



KFA

KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG

Zentralinstitut für Angewandte Mathematik

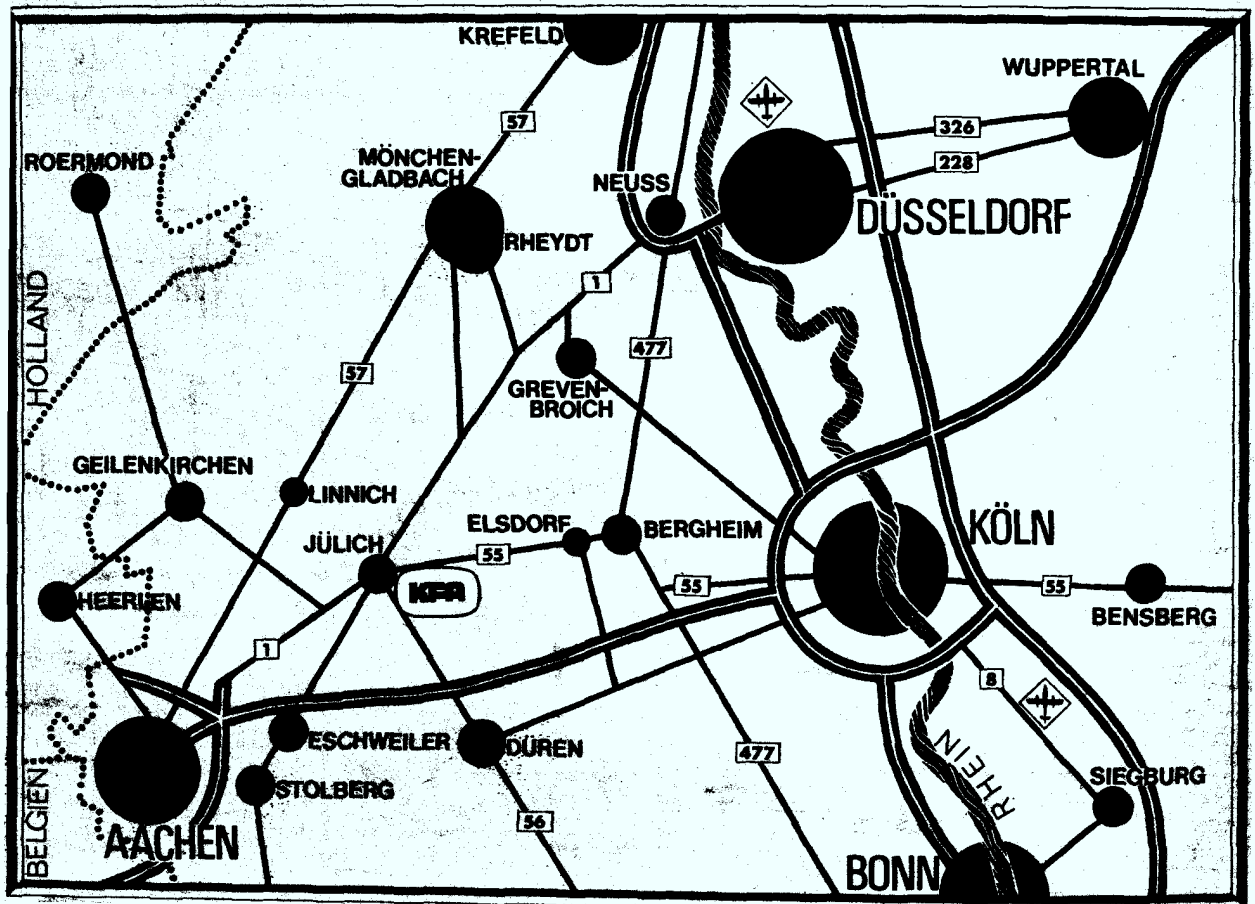
**Über die stationäre Lösung
der Diffusionsgleichung mit Drift-Term**

von

M. Profant und H. Walther

JüI - 1027 - MA
Dezember 1973

Als Manuskript gedruckt



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1027
 Zentralinstitut für Angewandte Mathematik Jülich - 1027 - MA

- Dok.: Radiation Effect - Lattice Defect
- Lattice Defect - Drift Velocity
- Fluence
- Elliptic PDE - Numerical Solution
- Variational Method - Ritz Method

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
 Jülich, Bundesrepublik Deutschland

Über die stationäre Lösung der Diffusionsgleichung mit Drift-Term

von

M. Profant und H. Walther

Einleitung

In der vorliegenden Arbeit wird eine elliptische Differentialgleichung in E^3 behandelt, die den Strom der Defekte in einem strahlgeschädigten metallischen Werkstoff beschreibt. Die Defektstruktur in diesem Werkstoff ist nicht nur durch die Erzeugungsart der Defekte, sondern in hohem Maße auch durch die Wechselwirkung der während der Bestrahlung thermisch beweglichen Defekte bestimmt. Diese Wechselwirkung ist in metallischen Werkstoffen im wesentlichen elastischer Natur. Dadurch führen die Punktdefekte eine Driftdiffusion aus, die in guter Näherung durch Gleichung (1) beschrieben wird. Dabei ist weniger die Lösung der Gleichung (1) von Interesse, als vielmehr der Wert des Flußintegrals (4).

Im ersten Kapitel wird gezeigt, daß das Flußintegral (4) der Minimalwert des Funktionals der entsprechenden Variationsaufgabe ist. Diese Tatsache bestimmt auch die Lösungsmethode. Für die Lösung der Variationsaufgabe haben wir das Ritz'sche Verfahren gewählt, wobei die Koordinatenfunktionen die Eigenfunktionen des Laplace-Operators sind. Diese Wahl der Koordinatenfunktionen garantiert uns (wegen der Ähnlichkeit - im Sinne von Michlin - beider Operatoren), daß sie in einem geeigneten Hilbertraum ein minimales System bilden. Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung wird im Kapitel 2 gezeigt, wo auch die erforderlichen Grundbegriffe kurz skizziert sind. Für die numerische Rechnung empfiehlt es sich, die Anzahl der dreidimensionalen Integrationen möglichst zu reduzieren, um annehmbare Rechenzeiten zu erreichen. Im Kapitel 3 (und im Anhang 4) wird daher gezeigt, daß für die Ritz'sche Matrix nur eindimensionale und zweidimensionale Integrationen notwendig sind.

