

MASTERARBEIT

UNIVERSITÄT BIELEFELD
FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK

Numerische Lösung parabolischer Gleichungen mit quadraturbasierten Integratoren

MASTERSEMINAR DYNAMISCHE SYSTEME UND PARTIELLE
DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

2. KORRIGIERTE UND ERGÄNZTE AUFLAGE
VOM 22. MÄRZ 2016

vorgelegt von

Christian Döding

Betreuer: Prof. Dr. Wolf-Jürgen Beyn

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Exponentielle Integratoren	5
1.1 Analytische Halbgruppen und parabolische Gleichungen	6
1.2 Konstruktion der Einschrittverfahren	14
1.3 Realisierung der Einschrittverfahren	19
1.4 Konstruktion der Mehrschrittverfahren	35
1.5 Realisierung der Mehrschrittverfahren	38
2 Fehleranalyse	45
2.1 Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahrens	46
2.2 Fehleranalyse der Quadratur	52
2.3 Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadratur	74
3 Numerische Anwendungen	81
3.1 Quadratur der inversen Laplacetransformation	82
3.2 Eine Reaktions-Diffusions-Gleichung	85
3.3 Die Nagumo-Gleichung	94
3.4 Die eingefrorene Nagumo-Gleichung	100
Fazit	107
A Hilfsmittel der Funktionentheorie	109
B Weitere Hilfsmittel	113

Einleitung

In dieser Arbeit studieren wir numerische Lösungsverfahren für semilineare parabolische Evolutionsgleichungen. Wir betrachten Anfangs- bzw. Anfangsrandwertprobleme, denen eine parabolische Differentialgleichung zugrunde liegt und welche als Cauchy-Problem auf einem geeigneten Banachraum formuliert sind:

$$u' = Au + f(t, u), \quad u(0) = u_0.$$

Von Interesse sind numerische Verfahren, die eine Approximation der Lösung des Cauchy-Problems liefern - dies sind die sogenannten exponentiellen Integratoren. Es gibt Ein- und Mehrschrittverfahren diesen Typs, welche sowohl explizit als auch implizit sein können. In dieser Arbeit beschäftigen wir uns ausschließlich mit expliziten Verfahren. Das einfachste Einschrittverfahren ist das sogenannte Euler-Nørsett-Verfahren, auf das wir in dieser Arbeit besonders eingehen werden.

Die Einschrittverfahren für semilineare parabolische Gleichungen wurden in den 2000ern von M. Hochbruck und A. Ostermann in [HO06] entwickelt. In Kapitel 1 dieser Arbeit folgen wir der Konstruktion der Einschrittverfahren in [HO06], dessen Idee eine Lösungsdarstellung über die Formel der Variation der Konstanten zugrunde liegt:

$$u(t+h) = e^{hA}u(t) + \int_t^{t+h} e^{(t+h-\tau)A} f(\tau, u(\tau)) d\tau.$$

Die Konstruktion der numerischen Verfahren basiert auf einer Approximation im nichtlinearen Anteil der Inhomogenität. Dies zeigt die Stärke der exponentiellen Integratoren, denn sie integrieren den linearen Anteil der semilinearen Gleichung exakt. In den 2000ern wurden die Mehrschrittverfahren von M.P. Calvo und C. Palencia in [CP06] vorgestellt. Der Unterschied zu den Einschrittverfahren aus [HO06] liegt in der Approximation der Inhomogenität. Die Grundlage der Verfahren ist jedoch von gleicher Natur. Wir werden in Kapitel 1 die Konstruktion der Mehrschrittverfahren nach

[CP06] vorstellen.

Aus der Formel der Variation der Konstanten wird deutlich, dass das Operatorexponential erklärt werden muss, denn ein Ansatz über die Exponentialreihe scheitert an der Unbeschränktheit des Operators. Unter bestimmten Voraussetzungen kann das Operatorexponential über die Spektralzerlegung des Operators definiert werden. Diese Voraussetzungen sind jedoch sehr restriktiv und für uns ungeeignet. Für die Lösung dieses Problems nutzen wir die funktionalanalytischen Grundlagen von D. Henry, welche aus den 80er Jahren stammen und in [Hen81] aufgeführt sind. Zu Beginn dieser Arbeit werden wir die für uns grundlegenden Ergebnisse aus [Hen81] zitieren. Dabei treffen wir auf die Begriffe des sektoriellen Operators und der analytischen Halbgruppe, die es uns erlauben das Operatorexponential für diese Klasse von Operatoren über Konturintegrale zu definieren. Bevor wir mit der Konstruktion der exponentiellen Integratoren beginnen, werden wir in Kapitel 1 unser Ausgangsproblem genau schildern und die Annahmen aus [Hen81], [HO06] und [CP06] an das System treffen, die uns die Existenz des Operatorexponentials garantieren und wichtig für die Konvergenzanalyse in Kapitel 2 sind.

Für die Realisierung der exponentiellen Integratoren ist es erforderlich Koeffizientenabbildungen, die das Operatorexponential beinhalten, zu berechnen. Dabei wissen wir bereits, dass das Operatorexponential eine Darstellung über Konturintegrale besitzt. Im Jahr 2010 wurde von M. López-Fernández eine Methode in [LF10] vorgestellt, die es erlaubt die Koeffizientenabbildungen ebenfalls über Konturintegrale darzustellen. Genauer sind dies Darstellungen über inverse Laplacetransformationen. Für die numerische Berechnung dieser Koeffizientenabbildungen kann dann nach einer Parametrisierung des komplexen Wegintegrals eine Quadratur zur Approximation des Konturintegrals verwendet werden. Wir werden in Kapitel 1 eine kurze Einführung in die Laplacetransformation und deren Rücktransformation geben und folgen dabei den Ergebnissen von W. Arendt in [Are01] aus dem Jahr 2001. Mit Hilfe der Laplacetransformation beweisen wir rigoros die in [LF10] nur formal dargestellten Ergebnisse und erhalten die Konturintegraldarstellungen der Koeffizientenabbildungen, für die wir dann die Methode zur Quadraturapproximation angeben.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit der Fehleranalyse des Euler-Nørsett-Verfahrens und der Quadraturapproximation für die Konturintegrale. Wir beweisen, dass das Euler-Nørsett-Verfahren die Konvergenzordnung 1 besitzt, wobei wir zunächst den Fehler, der durch die Quadraturapproxima-

tion verursacht wird, nicht berücksichtigen. Wir folgen der Beweisstrategie in [HO06] und den Ausarbeitungen in [Die10]. Grundlegend für die Konvergenzanalyse ist eine Stabilitätsabschätzung, welche aus den Ergebnissen in [Hen81] folgt.

Danach betrachten wir den Fehler der Quadraturapproximation holomorpher Funktionen und zeigen Abschätzungen die von M. López-Fernández, C. Palencia und A. Schädle in [LFPS06] und [LFP04] erarbeitet wurden. Dabei werden in dieser Arbeit die Beweise ausführlicher ausgearbeitet als in [LFPS06] und [LFP04]. Die Fehlerabschätzungen lassen sich dann auf die Quadraturapproximationen der Koeffizientenabbildungen für die exponentiellen Integratoren übertragen und wir geben entsprechende Fehlerschranken an.

Am Ende des zweiten Kapitels stellen wir uns die Frage, ob es möglich ist die Fehlerergebnisse der Konvergenztheorie und die der Quadraturapproximation zu vereinen? Genauer untersuchen wir den Konvergenzfehler des Euler-Nørsett-Verfahrens unter der Berücksichtigung, dass die Koeffizientenabbildungen durch eine Quadratur approximiert werden. Dies ist ein Problem, welches in der Literatur bisher noch nicht behandelt wurde. Wir werden dabei den Konvergenzbeweis für das Euler-Nørsett-Verfahren imitieren, müssen jedoch eine Stabilitätsannahme an die Quadraturen treffen. Der Beweis dieser Stabilitätsaussage ist weitgehend komplexer und ein noch ungelöstes Problem. Unter dieser Annahme werden wir jedoch Fehlerabschätzungen für das Euler-Nørsett-Verfahren mit Quadraturapproximation beweisen.

Im letzten Kapitel werden wir die Ergebnisse aus den Kapiteln 1 und 2 numerisch verifizieren und numerische Experimente zu den exponentiellen Integratoren und den Quadraturapproximationen durchführen. Wir wenden die exponentiellen Integratoren an, um Lösungen konkreter Beispiele numerisch zu berechnen. Zu Beginn werden numerische Experimente zur Quadraturapproximation inverser Laplacetransformationen an einer skalaren Funktion durchgeführt und die dabei auftretenden Effekte erläutert. Zusätzlich werden Parameterwahlen für die Quadratur diskutiert und eine Empfehlung dieser für die darauf folgenden Experimente zum Lösen konkreter Anfangswertprobleme angegeben. Dann betrachten wir ein Beispiel einer Reaktions-Diffusions-Gleichung und lösen diese mit den Ein- und Mehrschrittverfahren aus Kapitel 1. Zudem untersuchen wir das Konvergenzverhalten dieser Verfahren und verifizieren die Konvergenzergebnisse aus Kapitel 2 und denen aus [HO06] und [CP06].

Das abschließende Thema dieser Arbeit sind Wellenlösungen in parabolischen Evolutionsgleichungen. Wir werden eine kurze Einführung in das Gebiet der äquivarianten Evolutionsgleichungen angeben und folgen dabei W.-J. Beyn und V. Thümmeler in [BT09] und [Thü08]. Wir untersuchen das Beispiel der Nagumo-Gleichung und lösen diese mit dem Euler-Nørsett-Verfahren. Die Ergebnisse zeigen dabei, dass die entstehende wandernde Wellenfront aus dem Definitionsbereich des Anfangsrandwertproblems herausläuft. Dies veranlasst uns die Einfriermethode für wandernde Wellen einzuführen. Wir halten uns ebenfalls an die Konstruktionen in [BT09] und [Thü08]. Die Einfriermethode transformiert das Anfangsrandwertproblem in ein Anfangsrandwertproblem mit einer algebraischen Nebenbedingung. Exponentielle Integratoren zum Lösen solcher Probleme sind in der Literatur bisher nicht zu finden. Wir werden eine Möglichkeit vorstellen, wie man das Euler-Nørsett-Verfahren verallgemeinern kann, um dieses Problem zu lösen. Eine entsprechende Konvergenztheorie dafür ist bisher nicht bekannt. Die numerischen Ergebnisse zeigen aber, dass ein solcher Ansatz sinnvoll sein kann.

Diese Masterarbeit wurde im Rahmen des Masterseminars dynamische Systeme und partielle Differentialgleichungen unter der Leitung von Prof. Dr. Wolf-Jürgen Beyn an der Fakultät für Mathematik an der Universität Bielefeld angefertigt.

Diese Auflage wurde nach Einreichung der Masterarbeit am Abgabetermin den 12. November 2015 nachträglich korrigiert und überarbeitet.

Ich möchte mich besonders bei Herrn Prof. Dr. Wolf-Jürgen Beyn für die Möglichkeit der Anfertigung und die große Unterstützung und Beratung während der Erstellung dieser Masterarbeit bedanken.

Des Weiteren bedanke ich mich bei Dr. Denny Otten und Simon Dieckmann, die mich bei der Ausarbeitung dieser Arbeit unterstützt haben und für Fragen und Diskussionen stets offen waren.

Zuletzt bedanke ich mich bei meinen Eltern und meiner Familie, die mir dieses Studium ermöglicht haben und mich stets unterstützt haben.

Kapitel 1

Exponentielle Integratoren

In diesem Kapitel werden wir numerische Verfahren zum Lösen semilinearer parabolischer Differentialgleichungen einführen - die sogenannten **exponentiellen Integratoren**. Dies sind sowohl Ein - als auch Mehrschrittverfahren, die die exakte Lösung solcher Gleichungen approximieren.

Wir werden Einschrittverfahren nach [HO06] konstruieren und deren Herleitung genauer betrachten. Die Idee der exponentiellen Integratoren ist es, mit Hilfe der Variation der Konstanten Formel die Lösung des Cauchy-Problems darzustellen, um dann im nichtlinearen Teil der Gleichung eine Approximation anzusetzen. Die Stärke dieser exponentiellen Integratoren ist es, dass sie den linearen Teil der Gleichung exakt integrieren.

Durch die Formel der Variation der Konstanten tritt das Operator-exponential auf, welches zunächst für die zu betrachtenden Operatoren erklärt werden muss. Der abstrakte Rahmen dafür ist die Theorie analytischer Halbgruppen. Wir werden zu Beginn dieses Kapitels in die Theorie analytischer Halbgruppen in parabolischen Evolutionsgleichungen einsteigen. Dabei halten wir uns an die Ergebnisse von D. Henry aus [Hen81].

Wir werden eine Methode zum Auswerten des Operatorexponentials über inverse Laplacetransformationen entwickeln. Dabei halten wir uns an das Vorgehen in [LF10] und beweisen rigoros die formalen Ergebnisse aus [LF10]. Diese inversen Laplacetransformationen sind komplexe Konturintegrale, welche dann nach Parametrisierung durch eine geeignete Quadratur approximiert werden können. Wir werden die Realisierung dieser Verfahren genauer erläutern.

Zum Abschluss dieses Kapitels werden wir die Mehrschrittverfahren nach

[CP06] konstruieren. Diese Mehrschrittverfahren besitzen die gleiche Struktur wie die zuvor betrachteten Einschrittverfahren. Die Realisierung dieser Verfahren wird ebenfalls wie im Fall der Einschrittverfahren erläutert.

1.1 Analytische Halbgruppen und parabolische Gleichungen

Sei $(X, \|\cdot\|_X)$ ein reeller Banachraum. Wir wollen nun parabolische Differentialgleichungen studieren. Dazu betrachten wir das folgende abstrakte Cauchy-Problem, dem eine parabolische Differentialgleichung zugrunde liegt:

$$\begin{cases} u'(t) = Au(t) + f(t, u(t)) \\ u(0) = u^0 \end{cases} \quad (1.1)$$

für $t \in [0, T]$ und $u^0 \in X$. Hierbei ist

$$\begin{aligned} A : \mathcal{D}(A) &\rightarrow X \\ v &\mapsto Av \end{aligned}$$

ein linearer Operator mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(A) \subset X$ und

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R} \times X &\rightarrow X \\ (t, v) &\mapsto f(t, v) \end{aligned}$$

eine im Allgemeinen nichtlineare Inhomogenität.

Wir folgen Abschnitt 1.3 aus [Hen81] und betrachten als einfaches Beispiel die homogene Wärmeleitungsgleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen auf $X = L^2(\Omega)$ mit $\Omega = [0, 1]$:

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= u_{xx}(x, t), & x \in \Omega, t \in [0, T] \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x \in \Omega, \\ u(0, t) &= 0, & t \in [0, T] \\ u(1, t) &= 0, & t \in [0, T]. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Dann definieren wir

$$\begin{aligned} A : \mathcal{D}(A) &\rightarrow L^2(\Omega) \\ u &\mapsto Au := u_{xx}, \end{aligned}$$

mit $\mathcal{D}(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Dabei ist $H^2(\Omega)$ der Sobolev-Raum der zweimal schwach differenzierbaren Funktionen in $L^2(\Omega)$ und $H_0^1(\Omega)$ der Sobolev-Raum der einmal schwach differenzierbaren Funktionen in $L^2(\Omega)$, sodass die Funktion selbst auf dem Rand von Ω verschwindet. Für detaillierte Definitionen und Eigenschaften von Sobolev-Räumen verweisen wir auf [Alt06, Kap.1]. Dann können wir das Anfangsrandwertproblem (1.2) als Cauchy-Problem schreiben mit $u(t) = u(\cdot, t) \in L^2(\Omega)$:

$$\begin{aligned} u'(t) &= Au(t), \quad t \in [0, T] \\ u(0) &= u_0. \end{aligned}$$

Die Lösung lässt sich dann formal schreiben als

$$u(t) = e^{tA}u_0.$$

Dabei kann das Operatorexponential durch eine Spektralzerlegung definiert werden. Dafür sei $\lambda_n = -n^2\pi^2$ und

$$e_n(x) = \sqrt{2} \sin(n\pi x)$$

für $n \in \mathbb{N}$. Dann gilt

$$Ae_n = \lambda_n e_n,$$

sowie

$$e_n(0) = 0 = e_n(1)$$

und

$$(e_n, e_m)_{L^2(\Omega)} = \delta_{n,m}$$

für alle $n, m \in \mathbb{N}$. Also sind λ_n die Eigenwerte und e_n die Eigenfunktionen von A . Ferner bildet $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Orthonormalbasis des $L^2(\Omega)$. Dies folgt aus dem Spektralsatz B.13, da A ein linear symmetrischer Operator mit $\mathcal{R}(A) = L^2(\Omega)$ mit kompaktem Inversen ist. Dies wird in [Alt06, Kap.8] gezeigt. Dann gilt mit dem Spektralsatz B.13 für alle $v \in \mathcal{D}(A)$, dass

$$Av = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (e_n, v)_{L^2(\Omega)} e_n.$$

Aus der Parsevalschen Identität B.12 folgt

$$\mathcal{D}(A) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 (e_n, v)_{L^2(\Omega)}^2 < \infty \right\}.$$

Ist $u_0 \in L^2(\Omega)$, so ist

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{\lambda_n t} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(x),$$

wobei mit der Parsevalschen Identität B.12

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{n=1}^{\infty} e^{\lambda_n t} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n \right\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \sum_{n=1}^{\infty} e^{2\lambda_n t} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)}^2 = \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 < \infty \end{aligned}$$

gilt. Ist $u_0 \in L^2(\Omega)$ hinreichend regulär, sodass die folgenden Reihen konvergieren und Differentiation und Summation vertauscht werden können, so gilt

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n e^{\lambda_n t} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (e_n, e^{\lambda_n t} u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (e_n, u(\cdot, t))_{L^2(\Omega)} e_n(x) \\ &= Au(x, t) = u_{xx}(x, t), \end{aligned}$$

sowie

$$u(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(x) = u_0(x)$$

und

$$\begin{aligned} u(0, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(0) = 0, \\ u(1, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} (e_n, u_0)_{L^2(\Omega)} e_n(1) = 0. \end{aligned}$$

D.h. u löst (1.2). Hierbei haben wir ausgenutzt, dass der Operator A selbstadjungiert ist und eine Spektralzerlegung besitzt. Für allgemeine parabolische Gleichungen ist dies jedoch nicht der Fall. Eine entsprechende Verallgemeinerung führt uns auf den Begriff des sektoriellen Operators.

Definition 1.1.1. Ein linearer Operator A auf einem Banachraum $(X, \|\cdot\|_X)$ heißt **sektorieller Operator**, falls dieser abgeschlossen dicht definiert ist und es $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$, sowie $M \geq 1$ und $a \in \mathbb{R}$ gibt mit

$$\|(zI - A)^{-1}\|_{X \rightarrow X} \leq \frac{M}{|z - a|} \quad \text{für alle } z \in \mathbb{C} \setminus \Sigma_{a,\delta},$$

wobei

$$\Sigma_{a,\delta} := \{z \in \mathbb{C} : \pi - \delta \leq |\arg(z - a)| \leq \pi, z \neq a\} \cup \{a\}.$$

Falls $a = 0$, so schreiben wir auch $\Sigma_{a,\delta} = \Sigma_\delta$.

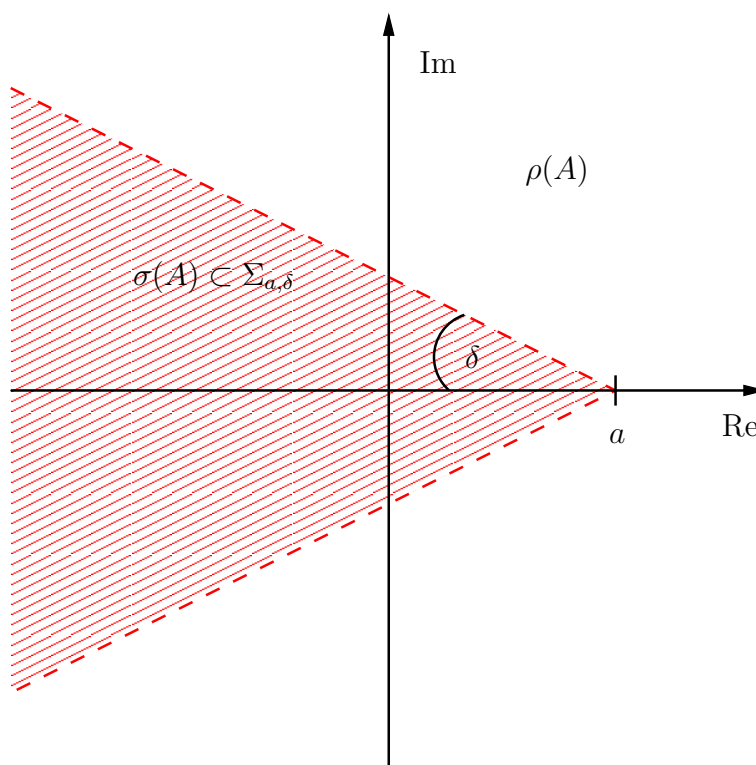


Abbildung 1.1: Spektrum eines sektoriellen Operators mit Sektor $\Sigma_{a,\delta}$.

Wir bemerken, dass der Sektor $\Sigma_{a,\delta}$ abgeschlossen ist. Weiter definieren wir für einen linearen dicht definierten Operator A mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(A) \subset X$ die Resolventenmenge von A durch

$$\rho(A) := \{z \in \mathbb{C} : (zI - A) : \mathcal{D}(A) \rightarrow X \text{ ist bijektiv und } (zI - A)^{-1} \text{ ist linear und beschränkt}\}$$

und das Spektrum von A durch

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A).$$

Vergleiche dazu auch [Wer07, Kap.VII]. Ferner schreiben wir für eine Menge $M \subset \mathbb{C}$:

$$\operatorname{Re} M := \sup\{\operatorname{Re}(z) : z \in M\}.$$

Beispiel 1.1.2. i) Ist A ein beschränkter linearer Operator auf X , so ist A ein sektorieller Operator. (siehe [Hen81, Sec. 1.3])

ii) Ist A ein selbstadjungierter dicht definierter Operator auf einem Hilbertraum H und ist $(-A)$ von unten beschränkt, so ist A ein sektorieller Operator. (siehe [Hen81, Sec. 1.3])

iii) Ist $X = L^2(\Omega)$ und $A = \Delta$ der Laplace-Operator mit $\mathcal{D}(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Dann ist A ein sektorieller Operator. (siehe [Ott09, Satz 2.3])

Ziel ist es für die Klasse sektorieller Operatoren, das Operatorexponential zu definieren. Dies führt uns zunächst auf den Begriff der analytischen Halbgruppe und ihres infinitesimalen Erzeugers. Eine analytischen Halbgruppe ist nach [Hen81] definiert durch:

Definition 1.1.3. Eine Familie $\{T(t)\}_{t \geq 0}$ von linearen, beschränkten Operatoren

$$T(t) : X \rightarrow X$$

mit

- i) $T(0) = I$,
- ii) $T(s+t) = T(s)T(t)$ für alle $s, t \geq 0$,
- iii) $\lim_{t \rightarrow 0} T(t)x = x$ für alle $x \in X$,
- iv) $t \mapsto T(t)x$ ist analytisch für alle $t > 0$,

heißt **analytische Halbgruppe**.

Der Operator

$$L : \mathcal{D}(L) \rightarrow X \tag{1.3}$$

$$x \mapsto \lim_{t \rightarrow 0} \frac{T(t)x - x}{t}$$

mit $\mathcal{D}(L) := \{x \in X : \text{der Limes in (1.3) existiert}\}$ heißt **infinitesimaler Erzeuger** der analytischen Halbgruppe.

Wir werden nun Theorem 1.3.4 aus [Hen81] zitieren. Die Aussage des Satzes liefert die Existenz einer analytischen Halbgruppe, dessen infinitesimaler Erzeuger ein sektorieller Operator ist. Diese analytische Halbgruppe definiert das Operatorexponential des sektoriellen Operators über ein Konturintegral, dessen Integrationsweg den Sektor Σ_δ umschließt. Wir werden zu einem späteren Zeitpunkt sehen, dass dieses Konturintegral auch als inverse Laplacetransformation der Resolventenabbildung interpretiert werden kann. Dabei garantiert der sektorielle Abfall der Resolvente die absolute Konvergenz des Integrals. Für Details des Beweises verweisen wir auf [Hen81].

Satz 1.1.4. *Sei A ein sektorieller Operator mit Sektor $\Sigma_{a,\delta}$. Dann ist A infinitesimaler Erzeuger der analytischen Halbgruppe $\{e^{tA}\}_{t \geq 0}$ mit*

$$e^{tA} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{zt} (zI - A)^{-1} dz,$$

wobei Γ eine Kontur in $\rho(A)$ ist mit $\arg(z - a) \rightarrow \pm\theta$ für $|z| \rightarrow \infty$ mit $\frac{\pi}{2} < \theta < \pi - \delta$. Falls $\operatorname{Re} \sigma(A) < a$, dann gibt es ein $C > 0$, sodass für alle $t > 0$

$$\|e^{tA}\|_{X \rightarrow X} \leq C e^{at}$$

und

$$\|Ae^{tA}\|_{X \rightarrow X} \leq \frac{C}{t} e^{at}$$

gilt.

Beweis. Siehe Theorem 1.3.4 in [Hen81]. □

Für die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen des Cauchy-Problems (1.1) werden Räume funktionalanalytischer Natur benötigt. Diese Räume werden durch die Definitionsbereiche von sogenannten gebrochenen Potenzen des sektoriellen Operators A definiert. Wir werden diese Räume in der späteren Konvergenztheorie der exponentiellen Integratoren benötigen, da allgemeine Lösungen des Cauchy-Problems nur eine geringe Regularität aufweisen. Für die Theorie gebrochener Potenzen folgen wir den Ergebnissen aus Abschnitt 1.4 in [Hen81].

Definition 1.1.5. Sei A ein sektorieller Operator mit $\operatorname{Re} \sigma(A) < 0$. Dann definiere für $\alpha > 0$ die **gebrochene Potenz**

$$(-A)^{-\alpha} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{tA} dt.$$

Hierbei bezeichnet $\Gamma(\alpha)$ die Eulersche Gammafunktion an der Stelle $\alpha > 0$.

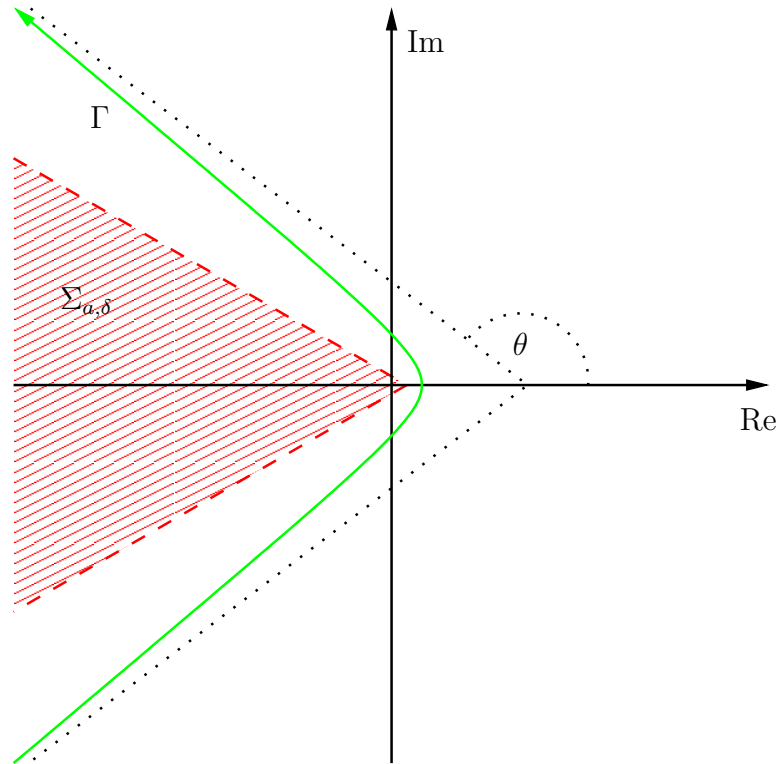


Abbildung 1.2: Möglicher Integrationsweg zur Definition der analytischen Halbgruppe aus Satz 1.1.4.

Der folgende Satz beinhaltet einige Eigenschaften der gebrochenen Potenzen eines sektoriellen Operators A , welche wir an dieser Stelle aufzeigen wollen. Der Satz ist ein Zitat von Theorem 1.4.2 in [Hen81].

Satz 1.1.6. *Sei A ein sektorieller Operator mit $\operatorname{Re} \sigma(A) < 0$. Dann ist $(-A)^{-\alpha}$ für alle $\alpha > 0$ ein beschränkter linearer Operator von X nach X und injektiv. Falls $0 < \alpha < 1$, so gilt*

$$(-A)^{-\alpha} = \frac{\sin(\pi\alpha)}{\pi} \int_0^\infty z^{-\alpha} (zI - A)^{-1} dz.$$

Beweis. Siehe Theorem 1.4.2 in [Hen81]. □

Wir wissen also, dass die gebrochenen Potenzen einen injektiven Operator definieren. Dies motiviert den inversen Operator einer gebrochenen Potenz mit geeignetem Definitionsbereich zu definieren:

Definition 1.1.7. Definiere $(-A)^\alpha$ für $\alpha > 0$ durch $(-A)^\alpha := ((-A)^{-\alpha})^{-1}$, sowie $\mathcal{D}((-A)^\alpha) = \mathcal{R}((-A)^{-\alpha})$ und $(-A)^0$ als die Identität auf X .

Die gebrochenen Potenzen eines sektoriellen Operators können in Verbindung mit der erzeugten analytischen Halbgruppe gebracht werden. Das Ergebnis ist ein Stabilitätssatz, den wir aus [Hen81] zitieren und dessen Aussage ein wichtiges Hilfsmittel für die Konstruktion und Konvergenztheorie der exponentiellen Integrierten darstellt.

Satz 1.1.8. *Sei A ein sektorieller Operator mit $\operatorname{Re} \sigma(A) < \omega < 0$. Dann gibt es für jedes $\alpha \geq 0$ ein $C = C(\alpha) > 0$, sodass für alle $t > 0$*

$$\|t^\alpha (-A)^\alpha e^{tA}\|_{X \rightarrow X} \leq C e^{\omega t}$$

gilt.

Beweis. Siehe Theorem 1.4.3 in [Hen81]. □

Die Voraussetzungen dieser Ergebnisse beinhalten stets, dass $\{0\} \in \rho(A)$ liegt. Um diese Ergebnisse für sektorielle Operatoren, die diese Eigenschaft nicht erfüllen, zu erhalten verschiebt man den Operator und somit sein Spektrum um ein vielfaches der Identität.

Definition 1.1.9. Sei A ein sektorieller Operator mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$. Dann definiere für $\tilde{\omega} > \omega$ den Operator $\tilde{A} := (-A + \tilde{\omega}I)$ und den Raum $X_\alpha = \mathcal{D}(\tilde{A}^\alpha)$ mit der Graphennorm $\|\cdot\|_{X_\alpha} := \|\tilde{A}^\alpha \cdot\|_X$.

Bemerkung 1.1.10. Verschiedene Wahlen von $\tilde{\omega} > \omega$ führen zu äquivalenten Normen $\|\cdot\|_{X_\alpha}$, wodurch unsere Ergebnisse, die wir erarbeiten werden, unabhängig von der Wahl der Norm sind.

Satz 1.1.11. *Sei A ein sektorieller Operator. Dann ist $(X_\alpha, \|\cdot\|_{X_\alpha})$ für alle $\alpha \geq 0$ ein Banachraum.*

Beweis. Siehe Theorem 1.4.8 in [Hen81]. □

Beispiel 1.1.12. (siehe [Ott09, Kap. 2.3])

Ist $X = L^2(\Omega)$ und $A = \Delta$ der Laplace-Operator mit $\mathcal{D}(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Dann ist für $\alpha = \frac{1}{2}$

$$\mathcal{D}((-A)^{\frac{1}{2}}) = \mathcal{D}((-\Delta)^{\frac{1}{2}}) = H_0^1(\Omega).$$

Damit haben wir nun einige Grundbegriffe aus der Theorie parabolischer Gleichungen definiert und Ergebnisse vorgestellt, die wir im Laufe dieser Arbeit benutzen werden. Mit diesen Begriffen können wir nun die für uns wesentlichen Annahmen an das System (1.1) stellen:

Annahme 1. Der Operator $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow X$ in (1.1) ist ein sektorieller Operator mit Sektor $\Sigma_{\alpha, \delta}$.

Annahme 2. Für ein $0 < \alpha < 1$ besitzt die Anfangswertaufgabe (1.1) eine hinreichend glatte, eindeutige Lösung $u : [0, T] \rightarrow X_\alpha$. Ferner erfülle die Abbildung $f : [0, T] \times X_\alpha \rightarrow X$ in einer Umgebung der Lösung u eine lokale Lipschitzbedingung, d.h. für jedes $R > 0$ gibt es ein $L = L(R, T) > 0$, sodass

$$\|f(t, v) - f(t, w)\|_X \leq L\|v - w\|_{X_\alpha}$$

für alle $t \in [0, T]$ und $v, w \in X_\alpha$, die $\max\{\|v - u(t)\|_{X_\alpha}, \|w - u(t)\|_{X_\alpha}\} \leq R$ erfüllen. Weiter sei die Abbildung $g : [0, T] \rightarrow X$, $g(t) := f(t, u(t))$ einmal Fréchet differenzierbar.

1.2 Konstruktion der Einschrittverfahren

Wir wollen nun die Anfangswertaufgabe (1.1), die die Annahmen 1 und 2 erfüllt, numerisch lösen. Dafür konstruieren wir in diesem Abschnitt **exponentielle Integratoren** und folgen dem Vorgehen in [HO06]. Dazu sei eine Schrittweite $h > 0$ gegeben. Wir definieren äquidistante Stützstellen $t_n = nh$ für $n \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq nh \leq Nh \leq T$. Oft wird $h = \frac{T}{N}$ für ein $N \in \mathbb{N}$ gewählt, sodass $t_N = T$ ist. Ziel ist es Einschrittverfahren zu konstruieren, die eine Approximation u_n der exakten Lösung u an den Stellen t_n , d.h. $u_n \approx u(t_n)$ für $n = 1, \dots, N$ liefern.

Für die Konstruktion der Verfahren benutzen wir die Formel der Variation der Konstanten. Die exakte Lösung von (1.1) besitzt die Darstellung

$$u(t+h) = e^{hA}u(t) + \int_t^{t+h} e^{(t+h-\tau)A}f(\tau, u(\tau))d\tau. \quad (1.4)$$

Approximieren wir nun die Nichtlinearität f im Integranden von (1.4) durch $f(\tau, u(\tau)) \approx f(t, u(t))$ für $\tau \in [t, t+h]$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} u(t+h) &\approx e^{hA}u(t) + \int_t^{t+h} e^{(t+h-\tau)A}d\tau f(t, u(t)) \\ &= e^{hA}u(t) + \int_0^h e^{(h-s)A}ds f(t, u(t)) \\ &= e^{hA}u(t) + h \int_0^1 e^{(1-\sigma)hA}d\sigma f(t, u(t)). \end{aligned}$$

Durch diese Überlegung liegt es nahe für $n = 0, \dots, N - 1$ das folgende Einschrittverfahren zu definieren:

$$u_{n+1} = e^{hA}u_n + h \int_0^1 e^{(1-\sigma)hA} d\sigma f(t_n, u_n), \quad (1.5)$$

wobei $u_0 = u^0 \in X$ der Anfangswert zur Zeit $t = 0$ aus (1.1) ist. Dies ist das **explizite exponentielle Euler-Verfahren**, welches im Fall von semilinearen parabolischen Gleichungen auch **Euler-Nørsett-Verfahren** genannt wird.

Wir definieren für $j \in \mathbb{N}_0$ die Abbildungen $\varphi_j : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ gemäß

$$\varphi_j(\lambda) := \begin{cases} e^\lambda, & j = 0 \\ \int_0^1 e^{(1-\sigma)\lambda} \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} d\sigma, & j \geq 1 \end{cases} \quad (1.6)$$

für $\lambda \in \mathbb{C}$. Darüber hinaus definieren wir für $t \in [0, T]$ und einen sektoriellen Operator A die folgenden Operatoren auf X :

$$\varphi_j(tA) := \begin{cases} e^{tA}, & j = 0, \\ \int_0^1 e^{(1-\sigma)tA} \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} d\sigma, & j \geq 1. \end{cases}$$

Für $j \geq 1$ und $0 < t \leq T$ gilt mit $\tau = \sigma t$, dass

$$\varphi_j(tA) = \int_0^1 e^{(1-\sigma)tA} \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} d\sigma = \frac{1}{t^j} \int_0^t e^{(1-\tau)A} \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!} d\tau.$$

Für die Operatoren $\varphi_j(tA)$ erhalten wir aus Satz 1.1.8 eine Stabilitätsabschätzung, die wir im folgenden Lemma festhalten. Aus dieser Abschätzung folgt, dass die Operatoren $\varphi_j(tA)$ sogar linear und beschränkt auf X sind.

Lemma 1.2.1. *Sei A ein sektorieller Operator mit Sektor $\Sigma_{\alpha, \delta}$ und $j \in \mathbb{N}_0$. Dann gibt es für jedes $0 \leq \alpha < 1$ ein $C = C(\alpha) > 0$, sodass*

$$\left\| t^\alpha \tilde{A}^\alpha \varphi_j(tA) \right\|_{X \rightarrow X} \leq C$$

gleichmäßig für $0 < t \leq T$ gilt. Insbesondere ist $\varphi_j(tA)$ ein linearer beschränkter Operator auf X .

Beweis. Der Fall $j = 0$, d.h. $\varphi_0(tA) = e^{tA}$ folgt aus Satz 1.1.8. Denn für $\omega > \alpha$ gilt

$$\operatorname{Re} \sigma(A - \omega I) < 0.$$

Dann folgt aus Satz 1.1.8 für jedes $\alpha \geq 0$, dass es ein $C = C(\alpha) > 0$ gibt mit

$$\left\| t^\alpha \tilde{A}^\alpha e^{tA} \right\|_{X \rightarrow X} \leq C e^{\omega t} \leq C$$

für alle $0 < t \leq T$.

