
Unterschrift der Betreuers



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

DIPLOMARBEIT

SEMIDISKRETE TRANSPARENTE RANDBEDINGUNGEN FÜR DIE SCHRÖDINGERGLEICHUNG MITTELS FALTUNGSQUADRATUR

Ausgeführt am Institut für
Analysis und Scientific Computing
der Technischen Universität Wien

unter der Anleitung von Univ.Prof. Jens Markus Melenk, PhD

durch

ALEXANDER RIEDER, BSc
Plunkergasse 9/2, 1150 Wien

31. Juli 2013

Alexander Rieder, BSc

Zusammenfassung

Die Schrödingergleichung ist eine der fundamentalen Gleichungen der Quantenmechanik und hat als solche zahlreiche Anwendungen in der Physik. Traditionell ist sie als Anfangswertproblem auf dem gesamten Raum \mathbb{R}^d gestellt. Für viele numerische Verfahren ist es nötig, das Problem auf ein beschränktes Gebiet zu reduzieren. Für den dadurch eingeführten künstlichen Rand werden passende Randbedingungen benötigt, für welche sich die damit erhaltene Lösung so wenig wie möglich von der Lösung des Ganzraumproblems unterscheidet.

Da es sich bei der Schrödingergleichung um ein zeitabhängiges Problem handelt, müssen geeignete Verfahren verwendet werden, um eine Folge von Approximationslösungen zu berechnen. Zeitdiskretisierungen teilen sich in zwei Familien auf: die Mehrschrittverfahren sowie die Runge-Kutta-Verfahren. Diese Arbeit beschäftigt sich damit, transparente (oder nicht-reflektierende) Randbedingungen für die Folge von semidiskreten, das heißt von zeitlich diskreten aber räumlich noch kontinuierlichen, Lösungen herzuleiten und auf ihre numerische Stabilität zu untersuchen. Die dabei verwendete Methode stellt sich als äquivalent zu einer Diskretisierung von transparenten Randbedingungen der kontinuierlichen Lösung mittels Faltungsquadratur heraus.

Für den Fall, dass für die Zeitdiskretisierung ein Mehrschrittverfahren verwendet wird, gibt es in der Literatur zahlreiche Arbeiten, in welchen entsprechende Randbedingungen hergeleitet und untersucht werden. Einen Überblick liefert etwa [AAB⁺08]. In dieser Arbeit werden nun auch für Runge-Kutta-Verfahren entsprechende Randbedingungen hergeleitet und sowohl theoretisch wie auch numerisch untersucht. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich dabei auf den Fall der eindimensionalen Gleichung. Am Ende werden dann Möglichkeiten zur Verallgemeinerung auf höhere Raumdimensionen mittels Randelementmethoden kurz angesprochen.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	4
1.1. Selbstadjungierte Operatoren	4
1.2. Die Schrödingergleichung als C_0 -Halbgruppe	6
2. Mehrschrittverfahren	8
2.1. Methode der erzeugenden Funktionen	10
2.2. Stabilität und Konvergenz für volldiskrete Verfahren	16
3. Runge-Kutta Verfahren	27
3.1. Stabilität	39
4. Zusammenhang zur Faltungsquadratur	48
5. Numerische Ergebnisse	51
6. Der Höherdimensionale Fall	55
6.1. Mehrschrittverfahren	55
6.2. Runge-Kutta Verfahren	57
A. Abbildungsverzeichnis	59
B. Notation	60
C. Verwendete Runge-Kutta Verfahren	61
C.1. Gauss-Verfahren	61
C.2. Radau-IIA-Verfahren	61
C.3. Lobatto IIIC-Verfahren	61
C.4. Andere Verfahren	62

1. Einführung

Die Schrödinger-Gleichung ist in einer Raumdimension gegeben durch:

Finde $u(x, t)$, sodass

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t) + V(x)u(x, t), & x \in \mathbb{R}, t \in (0, \infty) \\ u(\cdot, 0) = u_0. \end{cases} \quad (1.1)$$

Wir schreiben die Gleichung auch oft als

$$iu_t = \mathbf{H}u \quad (1.2)$$

mit dem Hamilton-Operator

$$(\mathbf{H}u)(x, t) := -\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t) + V(x)u(x, t). \quad (1.3)$$

Für den Rest der Arbeit stellen wir einige Anforderungen an die Gleichung.

Für das auftretende Potential gelte:

- $V(x) \in \mathbb{R} \quad \forall x \in \mathbb{R}$,
- der zu V gehörige Hamilton-Operator \mathbf{H} ist ein dicht definierter selbstadjungierter Operator von $L^2(\mathbb{R})$ nach $L^2(\mathbb{R})$ im Sinne von Definition 1.3,
- $V(x) \equiv V_l$ für $x \leq x_l$ und $V(x) \equiv V_r$ für $x \geq x_r$, wobei $V_l, V_r \in \mathbb{R}$.