Um die Güte unserer Ergebnisse abzuschätzen, rechnen wir das Flußintegral auch direkt aus der (numerisch) bekannten Lösung und vergleichen (im Kapitel 4) mit dem Minimum des Funktionals. Wünschenswert wäre die Gleichheit beider Größen; wir erhalten eine Differenz von etwa 1 %. Testfall für unser Programm ist der Fall $G = 1$ (winkelunabhängiger Fall), wo wir das Problem analytisch lösen können. Die numerischen und analytischen Ergebnisse stimmen in diesem Fall auf 4 - 5 Stellen überein. Die ganze Rechnung für den winkelunabhängigen Fall wurde für fünf verschiedene Parameter B (zwischen $B = 330$ und $B = 2.468$) durchgeführt.

Dabei hat sich gezeigt, daß das Verhältnis zwischen dem Flußintegral für $G = 1$ und dem Flußintegral für G aus (2) ungefähr bei 79 % liegt.

Die Autoren danken Herrn R. Kaussen und Herrn G. Groten für ihre Hilfe bei der Programmerstellung und Herrn J. Wick für wertvolle mathematische Diskussionen.

1. Formulierung des Problems

Im Äußeren der Einheitskugel des dreidimensionalen euklidischen Raums suchen wir die Lösung $c = c(r, \theta, \phi)$ der elliptischen Differentialgleichung

$$(1) \quad \operatorname{div} \left[\operatorname{grad} c + c \cdot \operatorname{grad} \left(-\frac{B G(\theta, \phi)}{r^3} \right) \right] = 0.$$

Mit r , θ und ϕ bezeichnen wir in der üblichen Art und Weise die sphärischen Koordinaten. Es ist $G = G(\theta, \phi)$ eine bekannte Funktion, die nicht von r abhängt.

In unserem Falle gilt:

$$(2) \quad G = 5 \cdot (\sin^4 \theta \cdot \cos^4 \phi + \sin^4 \theta \sin^4 \phi + \cos^4 \theta) - 3.$$

Weiterhin ist B ein reeller Parameter mit $330 \leq B \leq 2468$.

Die Randbedingungen für c lauten:

$$(1a) \quad c = 0 \quad \text{für} \quad r = 1 \quad \text{und}$$

$$(1b) \quad c \rightarrow 1 \quad \text{für} \quad r \rightarrow \infty.$$

Es sei V_R die durch $1 < r < R$ definierte Kugelschale, S_R sei ihre äußere und S_1 ihre innere Begrenzungsfläche. Mit

$$(3) \quad g = g(r, \theta, \phi) = -\frac{B \cdot G(\theta, \phi)}{r^3}$$

gilt dann nach dem Gauß'schen Integralsatz für alle $R > 1$:

$$\begin{aligned} \int_{V_R} \operatorname{div} \left[\operatorname{grad} c + c \operatorname{grad} g \right] \cdot dV &= \\ &= \int_{S_R} \left(\frac{\partial c}{\partial r} + c \frac{\partial g}{\partial r} \right) dS - \int_{S_1} \left(\frac{\partial c}{\partial r} + c \frac{\partial g}{\partial r} \right) dS. \end{aligned}$$

Wegen (1) ist die linke Seite dieser Relation Null. Deshalb sind die beiden Flächenintegrale auf der rechten Seite gleich. Und das gilt für jedes beliebige $R > 1$.

Die Berechnung des somit von R unabhängigen Flußintegrals

$$(4) \quad \Phi = \Phi(B) = \int_{S_R} \left(\frac{\partial c}{\partial r} + c \frac{\partial g}{\partial r} \right) dS$$

ist die Hauptaufgabe dieser Arbeit.

Die Lösung c der Gleichung (1) setzen wir in der folgenden Gestalt an:

$$(5) \quad c = \bar{u}(r, \theta, \phi) \cdot \exp\left(\frac{g}{2}\right).$$

Die so definierte Funktion \bar{u} erfüllt dann die Differentialgleichung

$$(6) \quad -\Delta \bar{u} + \rho \bar{u} = 0$$

mit den Randbedingungen

$$(6a) \quad \bar{u} = 0 \quad \text{für } r = 1 \quad \text{und}$$

$$(6b) \quad \bar{u} \rightarrow 1 \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

Die Gültigkeit von (6b) ist leicht einzusehen, da $\lim_{r \rightarrow \infty} g = 0$ ist.

In (6) haben wir zur Abkürzung gesetzt:

$$(7) \quad \rho = \rho(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4}(\text{grad } g)^2 - \frac{1}{2} \Delta g.$$

In dem auf (2) zurückgehenden Spezialfall gilt:

$$(8) \quad \rho = \frac{B^2}{4r^8} \rho_1(\theta, \phi) - \frac{7B}{2r^5} \rho_2(\theta, \phi)$$

mit

$$(9a) \quad \rho_1 = 9 \cdot \left[5(\sin^4 \theta \cos^4 \phi + \sin^4 \theta \sin^4 \phi + \cos^4 \theta) - 3 \right]^2 + \\ + 400 \sin^2 \theta \cos^2 \theta (\sin^2 \theta \cos^4 \phi + \sin^2 \theta \sin^4 \phi - \cos^2 \theta)^2 + \\ + 25 \sin^6 \theta \sin^2 4\phi,$$

$$(9b) \quad \rho_2 = 4 - 5 \left(\sin(2\theta) + \sin^2 \theta \cdot \sin^2(2\phi) \right).$$

Das Flußintegral (4) hat jetzt die Form:

$$(10) \quad \phi = \int_R \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \exp\left(-\frac{g}{2}\right) dS - \frac{1}{2} \int_R \bar{u} \frac{\partial g}{\partial r} \cdot \exp\left(-\frac{g}{2}\right) dS$$

Für $r \rightarrow \infty$ gilt $\lim_{r \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{g}{2}\right) = 1$ und $\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\partial g}{\partial r} = 0$. Deshalb erhalten wir

$$(11) \quad \phi = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{S_R} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} dS.$$

Das Differentialgleichungsproblem (6) ersetzen wir nun durch ein äquivalentes Variationsproblem. Und zwar minimieren wir das Funktional

$$(12) \quad J(v) = \int_V [(\text{grad } v)^2 + \rho v^2] dV.$$

Dabei erstreckt sich die Integration über das Äußere der Einheitskugel. Zur Konkurrenz lassen wir Funktionen zu, für die das Integral (12) einen Sinn hat. Weiterhin müssen diese Funktionen die Randbedingungen (6a) und (6b) erfüllen. Unter anderen konkurriert z.B. $v_0 = 1 - \frac{1}{r}$ mit. Diese Funktion wäre die Lösung des Problems im Fall der reinen Laplace-Gleichung ($\rho = 0$).