Den Fall $j \geq 1$ können wir nun darauf zurückführen. Denn für $0 < t \leq T$ und $0 \leq \tau < t$ ist $0 < t - \tau \leq T$ und es gilt für $\alpha \geq 0$, dass

$$\left\| \tilde{A}^\alpha e^{(t-\tau)A} \right\|_{X \rightarrow X} \leq C(t - \tau)^{-\alpha}.$$

Damit folgt für $0 \leq \alpha < 1$

$$\begin{aligned} \left\| t^\alpha \tilde{A}^\alpha \varphi_j(tA) \right\|_{X \rightarrow X} &\leq t^{\alpha-j} \int_0^t \left\| \tilde{A}^\alpha e^{(t-\tau)A} \right\|_{X \rightarrow X} \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!} d\tau \\ &\leq C t^{\alpha-j} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!} d\tau \\ &\leq C \frac{t^{\alpha-1}}{(j-1)!} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} d\tau \\ &= C \frac{t^{\alpha-1} t^{1-\alpha}}{(1-\alpha)(j-1)!} = \tilde{C}. \end{aligned}$$

Damit sind die Operatoren $\varphi_j(tA)$ beschränkt auf X . Die Linearität der Operatoren ist klar, sodass $\varphi_j(tA)$ ein linearer beschränkter Operator auf X ist. \square

Mit Hilfe dieser Operatoren können wir nun das Euler-Nørsett-Verfahren schreiben als

$$u_{n+1} = \varphi_0(hA)u_n + h\varphi_1(hA)f(t_n, u_n)$$

für $n = 1, \dots, N-1$ und $u_0 = u^0$. Das Euler-Nørsett-Verfahren ist nur ein Beispiel aus einer ganzen Klasse von exponentiellen Integratoren zum numerischen Lösen der Anfangswertaufgabe (1.1) - den **exponentiellen Runge-Kutta-Verfahren**. Die exponentiellen Runge-Kutta-Verfahren der Stufe s werden definiert durch die Verfahrensvorschrift

$$u_{n+1} = \varphi_0(hA)u_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hA)f(t_n + c_i h, k_i(t_n, u_n, h)), \quad n = 0, \dots, N-1$$

mit

$$k_i(t, v, h) = \varphi_0(c_i h A)v + h \sum_{j=1}^s a_{i,j}(hA)f(t + c_j h, k_j(t, v, h)), \quad i = 1, \dots, s,$$

wobei $u_0 = u^0$ und die Koeffizientenabbildungen $a_{i,j}, b_i$ für $i, j = 1, \dots, s$ Linearkombinationen der φ_j sind, d.h. für $\alpha_{k,\ell}, \beta_i, c_i \in \mathbb{R}, i, j = 1, \dots, s$ ist

$$a_{i,j}(hA) = \sum_{k,\ell=1}^s \alpha_{k,\ell} \varphi_\ell(c_k hA)$$

und

$$b_i(hA) = \sum_{k=1}^s \beta_k \varphi_k(hA).$$

Dies sind im Allgemeinen implizite Verfahren. Wir wollen uns in dieser Arbeit mit rein expliziten Verfahren beschäftigen. Insbesondere soll das Hauptaugenmerk auf dem Euler-Nørsett-Verfahren liegen, welches unter die Klasse der expliziten exponentiellen Runge-Kutta-Verfahren fällt. Die expliziten exponentiellen Runge-Kutta-Verfahren der Stufe s erhalten die Form:

$$u_{n+1} = \varphi_0(hA)u_n + h \sum_{i=1}^s b_i(hA) f(t_n + c_i h, k_i(t_n, u_n, h)), \quad n = 0, \dots, N-1$$

mit

$$k_i(t, v, h) = \varphi_0(c_i hA)v + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}(hA) f(t + c_j h, k_j(t, v, h)), \quad i = 1, \dots, s,$$

wobei wieder $u_0 = u^0$ gesetzt wird.

Wie bei den Runge-Kutta-Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen im \mathbb{R}^n , lassen sich auch für exponentielle Runge-Kutta-Verfahren semilinearer parabolischer Gleichungen die Koeffizientenabbildungen in einem sogenannten Butcher-Tableau darstellen:

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{1,1}(\cdot) & \cdots & a_{1,s}(\cdot) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s,1}(\cdot) & \cdots & a_{s,s}(\cdot) \\ \hline & b_1(\cdot) & \cdots & b_s(\cdot) \end{array}$$

Beispiel 1.2.2. Für das Euler-Nørsett-Verfahren ist $s = 1$ und besitzt das Butcher-Tableau:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & \varphi_1 \end{array}$$

Wir werden in Kapitel 2 zeigen, dass das Euler-Nørsett-Verfahren die Konvergenzordnung 1 besitzt. Es lassen sich auch Verfahren höherer Ordnung konstruieren, die eine höhere Konvergenzordnung besitzen.

Beispiel 1.2.3. Wir definieren $\varphi_{i,j}(hA) = \varphi_i(c_j hA)$ für $i, j \in \mathbb{N}$.

Für $s = 2$ wird ein exponentielles Runge-Kutta-Verfahren der Stufe 2 in [HO06] definiert durch das Butcher-Tableau:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,2} & \\ \hline & 0 & \varphi_1 \end{array} \quad (1.7)$$

Allgemeiner kann eine Familie von Verfahren der Stufe 2 definiert werden durch

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ c_2 & c_2\varphi_{1,2} & \\ \hline & 0(1 - \frac{1}{2c_2})\varphi_1 & \frac{1}{2c_2}\varphi_1 \end{array}$$

für einen zu wählenden Parameter $c_2 > 0$. In [HO06] wird gezeigt, dass diese Verfahren die Konvergenzordnung 2 besitzen.

Im Fall $s = 3$ werden in [HO06] ähnliche von bis zu 3 Parametern abhängige Verfahren konstruiert. Diese Verfahren besitzen im schlechtesten Fall ebenfalls nur die Konvergenzordnung 2, wodurch sich der höhere Rechenaufwand nicht lohnt. Ein Verfahren der Stufe $s = 3$, welches auch die Konvergenzordnung 3 besitzt, ist gegeben durch das Butcher-Tableau:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,2} & & \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3}\varphi_{1,3} - \frac{8}{9}\varphi_{2,3} & \frac{8}{9}\varphi_{2,3} & \\ \hline & \varphi_1 - \frac{3}{2}\varphi_2 & 0 & \frac{3}{2}\varphi_2 \end{array} \quad (1.8)$$

Für $s = 4$ stellen wir nun eine Variante des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens vor, welches gegeben ist durch das Butcher-Tableau:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2}\varphi_{1,3} & & \\ 1 & \frac{1}{2}\varphi_{1,3}(\varphi_{0,3} - 1) & 0 & \varphi_{1,3} & \\ \hline & \varphi_1 - 3\varphi_2 + 4\varphi_3 & 2\varphi_2 - 4\varphi_3 & 2\varphi_2 - 4\varphi_3 & 4\varphi_3 - \varphi_2 \end{array}$$

Ein Verfahren der Stufe 4, welches die Konvergenzordnung 3 besitzt, ist das Verfahren von Strehmel und Wiener:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,2} & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,3} - \frac{1}{2}\varphi_{2,3} & \frac{1}{2}\varphi_{2,3} & & \\ 1 & \varphi_{1,4} - 2\varphi_{2,4} & -2\varphi_{2,4} & 4\varphi_{2,4} & \\ \hline & \varphi_1 - 3\varphi_2 + 4\varphi_3 & 0 & 4\varphi_2 - 8\varphi_3 & -\varphi_2 + 4\varphi_3 \end{array}$$

Zuletzt betrachten wir noch den Fall $s = 5$, um ein Verfahren der Konvergenzordnung 4 anzugeben. Dies ist gegeben durch das Butcher-Tableau:

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 \frac{1}{2} & & \frac{1}{2}\varphi_{1,2} & & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,3} - \frac{1}{2}\varphi_{2,3} & \varphi_{2,3} & & & & \\
 1 & \varphi_{1,4} - 2\varphi_{2,4} & \varphi_{2,4} & \varphi_{2,4} & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\varphi_{1,5} - 2a_{5,2} - a_{5,2} & a_{5,2} & a_{5,2} & \frac{1}{4}\varphi_{2,5} - a_{5,2} & & \\
 \hline
 & \varphi_1 - 3\varphi_2 + 4\varphi_3 & 0 & 0 & -\varphi_2 + 4\varphi_3 & 4\varphi_2 - 8\varphi_3 &
 \end{array} \tag{1.9}$$

1.3 Realisierung der Einschnittverfahren

Die praktische Anwendung der exponentiellen Runge-Kutta-Verfahren - insbesondere die des Euler-Nørsett-Verfahrens - benötigt die Kenntnis der linearen beschränkten Operatoren $\varphi_j(hA)$ für einen gegebenen sektoriellen Operator A sowie einer Schrittweite $h > 0$ und $j \in \mathbb{N}_0$. In diesem Abschnitt werden wir Darstellungen dieser Operatoren über Konturintegrale beweisen, welche dann mit Hilfe von Quadraturen numerisch gelöst werden können. Es werden hier die Methoden aus [LF10] vorgestellt. Das zentrale Hilfsmittel für die Herleitung dieser Konturintegrale ist die Laplacetransformation bzw. deren Rücktransformation. Wir werden zunächst die Laplacetransformation einführen sowie wichtige Eigenschaften und die Rücktransformationsformel vorstellen. Dabei folgen wir den Ergebnissen aus [Are01]. Wir beginnen mit der Definition der Laplacetransformation.

Definition 1.3.1. Sei $u : [0, \infty) \rightarrow X$. Dann heißt für $z \in \mathbb{C}$

$$\hat{u}(z) := \int_0^\infty e^{-tz} u(t) dt := \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T e^{-tz} u(t) dt \tag{1.10}$$

das **Laplace-Integral** von u an der Stelle z . Sei $W \subset \mathbb{C}$ und das Laplace-Integral (1.10) existiere für alle $z \in W$. Dann heißt $\hat{u} : W \rightarrow X$ die **Laplace-Transformation** von u . Wir schreiben auch $\hat{u} = \mathcal{L}[u]$.

Durch die Definition der Laplacetransformation 1.3.1 stellt sich unmittelbar die Frage, unter welchen Voraussetzungen die Laplacetransformation auf einer Menge $W \subset \mathbb{C}$ existiert. Dazu führen wir die folgenden Größen ein:

$$\text{abs}(u) := \inf\{\text{Re } z : \hat{u}(z) \text{ existiert}\},$$

$$\omega(u) := \inf\{\omega \in \mathbb{R} : \sup_{t \geq 0} \|e^{-\omega t} u(t)\|_X < \infty\},$$

$$\text{hol}(\hat{u}) := \inf\{\omega \in \mathbb{R} : \hat{u} \text{ besitzt eine holomorphe Fortsetzung für } \text{Re } z > \omega\},$$

wobei $\inf \emptyset := \infty$.

In [Are01] wird gezeigt, dass der Existenzbereich der Laplacetransformation, d.h. der Bereich in \mathbb{C} für den das Laplaceintegral konvergiert, entweder leer oder eine offene Halbebene in \mathbb{C} ist, d.h. das Laplaceintegral konvergiert für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \operatorname{abs}(u)$. Jedoch kann die Laplacetransformation in dieser Halbebene auf einen größeren Bereich holomorph fortsetzbar sein, d.h. es gilt stets $\operatorname{hol}(\hat{u}) \leq \operatorname{abs}(u) \leq \omega(u)$. Für Details verweisen wir auf [Are01, Kap.1]. Die letztere Ungleichung beweisen wir im folgenden Lemma für lokal integrierbare Funktionen. Insbesondere erhalten wir eine Beispiellklasse von Funktionen, für die der Definitionsbereich der Laplacetransformation nicht leer ist.

Lemma 1.3.2. *Sei $u \in L^1_{\text{loc}}([0, \infty), X)$ mit*

$$\|u(t)\|_X \leq Ct^{\nu-1}e^{\omega t}$$

für alle $t \geq 0$ und ein $C > 0$, $\omega \in \mathbb{R}$ und $\nu > 0$. Dann gilt $\operatorname{abs}(u) \leq \omega$. Insbesondere konvergiert das Laplaceintegral absolut für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \omega$.

Beweis. Sei $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \omega$. Dann gibt es ein $0 < \varepsilon < \operatorname{Re} z - \omega$ und es folgt

$$\int_0^\infty \|e^{-zt}u(t)\|_X dt \leq C \int_0^\infty e^{-\operatorname{Re} zt} e^{\omega t} t^{\nu-1} dt \leq C \int_0^\infty e^{-\varepsilon t} t^{\nu-1} dt < \infty.$$

□

In Abschnitt 1.1 haben wir den Begriff des sektoriellen Operators eingeführt. Diesen Begriff wollen wir auch für allgemeine Abbildungen ähnlich definieren.

Definition 1.3.3. Sei $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und $\omega \in \mathbb{R}$. Dann heißt eine Abbildung $U : W \subset \mathbb{C} \rightarrow X$ **sektoriell**, genauer **sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ und $\mu > 0$** , falls

- i) $(\Sigma_{\omega, \delta})^c \subset W$.
- ii) es existiert ein $M > 0$ und $\mu \in \mathbb{R}$, sodass

$$\|U(z)\|_X \leq \frac{M}{|z - \omega|^\mu}$$

für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \Sigma_{\omega, \delta}$.

Bemerkung 1.3.4. Der für uns interessante Fall ist, dass U eine sektorielle Abbildung mit $\mu > 0$ ist. Wir werden nur diesen Fall behandeln und dies stets voraussetzen. Die Ergebnisse dieser Arbeit lassen sich auf den Fall $\mu \leq 0$ verallgemeinern. Für Details verweisen wir auf [LF10], [LFPS06] und [LFP04].

Von besonderem Interesse ist auch die Existenz der inversen Laplace-Transformation, d.h:

Gibt es zu gegebenem $U : W \rightarrow X$ eine Funktion $u : [0, \infty) \rightarrow X$, sodass $\hat{u}(z) = U(z)$ für alle $z \in W$ gilt und welche Eigenschaften besitzt u ?

Wir werden im Fall, dass U sektoriell mit $\mu > 0$ ist, eine Antwort auf diese Frage geben. Wir definieren für $0 < \alpha < \pi$ und $\omega \in \mathbb{R}$ den nach rechts geöffneten Sektor

$$S_{\omega, \alpha} := \{z \in \mathbb{C} : |\arg(z - \omega)| < \alpha, z \neq \omega\}.$$

Im Fall $\omega = 0$ schreiben wir auch $S_{\omega, \alpha} = S_{\alpha}$. Man beachte, dass $S_{\frac{\pi}{2}} = \mathbb{C}_+ = \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) > 0\}$ ist. Wir beweisen nun einen Satz [Are01, Theorem 2.6.1], der die Existenz der inversen Laplacetransformation für sektorielle Abbildung zeigt.

Satz 1.3.5. *Sei $U : S_{\omega, \alpha + \frac{\pi}{2}} \rightarrow X$ holomorph und sektoriell mit $\mu > 0$ für ein $\omega \in \mathbb{R}$ und $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$. Dann existiert eine holomorphe Funktion $u : S_{\alpha} \rightarrow X$, sodass es ein $C > 0$ gibt mit*

$$\|u(z)\|_X \leq C|z|^{\mu-1}e^{\omega \operatorname{Re}(z)}$$

für alle $z \in S_{\beta}$ mit $0 < \beta < \alpha$. Ferner gilt für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(z) > \omega$, dass

$$\mathcal{L}[u](z) = U(z)$$

und u besitzt die Darstellung

$$u(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

für alle $z \in S_{\alpha}$, wobei Γ eine Kontur in $S_{\omega, \alpha + \frac{\pi}{2}}$ ist mit $\arg(\lambda - \omega) \rightarrow \pm(\gamma + \frac{\pi}{2})$ für $|\lambda| \rightarrow \infty$, $\lambda \in \Gamma$ und $0 < \gamma < \alpha$.

Beweis. Seien $0 < \gamma < \alpha$ und $\delta > 0$. Wir definieren die Kontur $\Gamma = \Gamma_+ \cup \Gamma_0 \cup \Gamma_-$ bestehend aus

$$\Gamma_{\pm} := \{\omega + re^{\pm i(\gamma + \frac{\pi}{2})}, \delta \leq r\}$$

und

$$\Gamma_0 := \left\{ \omega + \delta e^{i\theta}, -\gamma - \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \gamma + \frac{\pi}{2} \right\}.$$

Dabei laufe die Kontur Γ von unten nach oben - siehe dazu Abbildung 1.3.

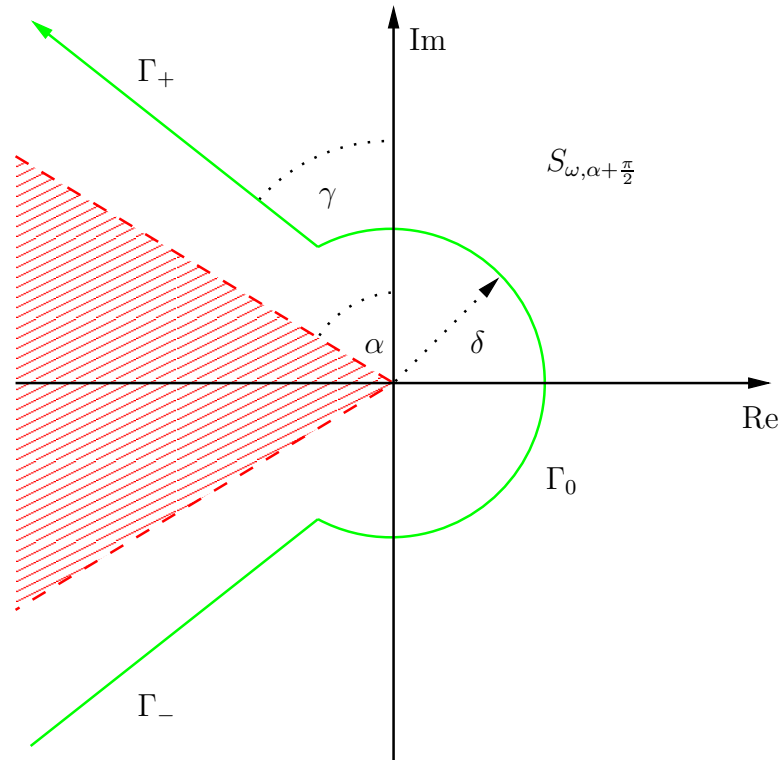


Abbildung 1.3: Bild der Kontur Γ im Beweis von Satz 1.3.5 für den Spezialfall $\omega = 0$.

Sei $0 < \varepsilon < \gamma$ und $z \in S_{\gamma-\varepsilon}$. Für $\lambda = \omega + r e^{\pm i(\gamma + \frac{\pi}{2})} \in \Gamma_{\pm}$ gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\lambda z) &= \omega \operatorname{Re}(z) + r|z| \cos(\arg z \pm (\gamma + \frac{\pi}{2})) \\ &\leq \omega \operatorname{Re}(z) \mp r|z| \sin(\arg z \pm \gamma) \\ &\leq \omega \operatorname{Re}(z) \mp r|z| \sin(\pm \varepsilon) \\ &= \omega \operatorname{Re}(z) - r|z| \sin(\varepsilon). \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\|e^{\lambda z} U(\lambda)\|_X \leq e^{\omega \operatorname{Re}(z)} e^{-r|z| \sin(\varepsilon)} \frac{M}{r^\mu}$$

für alle $\lambda \in \Gamma_{\pm}$. Somit ist das Integral

$$u(z) := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

absolut konvergent, d.h. die Folge $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit

$$u_k := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

konvergiert gegen u auf $S_{\gamma-\epsilon}$ und somit auch auf S_γ . Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \|u_k(z)\|_X &\leq \left\| \int_{\Gamma_0 \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X + \left\| \int_{\Gamma_+ \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X \\ &\quad + \left\| \int_{\Gamma_- \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X \end{aligned}$$

und es gibt für jedes $z \in S_\gamma$ ein $C_z > 0$, sodass für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\left\| \int_{\Gamma_0 \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X \leq C_z \quad (1.11)$$

und

$$\begin{aligned} \left\| \int_{\Gamma_\pm \cap B_k(\omega)} e^{\lambda z} U(\lambda) s \lambda \right\|_X &\leq \left\| \int_\delta^{\max(k, \delta)} e^{z(\omega + r e^{\pm i(\gamma + \frac{\pi}{2})})} U(\omega + r e^{\pm i(\gamma + \frac{\pi}{2})}) dr \right\|_X \\ &\leq M e^{\omega \operatorname{Re} z} \int_\delta^{\max(k, \delta)} e^{-r|z| \sin \epsilon} \frac{1}{r^\mu} dr \\ &\leq M e^{\omega \operatorname{Re} z} \int_\delta^\infty e^{-r|z| \sin \epsilon} \frac{1}{r^\mu} dr \leq C_z. \end{aligned}$$

Folglich erhalten wir

$$\sup_{k \in \mathbb{N}} \|u_k(z)\|_X \leq 3C_z$$

und für alle kompakten Teilmengen $K \subset S_\gamma$ gilt

$$\sup_{k \in \mathbb{N}, z \in K} \|u_k(z)\|_X < \infty.$$

Nach Satz A.10 ist u_k für jedes $k \in \mathbb{N}$ holomorph auf S_γ . Dann folgt aus dem Satz von Vitali A.12, dass auch $u = \lim_{k \rightarrow \infty} u_k$ holomorph auf S_γ ist. Nach den Sätzen A.14 und A.15 ist u unabhängig von $\delta > 0$ und wegen Lemma B.7 auch unabhängig von $\gamma < \alpha$, solange $\arg z < \gamma$. Daher ist u sogar holomorph für alle $z \in S_\alpha$.

Als nächstes wollen wir u abschätzen. Dafür wählen wir $\delta = |z|^{-1}$ und $\gamma, \epsilon > 0$ derart, dass $\gamma < \alpha$ und $|\arg z| < \gamma - \epsilon$ ist. Damit folgt

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_0} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\gamma - \frac{\pi}{2}}^{\gamma + \frac{\pi}{2}} e^{\omega \operatorname{Re} z} e^{\cos(\arg z + \theta)} M |z|^{\mu-1} d\theta \\ &\leq M e^{1 + \omega \operatorname{Re} z} |z|^{\mu-1} \\ &= C e^{\omega \operatorname{Re} z} |z|^{\mu-1}. \end{aligned}$$

Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{\pm}} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{|z|^{-1}}^{\infty} e^{\omega \operatorname{Re} z} e^{-r|z| \sin \varepsilon} \frac{M}{r^{\mu}} dr \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_1^{\infty} e^{\omega \operatorname{Re} z} e^{-\rho \sin \varepsilon} \frac{M}{\rho^{\mu}} |z|^{\mu-1} d\rho \\ &\leq \frac{M}{2\pi \sin \varepsilon} e^{\omega \operatorname{Re} z} |z|^{\mu-1} \\ &\leq \tilde{C} e^{\omega \operatorname{Re} z} |z|^{\mu-1}. \end{aligned}$$

Somit gilt

$$\|u(z)\|_X \leq C |z|^{\mu-1} e^{\omega \operatorname{Re} z}$$

für alle $z \in S_{\gamma-\varepsilon}$ mit $0 < \varepsilon < \gamma < \alpha$ und daher auch für alle $z \in S_{\beta}$ mit $0 < \beta < \alpha$. Dann existiert nach Lemma 1.3.2 auch die Laplacetransformation von u für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \omega$. Insbesondere konvergiert das Laplaceintegral von u an der Stelle z absolut.

Wir zeigen nun noch

$$\mathcal{L}[u](z) = U(z)$$

für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \omega$. Dazu sei $\xi \in \mathbb{R}$ mit $\xi > \omega$. Wir wählen $\Gamma = \Gamma(\gamma, \delta)$ derart, dass $0 < \delta < \xi - \omega$. Dann ist ξ rechts von der Kontur Γ . Ferner gilt für

$$\tilde{\Gamma}_R := \left\{ \omega + R e^{i\theta} : \gamma - \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \gamma + \frac{\pi}{2} \right\},$$

dass

$$\left\| \int_{\tilde{\Gamma}_R} \frac{U(\zeta)}{\xi - \zeta} d\zeta \right\|_X \leq \int_{-\gamma-\frac{\pi}{2}}^{\gamma+\frac{\pi}{2}} \frac{MR^{1-\mu}}{|\xi - \omega - R e^{i\theta}|} d\theta \rightarrow 0$$

für $R \rightarrow \infty$. Dann folgt mit dem Satz von Fubini B.8 und der Cauchyschen Integralformel A.4, dass

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[u](\xi) &= \int_0^{\infty} e^{-\xi t} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\zeta t} U(\zeta) d\zeta dt \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{U(\zeta)}{\xi - \zeta} d\zeta \\ &= U(\xi) + \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}_R} \frac{U(\zeta)}{\xi - \zeta} d\zeta \\ &= U(\xi). \end{aligned}$$

Also gilt $U(\xi) = \mathcal{L}[u](\xi)$ für alle $\xi > \omega$. Aus dem Identitätssatz holomorpher Funktionen A.11 gilt dann auch $U(z) = \mathcal{L}[u](z)$ für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \omega$,

denn $\text{hol}(\hat{u}) \leq \text{abs}(u) \leq \omega$. (vgl. [Are01, Theorem 1.5.1])

□

Mit Hilfe der Laplacetransformation und ihrer Rücktransformation können wir nun Integraldarstellungen für die linearen beschränkten Operatoren $\varphi_j(hA)$ zeigen. Dazu formulieren wir ein Lemma, in dem wir für die Funktionen $\varphi_j(\lambda)$ für $\lambda \in \mathbb{C}$ eine Darstellung über die inverse Laplacetransformation angeben.

Lemma 1.3.6. *Sei $j \in \mathbb{N}$ und $z, \lambda \in \mathbb{C}$. Dann definiere für $z \neq 0$ und $\lambda \neq z$*

$$\Phi_j(z, \lambda) := \frac{1}{z^j(z - \lambda)}.$$

Dann gibt es $\omega \in \mathbb{R}$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$, sodass die Abbildungen

$$\Phi_j(\cdot, \lambda) : S_{\omega, \pi - \delta} \rightarrow \mathbb{C}$$

holomorph und sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ sind. Ferner gilt

$$\varphi_j(\lambda) = \mathcal{L}^{-1}[\Phi_j(\cdot, \lambda)](1), \quad (1.12)$$

wobei φ_j wie in (1.6) definiert ist.

Beweis. Wir zeigen zunächst, dass die Abbildungen sektoriell sind.

Wir betrachten erst den Fall, dass $\text{Re } \lambda < 0$ ist. Dann gibt es einen Winkel $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ derart, dass $\lambda \in \Sigma_\delta \setminus \partial\Sigma_\delta$, d.h. $\lambda \notin S_{\pi - \delta}$. Dann gibt es ein $C > 0$, sodass für alle $z \in S_{\pi - \delta}$

$$\frac{1}{|z - \lambda|} \leq C.$$

Somit folgt

$$|\Phi_j(z, \lambda)| = \frac{1}{|z|^j |z - \lambda|} \leq \frac{C}{|z|^j}$$

für alle $z \in S_{\pi - \delta}$.

Betrachten wir nun den Fall $\text{Re } \lambda \geq 0$. Dann gibt es ein $\omega > 0$ und einen Winkel $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ derart, dass $\lambda \in \Sigma_{\omega, \delta} \setminus \partial\Sigma_{\omega, \delta}$, d.h. $\lambda \notin S_{\omega, \pi - \delta}$. Dann gibt es wieder ein $C > 0$, sodass

$$\frac{1}{|z - \lambda|} \leq C$$

für alle $z \in S_{\omega, \pi - \delta}$. Wir zeigen nun, dass

$$\frac{|z - \omega|}{|z|} \leq M$$

für alle $z \in S_{\omega, \pi - \delta}$. Dazu sei zunächst $\operatorname{Re} z \geq \frac{\omega}{2}$. Dann ist $|\operatorname{Re}(z - \omega)| \leq \operatorname{Re} z$ und $\operatorname{Im} z = \operatorname{Im}(z - \omega)$. Dann folgt

$$\begin{aligned} \frac{|z - \omega|^2}{|z|^2} &= \frac{(\operatorname{Re}(z - \omega))^2 + (\operatorname{Im}(z - \omega))^2}{(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2} \\ &= \frac{(\operatorname{Re}(z - \omega))^2 + (\operatorname{Im} z)^2}{(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2} \\ &\leq \frac{(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2}{(\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2} = 1. \end{aligned}$$

Sei nun $\operatorname{Re} z < \frac{\omega}{2}$. Sei $\alpha := \arg(z - \omega) - \frac{\pi}{2}$ und $\beta := \arg z - \frac{\pi}{2}$ - siehe dazu auch Abbildung 1.4.

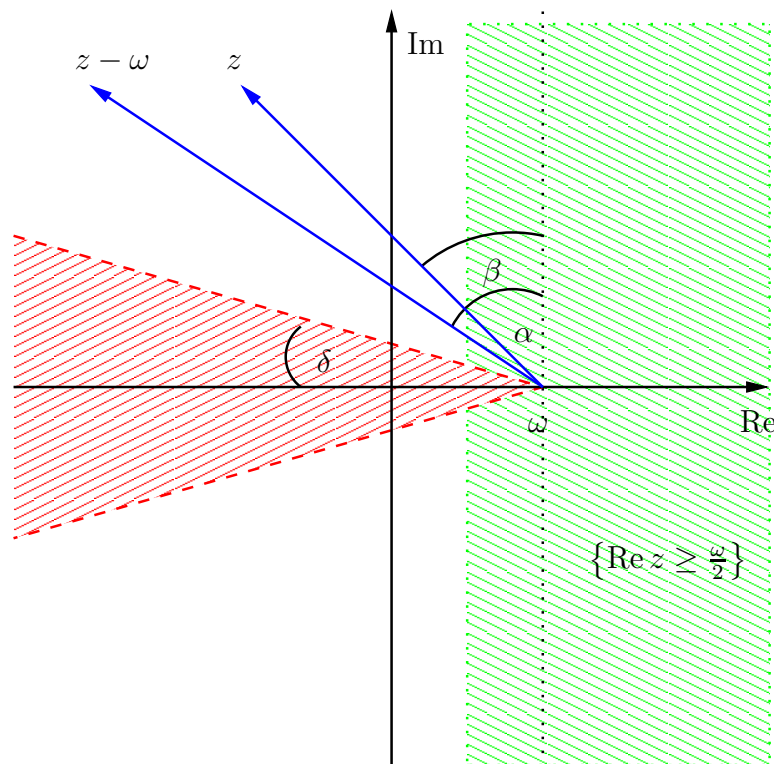


Abbildung 1.4: Die Winkel α und β aus dem Beweis von Lemma 1.3.6.

Dann gilt für alle $z \in S_{\omega, \pi - \delta}$ mit $\operatorname{Re} z < \frac{\omega}{2}$, dass $|\alpha| < \frac{\pi}{2} - \delta < \frac{\pi}{2}$. Somit folgt

$$\frac{|z - \omega|}{|z|} = \frac{\cos \beta \operatorname{Im} z}{\operatorname{Im} z \cos \alpha} \leq \frac{1}{\cos \alpha} \leq \frac{1}{\cos(\frac{\pi}{2} - \delta)} =: M < \infty.$$

Damit gilt nun

$$|\Phi_j(z, \lambda)| = \frac{1}{|z|^j |z - \lambda|} \leq \frac{C}{|z|^j} \leq \frac{CM^j}{|z - \omega|^j}$$

für alle $z \in S_{\omega, \pi - \delta}$. Wir haben gezeigt, dass die Abbildungen $\Phi_j(\cdot, \lambda)$ sektoriell sind. Die Holomorphie der Abbildungen ist klar.

Bleibt nun noch die Identität (1.12) zu zeigen. Dazu definieren wir für $t \geq 0$ und $\lambda \in \mathbb{C}$

$$g_0(t, \lambda) := e^{\lambda t},$$

sowie

$$g_j(t) := \frac{t^{j-1}}{(j-1)!}$$

für $j \in \mathbb{N}$. Dann ist

$$\varphi_j(\lambda) = \int_0^1 e^{(1-\tau)\lambda} \frac{\tau^{j-1}}{(j-1)!} d\tau = [g_0(\cdot, \lambda) * g_j](1).$$

Ferner gilt für $\lambda \in \mathbb{C}$

$$\mathcal{L}[g_0(\cdot, \lambda)](z) = \int_0^\infty e^{\lambda t} e^{-zt} dt = \int_0^\infty e^{(\lambda-z)t} dt = \frac{1}{z - \lambda}$$

für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \operatorname{Re} \lambda$. Weiter gilt

$$\mathcal{L}[g_j](z) = \frac{1}{z^j}$$

für $\operatorname{Re} z > 0$, wie wir per Induktion zeigen:

Induktionsanfang ($j = 1$):

$$\mathcal{L}[g_1](z) = \int_0^\infty e^{-tz} dt = \frac{1}{z}$$

für $\operatorname{Re} z > 0$.

Induktionsschritt ($j \mapsto j + 1$):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[g_{j+1}](z) &= \int_0^\infty e^{-tz} \frac{t^j}{j!} dt \\ &= \underbrace{-\frac{t^j}{j!} \frac{1}{z} e^{-tz} \Big|_{t=0}^{t=\infty}}_{=0} + \int_0^\infty \frac{1}{z} e^{-tz} \frac{t^{j-1}}{(j-1)!} dt \\ &\stackrel{\text{I.V.}}{=} \frac{1}{z} \frac{1}{z^{j-1}} = \frac{1}{z^j} \end{aligned}$$

für $\operatorname{Re} z > 0$. Dies schließt die Induktion ab und die Identität ist gezeigt. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} |[g_0(\cdot, \lambda) * g_j](t)| &\leq \frac{t^{j-1}}{(j-1)!} \int_0^t e^{(t-\tau) \operatorname{Re} \lambda} d\tau \\ &= \frac{t^{j-1}}{(j-1)!} \left[\frac{e^{\operatorname{Re} \lambda t}}{\operatorname{Re} \lambda} - \frac{1}{\operatorname{Re} \lambda} \right] \\ &\leq C t^{j-1} e^{\max(\operatorname{Re} \lambda, 0)t}. \end{aligned}$$

Also konvergiert das Laplaceintegral von $g_0(\cdot, \lambda) * g_j$ nach Lemma 1.3.2 absolut für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \max(\operatorname{Re} \lambda, 0)$. Klar ist, dass $g_0(\cdot, \lambda) * g_j$ stetig und von beschränkter Variation ist. Aus Satz B.6 gilt daher

$$[g_0(\cdot, \lambda) * g_j](1) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^z \mathcal{L}[g_0(\cdot, \lambda) * g_j](z) dz$$

für alle $c > \max(\operatorname{Re} \lambda, 0)$. Nun folgt mit dem Faltungssatz der Laplacetransformation B.4 und Lemma B.7 für alle $c > \max(\operatorname{Re} \lambda, 0)$, dass

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}[\Phi_j(\cdot, \lambda)](1) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^z \Phi_j(z, \lambda) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^z \Phi_j(z, \lambda) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^z \frac{1}{z^j(z-\lambda)} dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^z \mathcal{L}[g_0(\cdot, \lambda)](z) \mathcal{L}[g_j](z) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^z \mathcal{L}[g_0(\cdot, \lambda) * g_j](z) dz \\ &= [g_0(\cdot, \lambda) * g_j](1) = \varphi_j(\lambda). \end{aligned}$$

□

Somit haben wir nun Darstellungen der φ_j auf skalarer Ebene über inverse Laplacetransformationen bewiesen. Um diese Darstellung auch auf Operatorebene zu erhalten, liegt es nahe formal den Term $(z-\lambda)^{-1}$ in der Definition der Φ_j durch die Resolvente $(zI - hA)^{-1}$ zu ersetzen. Die rigorose Rechtfertigung dieser Vorgehensweise wollen wir nun beweisen. Eine Darstellung über Konturintegrale der φ_j auf Operatorebene gibt der nächste Satz an.

Satz 1.3.7. Sei $h > 0$ sowie $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow X$ ein sektorieller Operator. Dann gilt

$$\varphi_j(hA) = \mathcal{L}^{-1}[\Phi_j(\cdot, hA)](1),$$

wobei $\Phi_j(z, hA) := z^{-j}(zI - hA)^{-1}$ für $j \in \mathbb{N}$.

Beweis. A ist ein sektorieller Operator. Dann ist hA abgeschlossen und dicht definiert mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(hA) = \mathcal{D}(A)$. Ferner gibt es $\omega \in \mathbb{R}$, $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und ein $M \geq 1$, sodass

$$\|(zI - hA)^{-1}\|_{X \rightarrow X} \leq \frac{M}{|z - \omega|}$$

für alle $z \notin \Sigma_{\omega, \delta}$. Also ist auch hA ein sektorieller Operator.

Der Fall $j = 0$ folgt sofort aus Satz 1.1.4.

Sei also $j \geq 1$.

Definiere für $r > \max\{\omega, 0\}$ und $\frac{\pi}{2} < \gamma < \pi - \delta$ die Kontur $\Gamma = \Gamma_+ \cup \Gamma_0 \cup \Gamma_-$, wobei

$$\begin{aligned} \Gamma_+ &:= \{\omega + \rho e^{i\gamma}, \rho \geq r\}, \\ \Gamma_0 &:= \{\omega + re^{i\theta}, -\gamma \leq \theta \leq \gamma\}, \\ \Gamma_- &:= \{\omega + \rho e^{-i\gamma}, \rho \geq r\}. \end{aligned}$$

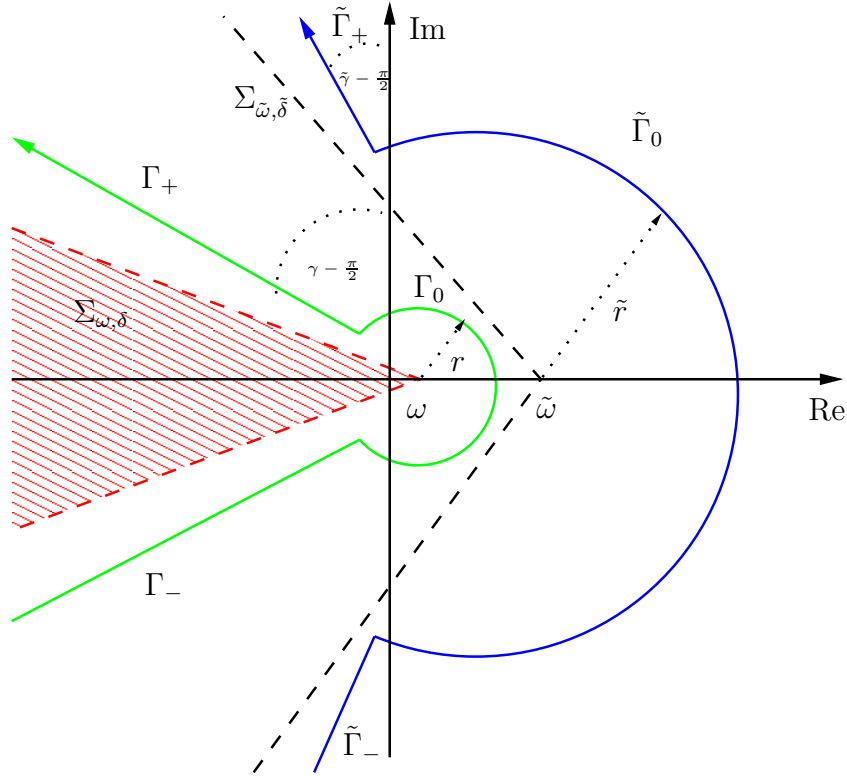
Dann gibt es $\tilde{\omega} > \max\{\omega + r, 0\}$ sowie einen Winkel $\pi - \gamma \leq \tilde{\delta} < \frac{\pi}{2}$, sodass $\Gamma \subset \Sigma_{\tilde{\omega}, \tilde{\delta}}$. Dann definiere für $\tilde{r} > \tilde{\omega}$ und $\frac{\pi}{2} < \tilde{\gamma} < \pi - \tilde{\delta}$ die Kontur $\tilde{\Gamma} = \tilde{\Gamma}_+ \cup \tilde{\Gamma}_0 \cup \tilde{\Gamma}_-$, wobei

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_+ &:= \{\tilde{\omega} + \tilde{\rho} e^{i\tilde{\gamma}}, \tilde{\rho} \geq \tilde{r}\}, \\ \tilde{\Gamma}_0 &:= \{\tilde{\omega} + \tilde{r} e^{i\tilde{\theta}}, -\tilde{\gamma} \leq \tilde{\theta} \leq \tilde{\gamma}\}, \\ \tilde{\Gamma}_- &:= \{\tilde{\omega} + \tilde{\rho} e^{-i\tilde{\gamma}}, \tilde{\rho} \geq \tilde{r}\}. \end{aligned}$$

Dabei seien die Konturen $\Gamma, \tilde{\Gamma}$ so orientiert, dass sie von unten nach oben laufen - siehe dazu Abbildung 1.5.