Wir interessieren uns für die Approximation der Lösung auf einem kompakten Intervall $[x_l, x_r]$.

Für die Anfangsbedingung u_0 gelte:

- $\text{supp } u_0 \subset [x_l, x_r]$,
- $u_0 \in \text{dom}(\mathbf{H})$.

1.1. Selbstadjungierte Operatoren

Für die Theorie der Schrödinger-Gleichung ist der Begriff des unbeschränkten selbstadjungierten Operators aus der Funktionalanalysis von großer Bedeutung. Wir wiederholen daher hier die wichtigsten Definitionen und einige für den speziellen Fall der Schrödinger-Gleichung wichtige Resultate. Die folgenden Aussagen sind aus [Wer07] übernommen. Dort findet sich auch eine detailliertere Einführung in die Theorie zusammen mit den genauen Beweisen. Im Folgenden bezeichne H stets einen komplexen (nicht notwendigerweise separablen) Hilbertraum.

Definition 1.1. (a) Ein Operator $T : H \supset \text{dom}(T) \rightarrow H$ ist eine lineare Abbildung, deren Definitionsbereich $\text{dom}(T)$ ein (i.a. nicht abgeschlossener) Unterraum von H ist.

- (b) Ein Operator $S : H \supset \text{dom } S \rightarrow H$ heißt *Erweiterung* von T , falls $\text{dom}(T) \subset \text{dom}(S)$, sowie $Sx = Tx$ für alle $x \in \text{dom}(T)$. Wir schreiben $T \subset S$.
- (c) Zwei Operatoren sind gleich, $T = S$, falls $T \subset S$ und $S \subset T$.

Definition 1.2. Ein Operator $T : H \supset \text{dom}(T) \rightarrow H$ heißt

- (a) *dicht definiert* in H , falls $\overline{\text{dom}(T)} = H$ ist;
- (b) *abgeschlossen*, falls der Graph von T als Teilraum von $H \times H$ abgeschlossen ist;
- (c) *symmetrisch*, falls

$$(Tx, y)_H = (x, Ty)_H \quad \forall x, y \in \text{dom}(T).$$

Definition 1.3. Sei T dicht definiert. Wir betrachten den Unterraum

$$\text{dom}(T^*) := \{y \in H : x \rightarrow (Tx, y)_H \text{ ist stetig auf } \text{dom}(T)\}.$$

Dann ist durch die Eigenschaft

$$(Tx, y)_H = (x, T^*y)_H \quad \forall x \in \text{dom}(T), y \in \text{dom}(T^*)$$

ein Operator $T^* : H \supset \text{dom}(T^*) \rightarrow H$ wohldefiniert. Wir nennen T^* den zu T *adjungierten Operator*. Gilt außerdem $T = T^*$, so nennen wir T *selbstadjungiert*.

Als Letztes benötigen wir noch die Definition des Spektrums eines unbeschränkten Operators.

Definition 1.4. Sei $T : H \supset \text{dom}(T) \rightarrow H$ dicht definiert. Wir definieren:

- (a) $\rho(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} : (\lambda - T) : \text{dom}(T) \rightarrow H \text{ ist bijektiv und } (\lambda - T)^{-1} \text{ ist ein beschränkter Operator auf } H\}$

heißt die *Resolventenmenge* von T ,

- (b) $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ heißt das *Spektrum* von T .

Satz 1.5. Sei $T : H \supset \text{dom}(T) \rightarrow H$ dicht definiert. Dann gilt:

- (a) T^* ist abgeschlossen,
- (b) T ist symmetrisch, genau dann wenn $T \subset T^*$,
- (c) für selbstadjungierte T gilt $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$.

Ein wichtiges Resultat über selbstadjungierte Operatoren ist der folgende Satz:

Satz 1.6 (Spektralsatz, Multiplikationsoperatorversion). Sei H ein Hilbertraum, $T : H \supset \text{dom}(T) \rightarrow H$ selbstadjungiert. Dann existieren ein (im separablen Fall σ -endlicher) Maßraum (Ω, Σ, μ) , eine meßbare Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, sowie ein unitärer Operator $U : H \rightarrow L^2(\mu)$ mit:

- (a) $x \in \text{dom}(T) \iff f \cdot Ux \in L^2(\mu)$.
- (b) $UTU^*\varphi = f \cdot \varphi =: M_f(\varphi)$ für $\varphi \in \text{dom}(M_f) := \{\varphi \in L^2(\mu) : f\varphi \in L^2(\mu)\}$.