Der Betrag des Gradienten von ρ wächst für kleine r sehr stark an. Dies scheint der Grund dafür zu sein, daß Versuche mit Differenzenverfahren scheiterten.

Die Autoren halten daher den Übergang zum Variationsproblem für einen erfolgversprechenderen Ansatz zur numerischen Lösung. Da ρ jedoch Werte beider Vorzeichen annimmt, sieht man nicht unmittelbar ein, daß ein Minimalwert des Funktional (12) überhaupt existieren muß. Daß die Variationsmethode gerechtfertigt ist, wird erst in § 2. mit Hilfe eines verwandten Problems bewiesen.

Nach (6) und (12) ist der Minimalwert des Funktional

$$(13) \quad J_{\text{Min}} = J(\bar{u}) = \\ = \int_V (\rho \bar{u}^2 - \bar{u} \Delta \bar{u}) dV + \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{S_R} \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} dS - \int_{S_1} \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} dS .$$

Wegen der Randbedingungen (6a) und (6b) gilt dann

$$(14) \quad J_{\text{Min}} = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{S_R} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} dS = \phi .$$

Der Minimalwert des Funktional (12) ist also gleich dem gesuchten Flußintegral (4). Und das ist der entscheidende numerische Vorteil der Variationsmethode.

Die starken Oszillationen von ρ machen auch bei dieser Methode Schwierigkeiten. Da ϕ aber jetzt als Volumenintegral beschrieben werden kann, werden diese Fehler weitgehend ausgeglättet.

Bei der zuerst versuchten Lösung des Differentialgleichungsproblems muß man den Fluß ϕ aus einem Flächenintegral berechnen. Die starken Gradienten von g bzw. ρ verursachen dann katastrophale Fehler in ϕ .

2. Der theoretische Hintergrund

In diesem Abschnitt behandeln wir die bekannten Sätze aus der Theorie der Hilberträume, die wir später bei unserer Aufgabe anwenden [1].

Der Einfachheit wegen betrachten wir zuerst die Randwertaufgaben mit homogenen Randbedingungen.

Inhomogene Randbedingungen können wir ja durch geeignete Wahl der Inhomogenität der Differentialgleichung berücksichtigen.

Die erste Randwertaufgabe lautet dann: Gesucht ist eine Funktion $u(x)$ im Gebiet V mit Rand S , welche die Gleichung

$$(15) \quad Au = f \text{ in } V$$

und die Randbedingung

$$(15a) \quad u = 0 \text{ in } S \text{ erfüllt.}$$

Wir setzen voraus, daß f in V stetig und quadratisch summierbar ist. Von u fordern wir noch die Stetigkeit in $\bar{V} = V + S$ und die Existenz der 2. Ableitungen in V . Weiterhin seien u und die ersten partiellen Ableitungen in V quadratisch summierbar.

Dann können wir u und f als Elemente des Hilbertraums H der über V quadratisch summierbaren Funktionen auffassen.

Einen symmetrischen Operator A in H nennen wir positiv, wenn $(Au, u) \geq 0$ ist für alle $u \in H$, wobei $(Au, u) = 0$ nur für das Nullelement von H gilt. Ein positiver Operator heißt positiv definit, wenn ein $\gamma > 0$ existiert, sodaß für alle $u \in H$ ist $(Au, u) \geq \gamma \|u\|^2$.

Es gibt Beispiele für Operatoren, die in einem beschränkten Gebiet positiv definit, in einem unbeschränkten Gebiet aber lediglich positiv sind. Beim Übergang vom beschränkten zum unbeschränkten Gebiet kann auch die Diskretheit des Spektrums verlorengehen.

Es sei nun $D(A)$ der Definitionsbereich eines positiven Operators A . Auf der Menge $D(A)$ können wir ein neues Skalarprodukt $[u, v] = (Au, v)$ erklären. Nach der Vervollständigung erhalten wir den sog. Energie-Raum H_A . Für positiv definite Operatoren A gilt $H_A \subset H$. Es gelten nun folgende Sätze:

Satz 1: Sei A ein positiver Operator, dann hat die Gleichung (15) in H höchstens eine Lösung. Ist diese Gleichung in H lösbar, so realisiert diese Lösung das Minimum des Funktionals

$$(16) \quad F(u) = (Au, u) - 2(f, u)$$

in der Menge $D(A)$. Andererseits erfüllt die Funktion, die das Funktional in $D(A)$ minimiert, auch die Gleichung (15).

Satz 2: A sei ein positiver Operator, und das lineare Funktional (f, u) sei beschränkt in H_A . Dann existiert ein Element $u_0 \in H_A$, welches das Funktional $F(u)$ aus (16) minimiert.

Beweis: Nach dem Riesz'schen Satz impliziert die Beschränktheit des Funktionals (f, u) die Existenz eines Elementes $u_0 \in H_A$, so daß gilt:

$$(f, u) = [u_0, u].$$

Jetzt können wir (16) so darstellen

$$\begin{aligned} F(u) &= [u, u] - 2(u, f) = \\ &= [u, u] - 2[u_0, u] = \\ &= \|u - u_0\|_A^2 - \|u_0\|_A^2. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich, daß $u_0 \in H_A$ das Minimum unseres Problems ist.

Im folgenden betrachten wir ein unendliches Gebiet V . Dieses soll Würfel mit beliebig großer Kantenlänge enthalten. Man spricht hier auch von einem unendlichen "Gebiet vom 1. Typ". Zu dieser Klasse gehören z.B. alle Gebiete, die außerhalb endlicher Grenzen liegen.