Dann ist

$$\begin{aligned} \chi : (-\infty, \infty) &\rightarrow \Gamma \subset \mathbb{C} \\ \sigma \mapsto \chi(\sigma) &:= \begin{cases} \omega + \sigma e^{i\gamma}, & \sigma \geq r \\ \omega + re^{i\sigma \frac{\pi}{r}}, & -r \leq \sigma \leq r \\ \omega + |\sigma| e^{-i\gamma}, & \sigma \leq -r \end{cases} \end{aligned}$$

Abbildung 1.5: Bild der Konturen Γ und $\tilde{\Gamma}$ im Beweis von Satz 1.3.7.

eine Parametrisierung von Γ und

$$\tilde{\chi} : (-\infty, \infty) \rightarrow \tilde{\Gamma} \subset \mathbb{C}$$

$$\tau \mapsto \tilde{\chi}(\tau) := \begin{cases} \tilde{\omega} + \tau e^{i\tilde{\gamma}}, & \tau \geq \tilde{r} \\ \tilde{\omega} + \tilde{r} e^{i\tau \frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{r}}}, & -\tilde{r} \leq \tau \leq \tilde{r} \\ \tilde{\omega} + |\tau| e^{-i\tilde{\gamma}}, & \tau \leq -\tilde{r} \end{cases}$$

eine Parametrisierung von $\tilde{\Gamma}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} & \int_{\tilde{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{\xi} \Phi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\tilde{\chi}(\tau)} \Phi_j(\tilde{\chi}(\tau), \chi(\sigma)) (\chi(\sigma) I - hA)^{-1} \tilde{\chi}'(\tau) \chi'(\sigma) d\sigma d\tau \quad (1.13) \end{aligned}$$

Wir zeigen nun, dass der Integrand in (1.13) absolut integrierbar ist, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \|e^{\tilde{\chi}(\tau)} \Phi_j(\tilde{\chi}(\tau), \chi(\sigma)) (\chi(\sigma) I - hA)^{-1} \tilde{\chi}'(\tau) \chi'(\sigma)\|_{X \rightarrow X} d\sigma d\tau < \infty$$

Dazu geben wir eine integrierbare Majorante an. Sei zunächst

$$\Xi(\tau, \sigma) := \left\| e^{\tilde{\chi}(\tau)} \Phi_j(\tilde{\chi}(\tau), \chi(\sigma)) (\chi(\sigma)I - hA)^{-1} \tilde{\chi}'(\tau) \chi'(\sigma) \right\|_{X \rightarrow X}$$

für $(\tau, \sigma) \in \mathbb{R}^2$. Da $\tilde{\gamma} < \gamma$, gibt es ein $C > 0$ und $\rho > \tilde{r}$ derart, dass

$$\frac{1}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}} - \chi(\sigma)|} \leq C \quad \forall |\tau| \geq \rho \geq |\sigma|, \quad (1.14)$$

$$\frac{1}{\left| \frac{\tilde{\omega} - \omega}{|\sigma|} + \frac{|\tau|}{|\sigma|} e^{\pm i\tilde{\gamma}} - e^{\pm i\gamma} \right|} \leq C \quad \forall |\tau|, |\sigma| \geq \rho, \quad (1.15)$$

$$\frac{1}{\left| \frac{\tilde{\chi}(\tau)}{|\sigma|} - \frac{\omega}{|\sigma|} - e^{\pm i\gamma} \right|} \leq C \quad \forall |\tau| \leq \rho \leq |\sigma|. \quad (1.16)$$

Nun ist Ξ beschränkt auf jedem Kompaktum $K \subset \mathbb{R}^2$, d.h. es gibt ein $C_1 > 0$, sodass

$$\Xi(\tau, \sigma) \leq C_1$$

für alle $(\tau, \sigma) \in [-\rho, \rho]^2$.

Sei nun $|\tau| \geq \rho$ und $|\sigma| \leq \rho$. Dann gilt mit (1.14) und da $\cos \tilde{\gamma} < 0$, dass

$$\begin{aligned} \Xi(\tau, \sigma) &\leq e^{\tilde{\omega} + |\tau| \cos \tilde{\gamma}} \frac{M |\chi'(\sigma)|}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}}|^j |\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}} - \chi(\sigma)| |\chi(\sigma) - \omega|} \\ &\leq \tilde{C}_2 e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| |\cos \tilde{\gamma}|} \frac{1}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}}|^j} \\ &\leq C_2 e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| |\cos \tilde{\gamma}|} \frac{1}{|\tau|^j}. \end{aligned}$$

Für $|\tau|, |\sigma| \geq \rho$ gilt mit (1.15), dass

$$\begin{aligned} \Xi(\tau, \sigma) &\leq e^{\tilde{\omega} + |\tau| \cos \tilde{\gamma}} \frac{M}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}}|^j |\tilde{\omega} - \omega + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}} - |\sigma|e^{\pm i\gamma}| |\sigma|} \\ &= e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| |\cos \tilde{\gamma}|} \frac{M}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}}|^j \left| \frac{\tilde{\omega} - \omega}{|\sigma|} + \frac{|\tau|}{|\sigma|} e^{\pm i\tilde{\gamma}} - e^{\pm i\gamma} \right| |\sigma|^2} \\ &\leq 2MC e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| |\cos \tilde{\gamma}|} \frac{1}{|\tilde{\omega} + |\tau|e^{\pm i\tilde{\gamma}}|^j |\sigma|^2} \\ &\leq C_3 e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| |\cos \tilde{\gamma}|} \frac{1}{|\tau|^j |\sigma|}. \end{aligned}$$

Und für $|\tau| \leq \rho$ und $|\sigma| \geq \rho$ gilt mit (1.16), dass

$$\begin{aligned} \Xi(\tau, \sigma) &\leq e^{\tilde{\chi}(\tau)} \left| \frac{\tilde{\chi}'(\tau)}{\tilde{\chi}(\tau)^j} \right| \frac{M}{|\tilde{\chi}(\tau) - \omega - |\sigma|e^{\pm i\gamma}||\sigma|} \\ &= e^{\tilde{\chi}(\tau)} \left| \frac{\tilde{\chi}'(\tau)}{\tilde{\chi}(\tau)^j} \right| \frac{M}{\left| \frac{\tilde{\chi}(\tau)}{|\sigma|} - \frac{\omega}{|\sigma|} - e^{\pm i\gamma} \right| |\sigma|^2} \\ &\leq 2MCe^{\tilde{\chi}(\tau)} \left| \frac{\tilde{\chi}'(\tau)}{\tilde{\chi}(\tau)^j} \right| \frac{1}{|\sigma|^2} \\ &\leq C_4 \frac{1}{|\sigma|^2}. \end{aligned}$$

Definiere also die Majorante

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi} : \mathbb{R}^2 &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\tau, \sigma) &\mapsto \tilde{\Xi}(\tau, \sigma) := \begin{cases} C_1, & |\tau|, |\sigma| \leq \rho \\ C_2 e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| \cos \tilde{\gamma}} \frac{1}{|\tau|^j}, & |\tau| > \rho, |\sigma| \leq \rho \\ C_3 e^{\tilde{\omega}} e^{-|\tau| \cos \tilde{\gamma}} \frac{1}{|\tau|^j |\sigma|}, & |\tau|, |\sigma| > \rho \\ C_4 \frac{1}{|\sigma|^2}, & |\tau| \leq \rho, |\sigma| > \rho. \end{cases} \end{aligned}$$

Dann ist $\tilde{\Xi} \in L^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$ und es gilt $\Xi \leq \tilde{\Xi}$ auf \mathbb{R}^2 . Also ist $\Xi \in L^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$, d.h. das Integral in (1.13) konvergiert absolut.

Ferner gilt nach [Are01] für alle $z \in \mathbb{C}_+$, dass

$$(zI - hA)^{-1} = \int_0^\infty e^{-zt} e^{thA} dt.$$

Für $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > \max(\max_{\lambda \in \Gamma} \operatorname{Re} \lambda, 0)$ folgt aus den Sätzen 1.1.4, 1.3.5 und Lemma 1.3.2, dass alle folgenden Integrale absolut konvergieren und der Satz von Fubini B.8 angewendet werden kann:

$$\begin{aligned} (zI - hA)^{-1} &= \int_0^\infty e^{-zt} e^{thA} dt \\ &= \int_0^\infty e^{-zt} \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma e^{\lambda t} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda dt \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma (\lambda I - hA)^{-1} \int_0^\infty e^{(\lambda-z)t} dt d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma \frac{1}{z - \lambda} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda. \end{aligned} \tag{1.17}$$

Da $(zI - hA)^{-1}$ holomorph ist für alle $z \notin \Sigma_{\omega, \delta}$ und das Integral in (1.17) absolut konvergiert, definiert das Integral nach Satz A.12 eine holomorphe

Funktion in z für alle $\operatorname{Re} z > \max(\max_{\lambda \in \Gamma} \{\operatorname{Re} \lambda\}, 0)$. Dann gilt nach dem Identitätssatz holomorpher Funktionen A.11, dass

$$(zI - hA)^{-1} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{1}{z - \lambda} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda \quad (1.18)$$

für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \Sigma_{\omega, \delta}$ für die das Integral in (1.18) existiert.

Damit erhalten wir einerseits

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\bar{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{\xi} \Phi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\bar{\Gamma}} e^{\xi} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \Phi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda \right\} d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\bar{\Gamma}} e^{\xi} \Phi_j(\xi, hA) d\xi \\ &= \mathcal{L}^{-1}[\Phi_j(\cdot, hA)](1). \end{aligned}$$

Andererseits erhalten wir mit Anwendung des Satzes von Fubini B.8 auf das Integral (1.13) und den Ergebnissen aus Satz 1.1.4 und Lemma 1.3.6, dass

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\bar{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{\xi} \Phi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\bar{\Gamma}} e^{\xi} \Phi_j(\xi, \lambda) d\xi \right\} d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \varphi_j(\lambda) d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \int_0^1 e^{(1-\sigma)\lambda} \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} d\sigma d\lambda \\ &= \int_0^1 \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} e^{(1-\sigma)\lambda} d\lambda \right\} d\sigma \\ &= \int_0^1 \frac{\sigma^{j-1}}{(j-1)!} e^{(1-\sigma)hA} d\sigma \\ &= \varphi_j(hA). \end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung gezeigt. \square

Schließlich haben wir nun Darstellungen der beschränkten linearen Operatoren $\varphi_j(hA)$ über Konturintegrale bewiesen. Für die numerische Realisierung der Einschnittverfahren - z.B. des Euler-Nørsett-Verfahrens - ist es nun nötig diese Konturintegrale auszuwerten. Die Konturintegrale können jedoch im Allgemeinen nicht analytisch gelöst werden. Daher werden wir die

Konturintegrale numerisch durch eine Trapezsumme approximieren. Zum Abschluss dieses Abschnitts werden wir die Vorgehensweise zur numerischen Approximation der Konturintegrale genauer erläutern.

Zunächst wollen wir an dieser Stelle bemerken, dass die Konturen in den bisher bewiesenen Integraldarstellungen noch keine spezielle Struktur erhalten haben. Nach dem Cauchyschen Integralsatz sind die Lösungen der Konturintegrale unabhängig von der Wahl der Kontur solange diese eine orientierte Kontur ist, die den Sektor, für den der Integrand sektoriell ist, umschließt. D.h. insbesondere liegt die Kontur im Holomorphiebereich des Integranden. Erst in Kapitel 2 werden wir spezielle Konturen betrachten, für die wir entsprechende Fehlerabschätzungen zeigen werden. Die geometrische Struktur der Kontur kann ausgenutzt werden, um entsprechend scharfe Abschätzungen zu zeigen.

Sei nun $V : W \rightarrow X$ eine holomorphe und sektorielle Abbildung. Weiter sei $v : [0, \infty) \rightarrow X$ mit

$$v(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{zt} V(z) dz$$

für alle $t > 0$. Die Existenz von einem solchen v ist durch Satz 1.3.5 gegeben. Wir wählen nun eine differenzierbare Parametrisierung T der Kontur Γ , d.h.

$$\begin{aligned} T : (-\infty, \infty) &\rightarrow \Gamma \subset W \\ x &\mapsto T(x). \end{aligned}$$

Setzen wir nun diese in das Konturintegral ein und wenden die Quadratur der Trapezsumme mit Schrittweite $\tau > 0$ als Approximation an, so erhalten wir

$$\begin{aligned} v(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{zt} V(z) dz = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{tT(x)} V(T(x)) T'(x) dx \\ &\approx \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} e^{tT(x_{\ell})} V(T(x_{\ell})) T'(x_{\ell}), \end{aligned}$$

wobei $(x_{\ell})_{\ell=-\infty}^{\infty}$ eine biunendliche Folge von Stützstellen $x_{\ell} = \ell\tau$ ist. Approximieren wir nun noch die unendliche Summe durch eine endliche Summe bis zum Index $K \in \mathbb{N}$ so erhalten wir

$$v(t) \approx \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(x_{\ell})} V(T(x_{\ell})) T'(x_{\ell}).$$

Ist $V(\bar{z}) = \overline{V(z)}$, so ist es sinnvoll eine zur reellen Achse symmetrische Kontur Γ und die entsprechende Parametrisierung T zu wählen. Dann reduziert sich die Summe auf

$$v(t) \approx \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_{\ell} e^{tT(x_{\ell})} V(T(x_{\ell})) \right)$$

mit den Gewichten $\omega_0 = \frac{\tau}{2\pi i} T'(0)$ und $\omega_{\ell} = \frac{\tau}{\pi i} T'(x_{\ell})$ für $1 \leq \ell \leq K$. D.h. der Rechenaufwand für die Berechnung der Summe ist nur nahezu halb so groß.

Sei $h > 0$ und A ein sektorieller Operator. Dann ist hA ein sektorieller Operator mit einem Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ für ein $\omega \in \mathbb{R}$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Sei Γ eine Kontur in $(\Sigma_{\omega, \delta})^c$ mit $\arg z \rightarrow \pm\theta$ für $|z| \rightarrow \infty$, $z \in \Gamma$ und $\frac{\pi}{2} < \theta < \pi - \delta$. Weiter sei T eine Parametrisierung von Γ und wähle $\tau > 0$ und $K \geq 1$. Dann approximieren wir die Operatoren $\varphi_j(hA)$ durch die Quadratur:

$$\varphi_j(hA) \approx \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_{\ell} e^{z_{\ell}} z_{\ell}^{-j} (z_{\ell} I - hA)^{-1} \right) =: \bar{\varphi}_j(hA), \quad (1.19)$$

mit $z_{\ell} = T(\ell\tau)$, $\omega_0 = \frac{\tau}{2\pi i} T'(0)$ und $\omega_{\ell} = \frac{\tau}{\pi i} T'(\ell\tau)$ für $0 \leq \ell \leq K$.

1.4 Konstruktion der Mehrschrittverfahren

Wir haben bereits in den vorherigen Abschnitten Einschrittverfahren zum numerischen Lösen der Anfangswertaufgabe (1.1), die die Annahmen 1, 2 erfüllt, konstruiert und dessen numerische Realisierung erläutert. Die naheliegende Frage ist nun, ob man auch - wie im Fall gewöhnlicher Differentialgleichungen im \mathbb{R}^n - Mehrschrittverfahren zum Lösen der Anfangswertaufgabe (1.1), die die Annahmen 1 und 2 erfüllt, konstruieren kann?

In diesem Abschnitt wollen wir nun exponentielle Integratoren dieser Art herleiten und konstruieren. Wir folgen dabei der Konstruktion in [CP06].

Sei also (1.1) mit den Annahmen 1 und 2 gegeben. Nach Annahme 2 gibt es also eine hinreichend glatte Lösung $u : [0, T] \rightarrow X_{\alpha}$ von (1.1). Sei nun $k \in \mathbb{N}$ sowie $h = \frac{T}{N}$ für ein $N \geq k$. Definiere die Zeitpunkte $t_n = nh$ für $0 \leq n \leq N$. Die Formel der Variation der Konstanten liefert dann

$$\begin{aligned} u(t_{n+k}) &= e^{(t_{n+k}-t_n)A} u(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+k}} e^{(t_{n+k}-\tau)A} f(\tau, u(\tau)) d\tau \\ &= e^{khA} u(t_n) + h \int_0^k e^{(k-\sigma)hA} f(t_n + \sigma h, u(t_n + \sigma h)) d\sigma. \end{aligned}$$

Für gegebene Approximationen $u_{n+j} \approx u(t_{n+j})$ für $0 \leq j \leq k-1$ definieren wir nun an der Stelle t_{n+k} die Approximation $u_{n+k} \approx u(t_{n+k})$ durch

$$u_{n+k} = e^{khA}u_n + h \int_0^k e^{(k-\sigma)hA} P_{n,k-1}(t_n + \sigma h) d\sigma, \quad (1.20)$$

wobei $P_{n,k-1}$ das Interpolationspolynom durch die Interpolationspunkte $\{(t_{n+j}, u(t_{n+j}))\}_{j=0}^{k-1}$ vom Grad $k-1$ ist. Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass das Interpolationspolynom $P_{n,k-1}$ eindeutig bestimmt ist.

Mit der Newtonschen Interpolationsformel gilt

$$P_{n,k-1}(t_n + \sigma h) = \sum_{j=0}^{k-1} \binom{\sigma}{j} \tilde{\Delta}^j f_n, \quad (1.21)$$

wobei $f_n := f(t_n, u_n)$, Δ der standard Vorwärtsdifferenzenoperator ist, d.h.

$$\tilde{\Delta} f_n := f(t_{n+1}, u_{n+1}) - f(t_n, u_n),$$

und für $\sigma \in \mathbb{R}$ und $j \in \mathbb{N}_0$ der Binomialkoeffizient $\binom{\sigma}{j}$ definiert ist durch

$$\binom{\sigma}{j} := \frac{\sigma(\sigma-1)\cdots(\sigma-j+1)}{j!}. \quad (1.22)$$

Einsetzen von (1.21) in (1.20) liefert die Iterationsvorschrift für das k -Schrittverfahren:

$$u_{n+k} = e^{khA}u_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \int_0^k e^{(k-\sigma)hA} \binom{\sigma}{j} d\sigma \tilde{\Delta}^j f_n \quad (1.23)$$

für $0 \leq n \leq N-k$. Wir definieren für $j \in \mathbb{N}_0$ und $k \in \mathbb{N}$ die Abbildungen $\psi_j(k, \cdot) : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ gemäß

$$\psi_j(k, \lambda) := \begin{cases} e^{k\lambda}, & j = 0, \\ \int_0^k e^{(k-\sigma)\lambda} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma, & 1 \leq j \leq k \end{cases} \quad (1.24)$$

für $\lambda \in \mathbb{C}$. Darüber hinaus definieren wir für $t \in [0, T]$ und einen sektoriellen Operator A die folgenden Operatoren auf X :

$$\psi_j(k, tA) := \begin{cases} e^{ktA}, & j = 0, \\ \int_0^k e^{(k-\sigma)tA} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma, & 1 \leq j \leq k. \end{cases} \quad (1.25)$$

Lemma 1.4.1. *Sei A ein sektorieller Operator auf X und $k \in \mathbb{N}$. Dann ist $\psi_j(k, tA)$ ein linearer beschränkter Operator auf X für $0 \leq j \leq k$.*

Beweis. Folgt sofort aus Satz 1.1.4. \square

Mit diesen linearen beschränkten Operatoren lassen sich die k -Schrittverfahren schreiben als:

$$u_{n+k} = \psi_0(k, hA)u_n + h \sum_{k=0}^{k-1} \psi_{j+1}(k, hA) \tilde{\Delta}^j f_n \quad (1.26)$$

für $0 \leq n \leq N - k$.

Es stellen sich nun die Fragen:

Unter welchen Voraussetzungen sind diese konstruierten Verfahren konvergent für h gegen 0?

Wie lassen sich geeignete Startwerte $u_j \approx u(t_j)$ für $0 \leq j \leq k - 1$ berechnen und welchen Einfluss haben diese auf die Konvergenz der Verfahren?

Für die Antworten auf diese Fragen zitieren wir an dieser Stelle einen Konvergenzsatz aus [CP06] für die k -Schrittverfahren.

Satz 1.4.2. *Sei die Anfangswertaufgabe (1.1) gegeben, die die Annahmen 1 und 2 erfüllt, wobei $g(t) := f(t, u(t))$ k -mal stetig Fréchet differenzierbar ist. Dann gilt für die Lösung $u_n, 0 \leq n \leq N$ des k -Schrittverfahrens aus (1.23) mit $h = \frac{T}{N}$ und Startwerten $u_j \in X_\alpha$ für $0 \leq j \leq k - 1$ mit*

$$\|u(t_j) - u_j\|_{X_\alpha} \leq C_0 h^k \quad (1.27)$$

für ein $C_0 > 0$, dass

$$\|u(t_n) - u_n\|_{X_\alpha} \leq Ch^k \sup_{0 \leq t \leq T} \|g^{(k)}(t)\|_X$$

für alle $0 \leq n \leq N$, wobei $K > 0$ unabhängig von h und g ist.

Beweis. siehe Theorem 1 in [CP06]. \square

Wir sehen also, dass die k -Schrittverfahren aus (1.23) für unsere Anfangswertaufgabe (1.1) mit den Annahmen 1, 2 konvergent der Ordnung k sind, wenn die Startwerte $u_j, 0 \leq j \leq k - 1$ die Bedingung (1.27) erfüllen. Es liegt also nahe, die Startwerte für das k -Schrittverfahren durch ein exponentielles Runge-Kutta-Verfahren der Konvergenzordnung k aus Abschnitt 1.2 zu verwenden. Für $k \leq 4$ kann also zum Beispiel ein Verfahren aus Beispiel 1.2.2, welches die Konvergenzordnung k besitzt, verwendet werden. Für Mehrschrittverfahren höherer Ordnung kann es jedoch schwierig werden, ein

konvergentes Einschrittverfahren gleicher Konvergenzordnung zu konstruieren. Ein Ausweg besteht darin, die Startwerte mit einem Einschrittverfahren niedriger Ordnung zu berechnen und diese mit Hilfe einer Kontraktion fest zu iterieren. Für Details dazu verweisen wir an dieser Stelle auf Sektion 4 in [CP06].

1.5 Realisierung der Mehrschrittverfahren

Ähnlich wie im Fall der Einschrittverfahren ist es für die numerische Realisierung der Mehrschrittverfahren nötig die beschränkten linearen Operatoren $\psi_j(k, hA)$ für einen gegebenen sektoriellen Operator A , sowie einer Schrittweite $h > 0$ und $j \in \mathbb{N}_0$ zu berechnen. Wir werden in diesem Abschnitt auch für diese Operatoren Darstellungen über Konturintegrale zeigen. Genauer ist dies eine Darstellung über inverse Laplacetransformationen, welche wiederum nach Parametrisierung durch eine Quadratur approximiert werden können. Unser Vorgehen orientiert sich an den Ergebnissen aus [LF10].

Wir benötigen zunächst eine Darstellung der Laplacetransformationen für die Binomialkoeffizienten aus (1.22). Wir erhalten eine Rekursionsvorschrift für die Berechnung der Laplacetransformationen.

Lemma 1.5.1. *Seien $\sigma \in \mathbb{R}_+$, $z \in \mathbb{C}_+$ und für $j \geq 1$*

$$\xi_j(\sigma) := \begin{cases} \sigma(\sigma - 1) \cdots (\sigma - (j - 2)), & j > 1 \\ 1, & j = 1. \end{cases}$$

Dann gilt

$$\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{0} \right] (z) = \mathcal{L}[\xi_1](z) = \frac{1}{z}$$

und für $j \geq 2$

$$\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{j-1} \right] (z) = \frac{1}{(j-1)!} \left[-\frac{d}{dz} \mathcal{L}[\xi_{j-1}](z) - (j-2) \mathcal{L}[\xi_{j-1}](z) \right]. \quad (1.28)$$

Ferner besitzt für jedes $j \geq 1$ die Laplacetransformation $\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{j-1} \right]$ eine sektorielle holomorphe Fortsetzung

$$R_j : (\Sigma_{\omega, \delta})^c \rightarrow \mathbb{C}$$

für jedes $\omega > 0$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$.

Beweis. Es gilt $\binom{\sigma}{0} = 1$ für alle $\sigma \in \mathbb{R}$. Dann folgt für alle $z \in \mathbb{C}_+$, dass

$$\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{0} \right] (z) = \mathcal{L}[1](z) = \mathcal{L}[\xi_1](z) = \int_0^\infty e^{-zt} dt = \frac{1}{z}.$$

Weiter gilt für $j \geq 2$, dass

$$\xi_j(\sigma) = \xi_{j-1}(\sigma)(\sigma - (j-2)) = \sigma \xi_{j-1}(\sigma) - (j-2)\xi_{j-1}(\sigma)$$

und

$$\binom{\sigma}{j-1} = \frac{\xi_j(\sigma)}{(j-1)!}.$$

Damit folgt nun für die Laplacetransformation des Binomialkoeffizienten mit Hilfe von Lemma B.1, dass

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{j-1} \right] (z) &= \frac{1}{(j-1)!} \mathcal{L}[\xi_j](z) \\ &= \frac{1}{(j-1)!} \mathcal{L}[(\cdot)\xi_{j-1} - (j-2)\xi_{j-1}](z) \\ &= \frac{1}{(j-1)!} [\mathcal{L}[(\cdot)\xi_{j-1}](z) - (j-2)\mathcal{L}[\xi_{j-1}](z)] \\ &= \frac{1}{(j-1)!} \left[-\frac{d}{dz} \mathcal{L}[\xi_{j-1}](z) - (j-2)\mathcal{L}[\xi_{j-1}](z) \right] \end{aligned}$$

für alle $z \in \mathbb{C}_+$.

Ferner ist

$$\begin{aligned} R_1 : (\Sigma_{\omega, \delta})^c &\rightarrow \mathbb{C} \\ z &\mapsto R_1(z) := \frac{1}{z} \end{aligned}$$

sektoriell und holomorph für jedes $\omega > 0$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Aus der Rekursionsvorschrift (1.28) folgt dann für $j \geq 2$ und $z \in \mathbb{C}_+$, dass

$$\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{j-1} \right] (z) = \frac{p_j(z)}{q_j(z)},$$

wobei p_j, q_j Polynome mit $\deg(p_j) < \deg(q_j)$ sind und q_j eine j -fache Nullstelle in $z = 0$ besitzt. Dann ist

$$\begin{aligned} R_j : (\Sigma_{\omega, \delta})^c &\rightarrow \mathbb{C} \\ z &\mapsto R_j(z) := \frac{p_j(z)}{q_j(z)} \end{aligned}$$

sektoriell und holomorph für jedes $\omega > 0$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Somit definiert R_j für $j \geq 1$ eine holomorphe Fortsetzung von $\mathcal{L} \left[\binom{\cdot}{j-1} \right]$. \square

Wir erhalten also beispielsweise für $1 \leq j \leq 4$:

$$\begin{aligned} R_1(z) &= \frac{1}{z} \\ R_2(z) &= \frac{1}{z^2} \\ R_3(z) &= \frac{1}{z^3} - \frac{1}{2z^2} = \frac{2-z}{2z^3} \\ R_4(z) &= \frac{3-3z+z^2}{3z^4}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Laplacetransformationen des Binomialkoeffizienten können wir nun auf skalarer Ebene Darstellungen der Funktionen $\psi_j(k, \lambda)$ für $\lambda \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{N}$ über inverse Laplacetransformationen beweisen.

Lemma 1.5.2. *Sei $\lambda \in \mathbb{C}$ und $\omega > 0$, $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ gegeben, sodass $\lambda \in \Sigma_{\omega, \delta} \setminus \partial\Sigma_{\omega, \delta}$. Definiere für $j \in \mathbb{N}$ und $z \in (\Sigma_{\omega, \delta})^c$ die Abbildungen*

$$\Psi_j(z, \lambda) := \frac{R_j(z)}{z - \lambda},$$

wobei R_j aus Lemma 1.5.1 gegeben ist. Dann sind die Abbildungen

$$\Psi_j(\cdot, \lambda) : (\Sigma_{\omega, \delta})^c \rightarrow \mathbb{C}$$

holomorph und sektoriell. Ferner gilt

$$\psi_j(k, \lambda) = \mathcal{L}^{-1}[\Psi_j(\cdot, \lambda)](k),$$

wobei $\psi_j(k, \lambda)$ wie in (1.24) definiert ist.

Beweis. Sei $\lambda \in \Sigma_{\omega, \delta} \setminus \partial\Sigma_{\omega, \delta}$. Dann gilt für alle $z \in (\Sigma_{\omega, \delta})^c$, dass

$$\frac{1}{|z - \lambda|} \leq C$$

für ein $C > 0$. Somit folgt für jedes $z \in (\Sigma_{\omega, \delta})^c$:

$$|\Psi_j(z, \lambda)| \leq C|R_j(z)|.$$

Also sind die Abbildungen $\Psi_j(\cdot, \lambda)$ holomorph und sektoriell, da R_j holomorph und sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ ist. Sei wieder für $\sigma \geq 0$

$$g_0(t, \lambda) = e^{\lambda\sigma}$$

und

$$\binom{\sigma}{j-1} = \frac{\xi_j(\sigma)}{(j-1)!}$$

mit ξ_j wie in Lemma 1.5.1. Dann ist

$$\psi_j(k, \lambda) = \int_0^k e^{(k-\sigma)\lambda} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma = \left(g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right) (k).$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \left| \left[g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] \right| &\leq \binom{t}{j-1} e^{\operatorname{Re} \lambda t} \int_0^t e^{-\operatorname{Re} \lambda \sigma} d\sigma \\ &\leq \tilde{C} t^{j-1} \left[\frac{e^{\operatorname{Re} \lambda t}}{\operatorname{Re} \lambda} - \frac{1}{\operatorname{Re} \lambda} \right] \\ &\leq C t^{j-1} e^{\max(\operatorname{Re} \lambda, 0)t}, \end{aligned}$$

sodass wir aus Satz B.6 für alle $c > \max(\operatorname{Re} \lambda, 0)$

$$\left[g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] (k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{kz} \mathcal{L} \left[g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] (z) dz$$

erhalten. Dann folgt mit dem Faltungssatz der Laplacetransformation B.4, Lemma B.7 und Lemma 1.5.1, dass

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}[\Psi_j(\cdot, \lambda)](k) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{kz} \frac{R_j(z)}{z-\lambda} dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{kz} \frac{R_j(z)}{z-\lambda} dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{kz} \mathcal{L}[g_0(\cdot, \lambda)](z) \mathcal{L} \left[\frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] (z) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{kz} \mathcal{L} \left[g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] (z) dz \\ &= \left[g_0(\cdot, \lambda) * \frac{\xi_j}{(j-1)!} \right] (k) = \psi_j(k, \lambda). \end{aligned}$$

□

Um nun eine Darstellung auf Operatorebene zu erhalten, liegt es wieder nahe, formal den Term $(z-\lambda)^{-1}$ durch die Resolvente $(zI - hA)^{-1}$ zu ersetzen und so die Operatoren $\Psi_j(k, hA)$ zu definieren. Dass wir so die Operatoren $\psi_j(k, hA)$ über inverse Laplacetransformationen darstellen können, beweisen wir in dem folgenden Satz:

Satz 1.5.3. *Sei $h > 0$ und $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow X$ ein sektorieller Operator. Dann gilt*

$$\psi_j(k, hA) = \mathcal{L}^{-1}[\Psi_j(\cdot, hA)](k),$$

wobei $\Psi_j(z, hA) := R_j(z)(zI - hA)^{-1}$ mit $R_j(z)$ aus Lemma 1.5.1 für $j \geq 1$ und $R_0 \equiv 1$.

Beweis. A ist ein sektorieller Operator. Dann ist hA abgeschlossen und dicht definiert mit Definitionsbereich $\mathcal{D}(hA) = \mathcal{D}(A)$. Ferner gibt es $\omega \in \mathbb{R}$, $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und ein $M \geq 1$, sodass

$$(zI - hA)^{-1} \leq \frac{M}{|z - \omega|}$$

für alle $z \notin \Sigma_{\omega, \delta}$. Also ist auch hA ein sektorieller Operator.

Der Fall $j = 0$ folgt sofort aus Satz 1.1.4.

Sei also $j \geq 1$. Wie im Beweis von Satz 1.3.7 zeigt man, dass das Integral

$$\int_{\tilde{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, \lambda) (zI - hA)^{-1} d\lambda d\xi$$

absolut konvergiert und der Satz von Fubini B.8 anwendbar ist. Dabei seien die Konturen $\Gamma, \tilde{\Gamma}$ genau wie im Beweis von Satz 1.3.7 definiert. Ebenso gilt wieder

$$(zI - hA)^{-1} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{1}{z - \lambda} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda$$

für alle $z \in \mathbb{C}$, für die das Integral auf der rechten Seite existiert. Damit folgt nun einerseits, dass

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\tilde{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{k\xi} R_j(\xi) \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{1}{\xi - \lambda} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda \right\} d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{k\xi} R_j(\xi) (\xi I - hA)^{-1} d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, hA) d\xi \\ &= \mathcal{L}^{-1}[\Psi_j(\cdot, hA)](k). \end{aligned}$$

Andererseits erhalten wir mit Anwendung des Satzes von Fubini B.8 und

dem Ergebnis aus Lemma 1.5.2, dass

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\tilde{\Gamma}} \int_{\Gamma} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda d\xi \\
&= \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, \lambda) (\lambda I - hA)^{-1} d\xi d\lambda \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{k\xi} \Psi_j(\xi, \lambda) d\xi \right\} d\lambda \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \psi_j(k, \lambda) d\lambda \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (\lambda I - hA)^{-1} \int_0^k e^{(k-\sigma)\lambda} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma d\lambda \\
&= \int_0^k \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{(k-\sigma)\lambda} (\lambda I - hA)^{-1} d\lambda \right\} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma \\
&= \int_0^k e^{(k-\sigma)hA} \binom{\sigma}{j-1} d\sigma \\
&= \psi_j(k, hA).
\end{aligned}$$

□

Sei also $h > 0$ und A ein sektorieller Operator. Dann ist hA ein sektorieller Operator mit einem Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ für ein $\omega \in \mathbb{R}$ und ein $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Wir erhalten beispielsweise für $k \in \mathbb{N}$ und $0 \leq j \leq 4$ die Operatoren

$$\Psi_0(z, hA) = (zI - hA)^{-1}, \quad (1.29)$$

$$\Psi_1(z, hA) = \frac{1}{z} (zI - hA)^{-1}, \quad (1.30)$$

$$\Psi_2(z, hA) = \frac{1}{z^2} (zI - hA)^{-1}, \quad (1.31)$$

$$\Psi_3(z, hA) = \frac{2-z}{2z^3} (zI - hA)^{-1}, \quad (1.32)$$

$$\Psi_4(z, hA) = \frac{3-3z+z^2}{3z^4} (zI - hA)^{-1}. \quad (1.33)$$

Sei Γ eine Kontur in $(\Sigma_{\omega, \delta})^c$ mit $\arg z \rightarrow \pm\theta$ für $|z| \rightarrow \infty$, $z \in \Gamma$ und $\frac{\pi}{2} < \theta < \pi - \delta$. Weiter sei T eine Parametrisierung von Γ und wähle $\tau > 0$ und $K \geq 1$. Dann approximieren wir die Operatoren $\psi_j(k, hA)$ durch die Quadratur:

$$\psi_j(k, hA) \approx \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_{\ell} e^{kz_{\ell}} R_j(z_{\ell}) (z_{\ell} I - hA)^{-1} \right) =: \bar{\psi}_j(k, hA), \quad (1.34)$$

mit $z_{\ell} = T(\ell\tau)$, $\omega_0 = \frac{\tau}{2\pi i} T'(0)$ und $\omega_{\ell} = \frac{\tau}{\pi i} T'(\ell\tau)$ für $0 \leq \ell \leq K$.

Kapitel 2

Fehleranalyse

Im zweiten Kapitel werden wir Fehleranalysen für das Euler-Nørsett-Verfahren aus Abschnitt 1.2 und für die Quadraturapproximation der inversen Laplacetransformationen holomorpher Abbildungen durchführen.

Im ersten Abschnitt führen wir einen Konvergenzbeweis für das Euler-Nørsett-Verfahren durch, wobei wir die Quadraturapproximation der Operatoren $\varphi_j(hA)$ zunächst nicht berücksichtigen. Wir zeigen, dass das Euler-Nørsett-Verfahren die Konvergenzordnung 1 besitzt. Wir folgen der Strategie in [HO06] und den Ausarbeitungen in [Die10]. Dafür definieren wir den lokalen Fehler des Euler-Nørsett-Verfahrens und nutzen die Stabilitätsaussage aus Lemma 1.2.1, um Abschätzungen des lokalen Fehlers zu beweisen. Mit diesen Abschätzungen ist es uns dann möglich, den Konvergenzfehler zu betrachten und die Konvergenzordnung 1 zu zeigen. In [HO06] und [Die10] sind Konvergenzaussagen für die Einschrittverfahren höherer Ordnung zu finden. Diese folgen aus einer Verallgemeinerung des Vorgehens für das Euler-Nørsett-Verfahren. Im Fall nichtäquidistanter Schrittweite lässt sich für das Euler-Nørsett-Verfahren ebenfalls die Konvergenzordnung 1 zeigen. Dazu verweisen wir auf [Die10].

Im darauf folgenden Abschnitt betrachten wir den Fehler der Quadratur für die inverse Laplacetransformation. Wir stützen uns in diesem Abschnitt auf die Ergebnisse aus [LFPS06] und [LFP04]. Die Beweise werden wir hier ausführlich ausarbeiten. Dabei wird konkret die Kontur in der inversen Laplacetransformation als Hyperbel gewählt und ihre geometrische Struktur ausgenutzt, um entsprechend scharfe Abschätzungen des Fehlers zu zeigen. Wir betrachten den Diskretisierungsfehler für das Konturintegral der Quadratur. Da die entstehende Summe eine unendliche Summe ist, verlangt die numerische Berechnung ein Abschneiden der Summe bei hinreichend großem

Index. Der entstehende Fehler wird ebenfalls betrachtet. Dann werden wir Fehlerschranken unter Berücksichtigung, dass die Laplacetransformation selbst fehlerbehaftet ist, was in der Anwendung eine realistische Annahme ist, zeigen. Zum Schluss dieses Abschnitts wenden wir die gezeigten Fehlerschranken auf die Operatoren $\varphi_j(hA)$ und $\psi_j(k, hA)$ für die exponentiellen Integratoren an.