Beweis. Dieser Satz findet sich in [Wer07] als Satz VII.3.1. □

Bemerkung 1.7. Für den Spezialfall, dass das Potential $V(x)$ konstant ist kann auf die Anwendung der Spektraltheorie verzichtet werden. Die im obigen Satz auftretende unitäre Transformation U kann dann durch Fourier-Transformation realisiert werden. f wird dann zu $|z|^2 + V$, und der Maßraum ist \mathbb{R} mit dem Lebesgue-Maß.

Als letztes betrachten wir noch Bedingungen dafür, dass der in der Schrödingergleichung auftretende Hamilton-Operator selbstadjungiert ist.

Satz 1.8. *Der Operator $-\Delta$ (im distributionellen Sinn) ist auf $L^2(\mathbb{R}^d)$ selbstadjungiert mit Definitionsbereich $H^2(\mathbb{R}^d)$.*

Beweis. Ein Beweis findet sich in [Wer07] als Beispiel VII.2 (d). □

Satz 1.9 (Kato-Rellich). *Sei T selbstadjungiert. Ist A ein symmetrischer Operator, der zusätzlich T -beschränkt mit Konstante kleiner 1 ist, d.h. es existieren Konstanten $a \geq 0$ und $b < 1$, sodass gilt: $\text{dom}(A) \supset \text{dom} T$ und*

$$\|Au\| \leq a \|u\| + b \|Tu\| \quad \forall u \in \text{dom}(T),$$

dann ist $T + A$ selbstadjungiert.

Beweis. Dies ist Satz X.12 in [RS75]. □

Korollar 1.10. *Wir interessieren uns für Operatoren der Gestalt $u \mapsto -\Delta u + V(x)u$ auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Die Voraussetzungen des vorigen Satzes sind insbesondere für beschränkte Potentiale $V(x)$ gegeben. Aber auch das Coulomb-Potential $V(x) := \frac{1}{|x|}$ im \mathbb{R}^3 erfüllt die Voraussetzungen. Für Details sei auf [Wer07, Seite 388] bzw. [RS75] verwiesen.*

1.2. Die Schrödingergleichung als C_0 -Halbgruppe

Bevor wir Diskretisierungen und Randbedingungen für die Schrödingergleichung diskutieren, betrachten wir sie zunächst noch auf dem kontinuierlichen Level über einen passenden funktionalanalytischen Zugang. Die Theorie hierfür sind stark stetige Halbgruppen (C_0 -Halbgruppen). Wir beziehen uns wieder auf [Wer07]. X sei im Folgenden stets ein komplexer Banachraum.

Definition 1.11. Eine *stark stetige Operatorhalbgruppe* (oder C_0 -Halbgruppe) ist eine Familie $T_t : X \rightarrow X$, $t \geq 0$, von stetigen linearen Operatoren auf einem Banachraum X mit folgenden Eigenschaften:

- (1) $T_0 = \text{Id}$,
- (2) $T_{s+t} = T_s T_t$ für alle $s, t \geq 0$,
- (3) $\lim_{t \rightarrow 0} T_t x = x$ für alle $x \in X$.

Definition 1.12. Sei $(T_t)_{t \geq 0}$ eine C_0 -Halbgruppe auf X . Der *infinitesimale Erzeuger* oder *infinitesimale Generator* von (T_t) ist der Operator

$$Ax := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{T_h x - x}{h}$$

auf dem Definitionsbereich

$$\text{dom}(A) = \left\{ x \in X : \lim_{h \rightarrow 0} \frac{T_h x - x}{h} \text{ existiert} \right\}.$$

Der Zusammenhang zwischen Schrödingergleichung und C_0 -Halbgruppen wird durch folgende Resultate hergestellt:

Satz 1.13. *Sei A der Erzeuger der C_0 -Halbgruppe (T_t) und sei $x_0 \in \text{dom}(A)$. Dann ist die Funktion $u : [0, \infty) \rightarrow X$, $u(t) := T_t x_0$ stetig differenzierbar, $\text{dom}(A)$ -wertig und löst das folgende Anfangswertproblem:*

$$u' = Au, \quad u(0) = x_0.$$

Ferner ist u die einzige Lösung dieses Problems mit den obigen Eigenschaften und $u(t)$ hängt stetig vom Anfangswert x_0 ab.

Beweis. Dieses Resultat findet sich in [Wer07] als Satz VII.4.7. □

Lösbarkeit von Anfangswertproblemen der obigen Form wird durch den folgenden Satz sichergestellt:

Satz 1.14 (Satz von Stone). *Sei A ein dicht definierter, im Allgemeinen unbeschränkter Operator auf X . Dann gilt: iA ist selbstadjungiert, genau dann wenn A der Erzeuger einer stark stetigen Halbgruppe, bestehend aus unitären Operatoren ist.*

Beweis. [Wer07] formuliert diesen Satz als Aufgabe VII.5.39. Ein vollständiger Beweis findet sich etwa in [Kal], Korollar 5.4.6. □