In einem Gebiet V vom 1. Typ sei der Differentialoperator A durch

$$(17) \quad Au = - \sum_{j,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(A_{jk} \frac{\partial u}{\partial x_k} \right), \quad \text{mit } A_{jk} = A_{kj}$$

erklärt. Die Koeffizienten $A_{jk} = A_{jk}(x)$ seien im abgeschlossenen Gebiet \bar{V} zweimal stetig differenzierbar. Weiterhin gebe es zwei positive Konstanten M_1 und M_2 , so daß gilt:

$$(17a) \quad M_1 \sum_{k=1}^3 |t_k|^2 \leq \sum_{j,k=1}^3 A_{jk}(x) \cdot t_j \cdot t_k \leq \\ \leq M_2 \sum_{k=1}^3 |t_k|^2 .$$

Das Definitionsgebiet $D(A)$ des Operators bestehe aus allen finiten Funktionen (die außerhalb einer individuellen Sphäre verschwinden) und die in \bar{V} zweimal stetig differenzierbar sind.

Dann gilt der

Satz 3: Der im Vorangegangenen definierte Operator A ist positiv, und es gilt

$$(18) \quad (Au, u) = \int_V \sum_{j,k=1}^3 A_{jk} \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial u}{\partial x_k} dx .$$

Für die Existenz einer Lösung der entsprechenden Variationsaufgabe (16) zur Gleichung (15) brauchen wir noch die Beschränktheit des Funktionals (f, u) in der Metrik (18). Aus dieser Bedingung kann man zwei weitere Sätze herleiten.

Satz 4: Die Aufgabe (16) besitzt in H_A eine Lösung, wenn gilt

$$(19) \quad \int_V |x|^2 \cdot |f(x)|^2 dx < +\infty .$$

Satz 5: Die Minimierungsaufgabe (16) besitzt dann und nur dann eine Lösung in H_A , wenn die "Divergenzbedingung" erfüllt ist. Um dieser Bedingung gerecht zu werden, muß sich f in der Form $f(x) = \operatorname{div} F(x)$ mit $|F| \in L_2(V)$ darstellen lassen.

Wir gehen jetzt zurück zur ursprünglichen Differentialgleichung (1), um Existenz und Eindeutigkeit des Problems zu zeigen.

Wir suchen die Lösung in der Gestalt

$$(20) \quad c = \bar{v} \cdot \exp(-g) .$$

Durch den Ansatz (20) wird $\bar{v} = \bar{v}(r, \theta, \phi)$ eindeutig definiert. Für diese Funktion ergibt sich die Differentialgleichung:

$$(21) \quad -\operatorname{div}(\exp(g) \cdot \operatorname{grad} \bar{v}) = 0$$

mit den Randbedingungen

$$(21a) \quad \bar{v} = 0 \quad \text{für } r = 1 \quad \text{und}$$

$$(21b) \quad \bar{v} \rightarrow 1 \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

Der Differentialoperator der Gleichung (21) hat schon die gewünschte Form (17). Um die inhomogenen Randbedingungen zu beseitigen, zerlegen wir die Lösung \bar{v} in $\bar{v} = v_0 + v$. Dabei soll v_0 eine zweimal stetig differenzierbare Funktion sein, die die Randbedingungen (21a) und (21b) erfüllt; es käme etwa in Frage:

$$(22) \quad v_0 = 1 - \frac{1}{r^2}.$$

Dann erhält man wegen (21) für v die Differentialgleichung

$$(23) \quad -\operatorname{div}(\exp(-g) \cdot \operatorname{grad} v) = \\ = \operatorname{div}(\exp(-g) \cdot \operatorname{grad} v_0) = f(x)$$

mit den homogenen Randbedingungen

$$(23a) \quad v = 0 \quad \text{für } r = 1 \quad \text{und}$$

$$v \rightarrow 0 \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

Die rechte Seite

$$(24) \quad f = \operatorname{div}(\exp(-g) \cdot \operatorname{grad} v_0)$$

erfüllt die Bedingung (19), wenn wir v_0 gemäß (22) wählen.

Daher hat die Gleichung (23) nach Satz 4 eine eindeutige Lösung. Diese Aussage gilt dann auch für das Problem (21) und die ursprüngliche Differentialgleichung (1). Und das gilt dann auch für das Problem (6), das wir aus (1) hergeleitet hatten.

Um die inhomogenen Randbedingungen der Gleichung (6) zu beseitigen, machen wir den Lösungsansatz

$$(25) \quad \bar{u} = u_0 + u \quad \text{mit unbekannter Funktion } u \text{ und}$$

$$(25a) \quad u_0 = 1 - \frac{1}{r^2}.$$

Dann haben wir die partielle Differentialgleichung

$$(26) \quad -\Delta u + \rho u = \Delta u_0 - \rho u_0 \quad \text{mit}$$

$$(26a) \quad u = 0 \quad \text{für } r = 0 \quad \text{und}$$

$$(26b) \quad u \rightarrow 0 \quad \text{für } r \rightarrow \infty.$$

Das Funktional der (26) entsprechenden Variationsaufgabe ist

$$(27) \quad F_0(u) = \int_V [(\text{grad } u)^2 + \rho u^2 - 2(\Delta u_0 - \rho u_0)u] dv$$

Es unterscheidet sich nun um einen konstanten Summanden vom Funktional

$$(28) \quad J(\bar{u}) = F(u) = \int_V ((\text{grad}(u+u_0))^2 + \rho(u+u_0)^2) dv.$$

Also gilt

$$(28a) \quad F_0(u) = F(u) - \int_V ((\text{grad } u_0)^2 + \rho u_0^2) \cdot dv.$$

Wir wollen jetzt die Minimalwerte der Funktionale (27) bzw. (28) bestimmen. Nach (14) erhalten wir das gesuchte Flußintegral als Minimum von (27).

3. Die Ritz'sche Methode

Das Minimum des Funktionals F berechnen wir mit der Ritz'schen Methode. Als Koordinatenfunktionen ϕ_{klm} wählen wir die Eigenfunktionen des Laplace-Operators mit homogenen Randbedingungen im Gebiet V :

$$(29) \quad \phi_{klm} = \phi_{klm}(r, \theta, \phi) = \\ = c_{klm} \frac{1}{\sqrt{r}} J_{k+\frac{1}{2}}\left(\frac{\gamma_{k,1}}{r}\right) P_k^m(\cos \theta) \cos(m\phi).$$

Hier sind die $\gamma_{k,1}$ die 1-ten Nullstellen der Bessel-Funktionen $J_{k+\frac{1}{2}}$ und P_k^m die abgeleiteten Legendre-Polynome. Den Normierungsfaktor c_{klm} setzen wir

$$(30) \quad c_{klm} = \frac{2^k \cdot k! (k-m)!}{(2k)!}.$$

Diese Größe ist der Zahlenfaktor in der Reihenentwicklung der Legendre-Funktionen [2].