Im letzten Abschnitt des Kapitels werden wir eine Möglichkeit zur Fehleranalyse des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadraturapproximation aufzeigen. Dieser Fehler wurde in der Literatur noch nicht betrachtet. Wir werden eine Annahme treffen müssen, dass die Quadraturen ähnlich wie die exakten Operatoren aus Lemma 1.2.1 eine Stabilitätsabschätzung erfüllen. Der Beweis dieser Aussage scheint von weitaus komplexerer Natur zu sein und ist immer noch ein offenes Problem. Setzen wir jedoch die Stabilität voraus, so folgt die Konvergenz aus unseren Ergebnissen in Abschnitt 2.3.

2.1 Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahrens

Das Anfangswertproblem (1.1) soll nun mit dem Euler-Nørsett-Verfahren numerisch gelöst werden. Dazu sei ein $N \in \mathbb{N}$ und eine Schrittweite $h = \frac{T}{N}$ gegeben. Wir definieren äquidistante Stützstellen $t_j = jh$ für $j = 0, \dots, N$. Die Lösung des Euler-Nørsett-Verfahrens liefert nun eine Approximation u_n der exakten Lösung u von (1.1), d.h. $u_n \approx u(t_n)$ für $n = 0, \dots, N$. Die Iterationsvorschrift für u_n liest sich nach Kapitel 1 folgendermaßen:

$$u_{n+1} = e^{hA}u_n + h\varphi_1(hA)f(t_n, u_n),$$

für $n = 0, \dots, N - 1$ und $u_0 = u^0 \in X$.

Zunächst definieren wir den lokalen Fehler des Euler-Nørsett-Verfahrens

$$\delta_h(t_n) := u(t_n) - \left(e^{hA}u(t_{n-1}) + h\varphi_1(hA)f(t_{n-1}, u(t_{n-1})) \right).$$

Für diesen Fehler erhalten wir nun eine Darstellung, wie das folgende Lemma zeigt.

Lemma 2.1.1. *Unter den Annahmen 1 und 2 gilt für den lokalen Fehler δ_h des Euler-Nørsett-Verfahrens zu gegebener Schrittweite $h > 0$, dass*

$$\delta_h(t_{n+1}) = \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma d\tau$$

für $n = 0, \dots, N - 1$.

Beweis. Die Formel der Variation der Konstanten liefert

$$u(t_n + h) = e^{hA}u(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)A}g(t_n + \tau)d\tau. \quad (2.1)$$

Da g nach Annahme 2 einmal Fréchet differenzierbar ist, liefert eine Taylor-Entwicklung der Ordnung 1

$$g(t_n + \tau) = g(t_n) + \int_0^\tau g'(t_n + \sigma)d\sigma. \quad (2.2)$$

Einsetzen von (2.2) in (2.1) liefert dann

$$\begin{aligned} u(t_n + h) &= e^{hA}u(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)A}d\tau g(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma)d\sigma d\tau \\ &= e^{hA}u(t_n) + h\varphi_1(hA)g(t_n) + \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma)d\sigma d\tau. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Damit ergibt sich nun mit der Definition von δ_h

$$\begin{aligned} \delta_h(t_{n+1}) &= u(t_{n+1}) - \left(e^{hA}u(t_n) + h\varphi_1(hA)g(t_n) \right) \\ &= \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma)d\sigma d\tau. \end{aligned}$$

□

Mit Hilfe dieses Lemmas lassen sich nun, wie oben bereits erwähnt, Abschätzungen für den lokalen Fehler zeigen. Dabei nutzen wir zusätzlich die Stabilitätsabschätzung der Operatoren $\varphi_j(hA)$ aus Satz 1.1.8.

Satz 2.1.2. *Sei $0 < \nu \leq 1$ derart, dass $\tilde{A}^{\nu-1}g' \in L^\infty([0, T]; X_\alpha)$. Dann gibt es ein $C = C(\nu, T) > 0$, sodass*

$$h^{1-\nu}\|\delta_h(t_{n+1})\|_{X_\alpha} + \left\| \tilde{A}^{\nu-1}\delta_h(t_{n+1}) \right\|_{X_\alpha} \leq Ch^2 \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1}g'(t) \right\|_{X_\alpha}$$

und

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA}\delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \leq Ch \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1}g'(t) \right\|_{X_\alpha}$$

gleichmäßig für $0 \leq t_n \leq T$.

Beweis. Es gilt

$$\begin{aligned}
& h^{1-\nu} \|\delta_h(t_{n+1})\|_{X_\alpha} + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \delta_h(t_{n+1}) \right\|_{X_\alpha} \\
&= \left\| h^{1-\nu} \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma d\tau \right\|_{X_\alpha} \\
&\quad + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma d\tau \right\|_{X_\alpha} \\
&\leq \int_0^h h^{1-\nu} \left\| e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma \right\|_{X_\alpha} \\
&\quad + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma \right\|_{X_\alpha} d\tau \\
&= \int_0^h h^{1-\nu} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau \tilde{A}^{\nu-1} g'(t_n + \sigma) d\sigma \right\|_{X_\alpha} \\
&\quad + \left\| e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau \tilde{A}^{\nu-1} g'(t_n + \sigma) d\sigma \right\|_{X_\alpha} d\tau \\
&\leq \int_0^h \left(h^{1-\nu} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} e^{(h-\tau)A} \right\|_{X \rightarrow X} + \left\| e^{(h-\tau)A} \right\|_{X \rightarrow X} \right) \\
&\quad \cdot \int_0^\tau \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t_n + \sigma) \right\|_{X_\alpha} d\sigma d\tau \\
&\stackrel{\text{Lemma 1.2.1}}{\leq} C \int_0^h (h^{1-\nu} (h-\tau)^{\nu-1} + 1) \int_0^\tau \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t_n + \sigma) \right\|_{X_\alpha} d\sigma d\tau \\
&\leq C \int_0^h (h^{1-\nu} (h-\tau)^{\nu-1} + 1) h \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} d\tau \\
&= Ch \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} \left(h^{1-\nu} \int_0^h (h-\tau)^{\nu-1} d\tau + h \right) \\
&= Ch \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} \left(\frac{1}{\nu} h^{1-\nu} h^\nu + h \right) \\
&\leq \tilde{C} h^2 \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha}.
\end{aligned}$$

Damit ist die erste Behauptung gezeigt. Ferner gilt

$$\begin{aligned}
& \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \leq \|\delta_h(t_n)\|_{X_\alpha} + \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} e^{jhA} \tilde{A}^{\nu-1} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
&\leq h^{\nu-1} h^{1-\nu} \|\delta_h(t_n)\|_{X_\alpha} + \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} e^{jhA} \right\|_{X \rightarrow X} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \stackrel{\text{Lemma 1.2.1}}{\leq} h^{\nu-1} h^{1-\nu} \|\delta_h(t_n)\|_{X_\alpha} + C \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& \leq \tilde{C} h \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} \left(h^\nu + h \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \right) \\
& \leq 2\tilde{C} h \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} h \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \\
& \leq C(\nu, T) h \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha},
\end{aligned}$$

da

$$h \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \leq \int_0^T t^{\nu-1} dt = \frac{T^\nu}{\nu} = \text{const.}$$

Damit ist auch die zweite Behauptung gezeigt. \square

Für den Konvergenzbeweis des Euler-Nørsett-Verfahrens wird nun noch das folgende diskrete Gronwall-Lemma benötigt. Dies zitieren wir an dieser Stelle aus [HO06].

Lemma 2.1.3. *Seien $h > 0$ und $M \in \mathbb{N}$ mit $Mh \leq T$. Ferner seien $\varepsilon_n > 0$, $n = 1, \dots, M$ gegeben, sodass für gewisse $0 \leq \rho < 1$ und $a, b \geq 0$*

$$\varepsilon_n \leq ah \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\rho} \varepsilon_j + b$$

gilt. Dann existiert ein $C = C(\rho, a, T) > 0$ mit

$$\varepsilon_n \leq Cb.$$

Es folgt nun ein Konvergenzsatz, der die Konvergenz der Ordnung 1 des Euler-Nørsett-Verfahrens zeigt.

Satz 2.1.4. *Gegeben sei das Anfangswertproblem (1.1), welches die Annahmen 1 und 2 erfüllt. Weiter sei $g : [0, T] \rightarrow X$ einmal Frechét differenzierbar und es gebe ein $\beta \in (0, 1]$, sodass $\tilde{A}^{\beta-1} g' \in L^\infty([0, T], X_\alpha)$. Dann gilt für die Lösung u_n , $0 \leq nh \leq T$ des Euler-Nørsett-Verfahrens von (1.1)*

$$\|u_n - u(t_n)\|_Y \leq Ch \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\beta-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha}$$

gleichmäßig für $0 \leq nh \leq T$.

Beweis. Für den Fehler $e_h(t_n) := u_n - u(t_n)$ gilt

$$\begin{aligned} e_h(t_{n+1}) &= u_{n+1} - u(t_{n+1}) = e^{hA}u_n + h\varphi_1(hA)f(t_n, u_n) - u(t_{n+1}) \\ &= e^{hA}u_n + h\varphi_1(hA)f(t_n, u_n) - e^{hA}u(t_n) - h\varphi_1(hA)f(t_n, u(t_n)) - \delta_h(t_{n+1}) \\ &= e^{hA}e_h(t_n) + h\varphi_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \delta_h(t_{n+1}). \end{aligned}$$

Wir zeigen zunächst per Induktion die folgende Identität für $n \in \mathbb{N}$:

$$e_h(t_n) = h \sum_{j=0}^{n-1} e^{(n-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] - \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}).$$

Induktionsanfang ($n = 1$):

Es gilt $e_h(t_0) = u_0 - u(t_0) = 0$. Damit folgt

$$\begin{aligned} e_h(t_1) &= h\varphi_1(hA)[f(t_0, u_0) - f(t_0, u(t_0))] - \delta_h(t_1) \\ &= h \sum_{j=0}^0 e^{(1-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] - \sum_{j=0}^0 e^{jhA} \delta_h(t_{1-j}). \end{aligned}$$

Induktionsschritt ($n \mapsto n + 1$):

$$\begin{aligned} e_h(t_{n+1}) &= e^{hA}e_h(t_n) + h\varphi_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \delta_h(t_{n+1}) \\ &\stackrel{\text{I.V.}}{=} e^{hA} \left[h \sum_{j=0}^{n-1} e^{(n-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] - \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right] \\ &\quad + h\varphi_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \delta_h(t_{n+1}) \\ &= e^{hA} h \sum_{j=0}^{n-1} e^{(n-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\ &\quad + h\varphi_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - e^{hA} \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) - \delta_h(t_{n+1}) \\ &= h \sum_{j=0}^{n-1} e^{(n+1-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\ &\quad + h\varphi_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \sum_{j=0}^{n-1} e^{(j+1)hA} \delta_h(t_{n-j}) - \delta_h(t_{n+1}) \\ &= h \sum_{j=0}^n e^{(n+1-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{j=1}^n e^{jhA} \delta_h(t_{n+1-j}) - \delta_h(t_{n+1}) \\
& = h \sum_{j=0}^n e^{(n+1-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] - \sum_{j=0}^n e^{jhA} \delta_h(t_{n+1-j}).
\end{aligned}$$

Dies schließt die Induktion ab und somit ist die Identität gezeigt. Mit der Definition vom $\|\cdot\|_{X_\alpha} = \|\tilde{A}^\alpha \cdot\|_X$, Lemma 1.2.1, Satz 2.1.2, der Lipschitzeigenschaft von f aus Annahme 2 und der Ungleichung

$$m^{-\nu} \leq \left(\frac{m+1}{2}\right)^{-\nu} \quad (2.4)$$

für $m \in \mathbb{N}_0$ und $\nu \geq 0$ folgt nun, dass

$$\begin{aligned}
& \|e_h(t_n)\|_{X_\alpha} \\
& \leq h \sum_{j=0}^{n-1} \left\| e^{(n-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \right\|_{X_\alpha} + \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& = h \sum_{j=0}^{n-1} \left\| \tilde{A}^\alpha e^{(n-j-1)hA} \varphi_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \right\|_X + \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& \leq h \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^\alpha e^{(n-j-1)hA} \right\|_{X \rightarrow X} \|\varphi_1(hA)\|_{X \rightarrow X} L \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& \stackrel{\text{Lemma 1.2.1}}{\leq} Ch \sum_{j=1}^{n-1} h^{-\alpha} (n-j-1)^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& \stackrel{(2.4)}{\leq} \frac{C}{2^{-\alpha}} h \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + \left\| \sum_{j=0}^{n-1} e^{jhA} \delta_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\
& \stackrel{\text{Satz 2.1.2}}{\leq} \tilde{C} \left[h \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + h \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\beta-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} \right].
\end{aligned}$$

Wendet man nun das Gronwall-Lemma 2.1.3 mit $\varepsilon_n = \|e_h(t_n)\|_{X_\alpha}$, $a = \tilde{C}$, $\rho = \alpha$ und $b = \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\beta-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha}$, so folgt

$$\|e_h(t_n)\|_{X_\alpha} \leq Ch \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\beta-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha}.$$

□

2.2 Fehleranalyse der Quadratur

In diesem Abschnitt wollen wir den Fehler der Quadraturapproximation für die Konturintegrale aus Abschnitt 1.3 und 1.5 studieren. Wir folgen dabei [LFPS06] und [LFP04].

Sei $V : (\Sigma_\delta)^c \rightarrow X$ holomorph und sektoriell für ein $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und $\mu \geq 1$. Wir untersuchen den Fehler der Approximation

$$\begin{aligned} v(t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{zt} V(z) dz = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{tT(x)} V(T(x)) T'(x) dx \\ &\approx \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{l=-K}^K e^{tT(l\tau)} V(T(l\tau)) T'(l\tau) =: v_K(t), \end{aligned}$$

wobei $T : (-\infty, \infty) \rightarrow \Gamma$ eine Parametrisierung der Kontur Γ ist und $\tau > 0$ eine gegebene Schrittweite.

Es reicht aus, holomorphe Abbildungen $V : (\Sigma_\delta)^c \rightarrow X$ zu betrachten, die sektoriell mit Sektor Σ_δ sind, d.h. $\omega = 0$ in Definition 1.3.3. Denn sei $\tilde{V} : (\Sigma_{\omega, \delta})^c \rightarrow X$ holomorph und sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ für ein $\omega \in \mathbb{R}$, d.h. es gibt ein $M \geq 1$, sodass

$$|\tilde{V}(z)| \leq \frac{M}{|z - \omega|^\mu}, \quad \forall z \in \mathbb{C} \setminus \Sigma_{\omega, \delta}.$$

Dann ist $V(z) := \tilde{V}(z + \omega)$ sektoriell mit Sektor Σ_δ und es gilt nach Lemma B.5, dass

$$v(t) := \mathcal{L}^{-1}[V](t) = \mathcal{L}^{-1}[\tilde{V}(\cdot + \omega)](t) = e^{-\omega t} \mathcal{L}^{-1}[\tilde{V}](t) = e^{-\omega t} \tilde{v}(t),$$

wobei hier

$$\mathcal{L}[v](z) = V(z), \quad \mathcal{L}[\tilde{v}](z) = \tilde{V}(z)$$

ist. Sei Γ eine Kontur um Σ_δ , welche durch T parametrisiert wird. Dann ist

$$v_K(t) = \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V(T(\ell\tau)) T'(\ell\tau).$$

Des Weiteren parametrisiert $T + \omega$ eine Kontur um den Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ und es

gilt

$$\begin{aligned}\tilde{v}_K(t) &= \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{t(T(\ell\tau)+\omega)} \tilde{V}(T(\ell\tau) + \omega) T'(\ell\tau) \\ &= e^{\omega t} \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V(T(\ell\tau)) T'(\ell\tau) \\ &= e^{\omega t} v_K(t).\end{aligned}$$

Angenommen wir wissen, dass

$$\|v(t) - v_K(t)\|_X \leq C.$$

So folgt

$$\begin{aligned}\|\tilde{v}(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X &= e^{\omega t} \|e^{-\omega t} \tilde{v}(t) - e^{-\omega t} \tilde{v}_K(t)\|_X \\ &= e^{\omega t} \|v(t) - v_K(t)\|_X \\ &\leq e^{\omega t} C.\end{aligned}$$

Wir werden die Kontur Γ als den linken Zweig einer Hyperbel um den Sektor Σ_δ wählen. Dazu seien $\gamma, d > 0$ derart, dass

$$d < \min\{\gamma, \frac{\pi}{2} - \gamma\}, \quad \gamma + d + \delta < \frac{\pi}{2}. \quad (2.5)$$

Wir definieren dann für $z \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}S &: D_d \rightarrow \mathbb{C} \\ z &\mapsto S(z) := -\sin(\gamma + iz),\end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei $D_d := \{z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im} z| \leq d\}$. Dann gilt für festes $y \in [-d, d]$, dass für alle $z = x + iy$ mit $x \in \mathbb{R}$ gilt

$$\left(\frac{\operatorname{Re} S(z)}{\sin(\gamma - y)}\right)^2 - \left(\frac{\operatorname{Im} S(z)}{\cos(\gamma - y)}\right)^2 = 1. \quad (2.7)$$

Somit bildet S jede Gerade parallel zur reellen Achse mit Imaginärteil zwischen $-d$ und d auf den linken Zweig einer Hyperbel mit Brennpunkten bei ± 1 und asymptotischen Winkeln $\pm(\frac{\pi}{2} - (\gamma - y))$ zur reellen Achse ab.

Wir definieren nun die Kontur Γ durch die Parametrisierung

$$\begin{aligned}T &: D_d \rightarrow \mathbb{C} \\ z &\mapsto T(z) := \lambda(1 + S(z))\end{aligned} \quad (2.8)$$

für ein festes $\lambda > 0$.

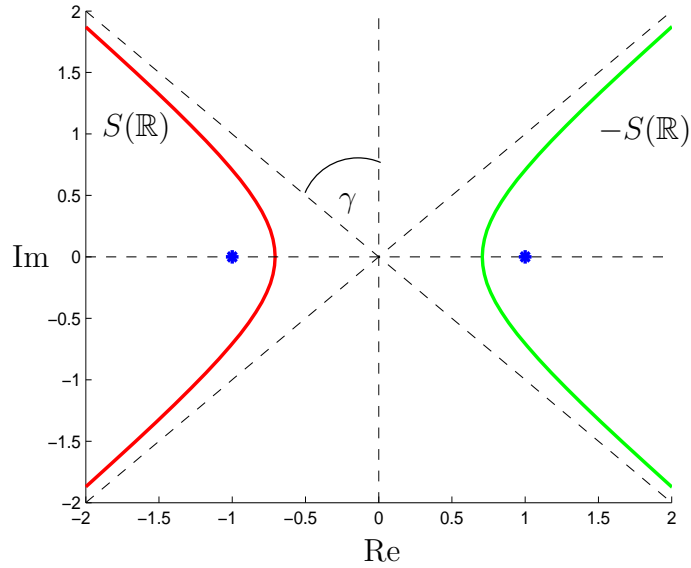


Abbildung 2.1: Bild von S und $-S$ aus (2.6) im Fall $y = 0$. Gekennzeichnet sind die Brennpunkte bei ± 1 (blau) und der asymptotische Winkel $\gamma = \gamma - y$ zur imaginären Achse.

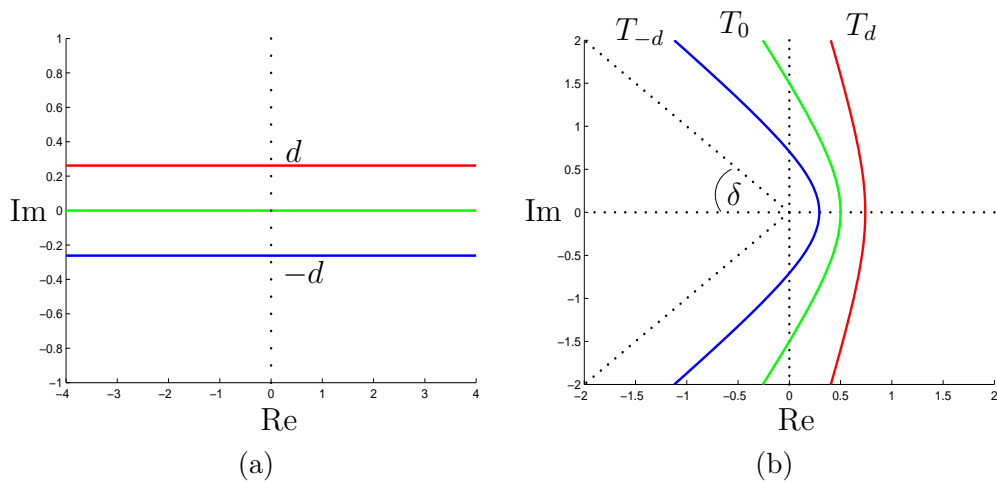


Abbildung 2.2: Lösung v des Anfangsrandwertproblems 3.5 berechnet durch das Euler-Nørsett-Verfahren mit Schrittweiten $\Delta x = h = 0.001$.

Lemma 2.2.1. Seien $d, \gamma > 0$ wie in (2.5) und T wie in (2.8). Dann gilt

$$\mathcal{R}(T) \subset \mathbb{C} \setminus \Sigma_\delta.$$

Beweis. Sei $z \in D_d$, d.h. $z = x + iy$ mit $x \in \mathbb{R}, y \in [-d, d]$. Nach 2.7 gilt, dass S jede parallel zur reellen Achse verlaufende Gerade mit Imaginärteil zwischen $-d$ und d auf den linken Zweig einer Hyperbel mit Brennpunkten bei ± 1 und asymptotischen Winkeln $\pm (\frac{\pi}{2} - (\gamma - y))$ zur reellen Achse abbildet. Also bildet $(1 + S(\cdot))$ jede solcher Geraden auf den linken Zweig einer Hyperbel ab, dessen Brennpunkt bei 0 liegt. Dann gilt $T(z) = \omega + re^{i\theta}$ für $\omega, r > 0$, sowie $|\theta| \leq \gamma - y + \frac{\pi}{2}$. Damit folgt aus (2.5), dass

$$\begin{aligned} |\theta| &\leq \gamma - y + \frac{\pi}{2} \leq \gamma + d + \frac{\pi}{2} \\ &< \frac{\pi}{2} - \delta + \frac{\pi}{2} = \pi - \delta. \end{aligned}$$

Also gilt $T(z) \notin \Sigma_\delta$ für alle $z \in D_d$. \square

Das Lemma sagt aus, dass T den Streifen D_d auf ein Gebiet außerhalb des Sektors Σ_δ abbildet, d.h. insbesondere in ein Gebiet in dem V holomorph ist und die sektorielle Eigenschaft erfüllt. Wir wollen nun eine Klasse von Funktionen definieren, die für uns in der Analyse des Quadraturfehlers von großer Bedeutung ist.

Definition 2.2.2. $S(D_d, X)$ ist die Klasse aller stetigen Abbildungen $g : D_d \rightarrow X$, welche holomorph auf dem Inneren von D_d sind und die beiden folgenden Eigenschaften erfüllen:

i)

$$\int_{-d}^d \|g(x + iy)\|_X dy \rightarrow 0 \text{ für } |x| \rightarrow \infty.$$

ii)

$$N(g, D_d) := \int_{-\infty}^{\infty} (\|g(x + id)\|_X + \|g(x - id)\|_X) dx < \infty.$$

Die beiden Eigenschaften in Definition 2.2.2 sagen aus, dass das Integral über den zur imaginären Achse parallel verlaufenden Anteil eines abgeschnittenen Streifens abfällt, je größer der Streifen in reeller Richtung wird. Die zweite Eigenschaft sagt aus, dass das Integral über den Rand des unendlichen Streifens D_d endlich ist. Wir definieren nun die Funktion G_t für festes $t \geq 0$ durch

$$\begin{aligned} G_t : D_d &\rightarrow X \\ z &\mapsto G_t(z) := -\frac{1}{2\pi i} e^{tT(z)} V(T(z)) T'(z), \end{aligned} \quad (2.9)$$

wobei T wie in (2.8) ist. Dann lässt sich unsere Approximation der inversen Laplacetransformation von V schreiben als

$$v_K(t) = \tau \sum_{\ell=-K}^K G_t(x_\ell).$$

Man beachte, dass das Minus in der Definition von G_t durch die Orientierung der Kontur Γ , welche durch T parametrisiert wird, entsteht. Genauer gilt $T(x) \rightarrow -\infty$ für $x \rightarrow \infty$ und $T(x) \rightarrow \infty$ für $x \rightarrow -\infty$.

Lemma 2.2.3. *Sei $V : (\Sigma_\delta)^c \rightarrow X$ holomorph und sektoriell für ein $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und $\mu \geq 1$. Weiter seien $\gamma, d > 0$ wie in (2.5), G_t wie in (2.9) mit Parametrisierung T wie in (2.8). Dann gilt für alle $x \in \mathbb{R}$ und $-d < y < d$, dass*

$$\|G_t(x + iy)\|_X \leq \frac{Ce^{\lambda t}}{4\lambda^{\mu-1}} e^{-\lambda t \sin(\gamma-y) \cosh x},$$

wobei

$$C = C(\gamma, d, M, \mu) = \frac{2M}{\pi} \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{(1 - \sin(\gamma + d))^{2\mu-1}}}. \quad (2.10)$$

Insbesondere gilt

$$\|G_t(x)\|_X \leq \frac{Ce^{\lambda t}}{4\lambda^{\mu-1}} e^{-\lambda t \sin \gamma \cosh x}.$$

Beweis. Es ist für $z \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned} T(z) &= \lambda(1 - \sin(\gamma + iz)), \\ T'(z) &= -i\lambda \cos(\gamma + iz). \end{aligned}$$

Sei $x \in \mathbb{R}$ und $-d < y < d$. Dann ist $z = x + iy \in D_d$ und es gilt

$$\begin{aligned} G_t(x + iy) &= \frac{i\lambda}{2\pi i} e^{t\lambda - t\lambda \sin(\gamma - y + ix)} V(\lambda(1 - \sin(\gamma - y + ix))) \cos(\gamma - y + ix) \\ &= \frac{\lambda e^{\lambda t}}{2\pi} e^{-t\lambda \sin(\xi + ix)} V(\lambda(1 - \sin(\xi + ix))) \cos(\xi + ix), \end{aligned}$$

wobei $\xi = \gamma - y \in (\gamma - d, \gamma + d) \subset (0, \frac{\pi}{2} - \delta)$. Dann folgt aus der sektoriellen Eigenschaft von V , dass

$$\begin{aligned} \|G_t(x + iy)\|_X &\leq \frac{M\lambda e^{\lambda t}}{2\pi} e^{-t\lambda \sin(\xi) \cosh(x)} \frac{|\cos(\xi + ix)|}{|\lambda - \lambda \sin(\xi + ix)|^\mu} \\ &= \frac{Me^{\lambda t}}{2\pi\lambda^{\mu-1}} e^{-t\lambda \sin(\xi) \cosh(x)} \frac{1}{|1 - \sin(\xi + ix)|^{\mu-1}} \left| \frac{\cos(\xi + ix)}{1 - \sin(\xi + ix)} \right|. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ferner folgt aus den Identitäten aus Lemma B.14, dass

$$\begin{aligned}
\left| \frac{\cos(\xi + ix)}{1 - \sin(\xi + ix)} \right|^2 &= \frac{\operatorname{Re}(\cos(\xi + ix))^2 + \operatorname{Im}(\cos(\xi + ix))^2}{\operatorname{Re}(1 - \sin(\xi + ix))^2 + \operatorname{Im}(1 - \sin(\xi + ix))^2} \\
&= \frac{\cos^2 \xi \cosh^2 x + \sin^2 \xi \sinh^2 x}{(1 - \sin \xi \cosh x)^2 + \cos^2 \xi \sinh^2 x} \\
&= \frac{\cos^2 \xi \cosh^2 x + \sin^2 \xi \sinh^2 x}{1 - 2 \sin \xi \cosh x + \sin^2 \xi \cosh^2 x + \cos^2 \xi \sinh^2 x} \\
&= \frac{\cos^2 \xi \cosh^2 x - \sin^2 \xi + \sin^2 \xi \cosh^2 x}{1 - 2 \sin \xi \cosh x + \sin^2 \xi \cosh^2 x - \cos^2 \xi + \cos^2 \xi \cosh^2 x} \\
&= \frac{\cosh^2 x - \sin^2 \xi}{\sin^2 \xi - 2 \sin \xi \cosh x + \cosh^2 x} \\
&= \frac{(\cosh x - \sin \xi)(\cosh x + \sin \xi)}{(\cosh x \sin \xi)^2} \\
&= \frac{\cosh x + \sin \xi}{\cosh x - \sin \xi} = \frac{\cosh x + \sin \xi}{\cosh x - \sin \xi} - \frac{\cosh x - \sin \xi}{\cosh x - \sin \xi} + 1 \\
&= \frac{2 \sin \xi}{\cosh x - \sin \xi} + 1 \leq \frac{2 \sin \xi}{1 - \sin \xi} + 1 \\
&= \frac{2 \sin \xi}{1 - \sin \xi} + \frac{1 - \sin \xi}{1 - \sin \xi} = \frac{1 + \sin \xi}{1 - \sin \xi} \\
&\leq \frac{1 + \sin(\gamma + d)}{1 - \sin(\gamma + d)},
\end{aligned}$$

da $\sin \xi \leq \sin(\gamma + d)$. Außerdem gilt

$$\begin{aligned}
|1 - \sin(\xi + ix)|^2 &= \operatorname{Re}(1 - \sin(\xi + ix))^2 + \operatorname{Im}(1 - \sin(\xi + ix))^2 \\
&= (1 - \sin \xi \cosh x)^2 + \cos^2 \xi \sinh^2 x \\
&= 1 + \sin^2 \xi \cosh^2 x - 2 \sin \xi \cosh x + \cos^2 \xi \sinh^2 x \\
&= 1 + \sin^2 \xi \cosh^2 x - 2 \sin \xi \cosh x - \cos^2 \xi + \cos^2 \xi \cosh^2 x \\
&= 1 + \cosh^2 x - 2 \sin \xi \cosh x - \cos^2 \xi \\
&= \cosh^2 x - 2 \sin \xi \cosh x + \sin^2 \xi \\
&= (\cosh x - \sin \xi)^2.
\end{aligned}$$

Zusammen erhalten wir, da $\mu \geq 1$, dass

$$\frac{1}{|1 - \sin(\xi + ix)|^{\mu-1}} \left| \frac{\cos(\xi + ix)}{1 - \sin(\xi + ix)} \right| \leq \frac{1}{(\cosh x - \sin \xi)^{\mu-1}} \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{1 - \sin(\gamma + d)}}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{1}{(1 - \sin \xi)^{\mu-1}} \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{1 - \sin(\gamma + d)}} \\
&\leq \frac{1}{(1 - \sin(\gamma + d))^{\mu-1}} \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{1 - \sin(\gamma + d)}} \\
&= \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{(1 - \sin(\gamma + d))^{2\mu-1}}}.
\end{aligned}$$

Einsetzen in (2.11) liefert die Behauptung. \square

Wir werden später zeigen, dass sogar $G_t \in S(D_d, X)$ gilt. Dies motiviert nun den Quadraturfehler

$$E_K(g, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx - \tau \sum_{\ell=-K}^K g(\ell\tau)$$

für Funktionen $g \in S(D_d, X)$ mit

$$\|g(x)\|_X \leq C e^{-\eta \cosh x}, \quad C, \eta > 0 \quad (2.12)$$

zu untersuchen.

Wir beweisen nun technische Aussagen über den Abschätzungsterm $e^{-\eta \cosh x}$ in (2.12).

Lemma 2.2.4. *Sei $L(x) := 1 + |\log(1 - e^{-x})|$ für $x > 0$. Dann gilt:*

i)

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta \cosh x} dx \leq L(\eta), \quad \eta > 0$$

ii)

$$\int_r^{\infty} e^{-\eta \cosh x} dx \leq (1 + L(\eta)) e^{-\eta \cosh r}, \quad r, \eta > 0.$$

Beweis. i) Sei für $\eta > 0$

$$I(\eta) := \int_0^{\infty} e^{-\eta \cosh x} dx.$$

Wir substituieren $\sigma = \cosh x - 1$ und erhalten

$$I(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\eta(\sigma+1)}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma.$$

Sei $a := 2 \sinh^2\left(\frac{1}{2}\right) > \frac{1}{2}$. Dann ist

$$\begin{aligned} \int_0^a \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma &= \operatorname{arcosh}(\sigma+1) \Big|_{\sigma=0}^{\sigma=a} \\ &= \operatorname{arcosh}\left(2 \sinh^2\left(\frac{1}{2}\right) + 1\right) - \operatorname{arcosh}(1) \\ &= 2 \operatorname{arsinh}\left(\sinh\left(\frac{1}{2}\right)\right) = 1, \end{aligned}$$

da $\operatorname{arcosh}(2x^2+1) = 2 \sinh(x)$ für $x \geq 0$. Ferner gilt für $k \geq 0$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{k+a}} \frac{1}{\sqrt{2+k+a}} &= \frac{1}{\sqrt{k^2+2ka+a^2+2k+2a}} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{k^2+k+\frac{1}{4}+2k+1}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(k+1)^2+k+\frac{1}{4}}} \\ &\leq \frac{1}{k+1}. \end{aligned}$$

Damit folgt nun

$$\begin{aligned} I(\eta) &= e^{-\eta} \int_0^\infty \frac{e^{-\eta\sigma}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma \\ &= e^{-\eta} \left(\int_0^a \frac{e^{-\eta\sigma}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma + \sum_{k=0}^\infty \int_{a+k}^{a+k+1} \frac{e^{-\eta\sigma}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma \right) \\ &\leq e^{-\eta} \left(\int_0^a \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma + \sum_{k=0}^\infty \int_{a+k}^{a+k+1} \frac{e^{-\eta k}}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\sigma+2}} d\sigma \right) \\ &\leq e^{-\eta} \left(1 + \sum_{k=0}^\infty \frac{e^{-\eta k}}{\sqrt{k+a}\sqrt{k+a+2}} \right) \\ &\leq e^{-\eta} \left(1 + \sum_{k=0}^\infty \frac{e^{-\eta k}}{k+1} \right) = e^{-\eta} \left(1 + \sum_{k=0}^\infty (-1)^k \frac{(-e^{-\eta})^k}{k+1} \right) \\ &= e^{-\eta} - \sum_{k=0}^\infty (-1)^k \frac{(-e^{-\eta})^{k+1}}{k+1} = e^{-\eta} - \sum_{k=1}^\infty (-1)^{k+1} \frac{(-e^{-\eta})^k}{k} \\ &\leq e^{-\eta} + |\log(1 - e^{-\eta})| = e^{-\eta} + L(\eta) - 1 \\ &\leq L(\eta). \end{aligned}$$

ii) Sei $r, \eta > 0$. In der folgenden Rechnung substituieren wir $\sigma = \cosh x - \cosh r$. Es gilt

$$\begin{aligned} \int_r^\infty e^{-\eta \cosh x} dx &= e^{-\eta \cosh r} \int_0^\infty \frac{e^{-\eta \sigma}}{\sqrt{\sigma + \cosh r - 1} \sqrt{\sigma + \cosh r + 1}} d\sigma \\ &\leq e^{-\eta \cosh r} \int_0^\infty \frac{e^{-\eta \sigma}}{\sqrt{\sigma} \sqrt{\sigma + 2}} d\sigma \\ &= e^{-\eta \cosh r} e^\eta I(\eta) \\ &\stackrel{i)}{\leq} e^{-\eta \cosh r} e^\eta (e^{-\eta} + L(\eta) - 1). \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt nun aus

$$e^\eta (e^{-\eta} + L(\eta) - 1) \leq 1 + L(\eta).$$

Dies zeigen wir nun noch per Äquivalenzumformung, in der wir $y = \log(1 - e^{-\eta}) < 0$ substituieren:

$$\begin{aligned} 1 - y &\leq e^{-y} \Leftrightarrow 1 \leq e^{-y} + y \Leftrightarrow e^y \leq 1 + ye^y \\ &\Leftrightarrow -y \leq 1 - e^y - y + ye^y \Leftrightarrow -y \leq (1 - e^y) - (1 - e^y)y \\ &\Leftrightarrow |\log(1 - e^{-\eta})| \leq e^{-\eta} + e^{-\eta} |\log(1 - e^{-\eta})| \\ &\Leftrightarrow L(\eta) - 1 \leq e^{-\eta} L(\eta) \\ &\Leftrightarrow e^{-\eta} + L(\eta) - 1 \leq e^{-\eta} L(\eta) + e^{-\eta} \\ &\Leftrightarrow e^\eta (e^{-\eta} + L(\eta) - 1) \leq L(\eta) + 1. \end{aligned}$$

□

Die Strategie orientiert sich nun daran, zunächst den Diskretisierungsfehler

$$E_\infty(g, \tau) = \int_{-\infty}^\infty g(x) dx - \tau \sum_{\ell=-\infty}^\infty g(x_\ell) \quad (2.13)$$

der Trapezsumme abzuschätzen, um danach den Fehler, der durch das Abschneiden der unendlichen Summe entsteht, zu betrachten. Denn es gilt

$$E_K(g, \tau) = E_\infty(g, \tau) + \tau \sum_{|\ell| \geq K+1} g(x_\ell).$$

Hat man also bereits Kontrolle über den Fehler E_∞ , so ist nur noch eine Schranke für die Restsumme zu zeigen, um unser Ziel zu erreichen. Wir studieren also nun den in (2.13) angegebenen Diskretisierungsfehler. Die Fehlerabschätzungen für den Diskretisierungsfehler E_∞ , die wir benötigen, wurden in [Mar68] bewiesen und in [Pla13] detailliert ausgearbeitet. Wir folgen nun diesen Ergebnissen. Dazu zunächst folgendes elementare Lemma:

Lemma 2.2.5. *Es gilt:*

i)

$$|\cot z| \leq 1 \quad \text{für} \quad \operatorname{Re} z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, n \in \mathbb{Z}.$$

ii)

$$\left|1 + \frac{1}{i} \cot z\right| \leq \frac{2}{e^{2\operatorname{Im} z} - 1} \quad \text{für} \quad \operatorname{Im} z > 0.$$

iii)

$$\left|1 - \frac{1}{i} \cot z\right| \leq \frac{2}{e^{-2\operatorname{Im} z} - 1} \quad \text{für} \quad \operatorname{Im} z < 0.$$

Beweis. i) Es gilt die folgende Identität nach Lemma B.14 für $z \in \mathbb{C}$:

$$\cot z = \frac{\sin(2 \operatorname{Re} z) - i \sinh(2 \operatorname{Im} z)}{\cosh(2 \operatorname{Im} z) - \cos(2 \operatorname{Re} z)}.$$

Damit gilt für $\operatorname{Re} z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$, $n \in \mathbb{Z}$, dass

$$|\cot z| = \frac{|\sinh(2 \operatorname{Im} z)|}{\cosh(2 \operatorname{Im} z) + 1} \leq \frac{\cosh(2 \operatorname{Im} z)}{\cosh(2 \operatorname{Im} z) + 1} \leq 1.$$

ii) Es gilt

$$\cot z = \frac{\cos z}{\sin z} = i \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}.$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \left|1 + \frac{1}{i} \cot z\right| &= \left|\frac{e^{iz} - e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}} + \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}\right| \\ &= \left|\frac{2e^{iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}\right| = \left|\frac{2}{1 - e^{-2iz}}\right| \\ &\leq \frac{2}{|e^{-2iz}| - 1} = \frac{2}{e^{2\operatorname{Im} z} - 1} \end{aligned}$$

für $\operatorname{Im} z > 0$.

iii) Genau wie in ii) folgt

$$\begin{aligned} \left|1 - \frac{1}{i} \cot z\right| &= \left|\frac{e^{iz} - e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}} - \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}\right| \\ &= \left|\frac{2e^{-iz}}{e^{iz} - e^{-iz}}\right| = \left|\frac{2}{e^{2iz} - 1}\right| \\ &\leq \frac{2}{|e^{2iz}| - 1} = \frac{2}{e^{-2\operatorname{Im} z} - 1} \end{aligned}$$

für $\operatorname{Im} z < 0$.