Angewendet auf die Schrödingergleichung (1.2) bedeutet das mit $X = L^2(\mathbb{R})$ und $iA := \mathbf{H}$,

Satz 1.15. *Für einen Anfangswert $u_0 \in \text{dom}(\mathbf{H}) \subset H^2(\mathbb{R})$ hat die Schrödingergleichung (1.1) bzw. (1.2) für alle Zeiten $t \geq 0$ eine eindeutige Lösung im Sinne von Satz 1.13. Außerdem gilt, dass die L^2 -Norm in der Zeit erhalten bleibt:*

$$\|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} \quad \forall t \geq 0.$$

2. Mehrschrittverfahren

Zunächst betrachten wir den einfacheren Fall, dass für die Semidiskretisierung ein A-stabiles lineares Mehrschrittverfahren (LMV) mit konstanter Schrittweite Δt verwendet wird.

Das Verfahren ist gegeben durch die reellen Koeffizienten $\alpha_j, \beta_j, j = 0, \dots, K$, wobei die Koeffizienten $\alpha_0, \beta_0 \neq 0$ sind, das heißt wir betrachten nur implizite Verfahren. Die Approximationen $u_n(x) \approx u(x, n\Delta t)$ sind dann gegeben als Lösungen von

$$\frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} = \sum_{j=0}^K \beta_j (-\partial_x^2 + V) u^{n-j} \quad \forall n \geq K. \quad (2.1)$$

Wir nehmen an, dass die für das Verfahren nötigen Startwerte $u^0, \dots, u^{K-1} \in \text{dom}(\mathbf{H})$ gegeben sind, und $\text{supp } u^j \subset [x_l, x_r]$ erfüllen.

Definition 2.1. Ein Mehrschrittverfahren heißt A-stabil, wenn gilt:

Aus $\Re(\lambda) \leq 0$ folgt, die numerische Lösung von $y' = \lambda y$ ist beschränkt.

Im Weiteren benötigen wir des öfteren folgendes bekannte Resultat:

Lemma 2.2 (Diskretes Gronwall Lemma). *Sei $(y_n), (f_n), (g_n)$ drei Folgen nicht-negativer Zahlen mit*

$$y_n \leq f_n + \sum_{0 \leq k < n} g_k y_k.$$

Dann gilt

$$y_n \leq f_n + \sum_{0 \leq k < n} f_k g_k e^{\sum_{j=k+1}^{n-1} g_j}.$$

Wird in jedem Schritt nur auf den Vorgänger zugegriffen, gilt folgende verschärfte Variante: Es gelte

$$y_{n+1} \leq (1 + \delta_n) y_n + \eta_n.$$

Dann gilt

$$y_n \leq \left(y_0 + \sum_{j=0}^{n-1} \eta_j \right) e^{\sum_{j=0}^{n-1} \delta_j}.$$

Beweis. Ein Beweis der ersten Aussage findet sich etwa in [Hol]. Die verschärfte Variante ist ein einfacher Induktionsbeweis. \square

Lemma 2.3. *Sei das Potential V zusätzlich zu den allgemeinen Voraussetzungen aus Kapitel 1 noch beschränkt. Dann existieren Konstanten C und λ , die unabhängig von n und Δt sind, sodass für die Approximationen aus (2.1) gilt:*

$$\|u^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C e^{\lambda n} \sum_{k=0}^{K-1} \|u^k\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad (2.2)$$

$$\|u^n\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq C e^{\lambda n} \sum_{k=0}^{K-1} \|u^k\|_{H^1(\mathbb{R})}. \quad (2.3)$$

Beweis. Wir möchten zunächst die L^2 -Norm der u^n beschränken. Hierzu gehen wir von der Gleichung (2.1) aus und betrachten das L^2 -innere Produkt mit der Funktion $\sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j}$:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\Delta t} \left(\sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j}, \sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j} \right)_{L^2(\mathbb{R})} &= \left(\sum_{j=0}^K \beta_j \mathbf{H} u^{n-j}, \sum_{k=0}^K \beta_k u^{n-k} \right)_{L^2(\mathbb{R})} \\ &= \left(\mathbf{H} \sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j}, \sum_{k=0}^K \beta_k u^{n-k} \right)_{L^2(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Der Operator \mathbf{H} ist symmetrisch, daher ist der Ausdruck auf der rechten Seite rein reell. Betrachten des Imaginärteils liefert damit:

$$\frac{1}{\Delta t} \Re \left(\sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j}, \sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j} \right)_{L^2(\mathbb{R})} = 0.$$