Man wird zunächst (29) entsprechende Koordinatenfunktionen in $\sin(m\phi)$ vermissen. Für unser Problem brauchen wir aus Symmetriegründen die zuletzt genannten Funktionen nicht.

Aus Symmetriegründen können wir uns weiterhin auf die Funktionen (29) mit $m = 0, 4, 8, \dots$ und $k-m$ gerade beschränken.

Im folgenden ist des öfteren die Rede von Koordinatenfunktionen ϕ_s mit nur einem Index. Gemeint sind nach wie vor die Funktionen (29). Man muß sich nur vorstellen, daß diese Funktionen durch irgendeine Vorschrift in eine lineare Anordnung gebracht worden sind.

Durch

$$(31) \quad Bu = -\Delta u + \rho u$$

definieren wir noch den Operator B . Mit

$$B(u, v) = \int_V (\text{grad } u \cdot \text{grad } v + \rho \cdot u \cdot v) dV$$

haben wir dann die Ritz'sche Matrix

$$(32) \quad B_{ps} = B_{sp} = (B\phi_s, \phi_p), \quad \phi_s = \phi_{k_s, l_s, m_s}.$$

Die rechte Seite der Ritz'schen Gleichung ist dann

$$(33) \quad B_p = - (Bu_0, \phi_p)$$

oder ausgeschrieben

$$B_p = - \int_V (\text{grad } u_0 \text{ grad } \phi_p + \rho u_0 \phi_p) dV.$$

Die Näherungslösungen für die Variationsaufgabe (28) setzen wir in der Form

$$(34) \quad u = \sum_{i=1}^N x_i \phi_i$$

an. Für die Koeffizienten x_i , die im übrigen noch von N abhängen, gelten dann die Gleichungen:

$$(35) \quad \sum_{s=1}^N B_{ps} \cdot x_s = B_p \quad \text{für } p = 1, \dots, N.$$

Um die späteren Rechnungen auf der Maschine zu beschleunigen, müssen die in (32) und (33) enthaltenen Integrale noch vereinfacht werden. Die detaillierten Umrechnungen finden sich im Anhang A. Hier fassen wir lediglich die Ergebnisse zusammen.

Der Einfachheit halber lassen wir den Normierungsfaktor c_{klm} aus (30) zunächst außer Betracht. Er wird erst später berücksichtigt.

Dann gilt

$$(36) \quad \int_V \text{grad } \phi_{klm} \cdot \text{grad } \phi_{\alpha\beta\gamma} \cdot dV =$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } (k, l, m) \neq (\alpha, \beta, \gamma) \\ \gamma_{k,1}^2 J^2 \gamma_{k,1}^{k-\frac{1}{2}} \frac{\pi(1+\delta_{m,0})}{2k+1} & \text{für } (k, l, m) = (\alpha, \beta, \gamma) \\ & \text{und } k, m \neq 0 \\ 4 \gamma_{0,1} \cdot \cos^2 \gamma_{0,1} & \text{für } (k, l, m) = (\alpha, \beta, \gamma) \\ & \text{und } k = m = 0. \end{cases}$$

Mit (8) ist

$$\begin{aligned}
 (37) \quad & \frac{1}{16} \int_V \rho \cdot \phi_{klm} \cdot \phi_{\alpha\beta\gamma} \cdot dV = \\
 & = \frac{B^2}{4} \int_0^1 x^5 J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x) J_{\alpha+\frac{1}{2}}(\gamma_{\alpha,1}x) dx \int_0^{\frac{\pi}{4}} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{4}} \rho_1(\theta, \phi) P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^Y(\cos \theta) \cos(m\phi) \cos(\gamma\phi) \sin \theta d\phi - \\
 & - \frac{7B}{2} \int_0^2 x^2 J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x) J_{\alpha+\frac{1}{2}}(\gamma_{\alpha,1}x) dx \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^{\frac{\pi}{4}} \rho_2(\theta, \phi) P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^Y(\cos \theta) \cos(m\phi) \cos(\gamma\phi) \sin \theta d\phi.
 \end{aligned}$$

Weiter ergibt sich die rechte Seite des Gleichungssystems

$$\begin{aligned}
 (38) \quad & - \int \text{grad } u_0 \cdot \text{grad } \phi_{klm} \cdot dV = \\
 & = 2 \int_0^1 x \frac{\partial}{\partial x} (\sqrt{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x)) dx \int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos(m\phi) d\phi = \\
 & \quad \left\{ \begin{aligned} & (-2k \int_0^1 \sqrt{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x) dx + 2\gamma_{k,1} \int_0^1 \sqrt{x} J_{k-\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x) dx) ((-1)^{k+1}) \sum_{n=0}^k \frac{(-1)^n (k+n)!}{(k-n)! (n!)^2 (n+1)} \cdot 2\pi \quad \text{für } m = 0 \\ & 0 \quad \text{für } m \neq 0 \end{aligned} \right.
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 (39) \quad & - \frac{1}{16} \int_V \rho u_0 \phi_{k1m} dV = \\
 & = \frac{1}{4} B^2 \int_0^\pi (P_k^m(\cos \theta) \sin \theta \int_0^1 \rho_1(\theta, \phi) \cos(m\phi) d\phi) d\theta \int_0^1 (x-x^4) \sqrt{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1} x) dx + \\
 & + \frac{7}{2} B \int_0^\pi (P_k^m(\cos \theta) \sin \theta \int_0^1 \rho_2(\theta, \phi) \cos(m\phi) d\phi) d\theta \int_0^1 (x-x^3) \sqrt{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1} x) dx +
 \end{aligned}$$

Nehmen wir jetzt an, daß wir die Lösung des Gleichungssystems (35) schon haben, dann gilt

$$(40) \quad u + u_0 = 1 - \frac{1}{r^2} + \sum_{i=1}^N x_i \frac{1}{\sqrt{r}} J_{k_i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\gamma_{k_i,1,i}}{r} \right) P_{k_i}^{m_i}(\cos \theta) \cos(m_i \phi) .$$

