendet wurde, lautet:

$$(x\partial_x)^\alpha f(x) = \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) x^n f^{(n)}(x). \quad (\text{A.2})$$

Diese Gleichung ist offensichtlich erfüllt für  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 1$ . Setzt man die Richtigkeit von Gleichung (A.2) für ein  $\alpha > 0$  voraus, so folgt für  $\alpha + 1$ :

$$\begin{aligned} (x\partial_x)^{\alpha+1} f(x) &= (x\partial_x) \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) x^n f^{(n)}(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) \left( n x^n f^{(n)}(x) + x^{n+1} f^{(n+1)}(x) \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) n x^n f^{(n)}(x) + \sum_{n=1}^{\alpha+1} \mathcal{S}(\alpha, n-1) x^n f^{(n)}(x) \end{aligned}$$

und da  $\mathcal{S}(\alpha, 0) = 0$  für  $\alpha > 0$  und  $\mathcal{S}(\alpha, \alpha + 1) = 0$ :

$$\begin{aligned} (x\partial_x)^{\alpha+1} f(x) &= \sum_{n=0}^{\alpha+1} (n \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) + \mathcal{S}(\alpha, n-1)) x^n f^{(n)}(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha+1} \mathcal{S}(\alpha+1, n) x^n f^{(n)}(x) \end{aligned}$$

Mit vollständiger Induktion folgt, dass Gleichung (A.2) für alle  $\alpha \in \mathbb{N}$  gilt.



### A.3. Herleitung der Reihenformel

Betrachtet man nun die Reihe der Funktion  $(1-x)^{-1}$ , die für  $|x| < 1$  absolut konvergiert, so erhält man (ebenfalls für  $|x| < 1$ ):

$$\begin{aligned} (x\partial_x) \frac{1}{1-x} &= (x\partial_x) \sum_{n=0}^{\infty} x^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot x^n \end{aligned}$$

Zudem ist die  $k$ -te Ableitung von  $(1-x)^{-1}$  gleich  $k! \cdot (1-x)^{-k-1}$ . Mit Gleichung (A.2) gilt dann:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} n^\alpha \cdot x^n &= (x\partial_x)^\alpha \frac{1}{1-x} \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) x^n \cdot \partial_x^n \frac{1}{1-x} \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \frac{n! \cdot x^n}{(1-x)^{n+1}} \end{aligned}$$

In Abschnitt 2.3.2 wird nicht über  $x$ , sondern über  $z_k/z$  summiert. Für die weitere Rechnung bietet es sich an, die Terme auf den Hauptnenner  $(1-z/z_k)^{\alpha+1}$  zu bringen und zusammenzufassen:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=0}^{\alpha} n! \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \frac{(z_k/z)^n}{(1-z_k/z)^{n+1}} \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} n! \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \left(\frac{z_k}{z}\right)^n \cdot \left(\frac{z}{z_k}\right)^{n+1} \cdot \left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{\alpha-n} \cdot \left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{-\alpha-1} \\ &= \sum_{n=0}^{\alpha} n! \cdot \mathcal{S}(\alpha, n) \cdot \underbrace{(-1)^{\alpha+1} \left(\frac{z}{z_k}\right) \left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{\alpha-n}}_{f_{\alpha+1}(z)} \cdot \left(1 - \frac{z}{z_k}\right)^{-\alpha-1} \\ &= \qquad \qquad \qquad f_{\alpha+1}(z) \qquad \qquad \cdot \left(1 - \frac{z}{z_k}\right)^{-\alpha-1}. \end{aligned}$$

Dabei ist

$$f_{k,\alpha}(z) = (-1)^\alpha \cdot \sum_{\nu=0}^{\alpha-1} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot \left(\frac{z}{z_k}\right) \left(\frac{z}{z_k} - 1\right)^{\alpha-\nu-1},$$

wie es auch in Gleichung (2.14) angegeben ist.

## A.4. Koeffizienten

Um die  $l$ -te Ableitung von  $f_{k,\alpha}(z)$  zu berechnen, eignet sich die Darstellung von  $f_{k,\alpha}(z)$  aus Gleichung (2.15) besser. Es ist:

$$f_{k,\alpha}(z) = \sum_{\mu=1}^{\alpha} \left(\frac{z}{z_k}\right)^{\mu} \cdot \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\mu+\nu} \cdot \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu}.$$

Für  $l > 0$  lautet die Ableitung von  $(z/z_k)^{\mu}$  an der Stelle  $z_k$

$$\begin{aligned} \left(\prod_{\nu=\mu-l+1}^{\mu} \nu\right) \cdot (z_k/z_k)^{\mu-l} \cdot z_k^{-l} &= z_k^{-l} \cdot \prod_{\nu=\mu-l+1}^{\mu} \nu \\ &= \begin{cases} \frac{\mu!}{(\mu-l)!} z_k^{-l} & \text{für } 0 < l \leq \mu \\ 0 & \text{für } l > \mu \end{cases} \end{aligned}$$