Hervorheben der Terme mit u^n ergibt:

$$\begin{aligned} \alpha_0 \beta_0 \|u^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &= \sum_{j=1}^K \sum_{k=1}^K \alpha_j \beta_k \Re(u^{n-j}, u^{n-k})_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\quad + \sum_{j=1}^K \alpha_0 \beta_j \Re(u^n, u^{n-j})_{L^2(\mathbb{R})} + \alpha_j \beta_0 \Re(u^{n-j}, u^n)_{L^2(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Wendet man auf die in der rechten Seite auftretenden inneren Produkte die Cauchy-Schwarzsche und die Youngsche Ungleichung mit hinreichend kleinen Gewichten für die u^n Terme an, so erhält man durch einfache Rechnung:

$$\|u^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \leq C \sum_{j=1}^K \|u^{n-j}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2.$$

Die diskrete Variante des Gronwall Lemmas (Lemma 2.2) liefert daraus dann die Behauptung für die L^2 -Normen mit $f_k := \|u^k\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$, $k = 0, \dots, K-1$, $f_k := 0 \forall k \geq K$ und $g_k := C$.

Die H^1 Abschätzung verläuft ähnlich. Wir beginnen wieder mit der ursprünglichen Gleichung, testen aber mit $\sum_{k=0}^K \alpha_k u^{n-k}$ und erhalten:

$$\frac{i}{\Delta t} \left\| \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = \sum_{j=0}^K \sum_{k=0}^k \alpha_j \beta_k \left(\mathbf{H} u^{n-j}, u^{n-k} \right)_{L^2(\mathbb{R})}. \quad (2.4)$$

Wir betrachten den Realteil der Gleichung und erhalten somit:

$$0 = \sum_{j=0}^K \sum_{k=0}^k \alpha_j \beta_k \Re \left(\mathbf{H}u^{n-j}, u^{n-k} \right)_{L^2(\mathbb{R})}. \quad (2.5)$$

Eine einfache Nebenrechnung ergibt:

$$\left(\mathbf{H}u^j, u^k \right) = \int_{\mathbb{R}} -\partial_x^2 u^j \overline{u^k} + V(x) u^j \overline{u^k} = \int_{\mathbb{R}} \partial_x u^j \cdot \overline{\partial_x u^k} + V(x) u^j \overline{u^k}$$

und somit

$$\left| \left(\mathbf{H}u^j, u^k \right) \right| \leq |u^j|_{H^1(\mathbb{R})} |u^k|_{H^1(\mathbb{R})} + \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \|u^j\|_{L^2(\mathbb{R})} \|u^k\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Zurück in Gleichung (2.5) erhalten wir, da $(\mathbf{H}u^n, u^n)_{L^2}$ reell ist, durch einfaches Umformen und Anwenden der Dreiecksungleichung:

$$\begin{aligned} \beta_0 \alpha_0 (\mathbf{H}u^n, u^n)_{L^2(\mathbb{R})} &\leq \sum_{j=1, k=1}^K |\alpha_j| |\beta_k| \left| \left(\mathbf{H}u^{n-j}, u^{n-k} \right)_{L^2(\mathbb{R})} \right| \\ &\quad + \sum_{j=1}^K |\beta_0| |\alpha_k| \left| \left(\mathbf{H}u^{n-j}, u^n \right)_{L^2(\mathbb{R})} \right| + |\beta_k| |\alpha_0| \left| \left(\mathbf{H}u^n, u^{n-j} \right)_{L^2(\mathbb{R})} \right|. \end{aligned}$$

Verwenden wir nun die Resultate aus unserer vorigen Nebenrechnung, so ergibt sich mit Hilfe der Cauchy-Schwarzschen und der Youngschen Ungleichung:

$$\begin{aligned} \beta_0 \alpha_0 |u^n|_{H^1}^2 &\leq C_1 \sum_{j=0}^K \|u^{n-j}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_2 \sum_{j=1}^K |u^{n-j}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \\ &\quad + C \sum_{j=1}^K |u^{n-j}|_{H^1(\mathbb{R})} |u^n|_{H^1(\mathbb{R})} + \|V\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \|u^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|u^{n-j}\|_{L^2(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Verwendet man für die Terme mit $|u^n|_{H^1}$ die Youngsche Ungleichung mit hinreichend kleinem Gewicht, so ergibt sich für eine Konstante $\gamma > 0$:

$$\gamma |u^n|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_3 \sum_{j=0}^K \|u^{n-j}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_4 \sum_{j=1}^K |u^{n-j}|_{H^1(\mathbb{R})}^2$$

Der L^2 Anteil lässt sich mit Hilfe des ersten Teils des Beweises kontrollieren, und mit $f_k := |u^k|_{H^1}^2 \forall k = 0, \dots, K$, $f_k := Ce^{\lambda k} \forall k > K$ sowie $g_k := C_4$ folgt die Behauptung durch einfache Rechnung aus dem diskreten Gronwall Lemma (Lemma 2.2). \square