Wir wollen nun das Flächenintegral (14) berechnen und erhalten zunächst

$$(41) \quad \frac{\partial(u+u_0)}{\partial r} = \frac{2}{r^3} + \sum_{i=1}^N x_i \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\sqrt{r}} J_{k_i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\gamma_{k_i,1,i}}{r} \right) \right) P_{k_i}^{m_i}(\cos \theta) \cdot \cos(m_i \phi)$$

$$\text{Aus } \int_S \frac{\partial(u+u_0)}{\partial r} dS \text{ ergibt sich nach der Substitution } r = \frac{1}{x} :$$

$$\begin{aligned}
 (42) \quad \int_S \frac{\partial(u+u_0)}{\partial r} dS &= 2x \cdot \int_S \sin \theta d\theta d\phi - \\
 &- \sum_i x_i \left[\gamma_{k_i, l_i} \sqrt{x} J_{k-\frac{1}{2}}(\gamma_{k_i, l_i} x) - \frac{k_i}{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k_i, l_i} x) \right] \\
 &\times \int_S P_{k_i}^{m_i}(\cos \theta) \cos(m_i \phi) \sin \theta d\theta d\phi.
 \end{aligned}$$

Wir müssen noch erwähnen, daß

$$\begin{aligned}
 (43) \quad \lim_{x \rightarrow 0} \left[\gamma \sqrt{x} J_{k-\frac{1}{2}}(\gamma x) - \frac{k}{\sqrt{x}} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma x) \right] &= \\
 &= \begin{cases} 0 & \text{für } k > 0, \\ \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} & \text{für } k = 0. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Die Besselfunktion $J_n(x)$ verhält sich nämlich wie x^n für $x \rightarrow 0$.

Aus (42) und (43) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 (44) \quad \lim_{x \rightarrow 0} \int_S \frac{\partial(u+u_0)}{\partial r} dS &= \\
 &= - \sum_i x_i \sqrt{\frac{2\gamma_{0, l_i}}{\pi}} \delta_{m_i, 0} \cdot \int_S P_0^{m_i}(\cos \theta) \cos(m_i \phi) \cdot \sin \theta \cdot d\theta d\phi \\
 &= - 4 \sqrt{2\pi} \sum_i x_i \sqrt{\gamma_{0, l_i}}.
 \end{aligned}$$

Damit haben wir eine Kontrollgröße für die Berechnung des Minimums von (28) gewonnen. Das Funktional (28) hängt nur von den Koeffizienten der winkelunabhängigen Koordinatenfunktionen ab, wie aus (44) hervorgeht. Das bedeutet aber nicht, daß die Lösung winkelunabhängig ist. Das bedeutet weiterhin nicht, daß die winkelabhängigen Funktionen in der Zerlegung (40) keine Rolle spielen; ihr Einfluß ist indirekt über das Gleichungssystem (35) vorhanden.

4. Numerische Ergebnisse

Bevor wir auf die numerischen Ergebnisse eingehen, führen wir noch eine aus programmtechnischen Gründen nützliche Bezeichnung ein.

Jedem m ordnen wir einen Vektor V_m zu. Die erste Komponente von V_m enthält m selbst, die zweite die gewünschte Zahl der Nullstellen von $J_{\frac{1}{2}}(x)$; die dritte Komponente von V_m enthält schließlich die gewünschte Zahl der Nullstellen von $J_{\frac{3}{2}}(x)$, usw. Die Zeilenvektoren V_m bilden eine Matrix, die uns über die benutzten Koordinatenfunktionen informiert.

Im folgenden Beispiel haben die V_m 31 Komponenten. Die Matrix ist:

$$(0, 1, 0, 2, 0, 1, (25) 0) \\ (4, (4) 0, 2, (25) 0)$$

Das bedeutet, daß wir mit den folgenden Koordinatenfunktionen rechnen:

$$\frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\gamma_{0,1}}{r} \right), \frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{5}{2}} \left(\frac{\gamma_{2,1}}{r} \right) P_2^0(\cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{5}{2}} \left(\frac{\gamma_{2,2}}{r} \right) P_2^0(\cos \theta), \frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{9}{2}} \left(\frac{\gamma_{4,1}}{r} \right) P_4^0(\cos \theta), \\ \frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{9}{2}} \left(\frac{\gamma_{4,1}}{r} \right) P_4^4(\cos \theta), \\ \frac{1}{\sqrt{r}} J_{\frac{9}{2}} \left(\frac{\gamma_{4,2}}{r} \right) P_4^4(\cos \theta) \cdot \cos(4 \phi).$$

In der Ritz'schen Matrix (32) und bei der rechten Seite des Gleichungssystem brauchen wir nur ein- und zweidimensionale Integrale zu berechnen. Lediglich zur Ermittlung des Minimalwertes des Funktionals ist eine dreidimensionale Integration notwendig.

Die Integrale von der Form $\int_0^1 x^m J_{\frac{1}{2}}(\gamma_1 x) J_{\frac{1}{2}}(\gamma_2 x) dx$ und $\int_0^1 x^{m+\frac{1}{2}} J_{\frac{1}{2}}(\gamma x) dx$

werden analytisch berechnet. Die restlichen Integrale werden per Programm mit Hilfe der Gauß'schen Quadraturformel ausgewertet

Einen guten Test für das Programm erhält man, wenn man in (3) G mit 1 identifiziert. In diesem Fall können wir nämlich auch die analytische Lösung ermitteln. Diese Lösung ist nicht vom Winkel abhängig. Vergleiche zwischen numerischer und analytischer Lösung wurden für $B = 330$ und $B = 2468$ (siehe (3)) gemacht.

Die nächsten Tabellen geben Auskunft über das numerische Verhalten des Funktionals (28) und der Kontrollgröße (44) in Abhängigkeit von der Wahl der Koordinatenfunktionen und der Zahl der Stützstellen bei der Gauss - Quadratur.

Die numerischen Werte des Funktionals werden mit FF, die numerischen Werte der Kontrollgröße mit FFO bezeichnet. Die exakte Lösung ist

$$(45) \quad FF = \frac{4\pi \sqrt[3]{B}}{\int_0^B e^{-x} dx} = \frac{4\pi \sqrt[3]{B}}{0,892979577}$$

(für den Fall $G = 1$).

Zahl der Stützstellen / Koordinatenfunktionen	9 Stützstellen		16 Stützstellen	
	FF	FFO	FF	FFO
(0,10,0,...)			97,283	94,98
(0,15,0,...)	96,95	96,49	97,247	96,4906

1. Die winkelunabhängige Lösung $G = 1$, $B = 330$.

Der wirkliche Wert $FF = 97,24628$.