□

Wir beweisen nun den folgenden Satz, der eine obere Schranke für den Diskretisierungsfehler E_∞ angibt:

Satz 2.2.6. *Sei $g \in S(D_d, X)$. Dann gilt für $\tau > 0$, dass*

$$E_\infty(g, \tau) \leq \frac{N(g, D_d)}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1}.$$

Beweis. Sei für $n \in \mathbb{N}$

$$\Omega_n := \left\{ z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im} z| < d, |\operatorname{Re} z| < \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau \right\}.$$

Weiter seien

$$\begin{aligned} \Gamma_n &:= \left[-\left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau \right], \\ \Delta_+^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Re} z| \leq \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, \operatorname{Im} z = d \right\}, \\ \Delta_-^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Re} z| \leq \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, \operatorname{Im} z = -d \right\}, \\ \gamma_1^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, 0 \leq \operatorname{Im} z \leq d \right\}, \\ \gamma_2^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, 0 \leq \operatorname{Im} z \leq d \right\}, \\ \gamma_3^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, -d \leq \operatorname{Im} z \leq 0 \right\}, \\ \gamma_4^n &:= \left\{ z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \tau, -d \leq \operatorname{Im} z \leq 0 \right\} \end{aligned}$$

orientierte Kurven - siehe dazu Abbildung 2.3 - , sodass mit dem Cauchyschen Intergralsatz A.2 und der Folgerung A.3 gilt, dass

$$\int_{\Gamma_n} g(z) dz = - \left(\int_{\gamma_1^n} g(z) dz + \int_{\Delta_+^n} g(z) dz + \int_{\gamma_2^n} g(z) dz \right)$$

und

$$\int_{\Gamma_n} g(z) dz = \int_{\gamma_3^n} g(z) dz + \int_{\Delta_-^n} g(z) dz + \int_{\gamma_4^n} g(z) dz.$$

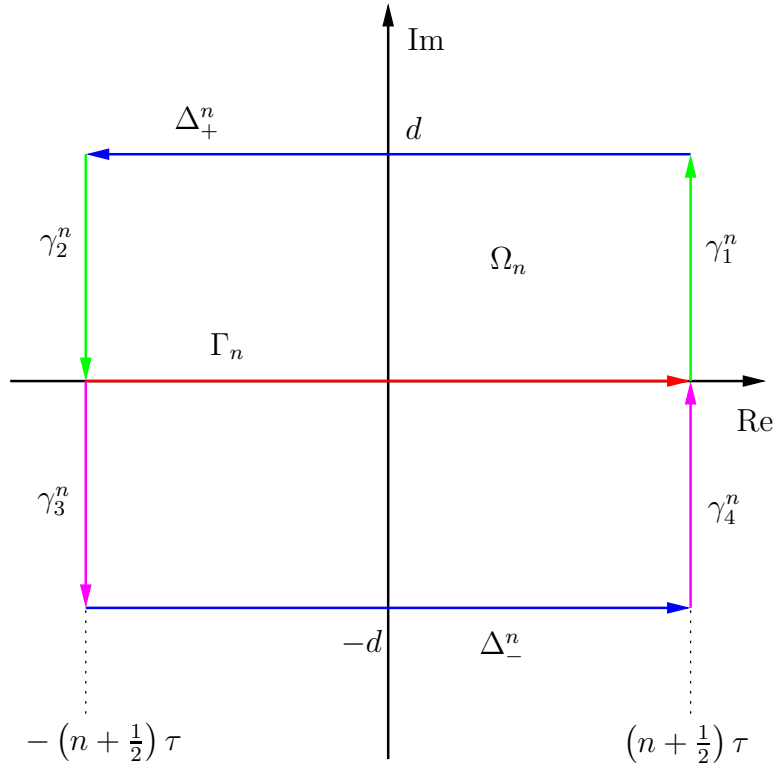


Abbildung 2.3: Konturen in Beweis von Satz 2.2.6.

Es gilt $\cot z = \frac{\cos z}{\sin z}$. Es folgt für $k \in \mathbb{Z}$ aus Lemma A.9, dass

$$\operatorname{res}_{k\tau} \left(g(\cdot) \cot \frac{\pi \cdot}{\tau} \right) = g(k\tau) \operatorname{res}_{k\tau} \left(\cot \frac{\pi \cdot}{\tau} \right)$$

und

$$\operatorname{res}_{k\tau} \left(\cot \frac{\pi \cdot}{\tau} \right) = \operatorname{res}_{k\tau} \left(\frac{\cos \frac{\pi \cdot}{\tau}}{\sin \frac{\pi \cdot}{\tau}} \right) = \frac{\cos(k\tau)}{\frac{\pi}{\tau} \cos(k\tau)} = \frac{\tau}{\pi}.$$

Damit erhalten wir aus dem Residuensatz A.8, dass

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Omega_n} g(z) \cot \frac{\pi z}{\tau} dz = \frac{\tau}{\pi} \sum_{k=-n}^n g(k\tau).$$

Damit gilt nun

$$\left\| \int_{\Gamma_n} g(z) dz - \tau \sum_{k=-n}^n g(k\tau) \right\|_X \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned}
&= \left\| \int_{\Gamma_n} g(z) dz - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_n} g(z) \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} dz \right\|_X \\
&= \left\| -\frac{1}{2} \left(\int_{\gamma_1^n} g(z) dz + \int_{\Delta_+^n} g(z) dz + \int_{\gamma_2^n} g(z) dz \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\int_{\gamma_3^n} g(z) dz + \int_{\Delta_-^n} g(z) dz + \int_{\gamma_4^n} g(z) dz \right) - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega_n} g(z) \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} dz \right\|_X \\
&\leq \left\| \frac{1}{2} \int_{\Delta_+^n} g(z) \left(1 + \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X + \left\| \frac{1}{2} \int_{\Delta_-^n} g(z) \left(1 - \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X \\
&\quad + \left\| \frac{1}{2} \int_{\gamma_1^n} g(z) \left(1 + \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X + \left\| \frac{1}{2} \int_{\gamma_2^n} g(z) \left(1 + \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X \\
&\quad + \left\| \frac{1}{2} \int_{\gamma_3^n} g(z) \left(1 - \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X + \left\| \frac{1}{2} \int_{\gamma_4^n} g(z) \left(1 - \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X.
\end{aligned}$$

Nun gilt mit Lemma 2.2.5 i) für $i = 1, \dots, 4$, dass

$$\begin{aligned}
\left\| \frac{1}{2} \int_{\gamma_i^n} g(z) \left(1 \pm \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right) dz \right\|_X &\leq \frac{1}{2} \int_{\gamma_i^n} \|g(z)\|_X \left| 1 \pm \frac{1}{i} \cot \frac{\pi z}{\tau} \right| dz \\
&\leq \frac{1}{2} \int_{\gamma_i^n} \|g(z)\|_X \left(1 + \left| \cot \frac{\pi z}{\tau} \right| \right) dz \\
&\leq \int_{\gamma_i^n} \|g(z)\|_X dz \longrightarrow 0,
\end{aligned}$$

für $n \longrightarrow \infty$, da $g \in S(D_d, X)$. Somit gilt im Grenzwert für $n \longrightarrow \infty$ in (2.14) mit Lemma 2.2.5 ii), iii), dass

$$\begin{aligned}
&\left\| \int_{-\infty}^{\infty} g(z) dz - h \sum_{k=-\infty}^{\infty} g(k\tau) \right\|_X \\
&\leq \left\| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} g(x + id) \left(1 + \frac{1}{i} \cot \left(\frac{\pi}{\tau} (x + id) \right) \right) dx \right\|_X \\
&\quad + \left\| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} g(x - id) \left(1 - \frac{1}{i} \cot \left(\frac{\pi}{\tau} (x - id) \right) \right) dx \right\|_X \\
&\leq \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \|g(x + id)\|_X \left| 1 + \frac{1}{i} \cot \left(\frac{\pi}{\tau} (x + id) \right) \right| dx \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \|g(x - id)\|_X \left| 1 - \frac{1}{i} \cot \left(\frac{\pi}{\tau} (x - id) \right) \right| dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} \int_{-\infty}^{\infty} (\|g(x + id)\|_X + \|g(x - id)\|_X) dx \\
&= \frac{N(g, D_d)}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1}.
\end{aligned}$$

□

Wir haben nun eine obere Schranke für den Diskretisierungsfehler E_∞ der Quadratur für Funktionen $g \in S(D_d, X)$ bewiesen. Wir wollen zusätzlich den Fehler, der durch das Abschneiden der unendlichen Summe verursacht wird, unter Ausnutzung des exponentiellen Abfalls des Integranden in (2.12), d.h. $g(x) = \mathcal{O}(e^{-\eta \cosh x})$ abschätzen. Eine Abschätzung des Quadraturfehlers für solche Funktionen gibt der folgende Satz an:

Satz 2.2.7. *Sei $d > 0$ und $g \in S(D_d, X)$ mit*

$$\|g(x)\|_X \leq C e^{-\eta \cosh x}$$

für alle $x \in \mathbb{R}$ und gewisse Konstanten $C, \eta > 0$. Dann gilt

$$\|E_K(g, \tau)\|_X \leq \frac{N(g, D_d)}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{2C(1 + L(\eta))}{e^{\eta \cosh(K\tau)}} \quad (2.15)$$

für alle $\tau > 0$.

Beweis. Es gilt mit Lemma 2.2.4 und Satz 2.2.6, dass

$$\begin{aligned}
\|E_K(g, \tau)\|_X &= \left\| \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx - \tau \sum_{\ell=-K}^K g(\ell\tau) \right\|_X \\
&= \left\| E_\infty(g, \tau) + \tau \sum_{|\ell| \geq K+1} g(\ell\tau) \right\|_X \\
&\leq \|E_\infty(g, \tau)\|_X + \tau \sum_{|\ell| \geq K+1} \|g(\ell\tau)\|_X \\
&= \|E_\infty(g, \tau)\|_X + \tau \sum_{\ell=K+1}^{\infty} \{\|g(\ell\tau)\|_X + \|g(-\ell\tau)\|_X\} \\
&\leq \|E_\infty(g, \tau)\|_X + 2C\tau \sum_{\ell=K+1}^{\infty} e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \\
&\leq \|E_\infty(g, \tau)\|_X + 2C \int_{K\tau}^{\infty} e^{-\eta \cosh x} dx \\
&\leq \frac{N(g, D_d)}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + 2C(1 + L(\eta)) e^{-\eta \cosh(K\tau)}.
\end{aligned}$$

□

Wir wollen diesen Satz auf die Funktion G_t aus (2.9) anwenden. Dabei wissen wir bereits, dass $G_t(x) = \mathcal{O}(e^{-\eta \cosh x})$ ist. Es bleibt also zu zeigen, dass sogar $G_t \in S(D_d, X)$ für ein geeignetes $d > 0$ ist, um unser Ziel einer geeigneten Abschätzung vom Typ (2.15) des Quadraturfehlers für die inverse Laplacetransformation zu erreichen.

Satz 2.2.8. *Seien $d, \gamma > 0$ wie in (2.5). Weiter sei für $t > 0$*

$$v(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_t(x) dx$$

und

$$v_K(t) = \tau \sum_{\ell=-K}^K G_t(\ell\tau)$$

für $K \in \mathbb{N}$, wobei G_t wie in (2.9) definiert ist. Dann gilt

$$\|v(t) - v_K(t)\|_X \leq CL(\lambda t \sin(\gamma - d)) e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \left\{ \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \right\},$$

wobei $C = C(d, \gamma, M, \mu)$ wie in (2.10) definiert ist.

Beweis. Wir zeigen zunächst, dass $G_t \in S(D_d, X)$:

Es gilt nach Lemma 2.2.1, dass $\mathcal{R}(T) \subset \mathbb{C} \setminus \Sigma_\delta$. Also ist $G_t : D_d \rightarrow X$ stetig und holomorph, da V auf $\mathbb{C} \setminus \Sigma_\delta$ stetig und holomorph ist.

Ferner gilt mit Lemma 2.2.3, dass

$$\int_{-d}^d \|G_t(x + iy)\|_X dy \leq \frac{C}{4} e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \int_{-d}^d e^{-\lambda t \sin(\gamma-y) \cosh x} dy \longrightarrow 0$$

für $|x| \longrightarrow \infty$.

Außerdem gilt wieder mit Lemma 2.2.3, Lemma 2.2.4 und $\sin(\gamma - d) < \sin(\gamma + d)$, dass

$$\begin{aligned} N(G_t, D_d) &= \int_{-\infty}^{\infty} (\|G_t(x + id)\|_X + \|G_t(x - id)\|_X) dx \\ &\leq \frac{C}{4} e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{-\lambda t \sin(\gamma+d) \cosh x} + e^{-\lambda t \sin(\gamma-d) \cosh x}) dx \\ &= \frac{C}{2} e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \int_0^{\infty} (e^{-\lambda t \sin(\gamma+d) \cosh x} + e^{-\lambda t \sin(\gamma-d) \cosh x}) dx \\ &\leq \frac{C}{2} e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \int_0^{\infty} (e^{-\lambda t \sin(\gamma-d) \cosh x} + e^{-\lambda t \sin(\gamma-d) \cosh x}) dx \\ &= C e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \int_0^{\infty} e^{-\lambda t \sin(\gamma-d) \cosh x} dx \\ &\leq C e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} L(\lambda t \sin(\gamma - d)) < \infty. \end{aligned}$$

Also gilt $G_t \in S(D_d, X)$.

Dann folgt aus Satz 2.2.7, dass

$$\begin{aligned}
\|v(t) - v_K(t)\|_X &= \|E_K(G_t, \tau)\|_X \\
&\leq \frac{N(G_t, D_d)}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{2\frac{C}{4}e^{\lambda t}\lambda^{1-\mu}(1 + L(\lambda t \sin \gamma))}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \\
&\leq \frac{Ce^{\lambda t}\lambda^{1-\mu}L(\lambda t \sin(\gamma - d))}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{Ce^{\lambda t}\lambda^{1-\mu}\frac{1}{2}(1 + L(\lambda t \sin \gamma))}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \\
&\leq CL(\lambda t \sin(\gamma - d))e^{\lambda t}\lambda^{1-\mu} \left\{ \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \right\},
\end{aligned}$$

denn, da L monoton fallend ist, gilt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} + \frac{1}{2}L(\lambda t \sin(\gamma)) &= 1 + \frac{1}{2}|\log(1 - e^{-\lambda t \sin \gamma})| \\
&\leq 1 + |\log(1 - e^{\lambda t \sin \gamma})| \\
&= L(\lambda t \sin \gamma) \\
&\leq L(\lambda t \sin(\gamma - d)).
\end{aligned}$$

□

Wir sehen also, dass sich der Fehler der Quadratur für die Approximation der inversen Laplacetransformation als Summe zweier Fehlerschranken zusammensetzt. Zum einen ist es der Fehler, der durch die Diskretisierung des uneigentlichen Integrals durch die Trapezsumme auftritt, zum anderen der Fehler, der durch das Abschneiden der unendlichen Trapezsumme verursacht wird. Die beiden Fehler gehen im Allgemeinen mit unterschiedlichen Ordnungen gegen 0 für τ gegen 0. Man hat jedoch noch Freiheitsgrade bei der Wahl der Parameter des Integrals und der Trapezsumme. Zum einen sind dies Parameter für die Wahl der Form der Kontur, genauer für die zu wählende Hyperbel und deren Parametrisierung T aus (2.8). Zum anderen ist dies die Schrittweite τ und ihre Abhängigkeit zum Abschneideindex K . Ziel ist es nun die Parameter des Systems so zu wählen, dass die beiden auftretenden Fehler gleich schnell, d.h. mit gleicher Ordnung, gegen 0 konvergieren für $\tau \rightarrow 0$. Eine geeignete Wahl der Parameter stellen wir in dem folgenden Satz vor.

Satz 2.2.9. *Sei V sektoriell mit Sektor Σ_δ für ein $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ mit $\mu \geq 1$ und seien $\gamma, d > 0$ wie in (2.5). Für $t_0 > 0$, $\Lambda \geq 1$, $0 < \theta < 1$ und $K \geq 1$ wähle*

$$\tau = \frac{a(\theta)}{K} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{2\pi d K (1 - \theta)}{t_0 \Lambda a(\theta)},$$

wobei

$$a(\theta) = \operatorname{arcosh} \left(\frac{\Lambda}{(1-\theta) \sin \gamma} \right).$$

Dann gilt gleichmäßig für alle $t_0 \leq t \leq \Lambda t_0$, dass

$$\|v(t) - v_K(t)\|_X \leq CL(\lambda t_0 \sin(\gamma - d)) \lambda^{1-\mu} \frac{2\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)},$$

wobei

$$\epsilon_K(\theta) = e^{-\frac{2\pi d}{a(\theta)} K}$$

und $C = C(d, \gamma, M, \mu)$ wie in (2.10) definiert ist.

Beweis. Wir setzen $\sigma = \lambda t_0$. Dann gilt mit Satz 2.2.8 gleichmäßig für alle $t_0 < t < \Lambda t_0$, dass

$$\begin{aligned} \|v(t) - v_K(t)\|_X &\leq CL(\lambda t \sin(\gamma - d)) e^{\lambda t} \lambda^{1-\mu} \left\{ \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \right\} \\ &\leq CL(\lambda t \sin(\gamma - d)) e^{\lambda \Lambda t_0} \lambda^{1-\mu} \left\{ \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\lambda t \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \right\} \\ &\leq CL(\sigma \sin(\gamma - d)) e^{\sigma \Lambda} \lambda^{1-\mu} \left\{ \frac{1}{e^{2\pi d \frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\sigma \sin \gamma \cosh(K\tau)}} \right\}. \end{aligned}$$

Die Wahl von τ und λ liefert:

$$e^{\frac{2\pi d}{\tau}} = e^{\frac{2\pi d K}{a(\theta)}} = \frac{1}{\epsilon_K(\theta)}$$

und

$$\begin{aligned} e^{\sigma \sin \gamma \cosh(K\tau)} &= e^{\lambda t_0 \sin \gamma \cosh(K\tau)} \\ &= \exp \left(\frac{2\pi d K (1-\theta)}{\Lambda t_0 a(\theta)} t_0 \sin \gamma \cosh(K\tau) \right) \\ &= \exp \left(\frac{2\pi d K (1-\theta)}{\Lambda t_0 a(\theta)} t_0 \sin \gamma \frac{\Lambda}{(1-\theta) \sin \gamma} \right) \\ &= \exp \left(\frac{2\pi d K}{a(\theta)} \right) = \frac{1}{\epsilon_K(\theta)}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}
\frac{1}{e^{2\pi d\frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{\sigma \sin \gamma \cosh(K\tau)}} &= \frac{1}{e^{2\pi d\frac{1}{\tau}} - 1} + \frac{1}{e^{2\pi d\frac{1}{\tau}}} \\
&= \frac{e^{-2\pi d\frac{1}{\tau}}}{1 - e^{-2\pi d\frac{1}{\tau}}} + e^{-2\pi d\frac{1}{\tau}} \\
&\leq \frac{2e^{-2\pi d\frac{1}{\tau}}}{1 - e^{-2\pi d\frac{1}{\tau}}} \\
&= \frac{2\epsilon_K(\theta)}{1 - \epsilon_K(\theta)}.
\end{aligned}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned}
e^{\Lambda\sigma} \epsilon_K(\theta) &= \exp\left(\frac{2\pi dK(1-\theta)}{a(\theta)}\right) \epsilon_K(\theta) \\
&= \exp\left(\frac{-2\pi dK(\theta-1)}{a(\theta)}\right) \epsilon_K(\theta) \\
&= \epsilon_K(\theta)^{\theta-1} \epsilon_K(\theta) = \epsilon_K(\theta)^\theta.
\end{aligned}$$

Einsetzen der Identitäten liefert die Behauptung

$$\|v(t) - v_K(t)\|_X \leq CL(\lambda t_0 \sin(\gamma - d)) \lambda^{1-\mu} \frac{2\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

gleichmäßig für alle $t_0 \leq t \leq \Lambda t_0$. \square

Wir haben nun für die Quadraturapproximation der inversen Laplace-Transformation v der sektoriellen Abbildung V eine theoretische Fehlerabschätzung bewiesen. Die numerischen Anwendungen, die wir in Kapitel 3 durchführen, zeigen jedoch, dass für große K diese Fehlerabschätzungen nicht mehr geeignet sind. Eine Erklärung hierfür ist, dass die Laplacetransformation V von v in

$$v_K(t) = -\frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V(T(\ell\tau)) T'(\ell\tau)$$

an den Quadraturpunkten $\ell\tau$ selbst numerisch berechnet wird und somit fehlerbehaftet ist. D.h. in der Anwendung berechnet man

$$\tilde{v}_K(t) = -\frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V_\ell T'(\ell\tau), \quad (2.16)$$

wobei $V_\ell \in X$ eine Approximation der Laplacetransformation $V(T(\ell\tau))$ ist. Wir werden annehmen, dass wir für den Fehler der Approximation V_ℓ eine globale Schranke kennen, d.h.

$$\|V(T(\ell\tau)) - V_\ell\|_X \leq \rho$$

für ein $\rho \geq 0$. Wir wollen nun die Ergebnisse aus Satz 2.2.9 unter diesen Annahmen verallgemeinern.

Satz 2.2.10. *Sei V sektoriell mit Sektor Σ_δ für ein $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$ und mit $\mu \geq 1$. Weiter seien $\gamma, d > 0$ wie in (2.5). Für $t_0 > 0$, $\Lambda \geq 1$, $0 < \theta < 1$ und $K \geq 1$ wähle die Parameter*

$$\tau = \frac{a(\theta)}{K} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{2\pi d K (1 - \theta)}{t_0 \Lambda a(\theta)},$$

wobei

$$a(\theta) = \operatorname{arcosh} \left(\frac{\Lambda}{(1 - \theta) \sin \gamma} \right).$$

Dann gilt für \tilde{v}_K aus (2.16) und $v = \mathcal{L}^{-1}[V]$ gleichmäßig für alle $t_0 \leq t \leq \Lambda t_0$ die Abschätzung

$$\|v(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X \leq M \cdot \Theta \cdot Q \left\{ \varepsilon \epsilon_K(\theta)^{\theta-1} + \lambda^{1-\mu} \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \right\},$$

wobei

$$\Theta = \max \left\{ \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{1 + \sin(\gamma + d)}{(1 - \sin(\gamma + d))^{2\mu-1}}}, \frac{1}{2\pi \sin \gamma} \right\},$$

$$Q = \max\{2L(\lambda t_0 \sin(\gamma - d)), 2 + (2 + \lambda t_0)\tau\},$$

$$\varepsilon = \frac{\rho}{M t_0}$$

und

$$\epsilon_K(\theta) = e^{-\frac{2\pi d}{a(\theta)} K}.$$

Beweis. Es gilt

$$\|v(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X \leq \|v(t) - v_K(t)\|_X + \|v_K(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X,$$

wobei

$$v_K(t) = -\frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V(T(\ell\tau)) T'(\ell\tau).$$

Aus Satz 2.2.9 folgt mit der Wahl von Θ und Q , dass

$$\|v(t) - v_K(t)\|_X \leq M \cdot \Theta \cdot Q \frac{\lambda^{1-\mu} \epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}.$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} \|v_K(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X &= \left\| \frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{t\Gamma(\ell\tau)} (V(\Gamma(\ell\tau)) - V_\ell) T'(\ell\tau) \right\|_X \\ &\leq \left\| \frac{\tau}{2\pi i} \rho \sum_{\ell=-K}^K e^{t\Gamma(\ell\tau)} T'(\ell\tau) \right\|_X \\ &= \left\| \frac{\tau}{2\pi i} \rho \sum_{\ell=-K}^K e^{\lambda t} e^{-\lambda \sin(\gamma + i\ell\tau)t} (-\lambda i \cos(\gamma + i\ell\tau)) \right\|_X \\ &= \left\| \frac{\lambda\tau}{2\pi} \rho e^{\lambda\tau} \sum_{\ell=-K}^K e^{-\lambda(\sin \gamma \cosh(\ell\tau) + i \cos \gamma \sinh(\ell\tau))t} \right. \\ &\quad \left. \cdot (\cos \gamma \cosh(\ell\tau) - i \sin \gamma \sinh(\ell\tau)) \right\|_X \\ &\leq \left\| \frac{\lambda\tau}{2\pi} \rho e^{\lambda\tau} \sum_{\ell=-K}^K e^{-\lambda t \sin \gamma \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) \right\|_X \\ &\leq \frac{\lambda e^{\lambda t_0} \tau \rho}{2\pi} \sum_{\ell=-K}^K e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau), \end{aligned}$$

wobei $\eta = \lambda t_0 \sin \gamma$ ist. Die Funktion χ definiert durch $\chi(s) := s e^{-\eta s}$ für $s \geq 0$ nimmt ihr Maximum $\frac{1}{\eta e}$ bei $s_0 = \frac{1}{\eta}$ an und ist monoton wachsend auf $[0, s_0]$, sowie monoton fallend auf $[s_0, \infty)$. Sei $\xi = \frac{1}{\tau} \operatorname{arcosh} \frac{1}{\eta}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \tau \sum_{\ell=-K}^K e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) &\leq \tau + 2\tau \sum_{\ell=1}^K e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) \\ &= \tau + 2\tau \sum_{\ell=1}^{[\xi]-1} e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) + 2\tau \sum_{\ell=[\xi]}^{[\xi]+1} e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) \\ &\quad + 2\tau \sum_{\ell=[\xi]+2}^K e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) \\ &\leq \tau + 2\tau \sum_{\ell=1}^{[\xi]-1} e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) + \frac{4\tau}{\eta e} + 2\tau \sum_{\ell=[\xi]+2}^K e^{-\eta \cosh(\ell\tau)} \cosh(\ell\tau) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \tau + 2 \int_0^{\lfloor \xi \rfloor \tau} e^{-\eta \cosh x} \cosh x dx + \frac{4\tau}{\eta e} + 2 \int_{\lfloor \xi \rfloor \tau}^{\infty} e^{-\eta \cosh x} \cosh x dx \\
&= \tau + \frac{4\tau}{\eta e} + 2 \int_0^{\infty} e^{-\eta \cosh x} \cosh x dx \\
&\leq \tau + \frac{4\tau}{\eta e} + \frac{2}{\eta} \\
&\leq \frac{2 + (\eta + 2)\tau}{\eta},
\end{aligned}$$

wobei im vorletzten Schritt die Abschätzung der modifizierten Besselfunktion zweiter Ordnung aus Lemma B.9 benutzt wurde. Mit $\varepsilon = \frac{\rho}{t_0 M}$ erhalten wir nun

$$\begin{aligned}
\|v_K(t) - \tilde{v}_K(t)\|_X &\leq \frac{\lambda e^{\lambda \Lambda t_0} \rho (2 + (\eta + 2)\tau)}{2\pi \eta} \\
&= \frac{\lambda e^{\lambda \Lambda t_0} \varepsilon M t_0 (2 + (\lambda t_0 \sin \gamma + 2)\tau)}{2\pi \lambda t_0 \sin \gamma} \\
&= \frac{e^{\lambda \Lambda t_0} \varepsilon M (2 + (\lambda t_0 \sin \gamma + 2)\tau)}{2\pi \sin \gamma} \\
&\leq \frac{M}{2\pi \sin \gamma} (2 + (\lambda t_0 + 2)\tau) \varepsilon e^{\lambda \Lambda t_0}.
\end{aligned}$$

Mit $e^{\lambda \Lambda t_0} = \varepsilon_K(\theta)^{\theta-1}$ folgt die Behauptung. □

Wir werden nun diesen Satz auf die linearen beschränkten Operatoren $\varphi_j(hA)$ und $\psi_j(k, hA)$ aus den Abschnitten 1.2 und 1.4 anwenden.

Sei $h > 0$ und A ein sektorieller Operator auf X . Dann ist hA ein sektorieller Operator auf X mit Sektor $\Sigma_{\omega, \delta}$ für ein $\omega \in \mathbb{R}$ und $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Wir betrachten zunächst die Operatoren $\varphi_j(hA)$ für die Einschrittverfahren gegeben durch

$$\varphi_j(hA) = \mathcal{L}^{-1}[\Phi_j(\cdot, hA)](1)$$

und zugehöriger Quadraturapproximation

$$\bar{\varphi}_j(hA) = \sum_{j=-K}^K \omega_\ell e^{z_\ell} \Phi_j(z_\ell, hA)$$

mit $z_\ell = T(\ell\tau)$, $\omega_\ell = -\frac{\tau}{2\pi i} T'(z_\ell)$ für $-K \leq \ell \leq K$ und gegebenen $K \geq 1$, sowie τ und T so gewählt, dass die Voraussetzungen von Satz 2.2.10 erfüllt sind. Dabei nehmen wir an, dass wir die Operatoren $\Phi_j(z_\ell, hA)$ mit Genauigkeit ρ berechnen können. Man kann zeigen, dass die Operatoren $\Phi_j(\cdot, hA)$

sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\max(0,\omega),\delta}$ und $\mu = j + 1 \geq 1$ sind. Dann folgt aus Satz 2.2.10 mit $t_0 = 1$, $\Lambda = 1$ und $0 < \theta < 1$ und dem Verschiebungslemma B.5, dass

$$\|\varphi_j(hA) - \bar{\varphi}_j(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq e^{\max(\omega,0)} M \cdot \Theta \cdot Q \left\{ \varepsilon \epsilon_K(\theta)^{\theta-1} + \lambda^{-j} \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \right\},$$

wobei $\Theta, Q, \lambda, \varepsilon$ und $\epsilon_K(\theta)$ wie in Satz 2.2.10 sind. Nehmen wir an, dass wir die Operatoren $\Phi_j(\cdot, hA)$ ohne Fehler berechnen können, so folgt aus Satz 2.2.9, dass

$$\|\varphi_j(hA) - \bar{\varphi}_j(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq e^{\max(\omega,0)} CL(\lambda \sin(\gamma - d)) \lambda^{-j} \frac{2\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)},$$

wobei $C > 0$ wie in Satz 2.2.9 ist. Betrachten wir die Operatoren $\psi_j(k, hA)$ für die k -Schrittverfahren mit

$$\psi_j(k, hA) = \mathcal{L}^{-1}[\Psi_j(\cdot, hA)](k)$$

mit Quadraturapproximation

$$\bar{\psi}_j(k, hA) = \sum_{\ell=-K}^K \omega_\ell e^{kz_\ell} \Psi_j(z_\ell, hA).$$

Man kann zeigen, dass die Operatoren $\Psi_j(\cdot, hA)$ sektoriell mit Sektor $\Sigma_{\max(0,\omega),\delta}$ und $\mu = 3$ im Fall $j \geq 1$ und mit $\mu = 1$ im Fall $j = 0$ sind. Vergleiche dazu die Darstellungen der $\Psi_j(\cdot, hA)$ in (1.29) - (1.33). Dann folgt aus Satz 2.2.10 im Fall, dass die Operatoren $\Psi_j(\cdot, hA)$ auf Genauigkeit ρ berechnet werden können und der Setzung $t_0 = k$, dass

$$\|\psi_j(k, hA) - \bar{\psi}_j(k, hA)\|_{X \rightarrow X} \leq e^{\max(\omega,0)} M \cdot \Theta \cdot Q \left\{ \varepsilon \epsilon_K(\theta)^{\theta-1} + \lambda^{\mu-1} \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \right\}.$$

Unter der Annahme, dass die Operatoren $\Psi_j(\cdot, hA)$ genau berechnet werden können, folgt aus Satz 2.2.9 sogar, dass

$$\|\psi_j(hA) - \bar{\psi}_j(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq e^{\max(\omega,0)} CL(\lambda k \sin(\gamma - d)) \lambda^{1-\mu} \frac{2\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

Zusätzlich gelten die folgenden schwächeren aber hilfreichen Abschätzungen, da die Operatoren $\Phi_j(hA)$ und $\Psi_j(k, hA)$ sektoriell mit $\mu = 1$ für alle $j \in \mathbb{N}_0$ sind:

$$\|\varphi_j(hA) - \bar{\varphi}_j(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

und

$$\|\psi_j(hA) - \bar{\psi}_j(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

für ein $C > 0$. Daraus folgt insbesondere, dass die Operatoren $\bar{\varphi}_j(hA)$ und $\bar{\psi}_j(k, hA)$ beschränkte Operatoren auf X sind, da die Operatoren $\varphi_j(hA)$ und $\psi_j(k, hA)$ beschränkte Operatoren auf X sind. Klar ist dann, dass die Operatoren $\bar{\varphi}_j(hA)$ und $\bar{\psi}_j(k, hA)$ lineare beschränkte Operatoren auf X sind.

2.3 Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadratur

In diesem Abschnitt werden wir eine Konvergenztheorie für das Euler-Nørsett-Verfahren erarbeiten unter der Berücksichtigung, dass die Operatoren $\varphi_0(hA)$ und $\varphi_1(hA)$ über die Quadratur für die inverse Laplacetransformation approximiert werden.

Sei $h > 0$ und A ein sektorieller Operator auf X . Die Approximationen der Operatoren $\varphi_0(hA)$, $\varphi_1(hA)$ sind für $K \geq 1$ definiert durch

$$\bar{\varphi}_0(hA) = \sum_{\ell=-K}^K \omega_\ell (z_\ell I - hA)^{-1},$$

sowie

$$\bar{\varphi}_1(hA) = \sum_{\ell=-K}^K \omega_\ell \frac{1}{z_\ell} (z_\ell I - hA)^{-1},$$

wobei $\omega_\ell = -\frac{\tau}{2\pi i} e^{T(\ell\tau)} T'(\ell\tau)$ und $z_\ell = T(\ell\tau)$ für $-K \leq \ell \leq K$, d.h. τ ist die Schrittweite auf der Kontur, welche durch T parametrisiert wird. Dabei seien die Schrittweite τ in Abhängigkeit von K und die Parameter der Parametrisierung T so gewählt, dass die Voraussetzungen von Satz 2.2.9 erfüllt sind. Dann gilt nach Satz 2.2.9 für alle $0 < \theta < 1$, dass

$$\|\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

und

$$\|\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)}$$

für ein $C = C(\gamma, d, M, \lambda, t_0) > 0$, wobei wieder

$$\epsilon_K(\theta) = e^{-\frac{2\pi dK}{a(\theta)}}.$$

Dann ist das Euler-Nørsett-Verfahren mit Quadratur definiert durch die Iterationsvorschrift

$$u_{n+1} = \bar{\varphi}_0(hA)u_n + \bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u_n) \quad (2.17)$$

für $n = 0, \dots, N - 1$. Die Strategie des Konvergenzbeweises orientiert sich an den Ergebnissen aus Abschnitt 2.1. Wir benötigen eine Stabilitätsaussage für die Quadraturapproximationen $\bar{\varphi}_0(hA)$ und $\bar{\varphi}_1(hA)$. Diese werden wir annehmen:

Annahme 3. Für $j \in \mathbb{N}$ und einen sektoriellen Operator A auf X gilt, dass es ein $C > 0$ gibt mit

$$\|(jh)^\gamma \tilde{A}^\gamma \bar{\varphi}_0(hA)^j\|_{X \rightarrow X} \leq C$$

für alle $0 \leq \gamma < 1$ gleichmäßig für $0 < h \leq T$.

Wir definieren den lokalen Fehler des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadratur durch

$$\bar{\delta}_h(t_{n+1}) := u(t_{n+1}) - (\bar{\varphi}_0(hA)u(t_n) + h\bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u(t_n))).$$

Wir beweisen nun eine Darstellung dieses Fehlers über den uns bereits bekannten lokalen Fehler $\delta_h(t_{n+1})$.

Lemma 2.3.1. Unter den Annahmen 1 und 2 gilt für den lokalen Fehler des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadratur $\bar{\delta}_h$ zu gegebener Schrittweite $h > 0$, dass

$$\bar{\delta}_h(t_{n+1}) = (\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA))u(t_n) + h(\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA))f(t_n, u(t_n)) + \delta_h(t_{n+1}),$$

wobei

$$\delta_h(t_{n+1}) = \int_0^h e^{(h-\tau)A} \int_0^\tau g'(t_n + \sigma) d\sigma d\tau.$$

Beweis. Wir wissen nach dem Beweis von Lemma 2.1.1, dass

$$u(t_{n+1}) = \varphi_0(hA)u(t_n) + h\varphi_1(hA)f(t_n, u(t_n)) + \delta_h(t_{n+1}).$$

Dann folgt die Behauptung aus

$$\begin{aligned} & \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &= \varphi_0(hA)u(t_n) + h\varphi_1(hA)f(t_n, u(t_n)) + \delta_h(t_{n+1}) \\ & \quad - \bar{\varphi}_0(hA)u(t_n) - h\bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u(t_n)) \\ &= (\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA))u(t_n) + h(\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA))f(t_n, u(t_n)) + \delta_h(t_{n+1}). \end{aligned}$$

□

Wir schätzen nun wie in der Beweisstrategie für das Euler-Nørsett-Verfahren ohne Quadratur diesen lokalen Fehler ab.