2.1. Methode der erzeugenden Funktionen

Die Folge von Lösungen u^n ist rekursiv durch (2.1) definiert. Diese Darstellung ist schlecht dazu geeignet, einen Ausdruck für die Randwerte herzuleiten. Wir werden daher stattdessen die erzeugende Funktion, oder Z-transformierte, der Folge verwenden. Dieser Abschnitt dient dazu,

die verwendeten Notationen einzuführen und die wichtigsten Eigenschaften aufzulisten. Anstelle der meist üblichen Definition für reelle Folgen verwenden wir eine etwas verallgemeinerte Variante wobei wir Folgen in Banachräumen (im speziellen Fall $(L^2(\mathbb{R}^d))^m$ oder $(H^1(\mathbb{R}^d))^m$) zulassen.

für den Rest des Abschnitts bezeichne V stets einen Banachraum und $\mathcal{B}(V, V)$ den Raum aller beschränkten Linearen Operatoren von V nach V .

Definition 2.4. Sei $(u^n)_{n=0}^\infty$ eine Folge in V . Dann ist die Z -Transformierte von u definiert als:

$$\hat{u}(z) := \mathcal{Z}(u^n)(z) := \sum_{n=0}^{\infty} u^n z^n \quad \text{für } z \in \mathbb{C}, |z| < R(\mathcal{Z}(u^n)) \quad (2.6)$$

wobei $R(\mathcal{Z}(u^n))$ den Konvergenzradius der Potenzreihe bezeichnet. Wir schreiben auch oft $\hat{u} := \mathcal{Z}(u^n)$.

Diese mit der Laplace-Transformation eng verwandte Transformation hat die Eigenschaft, dass ein Index-Shift $n \rightarrow n - 1$ zu einer Multiplikation mit der freien Variable z und Anfangstermen wird. Das wird uns erlauben einen geschlossenen Ausdruck für die erzeugende Funktion der Lösungsfolge u^n zu erhalten.

Im restlichen Abschnitt sind die wichtigsten Eigenschaften der Transformation und der darin auftretenden Potenzreihen kurz zusammengefasst.

Satz 2.5. Ist der Konvergenzradius z_0 von zwei Z -Transformierten $\mathcal{Z}(u^n), \mathcal{Z}(v^n)$ größer als 0 und gilt $\hat{u}(z) = \hat{v}(z)$ für alle $|z| < z_0$, so folgt

$$u^n = v^n.$$

Satz 2.6. Für $u_n \in V$ ist der Konvergenzradius der Z -Transformierten gegeben durch

$$R(\mathcal{Z}(u^n)) = \frac{1}{\limsup \sqrt[n]{|u^n|}}. \quad (2.7)$$

Für alle $|z| \leq r < R$ konvergiert die Reihe (2.6) absolut und gleichmäßig.

Satz 2.7. Seien (u^n) eine Folge in V und (A^n) eine Folge in $\mathcal{B}(V, V)$. Es existiere \hat{u} für $|z| < R_u$ und \hat{A} für $|z| < R_A$. Definiert man die Faltung der beiden Folgen als

$$(A^n * u^n)_j := \sum_{k=0}^j A^k u^{j-k},$$

dann existiert die Z -Transformierte der Faltung $\mathcal{Z}(A^n * u^n)$ für $|z| < \min(R_u, R_A)$ und es gilt:

$$\mathcal{Z}(A^n * u^n) = \hat{A}(z)\hat{u}(z). \quad (2.8)$$

Satz 2.8. Die Inverse Z -Transformation \mathcal{Z}^{-1} ist gegeben durch die Cauchysche Integralformel:

$$u^n = (\mathcal{Z}^{-1}(\hat{u}))^n = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\hat{u}(z)}{z^{n-1}} dz \quad (2.9)$$

wobei γ einen Kreis mit einem Radius kleiner als R_u bezeichnet.

Wir wollen nun für den künstlichen Rand Bedingungen in Form einer Dirichlet-to-Neumann-Map herleiten. Wir folgen hierzu dem Vorgehen in [AAB⁺08, Abschnitt 2.3].

Wir beginnen mit der semidiskreten Gleichung (2.1):

$$\frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} = \sum_{j=0}^K \beta_j \mathbf{H} u^{n-j}, \quad \forall n \geq K. \quad (2.10)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit z^n und summiert über alle $n = K, \dots, N$ für ein $N \in \mathbb{N}$ so erhält man

$$\sum_{n=K}^N \frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} z^n = \mathbf{H} \left(\sum_{n=K}^N \sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j} z^n \right). \quad (2.11)$$

Wir interessieren uns für den Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Wir bemerken zunächst, dass aufgrund von Lemma 2.3 gilt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \|u^n z^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \sum_{n=0}^{\infty} e^{\lambda n} \cdot |z^n| < \infty \quad \text{für } |z| < \lambda.$$