Damit erhält man für die  $l$ -te Ableitung von  $f_{k,\alpha}(z)$  ( $l > 0$ ):

$$f_{k,\alpha}^{(l)}(z) = \sum_{\mu=l}^{\alpha} \frac{\mu!}{(\mu-l)!} z_k^{-l} \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\mu+\nu} \cdot \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu}$$

bzw.

$$f_{k,\alpha}^{[l]}(z) = \sum_{\mu=l}^{\alpha} \binom{\mu}{l} z_k^{-l} \cdot \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\mu+\nu} \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu}.$$

Die Koeffizienten  $\gamma_{\alpha}^{[l]}$ , die über  $f_{k,\alpha}^{[l]}(z_k) = (-1)^{\alpha} z_k^{-l} \gamma_{\alpha}^{[l]}$  definiert sind (vgl. auch Gleichung (2.18)), berechnen sich damit folgendermaßen:

$$\gamma_{\alpha}^{[l]} = \sum_{\mu=l}^{\alpha} \sum_{\nu=0}^{\alpha-\mu} \binom{\mu}{l} \binom{\alpha-\nu-1}{\alpha-\nu-\mu} \cdot \nu! \cdot \mathcal{S}(\alpha-1, \nu) \cdot (-1)^{\alpha+\mu+\nu}.$$

## Literaturverzeichnis

- [1] J. Main. Use of harmonic inversion techniques in semiclassical quantization and analysis of quantum spectra. *Physics Reports* 316, 233 – 338 (1999).
- [2] J. Main, P. A. Dando, D. Belkić und H. S. Taylor. Decimation and harmonic inversion of periodic orbit signals. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 33, 1247–1263 (2000).
- [3] D. Belkić, P. A. Dando, J. Main und H. S. Taylor. Three novel high-resolution nonlinear methods for fast signal processing. *The Journal of Chemical Physics* 113, 6542–6556 (2000).
- [4] H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Exceptional points in atomic spectra. *Physical Review Letters* 99, 173003 (2007).
- [5] H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Exceptional points in the spectra of atoms in external fields. *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 79, 053408 (2009).
- [6] H. Cartarius und N. Moiseyev. Fingerprints of exceptional points in the survival probability of resonances in atomic spectra. *Phys. Rev. A* 84, 013419 (2011).
- [7] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, Cambridge, second edition Auflage (1992).
- [8] H. Cartarius. *Exceptional points in atomic spectra and Bose-Einstein condensates*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2008).
- [9] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge (2011).
- [10] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York (1964).



# Danksagung

An dieser Stelle sei allen herzlich gedankt, die mich beim Schreiben dieser Arbeit unterstützt haben.

Besonderer Dank geht an meinen Betreuer, Herr Apl. Prof. Dr. Jörg Main. Er war stets freundlich und hilfsbereit, sodass ich mich mit Fragen jederzeit an ihn wenden konnte. Mit seiner Erfahrung hat er mir manchen Rat erteilt. Ebenso danke ich ihm für das Korrekturlesen.

Vielen Dank auch Herrn Dr. Holger Cartarius. Durch das Bereitstellen seiner Daten ermöglichte er die physikalische Anwendung der Harmonischen Inversion.

Im Büro zusammen mit Rüdiger Fortanier war stets eine gute Atmosphäre. Sowohl für diese als auch für manche Tipps und Gespräche, die mich in fachlichen und praktischen Dingen weitergebracht haben, möchte ich mich herzlich bei ihm bedanken.

Auch bei meinem Kommilitonen Andreas Löhle möchte ich mich bedanken für das Korrekturlesen und das freundschaftliche Miteinander während des Semesters.

Herrn Prof. Dr. Wunner, dem Leiter des 1. Institutes für Theoretische Physik danke ich für die Möglichkeit, hier meine Bachelorarbeit schreiben zu dürfen. Ihm und allen anderen Mitarbeitern des Institutes bin ich dankbar für die freundliche Aufnahme am Institut.



## **Ehrenwörtliche Erklärung**

Ich erkläre,

- dass ich diese Bachelorarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- dass ich die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht habe, es sei denn, der Prüfungsausschuss hat die Veröffentlichung vorher genehmigt
- und dass der Inhalt des elektronischen Exemplars mit dem des Druckexemplars übereinstimmt.

Stuttgart, den 6. August 2013

*Jacob Cornelius Fuchs*