Lemma 2.3.2. *Seien die Annahmen 1, 2 und 3 erfüllt und $0 < \nu \leq 1$, sodass $\tilde{A}^{\nu-1}g', \tilde{A}^{\nu-1}g, \tilde{A}^{\nu-1}u, u \in L^\infty([0, T], X_\alpha)$. Ferner seien $\gamma, d > 0$ wie in (2.5) und $\Lambda \geq 1, 0 < \theta < 1$. Zu $0 < h \leq 1$ wähle $K = K(h) \geq 1$ in Abhängigkeit von h derart, dass*

$$\frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \leq h^2,$$

wobei $\epsilon_K(\theta)$ wie in Satz 2.2.9 ist. Dann gibt es ein $C > 0$, sodass

$$h^{1-\nu} \|\bar{\delta}_h(t_{n+1})\|_{X_\alpha} + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \right\|_{X_\alpha} \leq Ch^2 \Upsilon_1$$

und

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} (\bar{\varphi}_0(hA))^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \leq Ch \Upsilon_2$$

gleichmäßig für alle $0 \leq t_n \leq T$, wobei

$$\begin{aligned} \Upsilon_1 := & \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|g(t)\|_{X_\alpha} \\ & + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} u(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t)\|_{X_\alpha} \\ & + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \Upsilon_2 := & \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{0 \leq t \leq t_n} \|g(t)\|_{X_\alpha} \\ & + \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} u(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{0 \leq t \leq t_n} \|u(t)\|_{X_\alpha}. \end{aligned}$$

Beweis. Es gilt

$$\begin{aligned} & h^{1-\nu} \|\bar{\delta}_h(t_{n+1})\|_{X_\alpha} + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \right\|_{X_\alpha} \\ & \leq \underbrace{h^{1-\nu} \|(\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA))u(t_n)\|_{X_\alpha} + \|(\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA))\tilde{A}^{\nu-1}u(t_n)\|_{X_\alpha}}_{=:R_1} \\ & + \underbrace{h^{1-\nu} \|h(\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA))g(t_n)\|_{X_\alpha} + \|h(\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA))\tilde{A}^{\nu-1}g(t_n)\|_{X_\alpha}}_{=:R_2} \\ & + \underbrace{h^{1-\nu} \|\delta_h(t_{n+1})\|_{X_\alpha} + \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \delta_h(t_{n+1}) \right\|_{X_\alpha}}_{=:R_3}. \end{aligned}$$

Nach Satz 2.1.2 gilt

$$R_3 \leq Ch^2 \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha}.$$

Wegen Annahme 1 und der Wahl der Parameter erhalten wir aus Satz 2.2.9

$$\|\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \leq Ch^2 \leq Ch^{1+\nu}$$

und

$$\|\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \leq Ch \leq Ch^\nu.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} R_1 &\leq \|\varphi_0(hA) - \bar{\varphi}_0(hA)\|_{X \rightarrow X} (h^{1-\nu} \|u(t_n)\|_{X_\alpha} + \|\tilde{A}^{\nu-1} u(t_n)\|_{X_\alpha}) \\ &\leq \tilde{C} h^2 \|u(t_n)\|_{X_\alpha} + \tilde{C} h^2 \|\tilde{A}^{\nu-1} u(t_n)\|_{X_\alpha} \\ &\leq \tilde{C} h^2 \left(\sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t)\|_{X_\alpha} + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|\tilde{A}^{\nu-1} u(t)\|_{X_\alpha} \right) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} R_2 &\leq h \|\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA)\|_{X \rightarrow X} (h^{1-\nu} \|g(t_n)\|_{X_\alpha} + \|\tilde{A}^{\nu-1} g(t_n)\|_{X_\alpha}) \\ &\leq \tilde{C} h^2 \|g(t_n)\|_{X_\alpha} + \tilde{C} h^2 \|\tilde{A}^{\nu-1} g(t_n)\|_{X_\alpha} \\ &\leq \tilde{C} h^2 \left(\sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|g(t)\|_{X_\alpha} + \sup_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|\tilde{A}^{\nu-1} g(t)\|_{X_\alpha} \right). \end{aligned}$$

Damit ist die erste Behauptung gezeigt. Die zweite Behauptung folgt nun mit Annahme 3 aus

$$\begin{aligned} &\left\| \sum_{j=0}^{n-1} (\bar{\varphi}_0(hA))^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \leq \|\bar{\delta}_h(t_n)\|_{X_\alpha} + \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} \bar{\varphi}_0(hA)^j \tilde{A}^{\nu-1} \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\ &\leq h^{\nu-1} h^{1-\nu} \|\bar{\delta}_h(t_n)\|_{X_\alpha} + \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^{1-\nu} \bar{\varphi}_0(hA)^j \right\|_{X \rightarrow X} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \\ &\leq h^{\nu-1} h^{1-\nu} \|\bar{\delta}_h(t_n)\|_{X_\alpha} + \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq Ch\Upsilon_1 \left(h^\nu + h \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \right) \\
&\leq 2Ch\Upsilon_2 h \sum_{j=1}^{n-1} (jh)^{\nu-1} \\
&\leq Ch\Upsilon_2 \int_0^T t^{\nu-1} dt \\
&\leq \tilde{C}h\Upsilon_2.
\end{aligned}$$

□

Mit Hilfe dieser Abschätzungen können wir nun den Konvergenzbeweis aus Abschnitt 2.1 auf diesen Fall verallgemeinern.

Satz 2.3.3. *Gegeben sei das Anfangswertproblem (1.1), welches die Annahmen 1 und 2 erfüllt. Weiter sei $g : [0, T] \rightarrow X$ einmal Fréchet differenzierbar und die Voraussetzungen von Lemma 2.3.2 seien erfüllt. Dann gilt für die Lösung $u_n, 0 \leq nh \leq T$ des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Quadratur von (1.1), dass*

$$\|u_n - u(t_n)\|_{X_\alpha} \leq Ch\Upsilon_2$$

gleichmäßig für $0 \leq nh \leq T$, wobei

$$\begin{aligned}
\Upsilon_2 := &\sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} g'(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{0 \leq t \leq t_n} \|g(t)\|_{X_\alpha} \\
&+ \sup_{0 \leq t \leq t_n} \left\| \tilde{A}^{\nu-1} u(t) \right\|_{X_\alpha} + \sup_{0 \leq t \leq t_n} \|u(t)\|_{X_\alpha}.
\end{aligned}$$

Beweis. Für den Fehler $e_h(t_n) := u_n - u(t_n)$ gilt

$$\begin{aligned}
e_h(t_{n+1}) &= u_{n+1} - u(t_{n+1}) = \bar{\varphi}_0(hA)u_n + h\bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u_n) - u(t_{n+1}) \\
&= \bar{\varphi}_0(hA)u_n + h\bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u_n) \\
&\quad - \bar{\varphi}_0(hA)u(t_n) - h\bar{\varphi}_1(hA)f(t_n, u(t_n)) - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\
&= \bar{\varphi}_0(hA)e_h(t_n) + h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \bar{\delta}_h(t_{n+1}).
\end{aligned}$$

Wir zeigen zunächst per Induktion die folgende Identität für $n \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
e_h(t_n) &= h \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\
&\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}).
\end{aligned}$$

Induktionsanfang ($n = 1$):

Es gilt $e_h(t_0) = u_0 - u(t_0) = 0$. Damit folgt

$$\begin{aligned} e_h(t_1) &= h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_0, u_0) - f(t_0, u(t_0))] - \bar{\delta}_h(t_1) \\ &= h \sum_{j=0}^0 \bar{\varphi}_0(hA)^{1-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_0, u_0) - f(t_0, u(t_0))] - \sum_{j=0}^0 \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{1-j}). \end{aligned}$$

Induktionsschritt ($n \mapsto n + 1$):

$$\begin{aligned} e_h(t_{n+1}) &= \bar{\varphi}_0(hA)e_h(t_n) + h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &\stackrel{\text{I.V.}}{=} \bar{\varphi}_0(hA) \left[h \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right] \\ &\quad + h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &= \bar{\varphi}_0(hA)h \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\ &\quad + h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] \\ &\quad - \bar{\varphi}_0(hA) \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}) - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &= h \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^{n+1-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\ &\quad + h\bar{\varphi}_1(hA)[f(t_n, u_n) - f(t_n, u(t_n))] \\ &\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^{j+1} \bar{\delta}_h(t_{n-j}) - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &= h \sum_{j=0}^n \bar{\varphi}_0(hA)^{n+1-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \\ &\quad - \sum_{j=1}^n \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n+1-j}) - \bar{\delta}_h(t_{n+1}) \\ &= h \sum_{j=0}^n \bar{\varphi}_0(hA)^{n+1-j-1} \bar{\varphi}_1(hA)[f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \end{aligned}$$

$$- \sum_{j=0}^n \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n+1-j}).$$

Dies schließt die Induktion ab und somit ist die Identität gezeigt.
Aus Satz 2.2.9 folgt

$$\|\varphi_1(hA) - \bar{\varphi}_1(hA)\|_{X \rightarrow X} \leq C$$

und somit ist $\bar{\varphi}_1(hA)$ ein beschränkter Operator auf X , da $\varphi_1(hA)$ beschränkt ist. Mit der Definition vom $\|\cdot\|_{X_\alpha} = \|\tilde{A}^\alpha \cdot\|_X$, Annahme 2, Annahme 3, Lemma 2.3.2 und der Lipschitzeigenschaft von f aus Annahme 2 folgt nun für $n \in \mathbb{N}_0$ und $\nu \geq 0$ mit

$$S_1 := \left\| \sum_{j=0}^{n-1} \bar{\varphi}_0(hA)^j \bar{\delta}_h(t_{n-j}) \right\|_{X_\alpha},$$

dass

$$\begin{aligned} \|e_h(t_n)\|_{X_\alpha} &\leq h \sum_{j=0}^{n-1} \left\| \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \bar{\varphi}_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \right\|_{X_\alpha} + S_1 \\ &= h \sum_{j=0}^{n-1} \left\| \tilde{A}^\alpha \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \bar{\varphi}_1(hA) [f(t_j, u_j) - f(t_j, u(t_j))] \right\|_X + S_1 \\ &\leq h \sum_{j=1}^{n-1} \left\| \tilde{A}^\alpha \bar{\varphi}_0(hA)^{n-j-1} \right\|_{X \rightarrow X} \|\bar{\varphi}_1(hA)\|_{X \rightarrow X} L \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + S_1 \\ &\leq Ch \sum_{j=1}^{n-1} h^{-\alpha} (n-j-1)^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + S_1 \\ &\stackrel{(2.4)}{\leq} \frac{C}{2^{-\alpha}} h \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + S_1 \\ &\stackrel{\text{Lemma 2.3.2}}{\leq} \tilde{C} \left[h \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + h\Upsilon_2 \right] \\ &= \tilde{C} \left[h \sum_{j=1}^{n-1} t_{n-j}^{-\alpha} \|e_h(t_j)\|_{X_\alpha} + h\Upsilon_2 \right]. \end{aligned}$$

Wendet man nun das Gronwall-Lemma 2.1.3 mit $\varepsilon_n = \|e_h(t_n)\|_{X_\alpha}$, $a = \tilde{C}$, $\rho = \alpha$ und $b = \Upsilon_2$, so folgt

$$\|e_h(t_n)\|_{X_\alpha} \leq Ch\Upsilon_2.$$

□

Kapitel 3

Numerische Anwendungen

Im letzten Kapitel dieser Arbeit werden wir numerische Experimente zu den Ergebnissen aus Kapitel 1 und 2 durchführen. Wir werden das Konvergenzverhalten der exponentiellen Integratoren an einem Beispiel einer Reaktions-Diffusions-Gleichung numerisch verifizieren. Dies werden wir sowohl für die Ein- als auch Mehrschrittverfahren durchführen. Wir werden die Konturdarstellungen über die inverse Laplacetransformation aus Kapitel 1 nutzen, um die Operatoren $\varphi_j(hA)$ mit Hilfe von Quadraturen numerisch zu berechnen. Dafür werden wir zu Beginn dieses Kapitels auf die Numerik für die inverse Laplacetransformation eingehen. Wir betrachten dabei eine skalare Funktion, für die wir die Laplacetransformation explizit berechnen können. Diese Laplacetransformation werden wir dann mit Hilfe der Quadraturen zurück transformieren und den Fehler genauer diskutieren. Zudem gehen wir dann auf geeignete Parameterwahlen für die Quadratur der inversen Laplacetransformation ein. In den letzten zwei Abschnitten interessieren wir uns für Wellenlösungen in parabolischen äquivarianten Evolutionsgleichungen. Wir berechnen mit Hilfe des Euler-Nørsett-Verfahren eine wandernde Wellenlösung der Nagumo-Gleichung. Wir werden sehen, dass die Lösung nach kurzer Zeit aus dem endlichen Definitionsgebiet der Gleichung herausläuft. Dies veranlasst uns die Einfrieremethode für wandernde Wellen einzuführen. Dabei transformiert sich das System auf eine partielle Differentialgleichung mit einer algebraischen Nebenbedingung. Den mathematischen Hintergrund dazu werden wir genauer erläutern und eine Verallgemeinerung des Euler-Nørsett-Verfahrens angeben, um dieses System numerisch zu lösen.

3.1 Quadratur der inversen Laplacetransformation

In diesem Abschnitt werden wir anhand eines Beispiels die Effekte bei der numerischen Inversion der Laplacetransformation mittels Quadratur erläutern und die Fehlerabschätzungen des Quadraturfehlers aus Satz 2.2.10 numerisch nachvollziehen. Insbesondere diskutieren wir geeignete Wahlen des Parameters $0 < \theta < 1$ aus Satz 2.2.10 in Abhängigkeit zum Abschneideindex K bzw. zur Schrittweite τ auf der Kontur. Wir folgen hier dem Vorgehen in [LFPS06].

Wir betrachten die Abbildung

$$\begin{aligned} v &: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} \\ t &\mapsto v(t) := e^{-t}. \end{aligned}$$

Weiter sei $V := \mathcal{L}[v]$. Dann gilt

$$V(z) = \int_0^\infty e^{-zt} v(t) dt = \int_0^\infty e^{-(z+1)t} dt = \frac{1}{1+z}$$

für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} z > -1$. Sei $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. So ist V sektoriell mit Sektor Σ_δ , genauer gilt

$$|V(z)| \leq \frac{M}{|z|} \quad \text{für alle } z \notin \Sigma_\delta,$$

wobei $M = (\sin \delta)^{-1}$. Wir wählen $\delta = 0,2$, $d = 0,6$ und $\gamma = 0,7$. Weiter setzen wir $t_0 = 1$, $\Lambda = 5$ und $\theta = 0,5$, sodass sie den Voraussetzungen von Satz 2.2.10 genügen. Wir nehmen an, dass wir U auf Maschinengenauigkeit berechnen können, d.h. $\rho = 10^{-16} \approx \text{eps}$, wobei eps die Maschinengenauigkeit ist. Weiter wählen wir für $K \geq 1$

$$\tau = \frac{a(\theta)}{K} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{2\pi d K (1 - \theta)}{t_0 \Lambda a(\theta)}$$

mit

$$a(\theta) = \operatorname{arcosh} \left(\frac{\Lambda}{(1 - \theta) \sin \gamma} \right).$$

Dann sind die Voraussetzungen von Satz 2.2.10 erfüllt. Wir berechnen nun für $K = 1, \dots, 150$ die numerische Approximation der inversen Laplacetransformation

$$\tilde{v}_K(t) = -\frac{\tau}{2\pi i} \sum_{\ell=-K}^K e^{tT(\ell\tau)} V_\ell T'(\ell\tau),$$

wobei

$$|V(\ell\tau) - V_\ell| \leq \rho$$

für alle $-K \leq \ell \leq K$ gilt. In Abbildung 3.1 ist der Fehler

$$e(K) := \max_{t \in [t_0, \Delta t_0]} |v(t) - \tilde{v}_K(t)| \quad (3.1)$$

auf logarithmischer Skala aufgetragen.

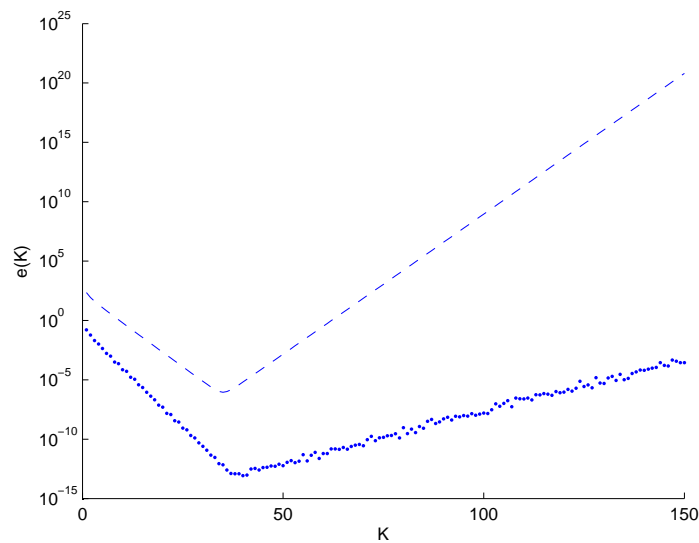


Abbildung 3.1: Fehler $e(K)$ aus (3.1) gegen K (Punkte) und theoretische Fehlerschranke aus Satz 2.2.10 (gestrichelt) für $\theta = 0, 5$.

Wir sehen, dass der Fehler der numerischen Inversion der Laplacetransformation zunächst für kleine K exponentiell fällt und einen Sättigungsbereich von etwa 10^{-14} erreicht. Danach wächst der Fehler wieder exponentiell. Der Grund für diesen Effekt ist, dass wir die Laplacetransformation U an den Quadraturpunkten $\ell\tau$ auf der Kontur nur auf Maschinengenauigkeit berechnen können. Durch diesen Effekt verhält sich der Fehler wie $\mathcal{O}(e^{cK})$ für große K . Das bedeutet die Fehlerschranke aus Satz 2.2.9 ist hier nicht mehr gültig und wir müssen die Fehlerschranke aus Satz 2.2.10 verwenden, welche in Abbildung 3.1 gestrichelt gezeichnet ist. Die Differenz zwischen dem theoretischen und numerischen Fehler kann dadurch erklärt werden, dass die Parameter γ, d, δ für dieses System nicht optimal gewählt wurden. Wir wollen an dieser Stelle jedoch nicht weiter darauf eingehen, wie diese Parameter optimal zu wählen sind.

Wir werden nun die Abhängigkeit des Fehlers von $0 < \theta < 1$ diskutieren, denn der Satz 2.2.10 gilt für jedes dieser θ , und die Schrittweite τ in Abhängigkeit von K wird über dieses θ festgelegt, wodurch sich natürlicherweise die Frage nach einem optimalen θ stellt. Führen wir das gleiche Experiment wie oben mit $\theta = 0,99$ durch, so erhalten wir Ergebnisse, die in Abbildung 3.2 dargestellt sind.

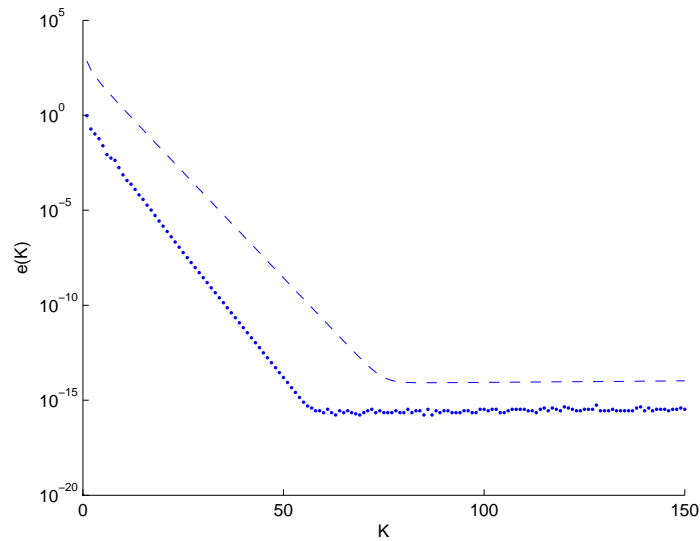


Abbildung 3.2: Fehler $e(K)$ aus (3.1) gegen K (Punkte) und theoretische Fehlerschranke aus Satz 2.2.10 (gestrichelt) für $\theta = 0,99$.

Wir sehen, dass der Fehler zunächst langsamer exponentiell fällt als im Vergleich zum Fall $\theta = 0,5$. Dann wird der Sättigungsbereich bei etwa $K = 60$ mit 10^{-15} erreicht. Besonders auffällig ist, dass für großes K der Fehler kaum wächst. In der Tat wächst dieser trotzdem exponentiell jedoch nur sehr langsam. Es liegt nahe, für kleine K auch θ klein zu wählen, um den schnellen exponentiellen Abfall wie im Fall $\theta = 0,5$ auszunutzen. Für große K sollte auch θ groß gewählt werden, um den langsamen exponentiellen Anstieg auszunutzen. Genauer sollte θ in Abhängigkeit von $\varepsilon = \frac{\rho}{Mt_0}$ und K so gewählt werden, dass der Fehlerterm

$$\varepsilon \epsilon_K(\theta)^{\theta-1} + \frac{\epsilon_K(\theta)^\theta}{1 - \epsilon_K(\theta)} \quad (3.2)$$

minimal ist. Man kann zeigen, dass für festes K und ε (3.2) strikt konvex ist für $\theta \in (0, 1)$ und sein Minimum für genau ein $\theta_{\text{opt}} \in (0, 1)$ annimmt. Dazu

verweisen wir auf [LFPS06]. Eine explizite Darstellung von θ_{opt} ist nicht leicht zu erhalten, jedoch kann θ_{opt} leicht numerisch berechnet werden. Dazu sei K und ε fest gegeben und $\theta_j = j10^{-3}$ für $j = 1, \dots, 999$. Berechne dann

$$\ell = \operatorname{argmin}_{j=1, \dots, 999} \left\{ \varepsilon \epsilon_K(\theta_j)^{\theta_j-1} + \frac{\epsilon_K(\theta_j)^{\theta_j}}{1 - \epsilon_K(\theta_j)} \right\} \quad (3.3)$$

und setze $\theta_{\text{opt}} = \theta_\ell$. Dies wurde für das oben angegebene Beispiel durchgeführt und die Ergebnisse sind in Abbildung 3.3 (a) dargestellt. Es wurden dann die Fehlerberechnungen mit optimalem θ durchgeführt und in Abbildung 3.3 (b) geplottet.

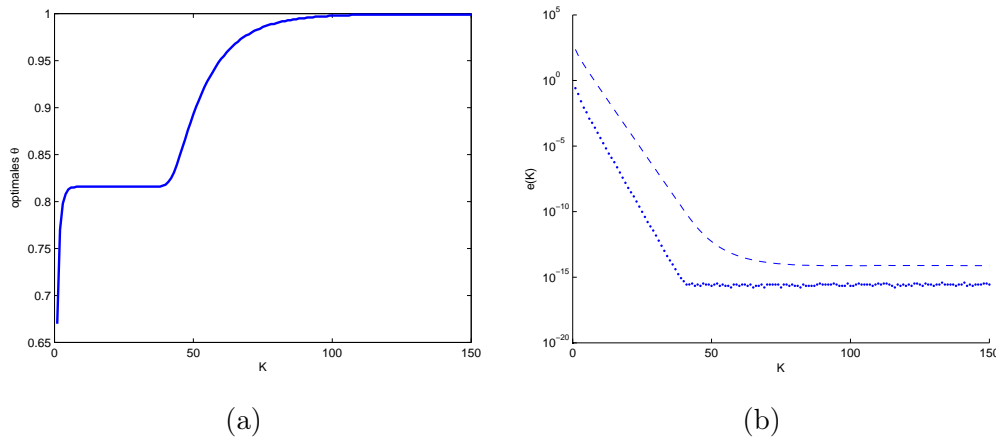


Abbildung 3.3: (a) Optimales θ aus (3.3) gegen K . (b) Fehler $e(K)$ aus (3.1) gegen K für $\theta = \theta_{\text{opt}}$.

Dies ist die bestmögliche Berechnung der inversen Laplacetransformation von V mit Hilfe der eingeführten Quadraturapproximation. Wir sehen, dass zu Beginn der Fehler exponentiell abfällt und dann für große K den Sättigungsbereich bei 10^{-15} hält. Es sei bemerkt, dass auch hier der Fehler für K gegen ∞ exponentiell steigt, jedoch nur sehr langsam. Um dies zu verhindern müsste $\theta = 1$ gewählt werden, was jedoch nicht erlaubt ist. Aus diesem Grund führt ein großes K zu einem schlechten Ergebnis. Eine zu empfehlende Größe ist $K = 35$.

3.2 Eine Reaktions-Diffusions-Gleichung

In diesem Abschnitt werden wir die aus Kapitel 1 konstruierten exponentiellen Integratoren auf ein Beispiel einer Reaktions-Diffusions-Gleichung an-

wenden und das Konvergenzverhalten der Verfahren illustrieren. Insbesondere sollen die Konvergenzergebnisse des Euler-Nørsett-Verfahrens aus Kapitel 2 numerisch veranschaulicht werden.

Wir betrachten das Anfangsrandwertproblem einer Reaktions-Diffusions-Gleichung vom Typ einer Michaelis-Menten-Gleichung auf dem Einheitsintervall $\Omega = [0, 1]$:

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= u_{xx}(x, t) - \frac{u(x, t)}{1 + u(x, t)}, & x \in \Omega, t \in [0, T] \\ u(x, 0) &= u_0(x), & x \in \Omega \\ u(0, t) &= 1, & t \in [0, T] \\ u(1, t) &= 1, & t \in [0, T], \end{aligned} \quad (3.4)$$

wobei die Anfangsfunktion $u_0 \equiv 1$ sei. Die Lösung $u : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ des Anfangsrandwertproblems modelliert zum Beispiel den zeitlichen Verlauf der Konzentration eines Substrats bis zur Zeit T in einem Reaktor der Länge 1. Dabei reagiert das Substrat zu einem weiteren Stoff und die Konzentration des Substrats nimmt ab. Dieser Vorgang wird durch die Nichtlinearität $f(u) = -\frac{u}{1+u}$ beschrieben. Gleichzeitig diffundiert das Substrat innerhalb des Reaktor mit Diffusionskoeffizienten 1, was durch den Term der zweiten räumlichen Ableitung in der Reaktions-Diffusions-Gleichung beschrieben wird. Zu Beginn der Reaktion sei die Konzentration des Substrats identisch 1, was durch die Anfangsfunktion u_0 gegeben ist. Die Dirichlet-Randbedingungen sind dahingegen zu interpretieren, dass während des Reaktionsprozesses am Rand von Ω das Substrat zugeführt wird, sodass die Konzentration am Rande des Reaktors konstant 1 ist.

Um dieses Anfangsrandwertproblem mit den exponentiellen Integratoren aus Kapitel 1 numerisch zu lösen, müssen wir dieses zunächst als ein abstraktes Cauchy-Problem in einem geeigneten Banachraum vom Typ (1.1) formulieren. Dazu führen wir die Funktion

$$\begin{aligned} v : \Omega \times [0, T] &\rightarrow \mathbb{R} \\ (x, t) &\mapsto v(x, t) := u(x, t) - g(x) \end{aligned}$$

ein, wobei $u : \Omega \times [0, T]$ die Lösung von (3.4) und $g \in C_b^2(\Omega, \mathbb{R})$ eine Funktion ist, die die Dirichlet-Randbedingungen $g(0) = g(1) = 1$ erfüllt. Es ist kanonisch $g \equiv 1$ zu wählen, sodass g die Lösung u um den Wert 1 verschiebt. Dann erfüllt v die homogenen Dirichlet-Randbedingungen $v(0, t) = v(1, t) = 0$ für

alle $t \in [0, T]$. Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned} v_t(x, t) &= u_t(x, t), \quad x \in \Omega, t \in [0, T] \\ v_{xx}(x, t) &= u_{xx}(x, t) + g_{xx}(x) = u_{xx}(x, t), \quad x \in \Omega, t \in [0, T] \\ v(x, 0) &= u_0(x) - g(x) = 0, \quad x \in \Omega. \end{aligned}$$

Damit löst v das Anfangsrandwertproblem

$$\begin{aligned} v_t(x, t) &= v_{xx}(x, t) - \frac{v(x, t) + 1}{v(x, t) + 2}, \quad x \in \Omega, t \in [0, T] \\ v(x, 0) &= 0, \quad x \in \Omega \\ v(0, t) &= 0, \quad t \in [0, T] \\ v(1, t) &= 0, \quad t \in [0, T]. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Sei nun $X = L^2(\Omega)$. Weiter sei A der Laplaceoperator in einer Dimension, d.h. $A = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ mit $\mathcal{D}(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. Dann ist nach Beispiel 1.1.2 A ein sektorieller Operator und $v(t) := v(\cdot, t)$ löst das Cauchy-Problem:

$$\begin{aligned} v'(t) &= Av(t) - \frac{v(t) + 1}{v(t) + 2}, \quad t \in [0, T] \\ v(0) &= 0 \in X. \end{aligned}$$

Dieses Problem wollen wir nun mit den exponentiellen Integratoren aus Kapitel 1 numerisch lösen. Da das System noch räumlich kontinuierlich ist, ist es erforderlich räumlich zu diskretisieren, d.h. der Operator A muss durch einen diskreten Operator $A_{\Delta x}$ ersetzt werden.

Dazu sei $M \in \mathbb{N}$, $\Delta x = \frac{1}{M}$ und räumliche Stützstellen $x_j = j\Delta x$ für $j = 0, \dots, M$ gegeben. Dann ist $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{M-1} < x_M = 1$ eine Zerlegung von $\Omega = [0, 1]$ in äquidistante Stützstellen. Weiter sei

$$w(t) := (v_1(t), \dots, v_{M-1}(t))^T$$

mit $v_j(t) := v(x_j, t)$ für $j = 1, \dots, M-1$. Dann approximieren wir

$$v_{xx}(x_j, t) \approx \frac{1}{\Delta x^2} (v(x_{j+1}, t) - 2v(x_j, t) + v(x_{j-1}, t))$$

für $j = 1, \dots, M-1$, wobei $v(x_0, t) = 0 = v(x_M, t)$ den homogenen Dirichlet-Randbedingungen entspricht. Dann definieren wir den Operator $A_{\Delta x}$ durch

$$A_{\Delta x} := \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M-1, M-1}.$$

Wir erhalten das räumlich diskretisierte System

$$w'(t) = A_{\Delta x} w(t) + \begin{pmatrix} f(v_1(t)) \\ \vdots \\ f(v_{M-1}(t)) \end{pmatrix}$$

mit $w(0) = 0 \in \mathbb{R}^{M-1}$ und $f(v_j(t)) = -\frac{v_j(t)+1}{v_j(t)+2}$ für $j = 1, \dots, M-1$.

Dieses räumlich diskrete System können wir nun zeitlich mit den exponentiellen Integratoren diskretisieren. Dazu sei ein $N \in \mathbb{N}$ gegeben und wir definieren die zeitliche Schrittweite $h = \frac{T}{N}$ und zeitliche Stützstellen $t_j = jh$ für $j = 0, \dots, N$. Für das Euler-Nørsett-Verfahren erhalten wir dann nach (1.5) die Iterationsvorschrift für $w_n := w(t_n)$:

$$w_{n+1} = \varphi_0(hA_{\Delta x})w_n + h\varphi_1(hA_{\Delta x})f(w_n) \quad (3.6)$$

für $n = 0, \dots, N-1$ und $f(w_n) := (f(v_1(t_n)), \dots, f(v_{M-1}(t_n)))^T$. Dabei werden die Operatoren $\varphi_0(hA_{\Delta x}), \varphi_1(hA_{\Delta x}) \in \mathbb{R}^{M-1, M-1}$ über die Quadratur der inversen Laplacetransformation aus Abschnitt 1.3 berechnet. Der Operator $hA_{\Delta x}$ ist ein sektorieller Operator mit Sektor Σ_δ für jedes $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Für die Quadratur wählen wir die Parameter $K = 35$, $d = 0,6$, $\theta = 0,9$, $\Lambda = 2$, $t_0 = 0,5$, $\gamma = 0,7$, sowie λ und τ wie in Satz 2.2.9, sodass der Fehler der Quadratur hinreichend klein ist und für die numerischen Ergebnisse nicht relevant ist. Die Quadratur liefert dann

$$\varphi_0(hA_{\Delta x}) = \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_\ell e^{z_\ell} (z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1} \right) \quad (3.7)$$

und

$$\varphi_1(hA_{\Delta x}) = \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_\ell \frac{e^{z_\ell}}{z_\ell} (z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1} \right), \quad (3.8)$$

wobei $z_\ell = T(\ell\tau)$, $\omega_0 = -\frac{\tau}{2\pi i} T'(0)$ und $\omega_\ell = -\frac{\tau}{\pi i} T'(\ell\tau)$ für $1 \leq \ell \leq K$. Einsetzen von (3.7) und (3.8) in (3.6) liefert dann die Iterationsvorschrift:

$$w_{n+1} = \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_\ell e^{z_\ell} (z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1} w_n \right) + h \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_\ell \frac{e^{z_\ell}}{z_\ell} (z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1} f(w_n) \right). \quad (3.9)$$

Bemerkung 3.2.1. Bei der Implementierung der Iteration (3.9) sollte aus numerischer Sicht darauf geachtet werden die inverse Matrix $(z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1}$

nicht direkt zu berechnen. Stattdessen sollte in jedem Iterationsschritt das Gleichungssystem

$$(z_\ell I - hA_{\Delta x})b = w_n$$

bzw.

$$(z_\ell I - hA_{\Delta x})b = f(w_n)$$

mit Hilfe eines geeigneten Lösungsverfahrens gelöst werden. Im Fall konstanter zeitlicher Schrittweite h kann dabei ausgenutzt werden, dass die Matrix sich während der zeitlichen Iteration nicht ändert. D.h. es ist zu empfehlen vor Beginn der zeitlichen Iteration eine LR-Zerlegung der Matrix $(z_\ell I - hA_{\Delta x})$ durchzuführen und diese in jeder Iteration für w_n zu benutzen.

Die Lösung des Euler-Nørsett-Verfahrens für das System (3.6) für $T = 1$, $\Delta x = 0.001$ und $h = 0.001$ ist in Abbildung 3.4 zu sehen. Dies stellt eine numerische Lösung für das Anfangsrandwertproblem (3.5) dar. Eine

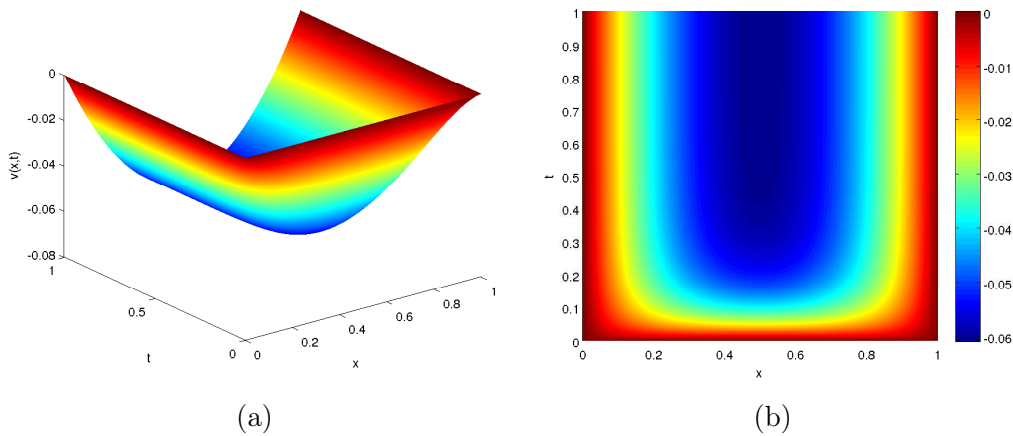


Abbildung 3.4: Lösung v des Anfangsrandwertproblems 3.5 berechnet durch das Euler-Nørsett-Verfahren mit Schrittweiten $\Delta x = h = 0.001$.

numerische Lösung für das Anfangsrandwertproblem (3.4) erhalten wir nach der Konstruktion, indem wir die Lösung von (3.5) um 1 verschieben. Diese Lösung ist in Abbildung 3.5 abgebildet.

Wir sehen, dass sich innerhalb des Reaktors ein Gleichgewichtszustand einstellt, d.h. es wird eine Konzentrationsverteilung erreicht, die sich dann zeitlich nicht mehr ändert. Diesen Zustand beschreibt die Lösung der statio-

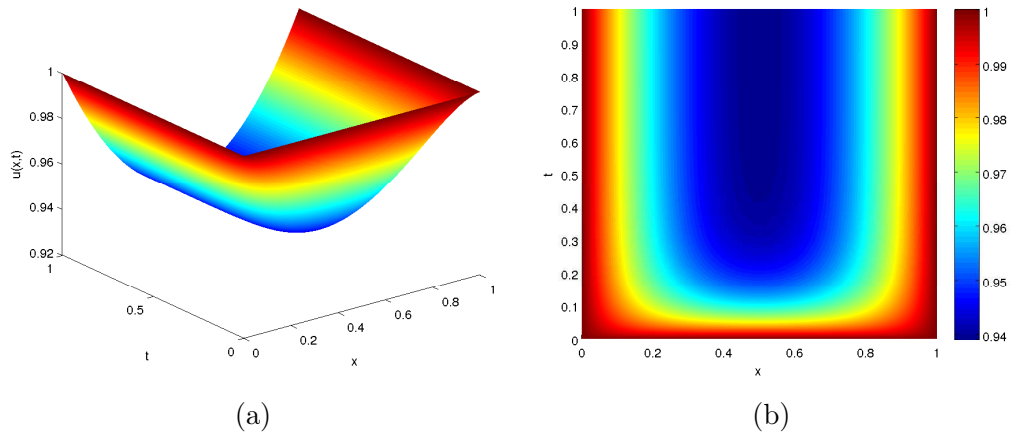


Abbildung 3.5: Lösung u des Anfangsrandwertproblems 3.4 berechnet durch das Euler-Nørsett-Verfahren mit Schrittweiten $\Delta x = h = 0.001$.

nären Gleichung

$$u_{xx}(x) = \frac{u(x)}{u(x) + 1}, \quad x \in [0, 1] \quad (3.10)$$

$$u(0) = 1 \quad (3.11)$$

$$u(1) = 1. \quad (3.12)$$

Wir wollen anhand dieses Beispiels die Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahrens und der Verfahren aus Beispiel 1.2.2 illustrieren und die theoretischen Konvergenzerggebnisse aus Abschnitt 2.1 und [HO06] numerisch verifizieren. Genauer untersuchen wir die Verfahren:

1. Euler-Nørsett-Verfahren, siehe (1.5). Wir bezeichnen dies mit **EXP1**.
2. Verfahren der Stufe $s = 2$, siehe (1.7). Wir bezeichnen dies mit **EXP2**.
3. Verfahren der Stufe $s = 3$, siehe (1.8). Wir bezeichnen dies mit **EXP3**.
4. Verfahren der Stufe $s = 5$, siehe (1.9). Wir bezeichnen dies mit **EXP5**.