Das heißt die L^2 -wertige Potenzreihe $\sum_{n=0}^{\infty} u^n z^n$ konvergiert absolut für $|z| < \lambda$. Daraus folgt unmittelbar, dass für $|z| < \lambda$ folgende Grenzwerte im L^2 Sinn existieren:

$$x_N := \left(\sum_{n=K}^N \sum_{j=0}^K \beta_j u^{n-j} z^n \right) \rightarrow \left(\sum_{j=0}^K \beta_j z^j \sum_{n=K}^{\infty} u^{n-j} z^{n-j} \right) =: x,$$

sowie wegen der Gleichung für die $\mathbf{H}x_N$:

$$\mathbf{H}x_N = \sum_{n=K}^N \frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} z^n \rightarrow \frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j z^j \sum_{n=K}^{\infty} u^{n-j} z^{n-j} =: y.$$

Da \mathbf{H} als selbstadjungierter Operator insbesondere abgeschlossen ist, muss gelten $y = \mathbf{H}x$, und wir erhalten

$$\frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j z^j \sum_{n=K}^{\infty} u^{n-j} z^{n-j} = \mathbf{H} \sum_{j=0}^K \beta_j z^j \left(\sum_{n=K}^{\infty} u^{n-j} z^{n-j} \right). \quad (2.12)$$

Setzt man nun die Definition der Z-Transformation (Definition 2.4) ein, so erhält man außerhalb von $[x_l, x_r]$, da die u^0, \dots, u^{K-1} dort verschwinden:

$$\sum_{j=0}^K \frac{i}{\Delta t} \alpha_j z^j \hat{u}(z) = \sum_{j=0}^K \beta_j z^j \mathbf{H} \hat{u}(z). \quad (2.13)$$

$$(2.14)$$

Setzen wir nun wieder die Definition des Hamiltonoperators ein, so erhalten wir eine Differentialgleichung für \hat{u} :

$$\frac{i}{\Delta t} \hat{u}(z) \sum_{j=0}^K \alpha_j z^j = (-\partial_x^2 + V) \hat{u} \sum_{j=0}^K \beta_j z^j. \quad (2.15)$$

Daraus ergibt sich die Gleichung

$$\left(\frac{i\delta(z)}{\Delta t} + \partial_x^2 - V \right) \hat{u}(z) = 0 \quad \text{für } |z| < \lambda, \quad (2.16)$$

wobei die erzeugende Funktion des Mehrschrittverfahrens $\delta(z)$ gegeben ist durch:

$$\delta(z) := \left(\sum_{j=0}^K \alpha_j z^j \right) / \left(\sum_{j=0}^K \beta_j z^j \right). \quad (2.17)$$

Die Z-Transformierte der Lösungen ist also die Lösung einer Differentialgleichung zweiter Ordnung in x .

Betrachten wir zunächst die Lösung am rechten Rand des Intervalls $[x_l, x_r]$. Dort gilt $V(x) = V_r$. Die allgemeine Lösung der obigen Gleichung ist gegeben durch

$$\hat{u}(z) = A^+(z) e^{i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r} x} + A^-(z) e^{-i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r} x} \quad \forall x \geq x_r, \quad (2.18)$$

wobei in dieser Arbeit \sqrt{z} immer den Hauptzweig der komplexen Wurzel bezeichne, das heißt jenen Zweig der Wurzel, für welchen $\Re(\sqrt{z}) \geq 0$ gilt.

Um im Folgenden einen der beiden Zweige der Lösung ausschließen zu können, benötigen wir noch folgendes Lemma:

Lemma 2.9. *Für die erzeugende Funktion eines A-Stabilen Mehrschrittverfahrens gilt:*

$$\Re(\delta(z)) > 0 \quad \forall |z| < 1 \quad (2.19)$$

Beweis. Betrachtet man die beiden charakteristischen Polynome des Verfahrens $\rho(z) = \sum_{j=0}^n \alpha_j z^{K-j}$ und $\sigma(z) = \sum_{j=0}^n \beta_j z^{K-j}$ (die hier gegebene Definition der charakteristischen Polynome weicht formal von der in [HW10] gegebenen leicht ab, da die Koeffizienten α_j dort in anderer Reihenfolge definiert werden), so lässt sich $\delta(z)$ für $z \neq 0$ schreiben als

$$\delta(z) = \frac{\sum_{j=0}^K \alpha_j z^j}{\sum_{j=0}^K \beta_j z^j} = \frac{z^K \left(\sum_{j=0}^K \alpha_j z^{j-K} \right)}{z^K \left(\sum_{j=0}^K \beta_j z^{j-K} \right)} = \frac{\rho(1/z)}{\sigma(1/z)}.$$

Sei $\zeta \in \mathbb{C}$ und sei $\mu := \frac{\rho(\zeta)}{\sigma(\zeta)}$ mit $\Re(\mu) \leq 0$. Dann folgt aus einfacher Rechnung:

$$\rho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) = 0.$$

Das Stabilitätsgebiet eines Mehrschrittverfahrens ist nach [HW10] gegeben durch

$$S := \{ \mu \in \mathbb{C} : \text{Alle Nullstellen von } \rho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) \text{ erfüllen} \\ |\zeta| < 1 \vee (|\zeta| = 1 \wedge \zeta \text{ ist einfache Nullstelle}) \}.$$

Da aufgrund der A-Stabilität μ im Stabilitätsgebiet liegt, folgt $|\zeta| \leq 1$.