Zahl der Stützstellen / Koordinatenfunktionen	16 Stützstellen	
	FF	FFO
(0,10,0,...)	215,7	148,94
(0,15,0,...)	190,598	183,9
(0,20,0,...)	190,317	186,66
(0,22,0,...)	190,289	187,0
(0,25,0,...)	190,299	188,07

2. Die winkelunabhängige Lösung $G = 1$, $B = 2468$.

Der wirkliche Wert $FF = 190,17$.

Wir sehen, daß man bei größerem B mehr Koordinatenfunktionen braucht. Weiter kommt es darauf an, mit wievielen Stützstellen wir integrieren. Eine Verbesserung der numerischen Integration ist nur durch die Erhöhung der Stützstellenzahl zu erreichen, was dann zu einer beträchtlichen Verlängerung der Rechenzeit führt. In unserem Fall dauert eine Integration mit 16 statt 9 Stützstellen fünfmal länger; bei 40 Stützstellen ergibt sich eine etwa 13 mal so lange Rechenzeit wie bei 16.

Nach (45) verhält sich FF wie $\sqrt[3]{B}$. Wir wollen prüfen, ob diese Regel auch im allgemeinen Fall (3) gilt. Die numerischen Ergebnisse zum allgemeinen Fall (3) sind in den Tabellen 3 und 4 zusammengefaßt.

Zahl der Stützstellen / Koordinatenfunktionen	9 Stützstellen		16 Stützstellen		40 Stützstellen	
	FF	FFO	FF	FFO	FF	FFO
(0,5,0,...)	81,367	79,140				
(0,10,0,...)	75,406	79,003	77,425	79,003		
(0,15,0,...)	75,282	76,685	77,286	76,685		
(0,20,0,...)	75,295	76,978	77,287252	76,97966	77,311857	76,9796
(0,25,0,2,0,2,0,1,0,...)						
(0,25,0,2,0,2,0,1,0,...)						
(4,0,0,0,2,0,2,1,0,...)						
(0,25,0,...)			77,281171	77,126569		

3. Die Lösung für $g = -\frac{B G(\theta, \phi)}{I}$, $B = 330$.

Zahl der Stützstellen / Koordinatenfunktionen	9 Stützstellen		16 Stützstellen		40 Stützstellen	
	FF	FFO	FF	FFO	FF	FFO
(0,5,0,...)	1.071	83,1				
(0,8,0,...)	323,9	120,3				
(0,10,0,...)	209,1	143,9	189,0	143,9		
(0,16,0,...)			153,26	170,90		
(0,20,0,...)			152,9	157,7	151,78	157,7
(0,25,0,...)			152,670	149,929	151,245	149,929
(0,30,0,...)			152,663	149,998	151,2131203	149,9882175
(0,25,0,0,0,2,0,1,0,2,0,...)					151,245	149,929
(0,30,0,0,0,2,0,1,0,2,0,...)						
(4,0,0,0,0,2,0,2,0,1,0,0,...)					151,2131210	149,9882175

4. Die Lösung für $g = -\frac{B G(\theta, \phi)}{3r}$, $B = 2468$.

Anhang A

Zuerst wollen wir die Formel (36) rechtfertigen. Nach der Substitution $x = \frac{1}{r}$ ergibt sich aus (36)

$$\begin{aligned}
 \text{(A1)} \quad & \int_V \text{grad } \phi_{klm} \cdot \text{grad } \phi_{\alpha\beta\gamma} \cdot dV = \\
 & = \int_0^1 \left[\sqrt{x} J_{\frac{k+1}{2}}(\gamma_{k,1}x) \right]_{,x} \left[\sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{\alpha,\beta}x) \right]_{,x} dx \int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^\gamma(\cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(\gamma\phi) d\phi + \\
 & + \int_0^1 \sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{k,1}x) \sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{\alpha,\beta}x) dx \int_0^\pi P_k^m(\cos \theta)_{,\theta} P_\alpha^\gamma(\cos \theta)_{,\theta} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos(m\phi) \cos(\gamma\phi) d\phi + \\
 & + \int_0^1 \sqrt{x} J_{\frac{k+1}{2}}(\gamma_{k,1}x) \sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{\alpha,\beta}x) \frac{1}{x} dx \int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^\gamma(\cos \theta) \frac{1}{\sin \theta} d\theta \int_0^{2\pi} m\gamma \sin(m\phi) \sin(\gamma\phi) d\phi.
 \end{aligned}$$

2 2

Wir benutzen die Tatsache, daß $w_1 = \sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{k,1}x)$ eine Lösung der Gleichung

$$\text{(A2)} \quad -w'' + \frac{k(k+1)}{x} w = \gamma_{k,1}^2 w$$

ist. Bezeichnen wir noch $\sqrt{x} J_{\frac{l}{2}}(\gamma_{k,\beta}x)$ mit w_2 , dann gilt

$$\text{(A3)} \quad \int_0^1 w_1' w_2' dx = -k(k+1) \int_0^1 \frac{1}{x} w_1 w_2 dx.$$

Zum Beweis ist folgendes zu sagen:

Man multipliziere die Gleichung (A2) für $w = w_1$ mit w_2 , weiterhin multipliziere man Gleichung (A2) für $w = w_2$ mit w_1 . Die beiden so erhaltenen Relationen addiere man zusammen und integriere über das Ergebnis. Wenn man noch berücksichtigt, daß $\gamma_{k,1}$ und $\gamma_{\alpha,\beta}$ verschiedene Nullstellen der Bessel-Funktion $J_{k+\frac{1}{2}}$ sind, erhält man (A3).