Die entsprechende Norm, in der wir die Konvergenz erhalten, ist nach Beispiel 1.1.12 für $\alpha = \frac{1}{2}$ die $H_0^1(\Omega)$ -Norm, denn $X_\alpha = \mathcal{D}((-A)^{\frac{1}{2}}) = H_0^1(\Omega)$. Durch die räumliche Diskretisierung erhalten wir jedoch nur die Lösung auf den räumlichen Gitterpunkten x_i für $i = 0, \dots, M$. Wir werden also gezwungen die $H_0^1(\Omega)$ -Norm durch eine entsprechende diskrete Norm zu ersetzen. Dazu

sei $u \in L^2(\Omega)$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_0^1 u(x)^2 dx = \sum_{i=0}^{M-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x)^2 dx \\ &\approx \sum_{i=0}^{M-1} (x_{i+1} - x_i) \frac{u(x_i)^2 + u(x_{i+1})^2}{2} \\ &= \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=0}^{M-1} (u(x_i)^2 + u(x_{i+1})^2) \end{aligned}$$

und entsprechend für $u \in H_0^1(\Omega)$ gilt

$$\begin{aligned} \|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2 &\approx \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=0}^{M-1} (u(x_i)^2 + u(x_{i+1})^2) \\ &\quad + \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=0}^{M-1} (u_x(x_i)^2 + u_x(x_{i+1})^2). \end{aligned}$$

Zusätzlich müssen wir noch die Ableitung durch Differenzenquotienten ersetzen gemäß:

$$\begin{aligned} u_x(x_0) &\approx \frac{1}{\Delta x} (u(x_1) - u(x_0)) = \frac{u(x_1) - u(x_0)}{\Delta x} \\ u_x(x_i) &\approx \frac{1}{2\Delta x} (u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})), \quad i = 1, \dots, M-1 \\ u_x(x_M) &\approx \frac{1}{\Delta x} (u(x_M) - u(x_{M-1})) = -\frac{u(x_M) - u(x_{M-1})}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Dann definieren wir für $v = (v_0, \dots, v_M)^T \in \mathbb{R}^{M+1}$ den Operator $\delta_1 : \mathbb{R}^{M+1} \rightarrow \mathbb{R}^{M+1}$ durch

$$(\delta_1 v)_j := \begin{cases} 0, & j = 0 \\ \frac{1}{2\Delta x} (v_{j+1} - v_{j-1}), & 1 \leq j \leq M-1 \\ 0, & j = M. \end{cases} \quad (3.13)$$

Dann definieren wir für $v \in \mathbb{R}^{M+1}$ die diskrete L^2 -Norm:

$$\|v\|_{L^2, \Delta x}^2 := \frac{\Delta x}{2} \sum_{i=0}^{M-1} (v(x_i)^2 + v(x_{i+1})^2).$$

Und die diskrete H_0^1 -Norm:

$$\|v\|_{H_0^1, \Delta x}^2 := \|v\|_{L^2, \Delta x}^2 + \|\delta_1 v\|_{L^2, \Delta x}^2 \quad (3.14)$$

Wir berechnen nun den Fehler

$$e_h := \|v(T) - w_N\|_{H_0^1, \Delta x}, \quad (3.15)$$

wobei v die exakte Lösung und $w_N = (0, w_1(T), \dots, w_{M-1}(T), 0)^T$ die numerische Lösung des jeweiligen Einschrittverfahren mit Schrittweiten $h = 2^{-i}$ für $i = 2, \dots, 7$ ist. Da die exakte Lösung des Anfangsrandwertproblems nicht explizit bekannt ist, ersetzen wir v durch die Lösung des Verfahrens EXP5 mit $\Delta x = 10^{-3}$ und $h = 10^{-5}$, was eine hinreichend gute Approximation der exakten Lösung ist. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.6 auf logarithmischer Skala dargestellt.

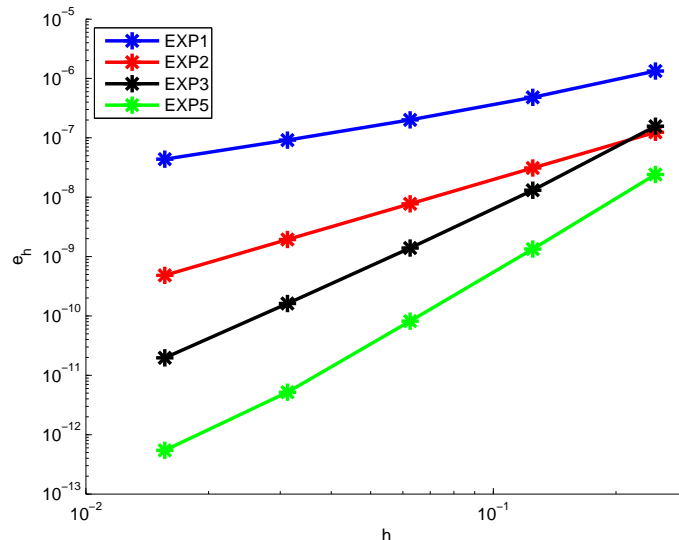


Abbildung 3.6: Fehler e_h des Euler-Nørsett-Verfahrens, sowie den Verfahren EXP2, EXP3, EXP5 aus Beispiel 1.2.2 zu den Schrittweiten $h = 2^{-i}$ für $i = 2, \dots, 7$.

Wir sehen, dass sich unsere Konvergenzaussagen für das Euler-Nørsett-Verfahren aus Abschnitt 2.1 bestätigen und das Euler-Nørsett-Verfahren die Konvergenzordnung 1 besitzt. Des Weiteren bestätigen sich die Ergebnisse aus [HO06], dass die Verfahren höherer Stufe auch eine höhere Konvergenzordnung besitzen. Das Verfahren der Stufe 2 EXP2, welches von der Stufe 2 ist, besitzt die Konvergenzordnung 2. Das Verfahren der Stufe 3 EXP3 besitzt die Konvergenzordnung 3 und das Verfahren der Stufe 5 EXP5 die Konvergenzordnung 4.

Des Weiteren wollen wir nun das Konvergenzverhalten der Mehrschrittverfahren aus Abschnitt 1.4 numerisch untersuchen und die Konvergenzergebnisse aus Satz 1.4.2 numerisch verifizieren. Wir werden das 2-Schritt-Verfahren mit **MSV2**, das 3-Schritt-Verfahren mit **MSV3** und das 4-Schritt-Verfahren mit **MSV4** bezeichnen. Für $k \in \{2, 3, 4\}$ besitzen die Verfahren die Iterationsvorschrift:

$$w_{n+k} = \psi_0(k, hA_{\Delta x})w_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \psi_{j+1}(k, hA_{\Delta x})\tilde{\Delta}^j f(t_n, w_n)$$

für $n = 0, \dots, N - k$. Dabei werden die Operatoren $\psi_j(k, hA_{\Delta x})$, $k = 0, \dots, 4$ mit Hilfe der Quadratur für die inverse Laplacetransformation berechnet gemäß:

$$\psi_j(k, hA_{\Delta x}) \approx \operatorname{Re} \left(\sum_{\ell=0}^K \omega_\ell e^{kz_\ell} R_j(z_\ell) (z_\ell I - hA_{\Delta x})^{-1} \right),$$

wobei ω_ℓ und z_ℓ wie im oben aufgeführten Beispiel zu den Einschrittverfahren sind. Die Startwerte werden zunächst mit dem Verfahren **EXP5** berechnet. Wir berechnen den Fehler in der H_0^1 -Norm wie im Fall der Einschrittverfahren. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.7 dargestellt.

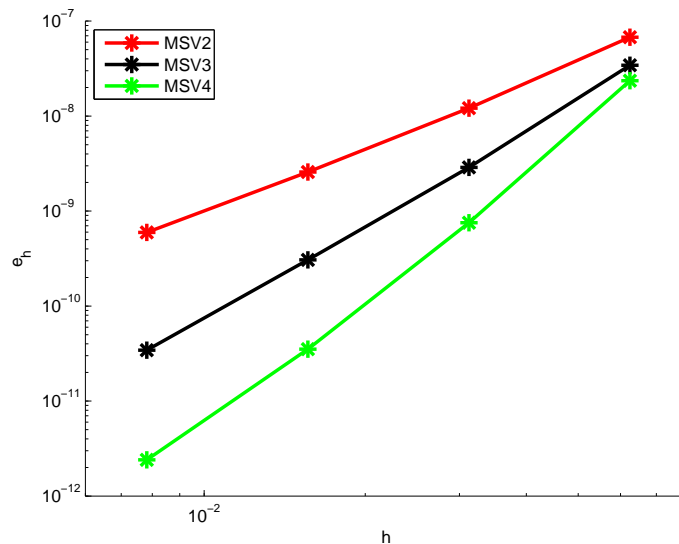


Abbildung 3.7: Fehler e_h der Verfahren MSV2, MSV3 und MSV4 Schrittweiten $h = 2^{-i}$ für $i = 4, \dots, 7$.

Wir sehen, dass sich die Konvergenzordnungen aus Satz 1.4.2 bestätigen. Das Verfahren MSV2 besitzt die Konvergenzordnung 2, das Verfahren MSV3

die Konvergenzordnung 3 und das Verfahren MSV4 die Konvergenzordnung 4. Dabei garantiert die Berechnung der Startwerte über das Einschrittverfahren EXP5 die Voraussetzungen des Satzes 1.4.2.

3.3 Die Nagumo-Gleichung

Von besonderem Interesse sind Wellenlösungen in parabolischen äquivarianten Evolutionsgleichungen. Ein Beispiel dafür ist die Nagumo-Gleichung

$$u_t(x, t) = u_{xx}(x, t) + u(x, t)(1 - u(x, t))(u(x, t) - b), \quad x \in \mathbb{R}, t \geq 0, b \in \mathbb{R}, \quad (3.16)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Dabei ist $u : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ die Lösung der Nagumo-Gleichung mit Anfangswert $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Die Nagumo-Gleichung ist äquivariant unter Translation und somit eine parabolische äquivariante Evolutionsgleichung. In diesem Abschnitt wollen wir anhand dieses Beispiels Wellenlösungen in Form einer wandernden Welle numerisch approximieren. Eine **wandernde Welle** ist eine Lösung $u_* : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ der Form

$$u_*(x, t) = v_*(x - \mu_* t) =: v_*(\xi) \quad (3.17)$$

für $x \in \mathbb{R}$ und $t \in [0, T]$ mit

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} v_*(\xi) = v_{\pm}.$$

Dabei heißt $\xi = x - \mu_* t \in \mathbb{R}$ die **mitbewegte räumliche Koordinate**, μ_* die **Geschwindigkeit** und $v_* : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ das **Profil der wandernden Welle**. Man nennt u_* auch **relatives Gleichgewicht** der äquivarianten Evolutionsgleichung. Im Fall $v_- = v_+$ ist die wandernde Welle ein **Puls** und im Fall $v_- \neq v_+$ eine wandernde **Front**. Für $\mu_* < 0$ bewegt sich die Welle nach links und für $\mu_* > 0$ nach rechts. Im Fall $\mu_* = 0$ nennt man die Welle auch **stehende Welle**.

Für $\mu_* = -\sqrt{2} \left(\frac{1}{4} - b\right)$, $b \in \mathbb{R}$ besitzt die Nagumo-Gleichung (3.16) ein relatives Gleichgewicht mit dem Profil

$$v_*(\xi) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right)} \quad (3.18)$$

mit

$$\lim_{\xi \rightarrow -\infty} v_*(\xi) = 0, \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} v_*(\xi) = 1. \quad (3.19)$$

Da die Anfangsfunktion u_0 im Allgemeinen nicht dem Profil v_* des relativen Gleichgewichts aus (3.18) entspricht, erwarten wir zumindest, dass die Lösung u gegen das relative Gleichgewicht u_* konvergiert für t gegen ∞ , sofern die Anfangsfunktion u_0 hinreichend nah an dem Profil v_* des relativen Gleichgewichts liegt. Dies ist die Frage der **Stabilität von relativen Gleichgewichten in äquivarianten Evolutionsgleichungen**. Für Details der Theorie über die Stabilität von relativen Gleichgewichten verweisen wir auf [BT09] und [Thü08].

Wir werden nun das Anfangswertproblem (3.16) numerisch mit dem Euler-Nørsett-Verfahren lösen und den Effekt der Stabilität des relativen Gleichgewichts visualisieren. Dafür müssen wir zunächst die Anfangswertaufgabe (3.16) auf ein endliches Gebiet mit geeigneten Randbedingungen beschränken. Es gilt für das Wellenprofil v_* des relativen Gleichgewichts, dass

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} v_{*,\xi}(\xi) = 0. \quad (3.20)$$

Dabei konvergiert die Ableitung sogar exponentiell gegen 0. Daher ist es sinnvoll ein Anfangsrandwertproblem auf einem hinreichend großen Intervall mit homogenen Neumann-Randbedingungen zu stellen. Der dabei auftretende Fehler ist für kleine Zeiten hinreichend klein und kann vernachlässigt werden. Wir werden also das folgende Anfangsrandwertproblem lösen, wobei wir jetzt $b = \frac{1}{4}$ setzen, $\Omega = [-10, 10]$ und eine geeignete Anfangsfunktion hinreichend nah am Profil v_* des relativen Gleichgewichts wählen:

$$u_t(x, t) = u_{xx}(x, t) + u(x, t)(1 - u(x, t)) \left(u(x, t) - \frac{1}{4} \right), \quad x \in \Omega, t \in [0, T], \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \Omega, \\ u_x(-10, t) &= 0, \quad t \in [0, T], \\ u_x(10, t) &= 0, \quad t \in [0, T], \end{aligned}$$

mit

$$u_0(x) = \begin{cases} 0, & x \in [-10, -1], \\ \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}, & x \in (-1, 1) \\ 1, & x \in [1, 10]. \end{cases} \quad (3.22)$$

Um dieses Anfangsrandwertproblem mit dem Euler-Nørsett-Verfahren zu lösen, müssen wir dieses wieder als ein abstraktes Cauchy-Problem vom Typ (1.1) schreiben.

Dazu sei $X = L^2(\Omega)$ und $A = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Seien $e_n \in H^2(\Omega)$ $n \in \mathbb{N}_0$, sodass

$$Ae_n = \lambda_n e_n \quad (3.23)$$

für $\lambda_n \in \mathbb{C}$ mit

$$(e_n, e_m)_{L^2(\Omega)} = \delta_{n,m}$$

und

$$e'_n(0) = 0 = e'_n(1).$$

Dann ist

$$e_n(x) = c_n \cos(n\pi x)$$

mit

$$c_n = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ \sqrt{2}, & n \geq 1. \end{cases}$$

und $\lambda_n = -n^2\pi^2$ für $n \in \mathbb{N}_0$. Dann definieren wir

$$\mathcal{D}(A) = \left\{ u \in L^2(\Omega) : \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n^2 (e_n, u)_{L^2(\Omega)}^2 < \infty \right\}$$

mit

$$Au = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n (e_n, u)_{L^2(\Omega)} e_n.$$

Mit Hilfe des Spursatzes [Alt06, Satz A6.6] kann man zeigen, dass

$$\{u \in H^2(\Omega) : u'(0) = u'(1) = 0\} \subset \mathcal{D}(A).$$

Dies wollen wir an dieser Stelle nicht beweisen. Jedoch ist A dicht definiert denn $C_0^\infty \subset \mathcal{D}(A) \subset L^2(\Omega)$ und C_0^∞ liegt dicht in $L^2(\Omega)$ und nach B.12 bildet $(e_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$. Sei $0 < \delta < \frac{\pi}{2}$. Dann erfüllt A die sektorielles Eigenschaft für den Sektor Σ_δ . Denn es gilt für $E_n(u) := (e_n, u)_{L^2(\Omega)} e_n$ und $u \in \mathcal{D}(A)$, dass

$$(\lambda I - A)^{-1} u = \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_n)^{-1} E_n(u).$$

Dann ist mit der Parsevalschen Identität B.12

$$\|(\lambda I - A)^{-1} u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |\lambda - \lambda_n|^{-2} (e_n, u)_{L^2(\Omega)}^2 \leq \left(\max_{n \in \mathbb{N}} \frac{1}{|\lambda - \lambda_n|} \right)^2 \|u\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Sei $\lambda = |\lambda|(\cos \theta + i \sin \theta)$ mit $|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$. So ist

$$|\lambda - \lambda_n| \geq |\lambda|$$

für alle $n \in \mathbb{N}$. Sei nun $\frac{\pi}{2} < |\theta| < \pi - \delta$. Dann ist

$$\min_{n \in \mathbb{N}} |\lambda - \lambda_n| \geq \min_{x \leq 0} |\lambda - x| \geq |\lambda|^2 \sin^2 \theta \geq |\lambda|^2 \sin^2(\pi - \delta).$$

Damit folgt

$$\|(\lambda I - A)^{-1}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq \frac{(\sin(\pi - \delta))^{-1}}{|\lambda|}$$

für alle $\lambda \in (\Sigma_\delta)^c$. Wir zeigen nun, dass $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow L^2(\Omega)$ abgeschlossen ist. Sei $(u_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{D}(A)$ eine Folge mit $u_k \rightarrow u$ in L^2 und $Au_k \rightarrow v$ in L^2 für $k \rightarrow \infty$. Sei nun $N \in \mathbb{N}_0$ fest, sowie $\varepsilon > 0$ und $k \geq k(\varepsilon, N)$ für ein $k(\varepsilon, N)$ hinreichend groß. Dann gilt mit der Besselschen Ungleichung B.11, dass

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{n=0}^N (v - \lambda_n u, e_n)_{L^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq \left(\sum_{n=0}^N (v - \lambda_n u_k, e_n)_{L^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\sum_{n=0}^N \lambda_n^2 (u_k - u, e_n)_{L^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq \left(\sum_{n=0}^N (v - \lambda_n u_k, e_n)_{L^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \max_{n=0, \dots, N} |\lambda_n|^2 \left(\sum_{n=0}^N (u_k - u, e_n)_{L^2}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq \|v - Au_k\|_{L^2} + \max_{n=0, \dots, N} |\lambda_n| \|u_k - u\|_{L^2} \leq \varepsilon. \end{aligned}$$

Da dies für jedes $\varepsilon > 0$ gilt, folgt

$$\sum_{n=0}^N (v - \lambda_n u, e_n)_{L^2}^2 = 0$$

und somit

$$(v, e_n)_{L^2} = \lambda_n (u, e_n)_{L^2}$$

für alle $n \in \mathbb{N}_0$. Dann gilt mit der Parsevalschen Identität B.12, dass

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n^2 (u, e_n)_{L^2}^2 = \sum_{n=0}^{\infty} (v, e_n)_{L^2}^2 = \|v\|_{L^2}^2 < \infty.$$

Also ist $u \in \mathcal{D}(A)$ und es folgt

$$Au = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n (u, e_n)_{L^2} e_n = \sum_{n=0}^{\infty} (v, e_n) e_n = v.$$

Das heißt der Operator $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow L^2(\Omega)$ ist abgeschlossen.

Also ist A ein sektorieller Operator. Wir schreiben $v(t) = v(\cdot, t)$. Dann löst v das Cauchy-Problem

$$\begin{aligned} v'(t) &= Av(t) + v(t)(1 - v(t)) \left(v(t) - \frac{1}{4} \right), \quad t \in [0, T] \\ v(0) &= u_0 \in L^2(\Omega). \end{aligned}$$

Als nächstes müssen wir wieder wie in Abschnitt 3.2 für die numerischen Berechnungen den Operator A durch einen diskreten Operator $A_{\Delta x}$ approximieren. Dazu sei $M \in \mathbb{N}$, $\Delta x = \frac{20}{M}$ und räumliche Stützstellen $x_j = -10 + j\Delta x$ für $j = 0, \dots, M$ gegeben. Dann ist $-10 = x_0 < x_1 < \dots < x_{M-1} < x_M = 10$ eine Zerlegung von $\Omega = [-10, 10]$ in äquidistante Stützstellen. Weiter sei

$$w(t) := (v_0(t), \dots, v_M(t))^T$$

mit $v_j(t) = v(x_j, t)$ für $j = 0, \dots, M - 1$. Dann approximieren wir

$$\begin{aligned} v_{xx}(x_0, t) &\approx \frac{1}{\Delta x^2}(2v(x_1) - 2v(x_0)), \\ v_{xx}(x_j, t) &\approx \frac{1}{\Delta x^2}(v(x_{j+1}, t) - 2v(x_j, t) + v(x_{j-1}, t)), \quad j = 1, \dots, M - 1 \\ v_{xx}(x_M, t) &\approx \frac{1}{\Delta x^2}(2v(x_{M-1}, t) - 2v(x_M, t)), \end{aligned}$$

wobei wir auf dem Rand von Ω die homogenen Neumann-Randbedingungen für eine Elimination benutzt haben. Wir definieren den diskreten Operator $A_{\Delta x}$ durch

$$A_{\Delta x} := \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & & \\ 1 & 2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 2 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M+1, M+1}.$$

Wir erhalten das räumlich diskrete System

$$w'(t) = A_{\Delta x} w(t) + \begin{pmatrix} f(v_0(t)) \\ \vdots \\ f(v_M(t)) \end{pmatrix}$$

mit $w(0) = (u_0(x_0), \dots, u_0(x_M))^T$ und $f(v_j(t)) = v_j(t)(1 - v_j(t)) \left(v_j(t) - \frac{1}{4} \right)$ für $j = 0, \dots, M$. Dieses System können wir nun zeitlich mit dem Euler-Nørsett-Verfahren diskretisieren. Dazu sei ein $N \in \mathbb{N}$ gegeben und wir definieren die zeitliche Schrittweite $h = \frac{T}{N}$ und zeitliche Stützstellen $t_j = jh$ für

$j = 0, \dots, N$. Für das Euler-Nørsett-Verfahren erhalten wir dann die folgende Iterationsvorschrift für $w(t_n) = w_n$:

$$w_{n+1} = \varphi_0(hA_{\Delta x})w_n + h\varphi_1(hA_{\Delta x})f(w_n)$$

für $n = 0, \dots, N - 1$ und $f(w_n) := (f(v_1(t_n)), \dots, f(v_{M-1}(t_n)))^T$. Dabei werden die Matrizen $\varphi_0(hA_{\Delta x})$ und $\varphi_1(hA_{\Delta x})$ wie in Abschnitt 3.2 über die Quadratur der inversen Laplacetransformation berechnet.

Die Lösung des Euler-Nørsett-Verfahren für $T = 10$ und den Schrittweiten $\Delta x = 0,001$ und $h = 0,001$ ist in Abbildung 3.8 gezeichnet.

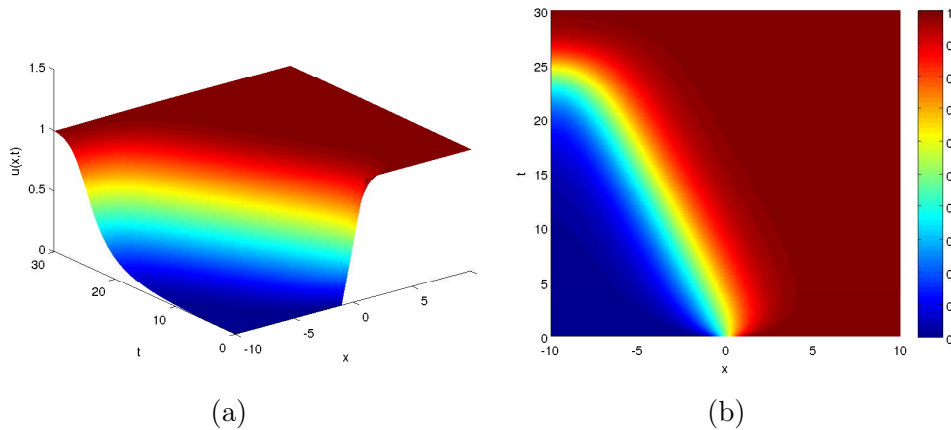


Abbildung 3.8: Numerische Lösung der Nagumo-Gleichung 3.21 des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Schrittweiten $\Delta x = h = 0,001$.

Das Ergebnis ist eine wandernde Wellenfront, die sich nach links bewegt. Das Profil der Anfangsfunktion u_0 konvergiert schnell gegen das Profil des relativen Gleichgewichts v_* . Bei etwa $t \geq 20$ fängt die Welle an, aus dem Gebiet Ω herauszulaufen und das Verhalten der wandernden Wellenfront kann dann für größere Zeiten nicht mehr beobachtet werden. Zudem sind bei diesem Vorgang die homogenen Neumann-Randbedingungen nicht mehr sinnvoll gestellt. Denn die Annahme, dass die Ableitung der Wellenlösung auf dem Rand verschwindet, ist im ursprünglichem Fall $\Omega = \mathbb{R}$ nicht mehr erfüllt, sodass das bedingte Zurückziehen auf ein endliches Gebiet für die numerischen Berechnungen keine gute Approximation liefert. Im folgenden Abschnitt werden wir eine Methode vorstellen, die dieses Problem umgeht. Diese Methode wird **Einfrieren wandernder Wellen** genannt.

3.4 Die eingefrorene Nagumo-Gleichung

Wir betrachten wieder die Nagumo-Gleichung auf der reellen Achse, d.h. gegeben ist das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= u_{xx}(x, t) + u(x, t)(1 - u(x, t))(u(x, t) - b), \quad x \in \mathbb{R}, t \geq 0 \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \end{aligned}$$

wobei $u : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ eine gesuchte Lösung ist, $b \in (0, 1)$ ein Parameter und $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die Anfangsfunktion beschreibt.

Gesucht sind wie in Abschnitt 3.3 Lösungen u_* in der Form einer wandernden Welle, d.h.

$$u_*(x, t) = v_*(x - \mu_* t), \quad x \in \mathbb{R}, t \geq 0,$$

wobei $v_* : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ das Profil und $\mu_* \in \mathbb{R}$ die Geschwindigkeit der wandernden Welle beschreibt.

Für die numerische Berechnung der Lösung ist es erforderlich, das Anfangswertproblem auf einem beschränkten Gebiet zu lösen und geeignete Randbedingungen zu stellen, d.h. wir lösen die Gleichung (3.21) aus Abschnitt 3.3. Dies hat zur Folge, dass die wandernde Welle für große t aus dem endlichen Gebiet herausläuft, wie wir in den Experimenten in Abschnitt 3.3 gesehen haben. Wenn dies geschieht, sind die angegebenen Neumann-Randbedingungen nicht mehr geeignet, um die Lösung auf dem unendlichen Gebiet zu approximieren.

Wir stellen nun eine Methode vor, die dieses Problem umgeht - die sogenannte **Einfriermethode für wandernde Wellen**. Die Idee dabei ist es, das Koordinatensystem mit der Geschwindigkeit der wandernden Welle mitzubewegen. Wir lösen also die Gleichung auf einem bewegten Koordinatensystem, sodass die wandernde Welle nicht aus dem endlichen Gebiet, auf dem das Anfangsrandwertproblem gestellt ist, herausläuft. Diesen Vorgang nennt man Einfrieren. Wir wollen zunächst das Einfrieren mathematisch beschreiben und das sogenannte eingefrorene System herleiten. Wir werden sehen, dass sich das Anfangsrandwertproblem 3.21 zu einem Anfangsrandwertproblem mit einer partiellen Differentialgleichung und einer algebraischen Nebenbedingung transformiert.

Wir machen folgenden Ansatz, welcher auch **travelling wave Ansatz** genannt wird:

Wir führen Funktionen

$$\begin{aligned} v &= v(\xi, t) \in \mathbb{R} \\ \gamma &= \gamma(t) \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

ein, sodass

$$u(x, t) = v(\xi, t)$$

gilt, wobei

$$\xi = \xi(t) := x - \gamma(t).$$

Dabei heißt v das **Profil**, γ die **Position** und ξ die **mitbewegte Koordinate** der wandernden Welle. Dann gilt

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t}[v(x - \gamma(t), t)] \\ &= [-\gamma'(t)]v_\xi(x - \gamma(t), t) + v_t(x - \gamma(t), t) \\ &= -\gamma'(t)v_\xi(\xi, t) + v_t(\xi, t) \end{aligned}$$

und

$$u_{xx}(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}[v(x - \gamma(t), t)] = v_{\xi\xi}(x - \gamma(t), t) = v_{\xi\xi}(\xi, t).$$

Fordern wir zusätzlich, dass $\gamma(0) = 0$ ist, so löst v das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} v_t(\xi, t) &= v_{\xi\xi}(\xi, t) - \gamma'(t)v_\xi(\xi, t) + v(\xi, t)(1 - v(\xi, t))(v(\xi, t) - b), \quad \xi \in \mathbb{R}, t \geq 0 \\ v(\xi, 0) &= u_0(\xi), \quad \xi \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Wir führen erneut eine Funktion $\mu : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gemäß der Vorschrift $\gamma'(t) = \mu(t)$ für alle $t \geq 0$ ein. Dies liefert nun eine gewöhnliche Differentialgleichung für γ :

$$\begin{aligned} \gamma'(t) &= \mu(t), \quad t \geq 0 \\ \gamma(0) &= 0. \end{aligned}$$

Um den zusätzlichen Freiheitsgrad μ zu kompensieren, fordern wir nun eine algebraische Nebenbedingung. Diese wird auch **fixe Phasenbedingung** genannt. Dazu wählen wir eine Referenzfunktion \hat{v} . Die fixe Phasenbedingung ist eine Minimierungsbedingung, die verlangt, dass \hat{v} der nächstgelegene Punkt von $v(t)$ auf dem Gruppenorbit $O(\hat{v}) := \{\hat{v}(\cdot - g) : g \in \mathbb{R}\}$ von \hat{v} bzgl. der L^2 -Norm ist, d.h.

$$\min_{g \in \mathbb{R}} \|v(\cdot, t) - \hat{v}(\cdot - g)\|_{L^2}^2 = \|v(\cdot, t) - \hat{v}(\cdot)\|_{L^2}^2$$

für alle $t \geq 0$. Eine notwendige Bedingung für ein lokales Minimum bei $g = 0$ ist, dass die erste Ableitung an der Stelle $g = 0$ verschwindet, d.h. wir

erhalten

$$\begin{aligned}
0 &= \left[\frac{\partial}{\partial g} \|v(\cdot, t) - \hat{v}(\cdot - g)\|_{L^2}^2 \right]_{g=0} \\
&= \left[\frac{\partial}{\partial g} (v(\cdot, t) - \hat{v}(\cdot - g), v(\cdot, t) - \hat{v}(\cdot - g))_{L^2} \right]_{g=0} \\
&= 2(\hat{v}_\xi, v(\cdot, t) - \hat{v})_{L^2}
\end{aligned}$$

für alle $t \geq 0$. Dies liefert die Phasenbedingung

$$(v(\cdot, t) - \hat{v}, \hat{v}_\xi)_{L^2} = 0 \quad \forall t \geq 0.$$

Zusammengefasst erhalten wir nun das einfrierende System

$$v_t(\xi, t) = v_{\xi\xi}(\xi, t) + \mu(t)v_\xi(\xi, t) + v(\xi, t)(1 - v(\xi, t)(v(\xi, t) - b)), \quad \xi \in \mathbb{R}, t \geq 0 \quad (3.24)$$

$$v(\xi, 0) = u_0(\xi), \quad \xi \in \mathbb{R} \quad (3.25)$$

$$0 = (v(\cdot, t) - \hat{v}, \hat{v}_\xi)_{L^2}, \quad t \geq 0 \quad (3.26)$$

$$\gamma_t(t) = \mu(t), \quad t \geq 0 \quad (3.27)$$

$$\gamma(0) = 0, \quad (3.28)$$

wobei \hat{v} eine geeignete Referenzfunktion ist.

Es sei bemerkt, dass die gewöhnliche Differentialgleichung (3.27), (3.28) für γ von (v, μ) entkoppelt ist. Diese gewöhnliche Differentialgleichung wird auch Rekonstruktionsgleichung genannt und dient nur zur Positionsbestimmung der wandernden Welle. Meist ist man nur an dem Profil v und der Geschwindigkeit μ der wandernden Welle interessiert. Dafür reicht es aus, die Gleichungen (3.24), (3.25), (3.26) zu lösen. Aus der Phasenbedingung (3.26) kann man $\mu(t)$ explizit berechnen. Denn differenzieren wir die Phasenbedingung nach t und fordern, dass $(\hat{v}_\xi, v_\xi(\cdot, t))_{L^2} \neq 0$ für alle $t \geq 0$, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{d}{dt} (\hat{v}_\xi, v(\cdot, t) - \hat{v})_{L^2} = (\hat{v}_\xi, v_t(\cdot, t))_{L^2} \\
&= (\hat{v}_\xi, v_{\xi\xi}(\cdot, t) + \mu(t)v_\xi(\cdot, t) + v(\cdot, t)(1 - v(\cdot, t))(v(\cdot, t) - b))_{L^2} \\
&= \mu(t)(\hat{v}_\xi, v_\xi(\cdot, t))_{L^2} + (\hat{v}_\xi, v_{\xi\xi}(\cdot, t) + v(\cdot, t)(1 - v(\cdot, t))(v(\cdot, t) - b))_{L^2}.
\end{aligned}$$

Umstellen nach $\mu(t)$ liefert dann

$$\mu(t) = - \frac{(\hat{v}_\xi, v_{\xi\xi}(\cdot, t) + v(\cdot, t)(1 - v(\cdot, t))(v(\cdot, t) - b))_{L^2}}{(\hat{v}_\xi, v_\xi(\cdot, t))_{L^2}}.$$

Daher ist (3.26) eine algebraische Nebenbedingung vom Differentiationsindex 2 (siehe dazu [Hai02]).

Wir werden nun eine mögliche Verallgemeinerung des Euler-Nørsett-Verfahren zum Lösen dieser partiellen Differentialgleichung mit einer algebraischen Nebenbedingung vorstellen. Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass es keine Konvergenztheorie für ein solches Verfahren gibt. Die numerischen Ergebnisse werden aber zeigen, dass ein solcher Ansatz sinnvoll sein kann. Sei $\Omega = [-10, 10]$. Ziel ist es das folgende Anfangsrandwertproblem mit einer algebraischen Nebenbedingung mit einer Verallgemeinerung des Euler-Nørsett-Verfahren zu lösen:

$$\begin{aligned} v_t(\xi, t) &= v_{\xi\xi}(\xi, t) + \mu(t)v_\xi(\xi, t) + v(\xi, t)(1 - v(\xi, t))(v(\xi, t) - b), \quad \xi \in \Omega, t \in [0, T] \\ v(\xi, 0) &= u_0(\xi), \quad \xi \in \Omega \\ v_\xi(-10, t) &= 0, \quad t \in [0, T] \\ v_\xi(10, t) &= 0, \quad t \in [0, T] \\ \mu(t) &= -\frac{(\hat{v}_\xi, v_{\xi\xi}(\cdot, t) + v(\cdot, t)(1 - v(\cdot, t))(v(\cdot, t) - b))_{L^2}}{(\hat{v}_\xi, v_\xi(\cdot, t))_{L^2}}, \quad t \in [0, T], \end{aligned}$$

wobei wir nun die Referenzfunktion $\hat{v} = u_0 \in L^2(\Omega)$ wählen mit u_0 wie in (3.22). Wir diskretisieren zunächst wieder im Raum. Dazu sei $M \in \mathbb{N}$, $\Delta x = \frac{20}{M}$ und $\xi_j = j\Delta x$ für $j = 0, \dots, M$ gegeben. Dann ist $-10 = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_{M-1} < \xi_M = 10$ einer Zerlegung von $\Omega = [-10, 10]$ in äquidistante Stützstellen. Wir führen den Operator $\delta_2 : \mathbb{R}^{M+1} \rightarrow \mathbb{R}^{M+1}$ für $w = (w_0, \dots, w_M)^T \in \mathbb{R}^{M+1}$ ein gemäß

$$(\delta_2 w)_j := \begin{cases} \frac{1}{\Delta x^2}(2w_1 - 2w_0), & j = 0 \\ \frac{1}{\Delta x^2}(w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1}), & 1 \leq j \leq M-1 \\ \frac{1}{\Delta x^2}(2w_{M-1} - 2w_M), & j = M. \end{cases}$$

Des Weiteren sei wieder $\delta_1 : \mathbb{R}^{M+1} \rightarrow \mathbb{R}^{M+1}$ für $w \in \mathbb{R}^{M+1}$ definiert durch

$$(\delta_1 w)_j := \begin{cases} 0, & j = 0 \\ \frac{1}{2\Delta x}(w_{j+1} - w_{j-1}), & 1 \leq j \leq M-1 \\ 0, & j = M. \end{cases}$$

Dann gilt für

$$w(t) := (v_0(t), \dots, v_M(t))^T$$

mit $v_j(t) = v(\xi_j, t)$ für $j = 0, \dots, M$, dass

$$v_{\xi\xi}(\xi_j, t) \approx (\delta_2 w(t))_j$$

und

$$v_\xi(\xi_j, t) \approx (\delta_1 w(t))_j,$$

wobei hier die Neumann-Randbedingungen ausgenutzt wurden. Wir benötigen nun noch eine Diskretisierung der inneren Produkte auf $L^2(\Omega)$. Sei $u, v \in L^2(\Omega)$. Dann gilt mit der Approximation der Trapezregel, dass

$$\begin{aligned} (u, v)_{L^2(\Omega)} &= \int_{\Omega} u(x)v(x)dx = \sum_{j=0}^{M-1} \int_{\xi_j}^{\xi_{j+1}} u(x)v(x)dx \\ &\approx \sum_{j=0}^{M-1} (\xi_{j+1} - \xi_j) \frac{u(\xi_j)v(\xi_j) + u(\xi_{j+1})v(\xi_{j+1})}{2} \\ &= \frac{\Delta x}{2} \sum_{j=0}^{M-1} (u(\xi_j)v(\xi_j) + u(\xi_{j+1})v(\xi_{j+1})) \\ &= \frac{\Delta x}{2} u(\xi_0)v(\xi_0) + \Delta x \sum_{j=0}^{M-1} u(\xi_j)v(\xi_j) + \frac{\Delta x}{2} u(\xi_M)v(\xi_M). \end{aligned}$$

Definieren wir für $u, v \in \mathbb{R}^{M+1}$ mit $u = (u_0, \dots, u_M)^T$, $v = (v_0, \dots, v_M)^T$:

$$(u, v)_{L^2, \Delta x} := \frac{\Delta x}{2} u_0 v_0 + \Delta x \sum_{j=0}^{M-1} u_j v_j + \frac{\Delta x}{2} u_M v_M.$$

Dann gilt für $\hat{w}_\xi := (\hat{v}_\xi(\xi_0), \dots, \hat{v}_\xi(\xi_M))^T$, dass

$$\begin{aligned} &(\hat{v}_\xi, v_{\xi\xi}(\cdot, t) + v(\cdot, t)(1 - v(\cdot, t))(v(\cdot, t) - b))_{L^2} \\ &\approx (\hat{w}_\xi, \delta_2 w(t) + w(t)(1 - w(t))(w(t) - b))_{L^2, \Delta x} \end{aligned}$$

sowie

$$(\hat{v}_\xi, v_\xi(\cdot, t))_{L^2} \approx (\hat{w}_\xi, \delta w(t))_{L^2, \Delta x}.$$

Setzen wir diese Approximationen in das Anfangsrandwertproblem ein, so erhalten wir das räumlich diskrete System

$$\begin{aligned} w'(t) &= A_{\Delta x} w(t) + \mu(t) \delta_1 w(t) + w(t)(1 - w(t))(w(t) - b), \quad t \in [0, T] \\ \mu(t) &= -\frac{(\hat{w}_\xi, \delta_2 w(t) + w(t)(1 - w(t))(w(t) - b))_{L^2, \Delta x}}{(\hat{w}_\xi, \delta_1 w(t))_{L^2, \Delta x}}, \quad t \in [0, T], \end{aligned}$$

mit $w(0) = (u_0(\xi_0), \dots, u_0(\xi_M))^T$, $\hat{w}_\xi = (\hat{v}_\xi(\xi_0), \dots, \hat{v}_\xi(\xi_M))^T$ und

$$A_{\Delta x} := \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 2 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M+1, M+1}.$$

Sei nun $N \in \mathbb{N}$ und eine zugehörige zeitliche Schrittweite $h = \frac{T}{N}$ gegeben. Wir definieren die zeitlichen Stützstellen $t_j = jh$ für $j = 0, \dots, N$. Eine mögliche Verallgemeinerung des Euler-Nørsett-Verfahrens zum Lösen dieses Problems ist die folgende Iterationsvorschrift für $w_j = w(t_j)$ und $\mu_j = \mu(t_j)$:

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= \varphi_0(hA_{\Delta x})w_n + h\varphi_1(hA_{\Delta x})(\mu_n\delta_1w_n + w_n(1 - w_n)(w_n - b)), \\ \mu_{n+1} &= -\frac{(\hat{w}_\xi, \delta_2w_{n+1} + w_{n+1}(1 - w_{n+1})(w_{n+1} - b))_{L^2, \Delta x}}{(\hat{w}_\xi, \delta_1w_{n+1})_{L^2, \Delta x}} \end{aligned}$$

für $n = 0, \dots, N - 1$, wobei

$$\mu_0 = -\frac{(\hat{w}_\xi, \delta_2w_0 + w_0(1 - w_0)(w_0 - b))_{L^2, \Delta x}}{(\hat{w}_\xi, \delta_1w_0)_{L^2, \Delta x}}.$$

Dabei werden die Operatoren $\varphi_0(hA_{\Delta x})$ und $\varphi_1(hA_{\Delta x})$ mit Hilfe der Quadratur für die inverse Laplacetransformation wie in Abschnitt 3.2 berechnet. Dieses verallgemeinerte Euler-Nørsett-Verfahren zum Lösen einer partiellen Differentialgleichung mit einer algebraischen Nebenbedingung führt also einen Eulerschritt durch, wobei der neue Advektionsterm, der durch das Einfrieren entsteht, in die Inhomogenität eingeht. Dabei wird μ schrittweise konstant gelassen, d.h. es wird der Wert aus dem vorherigen Schritt für μ benutzt. Danach wird der neue Wert für μ durch die Lösung des Euler-Schritts und der algebraischen Nebenbedingung berechnet.

Die Lösung des verallgemeinerten Euler-Nørsett-Verfahrens für die Nagumo-Gleichung zu Schrittweiten $\Delta x = 0,001$ und $h = 0,001$ mit $T = 30$ ist in Abbildung 3.9 geplottet.

Wir sehen, dass wir eine stehende Wellenfront in dem mitbewegten Koordinatensystem erhalten. Diese Wellenfront bewegt sich im ursprünglichen Koordinatensystem mit der Geschwindigkeit μ , welche in Abbildung 3.8 (c) gegen die Zeit aufgetragen ist. Das Anfangsprofil u_0 konvergiert gegen das Profil des relativen Gleichgewichts v_* . Die Geschwindigkeit μ konvergiert gegen die Geschwindigkeit des relativen Gleichgewichts μ_* . Dies sind beides Indikatoren für die Stabilität des relativen Gleichgewichts. Zusammenfassend kann man sagen, dass unsere Verallgemeinerung des Euler-Nørsett-Verfahrens sinnvoll ist. Es ist also von Interesse, ob man eine solche Verallgemeinerung der exponentiellen Integratoren mathematisch rechtfertigen kann und eine entsprechende Konvergenztheorie erarbeiten kann. Dies würde es erlauben, weitere Wellenphänomene und ihre Stabilität von relativen Gleichgewichten numerisch zu untersuchen.

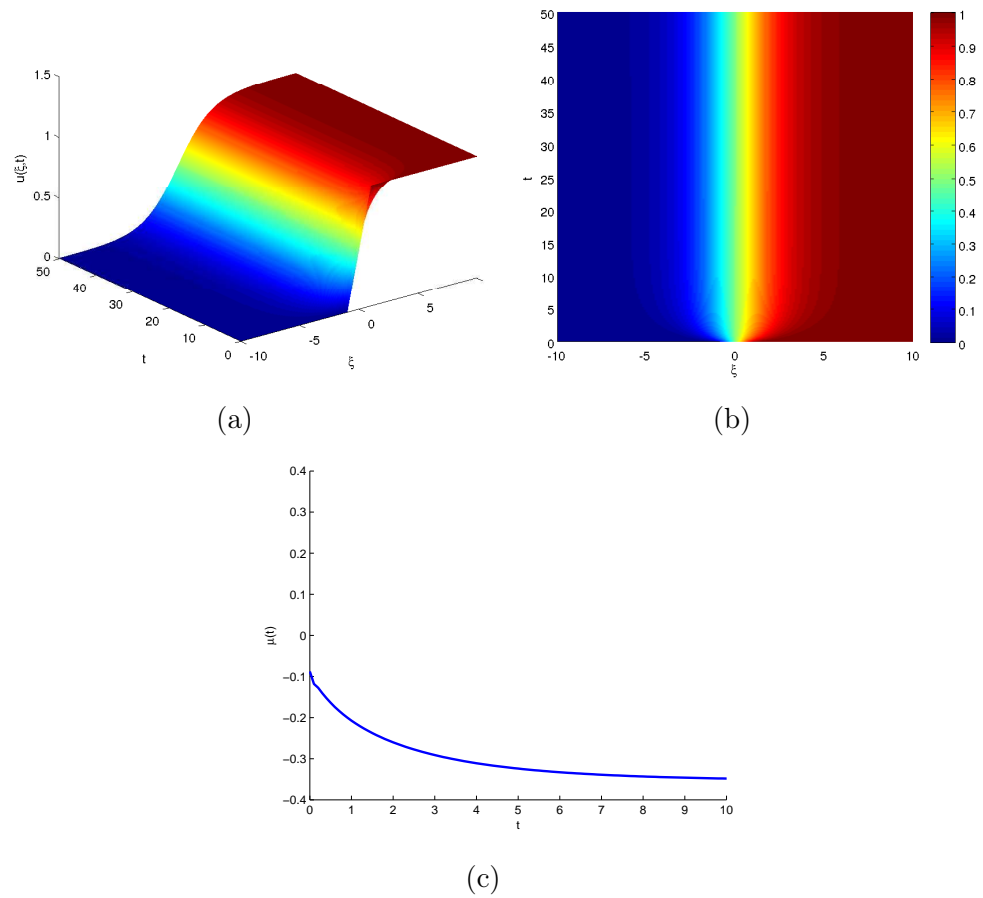


Abbildung 3.9: (a),(b): Numerische Lösung der eingefrorenen Nagumo-Gleichung 3.21 des Euler-Nørsett-Verfahrens mit Schrittweiten $\Delta x = h = 0,001$. (c): Geschwindigkeit μ der wandernden Welle für die eingefrorene Nagumo-Gleichung.

Fazit

Wir haben in dieser Arbeit numerische Methoden zum Lösen semilinear parabolischer Evolutionsgleichungen untersucht. Dies waren die exponentiellen Integratoren, die sowohl Ein- als auch Mehrschrittverfahren sein können. Unser Augenmerk lag dabei besonders auf dem Euler-Nørsett-Verfahren, das das einfachste Beispiel eines exponentiellen Integrators darstellt. Wir haben die Einschrittverfahren nach [HO06] mit Hilfe der Variation der Konstanten Formel hergeleitet. Wir haben auch Mehrschrittverfahren aus [CP06] konstruiert. Dabei war die Grundidee für beide Klassen der Verfahren gleicher Natur. Die Schwierigkeit der exponentiellen Integratoren war, dass wir für die auftretenden Operatoren im abstrakten Cauchy-Problem das Operatorexponential definieren mussten. Dabei sind wir den Ergebnissen aus [Hen81] gefolgt und haben die Begriffe des sektoriellen Operators und der analytischen Halbgruppe eingeführt. Für diese Klasse von Operatoren war es uns möglich das Operatorexponential über Konturintegrale zu definieren. Eine weitere Schwierigkeit war es, dass in den exponentiellen Integratoren Koeffizientenabbildungen $\varphi_j(hA)$ und $\psi_j(hA)$ auftreten, die das Operatorexponential enthalten. Wir haben eine Methode aus [LF10] vorgestellt, um diese Abbildungen mit Hilfe der Laplacetransformation bzw. deren Rücktransformation über Konturintegrale darzustellen. Diese Konturintegrale können dann nach Parametrisierung mit Hilfe einer Quadratur numerisch gelöst werden. Damit war es uns möglich, die exponentiellen Integratoren numerisch zu realisieren.

Für die Quadratur inverser Laplacetransformationen haben wir Fehlerabschätzungen aus [LFPS06] und [LFP04] bewiesen und diese auf die Quadraturapproximationen für die exponentiellen Integratoren angewandt. Dabei haben wir speziell eine Hyperbel als Kontur gewählt und ihre geometrische Struktur ausgenutzt. Außerdem haben wir eine Fehleranalyse für das Euler-Nørsett-Verfahren durchgeführt. Dabei haben wir gezeigt, dass dieses die Konvergenzordnung 1 besitzt, wobei wir die Quadraturapproximation zunächst nicht berücksichtigt haben. Zum Ende des 2. Kapitels haben wir

dann einen Konvergenzbeweis für das Euler-Nørsett-Verfahren durchgeführt. Wir mussten eine Stabilitätsaussage für die Quadraturapproximationen annehmen, um die Konvergenz zu zeigen. Dies wurde in der Literatur noch nicht betrachtet. Die Stabilitätsaussage ist weiterhin offen, da sich ein Beweis als sehr komplex darstellt.

Zum Abschluss dieser Arbeit haben wir numerische Experimente zu den Ergebnissen aus den vorherigen Kapiteln durchgeführt. Dabei haben wir den Fehler der Quadraturapproximation an einem skalaren Beispiel behandelt und die Konvergenz der exponentiellen Integratoren an einer Reaktions-Diffusions-Gleichung numerisch verifiziert. Wir interessierten uns dann für Wellenlösungen in parabolischen äquivarianten Evolutionsgleichungen. Wir haben die Nagumo-Gleichung, welche eine wandernde Wellenlösung besitzt, numerisch mit dem Euler-Nørsett-Verfahren gelöst. Die Ergebnisse haben uns veranlasst, das System der Nagumo-Gleichung einzufrieren, was uns auf ein System einer partiellen Differentialgleichung mit einer algebraischen Nebenbedingung geführt hat. Für dieses System haben wir das Euler-Nørsett-Verfahren verallgemeinert, für das es bisher noch keine Konvergenztheorie gibt. Dabei haben wir eine Indexreduktion durchgeführt, um eine explizite Darstellung der zeitabhängigen Wellengeschwindigkeit zu erhalten. Die numerischen Lösungen lassen vermuten, dass ein solcher Ansatz sinnvoll ist.

Es ist interessant, ob eine Verallgemeinerung der exponentiellen Integratoren für partielle Differentialgleichungen mit algebraischen Nebenbedingungen möglich ist. Genauer stellt sich die Frage, ob eine Konvergenztheorie für Probleme dieser Art entwickelt werden kann. Damit könnten andere Wellenphänomene in äquivarianten Evolutionsgleichungen mit Hilfe der Einfriermethode gelöst und untersucht werden. Es wäre besonders interessant, die Stabilitätsfrage von relativen Gleichgewichten mit Hilfe der exponentiellen Integratoren numerisch zu untersuchen.

Eine weiteres offenes Problem ist es, ob man die Konvergenz des Euler-Nørsett-Verfahren mit Berücksichtigung der Quadratur vollständig beweisen kann. D.h. lässt sich die Stabilitätsaussage für die Quadraturapproximationen beweisen?

Anhang A

Hilfsmittel der Funktionentheorie

Wir werden die klassischen funktionentheoretischen Ergebnisse aus [FL08], [FL10] und [Rem02] für \mathbb{C} -wertige Funktionen auf Banachraum-wertige Funktionen verallgemeinern und folgen [Are01, Appendix A].

Sei X ein Banachraum und $\Omega \subset \mathbb{C}$ eine offene Teilmenge. Eine Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ heißt **holomorph**, falls

$$f'(z_0) = \lim_{h \rightarrow 0, h \in \mathbb{C} \setminus \{0\}} \frac{f(z_0 + h) - f(z_0)}{h}$$

existiert für alle $z_0 \in \Omega$.

Falls f holomorph ist, so ist f stetig und **schwach holomorph**, d.h. $x^* \circ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ ist holomorph im Sinne von [FL08] für alle $x^* \in X^*$, wobei X^* der Dualraum von X ist. Weiter gilt wegen der Linearität der dualen Paarung, dass

$$\left\langle \int_{\Gamma} f(z) dz, x^* \right\rangle = \int_{\Gamma} \langle f(z), x^* \rangle dz.$$

Damit lassen sich die klassischen Ergebnisse aus [FL08] und [FL10] auf Banachraum-wertige Funktionen verallgemeinern. Wir werden nun einige wichtige Hilfsmittel aus [FL08] und [FL10] auf diesen Fall verallgemeinert aufführen. Für Details und Beweise verweisen wir auf [Are01, Appendix A], [FL08] und [FL10].

Proposition A.1. *(siehe [Are01, A.1])*

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph. Ferner sei $z_0 \in \Omega$ und $r > 0$, sodass $\overline{B(z_0, r)} \subset \Omega$. Dann ist

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n,$$

wobei die Reihe absolut konvergiert für $|z - z_0| < r$. Dabei ist

$$a_n := \int_{B(z_0, r)} \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz.$$

Satz A.2. (Cauchyscher Integralsatz, siehe [FL08, S.71, Satz 1.2])
Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ ein konvexes Gebiet und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph. Dann gilt für jeden geschlossenen Integrationsweg Γ in Ω , dass

$$\int_{\Gamma} f(z) dz = 0.$$

Folgerung A.3. (siehe [FL10, S.56])
Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ ein konvexes Gebiet und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph und stetig auf $\overline{\Omega}$. Dann gilt

$$\int_{\partial\Omega} f(z) dz = 0.$$

Satz A.4. (Cauchysche Integralformel, siehe [FL08, S. 67, Satz 3.3])
Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph. Weiter sei $\overline{G} \subset \Omega$ ein Gebiet. Dann gilt für jedes $z \in G$, dass

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial G} \frac{f(\zeta)}{\zeta - z} d\zeta.$$

Definition A.5. (Umlaufzahl, siehe [FL08, S.114, Def. 1.2])
Es sei Γ ein Zyklus und $z \in \mathbb{C} \setminus \Gamma$. Dann ist die Umlaufzahl von Γ bezüglich z gegeben durch

$$n(\Gamma, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{1}{\zeta - z} d\zeta.$$

Definition A.6. (nullhomologer Zyklus, siehe [FL08, S.117, Def. 2.1])
Ein Zyklus Γ in einer offenen Menge $\Omega \subset \mathbb{C}$ heißt nullhomolog in Ω , wenn für jeden Punkt $z \in \mathbb{C} \setminus \Omega$ die Umlaufzahl

$$n(\Gamma, z) = 0$$

ist.

Definition A.7. (Residuum, siehe [FL08, S.161, Def. 4.1])
Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph bis auf isolierte Singularitäten. Dann ist das Residuum von f in $z \in \Omega$ definiert durch

$$\operatorname{res}_z f = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial B(z, r)} f(\zeta) d\zeta,$$

wobei $r > 0$ so zu wählen ist, dass höchstens z eine Singularität von f in $\overline{B(z, r)}$ ist.

Satz A.8. (Residuensatz, siehe [FL08, S.162, Satz 4.1])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow X$ holomorph bis auf isolierte Singularitäten. Dann gilt für jeden nullhomologen Zyklus Γ in Ω , auf dessen Spur keine Singularität liegt, dass

$$\int_{\Gamma} f(\zeta) d\zeta = 2\pi i \sum_{z \in \Omega} n(\Gamma, z) \operatorname{res}_z f.$$

Lemma A.9. (siehe [FL08, S.164])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $g : \Omega \rightarrow X$ holomorph, sowie $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ holomorph bis auf isolierte Singularitäten.

i) Besitzt f einen Pol in $z_0 \in \Omega$, so gilt

$$\operatorname{res}_{z_0}(gf) = g(z_0) \operatorname{res}_{z_0} f.$$

ii) Besitzt f eine einfache Nullstelle in $z_0 \in \Omega$, so gilt

$$\operatorname{res}_{z_0} \frac{g}{f} = \frac{g(z_0)}{f'(z_0)}.$$

Satz A.10. (Holomorphie von Integralen, siehe [Rem02, Satz 8.2.3])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und Γ eine endliche Kontur in Ω . Weiter sei $g : \Gamma \times \Omega \rightarrow X$ stetig und für jedes $\lambda \in \Gamma$ sei die Funktion $g(\lambda, \cdot)$ holomorph in Ω . Dann ist

$$f(z) := \int_{\Gamma} g(\lambda, z) d\lambda$$

holomorph für jedes $z \in \Omega$.

Satz A.11. (Identitätssatz holomorpher Funktionen, siehe [Are01, Prop. A.2])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und zusammenhängend. Weiter seien $f, g : \Omega \rightarrow X$ holomorph. Wenn es eine Folge $(z_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \Omega$ mit $\lim_{k \rightarrow \infty} z_k \in \Omega$ und $f(z_k) = g(z_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ gibt, dann gilt $f(z) = g(z)$ für alle $z \in \Omega$.

Satz A.12. (Satz von Vitali, siehe [Are01, Theorem A.5])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und zusammenhängend. Weiter sei $f_k : \Omega \rightarrow X$ holomorph für alle $k \in \mathbb{N}$ mit

$$\sup_{k \in \mathbb{N}, z \in B(z_0, r)} \|f_k(z)\|_X < \infty$$

für jeden Ball $\overline{B(z_0, r)} \subset \Omega$. Wenn

$$\Omega_0 := \left\{ z \in \Omega : \lim_{k \rightarrow \infty} f_k(z) \text{ existiert} \right\}$$

einen Häufungspunkt in Ω besitzt, so existiert eine holomorphe Funktion $f : \Omega \rightarrow X$ mit

$$f^{(n)}(z) = \lim_{k \rightarrow \infty} f_k^{(n)}(z)$$

für alle $n \in \mathbb{N}_0$ gleichmäßig auf allen kompakten Teilmengen von Ω .

Definition A.13. (Stammfunktion, siehe [FL08, Def. 2.1])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ eine stetige Funktion. Dann heißt eine Funktion $F : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ **Stammfunktion** von f , falls F holomorph ist und $F' = f$ gilt.

Satz A.14. (siehe [FL08, Satz 2.2])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ holomorph. Dann besitzt f eine Stammfunktion auf Ω .

Satz A.15. (Wegunabhängigkeit komplexer Wegintegrale, siehe [FL08, Satz 2.1])

Sei $\Omega \subset \mathbb{C}$ offen und $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ stetig mit Stammfunktion F . Dann gilt für jeden Integrationsweg Γ in Ω , der $a \in \mathbb{C}$ mit $b \in \mathbb{C}$ verbindet, dass

$$\int_{\Gamma} f(z) dz = F(b) - F(a),$$

d.h. das Integral ist unabhängig vom Verlauf des Integrationsweges und hängt lediglich von seinen Endpunkten ab.

Anhang B

Weitere Hilfsmittel

Wir werden nun einige wichtige Eigenschaften der Laplacetransformation aus [Are01] und [Doe70] zitieren.

Satz B.1. (siehe [Are01, Theorem 1.5.1])

Sei $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}_+, X)$ mit $\text{abs}(f) < \infty$. Dann ist $\lambda \mapsto \hat{f}(\lambda)$ holomorph für alle $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re } \lambda > \text{abs}(f)$ und es gilt

$$\hat{f}^{(n)}(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda} (-t)^n f(t) dt$$

für alle $n \in \mathbb{N}_0$.

Definition B.2. (Faltung)

Seien $f : \mathbb{R} \rightarrow X$ und $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ messbar. Dann heißt

$$(g * f)(t) := \int_0^t g(t-s)f(s) ds$$

die Faltung von g mit f , falls das (Bochner-) Integral existiert.

Lemma B.3. Ist $g \in L^1(\mathbb{R})$ und $f \in L^1(\mathbb{R}, X)$, so existiert die Faltung von g mit f fast überall.

Satz B.4. (Faltungssatz, siehe [Are01, Prop. 1.6.4])

Sei $g \in L^1_{loc}(\mathbb{R}_+, \mathbb{R})$ und $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}_+, X)$. Dann existiert $\mathcal{L}[g * f](\lambda)$ für alle $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $\text{Re } \lambda > \max(\text{abs}(|g|), \text{abs}(f))$ und es gilt

$$\mathcal{L}[g * f](\lambda) = \mathcal{L}[g](\lambda)\mathcal{L}[f](\lambda).$$

Lemma B.5. (Verschiebungslemma)

Sei $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}_+, X)$ mit $\text{abs}(f) < \infty$. Ferner sei $g(t) := e^{at} f(t)$ für alle $t \geq 0$ und ein $a \in \mathbb{R}$. Dann gilt

$$\hat{g}(\lambda) = \hat{f}(\lambda - a)$$

für alle $\lambda > \text{abs}(f) + a$.

Beweis. Die Behauptung folgt aus

$$\hat{g}(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda t} e^{at} f(t) dt = \int_0^\infty e^{-(\lambda-a)t} f(t) dt = \hat{f}(\lambda - a)$$

für alle $\lambda > \text{abs}(f) + a$. □

Der folgende Satz gibt eine weitere komplexe Umkehrformel der Laplacetransformation an. Diesen Satz zitieren wir in einer einfacheren Version. Vergleiche dazu [Doe70, Satz 24.4].

Satz B.6. (*komplexe Umkehrformel für vertikale Konturen*)

Sei $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}_+, X)$ stetig und das Laplaceintegral konvergiere absolut für alle $z > \omega$, d.h.

$$\int_0^\infty e^{-zt} \|f(t)\|_X dt < \infty$$

für alle $z > \omega$. Dann gilt für jedes $t > 0$, wo f in einer Umgebung von beschränkter Variation ist, dass

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{tz} \mathcal{L}[f](z) dz$$

für alle $c > \omega$.

Wir beweisen nun, dass die Kontur in der inversen Laplacetransformation aus Satz 1.3.5 auf bestimmte Art deformiert werden kann.

Lemma B.7. (*Deformation der Kontur für die inverse Laplacetransformation*)

Sei $U : S_{\tilde{\omega}, \alpha + \frac{\pi}{2}} \rightarrow X$ holomorph und sektoriell mit $\mu > 0$ für ein $\tilde{\omega} \in \mathbb{R}$ und $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$.

i) Weiter seien $0 \leq \tilde{\gamma} < \gamma < \alpha$, $\omega \geq \tilde{\omega}$ und zwei Konturen $\Gamma, \tilde{\Gamma}$ in $S_{\tilde{\omega}, \alpha + \frac{\pi}{2}}$ gegeben mit

$$\arg(\lambda - \omega) \rightarrow \pm \left(\gamma + \frac{\pi}{2} \right) \quad \text{für } |\lambda| \rightarrow \infty, \lambda \in \Gamma$$

und

$$\arg(\lambda - \omega) \rightarrow \pm \left(\tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2} \right) \quad \text{für } |\lambda| \rightarrow \infty, \lambda \in \tilde{\Gamma}.$$

Dann gilt

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

für alle $z \in S_{\tilde{\gamma}}$, falls $\tilde{\gamma} > 0$. Im Fall $\tilde{\gamma} = 0$ gilt dies für alle $z \in \mathbb{R}_+$.

ii) Sei $\gamma = 0$ und die Kontur Γ wie in i). Dann gilt für alle $c > 0$ und $z \in \mathbb{R}_+$, dass

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{c+\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda.$$

Insbesondere gilt für alle $c > \tilde{\omega}$, dass

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda.$$

Beweis. i) Wegen der Wegunabhängigkeit komplexer Wegintegrale in Satz A.14 und A.15 sei O.b.d.A für $0 < \delta < 1$

$$\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_+ \cup \Gamma_- \quad \text{und} \quad \tilde{\Gamma} = \tilde{\Gamma}_0 \cup \tilde{\Gamma}_+ \cup \tilde{\Gamma}_-$$

mit

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &:= \left\{ \omega + \delta e^{i\theta}, -\gamma - \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \gamma + \frac{\pi}{2} \right\}, \\ \tilde{\Gamma}_0 &:= \left\{ \omega + \delta e^{i\theta}, -\tilde{\gamma} - \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2} \right\}, \\ \Gamma_{\pm} &:= \left\{ \omega + \tau e^{\pm i(\gamma + \frac{\pi}{2})}, \delta \leq \tau \right\}, \\ \tilde{\Gamma}_{\pm} &:= \left\{ \omega + \tau e^{\pm i(\tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2})}, \delta \leq \tau \right\}. \end{aligned}$$

Dabei seien die Konturen $\Gamma, \tilde{\Gamma}$ so orientiert, dass sie von unten nach oben verlaufen. Wir definieren für $k \in \mathbb{N}$ die endlichen Konturen

$$\Gamma_k := \Gamma \cap B_k(\omega) \quad \text{und} \quad \tilde{\Gamma}_k := \tilde{\Gamma} \cap B_k(\omega),$$

sowie

$$\begin{aligned} \gamma_k^+ &:= \left\{ \omega + k e^{i\theta}, \tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \gamma + \frac{\pi}{2} \right\}, \\ \gamma_k^- &:= \left\{ \omega + k e^{i\theta}, -\gamma - \frac{\pi}{2} \leq \theta \leq -\tilde{\gamma} - \frac{\pi}{2} \right\}, \end{aligned}$$

wobei γ_k^+ gegen den Uhrzeigersinn und γ_k^- mit dem Uhrzeigersinn verlaufe. Dann gilt mit dem Cauchyschen Integralsatz A.2

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_k} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda + \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_k^-} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}_k} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda + \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_k^+} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \end{aligned}$$

für alle $z \in S_{\tilde{\gamma}}$ bzw. $z \in \mathbb{R}_+$. Nun gilt, da $\gamma + \tilde{\gamma} < \pi$, $|\arg z| < \gamma$ und $\sin \theta \geq \frac{2}{\pi}\theta$ für $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{aligned}
\left\| \int_{\gamma_k^+} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X &= \left\| \int_{\tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2}}^{\gamma + \frac{\pi}{2}} e^{z\omega + zke^{i\theta}} U(\omega + ke^{i\theta}) d\theta \right\|_X \\
&\leq \frac{M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} k \int_{\tilde{\gamma} + \frac{\pi}{2}}^{\gamma + \frac{\pi}{2}} e^{k|z| \cos(\arg z + \theta)} d\theta \\
&= \frac{M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} k \int_{\tilde{\gamma}}^{\gamma} e^{-k|z| \sin(\arg z + \theta)} d\theta \\
&= \frac{M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} k \int_{\tilde{\gamma} - \arg z}^{\gamma - \arg z} e^{-k|z| \sin \theta} d\theta \\
&\leq \frac{M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} k \int_0^\pi e^{-k|z| \sin \theta} d\theta \\
&\leq \frac{2M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} k \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-k|z| \frac{2}{\pi} \theta} d\theta \\
&= \frac{2M}{k^\mu} e^{\omega \operatorname{Re} z} \frac{1 - e^{-k|z|}}{2|z|\pi^{-1}} \longrightarrow 0 \quad \text{für } k \longrightarrow \infty.
\end{aligned}$$

Ebenso zeigt man, dass

$$\left\| \int_{\gamma_k^-} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X \longrightarrow \infty \quad \text{für } k \longrightarrow \infty.$$

Damit erhalten wir im Grenzwert für $k \longrightarrow \infty$

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{\Gamma}} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

für alle $z \in S_{\tilde{\gamma}}$ bzw. $z \in \mathbb{R}_+$.

- ii) Sei nun $z \in \mathbb{R}_+$, $\gamma = 0$ und Γ wie im Beweis von i) definiert. Wir definieren jedoch nun $\Gamma_k := \Gamma \cap D_k$ für $k \in \mathbb{N}$, wobei $D_k := \{z \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im} z| \leq k\}$. Ferner sie

$$\begin{aligned}
\gamma_k^+ &:= \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Im} z = k, \omega \leq \operatorname{Re} z \leq \omega + c\}, \\
\gamma_k^- &:= \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Im} z = -k, \omega \leq \operatorname{Re} z \leq \omega + c\}.
\end{aligned}$$

Dabei laufen die Konturen γ_k^+ und γ_k^- von links nach rechts. Dann gilt

mit dem Cauchyschen Integralsatz A.2

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_k} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda + \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_k^+} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c+\Gamma_k} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda + \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_k^-} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \left\| \int_{\gamma_k^+} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X &= \left\| \int_{\omega}^{c+\omega} e^{z(\tau+ik)} U(\tau+ik) d\tau \right\|_X \\ &\leq \frac{M}{k^\mu} \int_{\omega}^{c+\omega} e^{z\tau} d\tau \\ &\leq \frac{M}{k^\mu} c e^{z(c+\omega)} \longrightarrow 0 \quad \text{für } k \longrightarrow \infty. \end{aligned}$$

Ebenso zeigt man, dass

$$\left\| \int_{\gamma_k^-} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda \right\|_X \longrightarrow \infty \quad \text{für } k \longrightarrow \infty.$$

Damit erhalten wir im Grenzwert für $k \longrightarrow \infty$

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{c+\Gamma} e^{\lambda z} U(\lambda) d\lambda$$

für alle $z \in \mathbb{R}_+$. □

Ferner benötigen wir den Satz von Fubini für (Bochner-) integrierbare Funktionen. Diesen zitieren wir aus [Are01].

Satz B.8. (Satz von Fubini, siehe [Are01, Theorem 1.1.9])

Sei $I = I_1 \times I_2 \subset \mathbb{R}^2$ und $f : I \rightarrow X$ messbar mit

$$\int_{I_1} \int_{I_2} \|f(t, s)\|_X dt ds < \infty.$$

dann ist f (Bochner-) integrierbar. Ferner existieren die folgenden Integrale und es gilt

$$\int_{I_1} \int_{I_2} f(t, s) dt ds = \int_I f(t, s) d(t, s) = \int_{I_2} \int_{I_1} f(t, s) ds dt.$$

Wir werden eine Abschätzung für die modifizierte Besselfunktion zweiter Ordnung aus [Olv10, 10.32] beweisen.

Lemma B.9. *Sei $\eta > 0$. Dann gilt*

$$K_1(\eta) = \int_0^\infty e^{-\eta \cosh t} \cosh t dt \leq \frac{1}{\eta}.$$

Beweis. Nach [Olv10, 10.32.9] und [Olv10, 10.32.11] gilt für alle $\eta > 0$, dass

$$\begin{aligned} K_1(\eta) &= \int_0^\infty e^{-\eta \cosh t} \cosh t dt \\ &= \frac{2\Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\eta} \int_0^\infty \frac{\cos(\eta t)}{(t^2 + 1)^{\frac{3}{2}}} dt \\ &\leq \frac{2\Gamma\left(1 + \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\eta} \int_0^\infty \frac{1}{(t^2 + 1)^{\frac{3}{2}}} dt \\ &= \frac{1}{\eta} \int_0^\infty \frac{1}{(t^2 + 1)^{\frac{3}{2}}} dt \\ &= \frac{1}{\eta}. \end{aligned}$$

□

Wir stellen nun einige Ergebnisse aus der Operatortheorie vor. Im Folgenden sei H ein Hilbertraum.

Definition B.10. (Orthonormalsystem, siehe [Alt06, S.304])

Eine Folge $(e_k)_{k \in N} \subset H$ mit $N \subset \mathbb{N}$ heißt Orthonormalsystem, falls

$$(e_k, e_l)_H = \delta_{k,l}$$

für alle $k, l \in N$.

Lemma B.11. (*Besselsche Ungleichung, siehe [Alt06, S.304]*)

Sei $(e_k)_{k=1, \dots, n} \subset H$ ein endliches Orthonormalsystem von H . Dann gilt für jedes $u \in H$, dass

$$\sum_{k=1}^n |(u, e_k)_H|^2 \leq \|u\|_H^2.$$

Definition B.12. (Orthonormalbasis, siehe [Alt06, S.305])

Sei $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ ein Orthonormalsystem von H . Dann heißt $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ Orthonormalbasis oder vollständiges Orthonormalsystem von H , falls eine der folgenden äquivalenten Eigenschaften erfüllt ist:

i) $\text{span}\{e_k : k \in \mathbb{N}\}$ liegt dicht in H .

ii) Für alle $u \in H$ gilt

$$u = \sum_{k=1}^{\infty} (e_k, u)_H e_k.$$

iii) Für alle $u \in H$ gilt die **Parsevalsche Identität**:

$$\|u\|_H^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |(u, e_k)|^2.$$

Satz B.13. (Spektralsatz, siehe [Ott09, A.31])

Sei $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow H$ ein linearer symmetrischer Operator mit $\mathcal{R}(A) = H$.

Weiter sei A invertierbar mit kompaktem Inversen. Dann gilt:

i) Es gibt eine abzählbar unendliche Menge $\{\lambda_k : k \in \mathbb{N}\}$ reeller Eigenwerte von A . Sind die Eigenwerte gemäß $|\lambda_{k+1}| \geq |\lambda_k|$ angeordnet, so gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |\lambda_k| = \infty.$$

ii) Die zugehörigen Eigenfunktionen $\{e_k : k \in \mathbb{N}\}$ können so gewählt werden, dass sie eine Orthonormalbasis von $\mathcal{R}(A) = H$ bilden und es gilt für alle $u \in \mathcal{D}(A)$, dass

$$Au = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (u, e_k)_H e_k.$$

Zuletzt werden wir einige Identitäten für Trigonometrische- und Hyperbelfunktionen aus [Olv10] auflisten:

Lemma B.14. (Additionstheoreme)

Es gelten die folgenden Identitäten für $x, y \in \mathbb{R}$, $z \in \mathbb{C}$:

i) $\cos^2 x + \sin^2 x = 1$

ii) $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$

iii) $\cos(x + iy) = \cos x \cosh y - i \sin x \sinh y$

iv) $\sin(x + iy) = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y$

v) $\cot z = \frac{\sin(2 \operatorname{Re} z) - i \sinh(2 \operatorname{Im} z)}{\cosh(2 \operatorname{Im} z) - \cos(2 \operatorname{Re} z)}$

Nomenclature

- $(\cdot, \cdot)_H$ inneres Produkt auf H
- $\text{abs}(u)$ Konvergenzabzisse von u
- $\arg z$ komplexes Argument von z
- \mathbb{C} komplexe Zahlen
- \mathbb{C}_+ komplexe Zahlen mit echt positiven Realteil
- $\mathcal{D}(A)$ Definitionsbereich von A
- Γ Kontur in \mathbb{C}
- \hat{u} Laplacetransformation von u
- $\text{hol}(u)$ Holomorphieabzisse von u
- $\mathcal{L}[u]$ Laplacetransformation von u
- $\mathcal{L}^{-1}[U]$ inverse Laplacetransformation von U
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$ duale Paarung
- \mathbb{N} natürliche Zahlen ohne 0
- \mathbb{N}_0 natürliche Zahlen mit 0
- $\omega(u)$ exponentielle Beschränktheitsabzisse von u
- \mathbb{R} reelle Zahlen
- \mathbb{R}_+ echt positive reelle Zahlen
- $\mathcal{R}(A)$ Bild von A
- $\text{Re } \sigma(A)$ $\max_{\lambda \in \sigma(A)} \text{Re } \lambda$

$\rho(A)$ Resolventenmenge von A

$\sigma(A)$ Spektrum von A

Σ_δ $\Sigma_{0,\delta}$

$\Sigma_{a,\delta}$ Sektor mit Winkel δ verankert bei a

$\tilde{\Delta}$ standard Vorwärtsdifferenzenoperator

\tilde{A} $(-A + \omega I)$ für $\omega > \operatorname{Re} \sigma(A)$

$f * g$ Faltung von f und g

H^k, H_0^k Sobolev-Raum, [Alt06, Kap.1]

L_{loc}^1 Lebesgue-Raum der lokal integrierbaren Funktionen

L^2 Lebesgue-Raum der quadratintegrierbaren Funktionen, [Alt06, Kap.1]

$P_{n,k-1}$ Interpolationspolynom vom Grad $k - 1$

$S_{a,\delta}$ nach rechts geöffneter Sektor

X Banachraum

X_α $\mathcal{D}(\tilde{A}^\alpha)$

Literaturverzeichnis

- [Alt06] H. W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis : eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer, Berlin [u.a.], 5., überarb. Aufl. edition, 2006.
- [Are01] W. Arendt, editor. *Vector valued Laplace transforms and Cauchy problems*, volume 96 of *Monographs in mathematics ; 96*. Birkhäuser, Basel [u.a.], 2001.
- [BT09] W. J. Beyn and V. Thümmler. Dynamics of patterns in nonlinear equivariant pdes. *MITTEILUNGEN- GESELLSCHAFT FÜR ANGEWANDTE MATHEMATIK UND MECHANIK*, 2009, 32, 1, 7, 2009.
- [CP06] M.P. Calvo and C. Palencia. A class of explicit multistep exponential integrators for semilinear problems. *Numerische Mathematik*, 2006, 102, 3, 367, 2006.
- [Die10] S. Dieckmann. *Exponentielle Integratoren, Diplomarbeit*. Universität Bielefeld, 2010.
- [Doe70] Gustav Doetsch. *Einführung in Theorie und Anwendung der Laplace-Transformation : ein Lehrbuch für Studierende der Mathematik, Physik und Ingenieurwissenschaft*, volume 24 of *Lehrbücher und Monographien aus dem Gebiete der exakten Wissenschaften : Mathematische Reihe ; 24*. Birkhäuser, Basel [u.a.], 2., neubearb. und erw. Aufl. edition, 1970.
- [FL08] W. Fischer and I. Lieb. *Funktionentheorie : komplexe Analysis in einer Veränderlichen*. Studium. Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 9., korr. Aufl., korr. Nachdr. edition, 2008.
- [FL10] W. Fischer and I. Lieb. *Einführung in die komplexe Analysis : Elemente der Funktionentheorie*. Bachelorkurs Mathematik. Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 1. Aufl. edition, 2010.

- [Hai02] Ernst Hairer. *Stiff and differential algebraic problems*, volume 14 of *Springer series in computational mathematics ; 14*. 2. rev. ed., corr. 2. print. edition, 2002.
- [Hen81] D. Henry. *Geometric theory of semilinear parabolic equations*, volume 840 of *Lecture notes in mathematics ; 840*. Springer, Berlin [u.a.], 1981.
- [HO06] M. Hochbruck and A. Ostermann. Explicit exponential runge-kutta methods for semilinear parabolic problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2006, 43, 3, 1069, 2006.
- [LF10] M. López-Fernández. A quadrature based method for evaluating exponential-type functions for exponential methods. *BIT : numerical mathematics*, 2010, 50, 3, 631, 2010.
- [LFP04] M. López-Fernández and C. Palencia. On the numerical inversion of the laplace transform of certain holomorphic mappings. *Applied Numerical Mathematics*, 2004, 51, 2, 289, 2004.
- [LFPS06] M. López-Fernández, C. Palencia, and A. Schädle. A spectral order method for inverting sectorial laplace transforms. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2006, 44, 3, 1332, 2006.
- [Mar68] E. Martensen. *Zur numerischen Auswertung uneigenschaftlicher Integrale*. 1968.
- [Olv10] F. W. J. Olver. *NIST handbook of mathematical functions*. National Inst. of Standards and Techn. [u.a.], Gaithersburg, Md.[u.a.], 2010.
- [Ott09] D. Otten. *Attraktoren für Finite-Elemente-Diskretisierungen parabolischer Differentialgleichungen*. 2009.
- [Pla13] J.-E. Platte. *Zur Theorie und Numerik der Laplace-Transformation, Bachelorarbeit*. Universität Bielefeld, 2013.
- [Rem02] *Funktionentheorie/1*. Grundwissen Mathematik. 5., neu bearb. aufl. edition, 2002.
- [Thü08] V. Thümmler. The effect of freezing and discretization to the asymptotic stability of relative equilibria. *Journal of dynamics and differential equations*, 2008, 20, 2, 425, 2008.

- [Wer07] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. Springer-Lehrbuch. Springer, Berlin [u.a.], 6., korrigierte Aufl. edition, 2007.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Bielefeld, den 12.11.2015