Für $\gamma_{k,1} = \gamma_{\alpha,\beta}$ zeigt man mit einer analogen Herleitung, daß gilt:

$$(A4) \quad \int_0^1 \left[\sqrt{x} J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1}x) \right]^2 dx = -k(k+1) \int_0^1 \frac{1}{x} J_{k+\frac{1}{2}}^2(\gamma_{k,1}x) dx + \gamma_{k,1}^2 \int_0^1 x J_{k+\frac{1}{2}}^2(\gamma_{k,1}x) dx =$$

$$= -k(k+1) \int_0^1 \frac{1}{x} J_{k+\frac{1}{2}}^2(\gamma_{k,1}x) dx + \frac{1}{2} \gamma_{k,1}^2 J_{k-\frac{1}{2}}^2(\gamma_{k,1}) .$$

Die Legendre-Funktionen erfüllen die Gleichung

$$(A5) \quad \left[(1-x^2)y' \right]' + k(k+1)y = \frac{m^2}{1-x^2} y \quad \text{mit} \quad y = P_k^m(x) .$$

Nach der Substitution $x = \cos \theta$ bekommen wir

$$(A6) \quad \int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 P_k^m(x) P_\alpha^m(x) (1-x^2) dx .$$

Um das letzte Integral auszuwerten, multiplizieren wir (A5) für $y = P_k^m$ mit P_α^m und noch einmal die Gleichung (A5) für $y = P_\alpha^m$ mit P_k^m .

Aus der Integration der Summe der beiden Gleichungen ergibt sich

$$(A7) \quad \int_{-1}^1 P_k^m(x) P_\alpha^m(x) (1-x^2) dx = -m^2 \int_{-1}^1 \frac{P_k^m(x) P_\alpha^m(x)}{1-x^2} dx \quad \text{für } k \neq \alpha.$$

Für $k = \alpha$ gilt

$$(A8) \quad \int_{-1}^1 [P_k^m(x)]^2 (1-x^2) dx = \frac{2k(k+1)}{2k+1} \frac{(k+m)!}{(k-m)!} - m^2 \int_{-1}^1 \frac{(P_k^m(x))^2}{1-x^2} dx.$$

Jetzt können wir (A1) betrachten. Die rechte Seite von (A1) ist für $m \neq \gamma$ gleich null wegen der Orthogonalität der Winkelfunktionen. Weiter ist für $m = \gamma$ und $k \neq \alpha$

$$\int_0^\pi P_k^m(\cos \theta) P_\alpha^m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = 0$$

wegen der Orthogonalität der Legendre-Polynome.

Dann folgt für $m = \gamma$ und $k \neq \alpha$

$$(A9) \quad \int_V \text{grad } \phi_{klm} \text{ grad } \phi_{\alpha\beta m} dV = \\ = \int_0^1 J_{k+\frac{1}{2}}(\gamma_{k,1} x) J_{\alpha+\frac{1}{2}}(\gamma_{\alpha,\beta} x) \frac{1}{x} dx \left[-m^2 \int_{-1}^1 \frac{P_k^m(x) P_\alpha^m(x)}{1-x^2} dx (\pi+\delta_{m,0}\pi) + \int_{-1}^1 \frac{P_k^m(x) P_\alpha^m(x)}{1-x^2} dx m^2 (\pi+\delta_{m,0}\pi) \right] = 0$$

Für $m = \gamma$, $k = \alpha$ und $l = \beta$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \text{(A10)} \quad & \int_V \text{grad } \phi_{klm} \text{ grad } \phi_{k\beta m} \, dV = \\
 & = (\pi + \delta_{m,0} \pi) \int_0^1 \int_{k+\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^J \int_{k+\frac{1}{2}}^J (\gamma_{k,\beta} x)^{\frac{dx}{x}} [-k(k+1)] \frac{2}{2k+1} \frac{(k+m)!}{(k-m)!} + \\
 & + \frac{2k(k+1)}{2k+1} \frac{(k+m)!}{(k-m)!} - m^2 \int_{-1}^1 \frac{[P_k^m(x)]^2}{1-x^2} \, dx + m^2 \int_{-1}^1 \frac{[P_k^m(x)]^2}{1-x^2} \, dx = 0.
 \end{aligned}$$

Im Fall $k = \alpha$, $l = \beta$, $m = \gamma$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \text{(A11)} \quad & \int_V [\text{grad } \phi_{klm}]^2 \, dV = \\
 & = (\pi + \delta_{m,0} \pi) \left[(-k(k+1)) \int_0^1 \int_{k+\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^{2k} \, dx + \frac{1}{2} \gamma_{k,1}^2 \int_{k-\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^{2k} \, dx \right] \frac{2}{2k+1} \frac{(k+m)!}{(k-m)!} + \\
 & + \int_0^1 \int_{k+\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^{2k} \, dx \left(\frac{2k(k+1)}{2k+1} \frac{(k+m)!}{(k-m)!} - m^2 \int_{-1}^1 \frac{[P_k^m(x)]^2}{1-x^2} \, dx \right) + \int_0^1 \int_{k+\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^{2k} \, dx \int_{-1}^1 \frac{[P_k^m(x)]^2}{1-x^2} \, dx = \\
 & = (\pi + \delta_{m,0} \pi) \frac{(k+m)!}{(k-m)!} \frac{1}{2k+1} \gamma_{k,1}^2 \int_{k-\frac{1}{2}}^J \int_0^1 (\gamma_{k,1} x)^{2k} \, dx.
 \end{aligned}$$

Damit ist die Formel (36) bewiesen.

Jetzt widmen wir unsere Aufmerksamkeit der Formel (38).

Dazu müssen wir das Integral

$$(A12) \quad \int_0^\pi P_k^0(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta$$

ausrechnen. Es gilt

$$(A13) \quad P_k(x) = \sum_{n=0}^k \frac{(-1)^n (k+n)!}{(k-n)! (n!)^2} \frac{1}{2^{n+1}} [(1-x)^n + (-1)^k (1+x)^n].$$

Wir integrieren (A13) von -1 bis +1 und bekommen

$$(A14) \quad \int_{-1}^1 P_k(x) dx = [1 + (-1)^k] \sum_{n=0}^k \frac{(-1)^n (k+n)}{(k-n)! (n!)^2 (n+1)}.$$

Aus der bekannten Rekursivformel für die Ableitungen der Bessel-Funktionen folgt sofort (38). Für $m \neq 0$ ist das trivial.

Literatur

- 1) MICHLIN, S.G.:
Numerische Realisierung von Variationsmethoden.
Berlin 1969.
- 2) JAHNKE - EMDE - LÖSCH:
Tafeln höherer Funktionen.
Stuttgart 1960.
- 3) KRAUT, A., DWORSCHAK, F., WOLLENBERGER, H.:
Analysis of Point Defect in Copper.
Phys. stat. sol. (b) 44, 805 (1971).
- 4) RYSHIK - GRADSTEIN:
Summen-, Produkt- und Integral - Tafeln.
Berlin 1957.