Somit folgt für $\zeta := 1/z$ mit $|z| < 1$, dass $\Re\left(\frac{\rho(1/z)}{\sigma(1/z)}\right) > 0$, was zu zeigen war.

Sei nun $y := \delta(0)$. Da wir nur Verfahren mit $\beta_0 \neq 0$ betrachten ist $\delta(z)$ in einer Umgebung von 0 analytisch und daher offen. Es existiert daher eine Umgebung U der 0 und eine offene Kugel B_r mit Radius $r > 0$ für die gilt, dass $\delta(U) = B_r(y)$. Da nun aber nach voriger Rechnung $B_r(y) \setminus \{y\}$ in der rechten Halbebene liegt, muss auch $\Re(y) > 0$ gelten. \square

Als Grenzwert von L^2 -Funktionen muss auch $\hat{u} \in L^2(\mathbb{R})$ gelten. Aus obigem Lemma wissen wir, dass gilt,

$$\Re\left(-i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r}\right) > 0, \quad \forall |z| > 1.$$

Dies bedeutet für die Gleichung (2.18), dass der Koeffizient $A^-(z)$ verschwinden muss. Differenziert man nun die Lösung nach x , so erhält man

$$\partial_x \hat{u}(z) = i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r} \hat{u}(z).$$

Wir möchten nun Z-Transformation und Differentiation in x vertauschen, um eine Gleichung für die Ableitungen von u^n herzuleiten. Hierzu benötigen wir, dass die Z-Transformierte der u^n nicht nur im L^2 Sinn konvergiert, sondern sogar im $H^1(\mathbb{R})$. Diese Aussage erhalten wir wieder aus Lemma 2.3. Damit gilt dann

$$\mathcal{Z}(\partial_x u^n)(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (\partial_x u^n) z^n = \partial_x \left(\sum_{n=0}^{\infty} u^n z^n \right) = i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r} \mathcal{Z}(u^n)(z).$$

Die Funktion $z \mapsto i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r}$ ist holomorph in z und lässt sich daher in eine Potenzreihe entwickeln. Satz 2.7 liefert somit für die inverse Z-Transformation:

$$\partial_x u^n(x) = \sum_{k=0}^n \psi_k^{(r)} u^{n-k}(x), \quad \text{für fast alle } x \geq x_r,$$

wobei die $\psi_k^{(r)}$ definiert sind durch

$$\mathcal{Z}\left(\psi_k^{(r)}\right)(z) = i\sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t} - V_r}. \quad (2.20)$$

Da die u^n in $H^2(\mathbb{R})$ liegen können wir diese Gleichung punktweise an x_r betrachten und erhalten somit die Randbedingung:

$$\partial_x u^n(x_r) = \sum_{k=0}^n \psi_k^{(r)} u^{n-k}(x_r).$$

Analoges Vorgehen am linken Randpunkt ergibt somit folgendes Randwertproblem für $n \geq K$:

$$\begin{cases} \frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j} = \sum_{j=0}^K \beta_j (-\partial_x^2 + V) u^{n-j}, & x \in \Omega, \\ \partial_n u^n(x) = \sum_{k=0}^n \psi_k^{(l,r)} u^{n-k}(x), & x = x_l, x_r. \end{cases} \quad (2.21)$$

Dabei definieren wir die Normalableitung durch $\partial_n := -\partial_x$ an $x = x_l$ und $\partial_n := \partial_x$ an $x = x_r$.

Satz 2.10. *Sind die ersten K Werte $u^0 \dots u^{K-1}$ vorgegeben, hat die Folge von Randwertproblemen (2.21) eine eindeutige Lösung. Diese stimmt mit der Einschränkung der Lösung des Ganzraumproblems (2.1) auf das Intervall $[x_l, x_r]$ überein.*

Beweis. Die transparenten Randbedingungen waren genau so gewählt, dass das Ganzraumproblem diese erfüllt. Somit bleibt noch die Eindeutigkeit zu zeigen.

Seien (u^n) und (v^n) zwei Folgen von Funktionen die (2.21) lösen. Wir setzen $w^n := u^n - v^n$. Die Aussage, dass die Lösung eindeutig ist, ist dann äquivalent dazu, dass

$$w^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Wir führen den Beweis durch vollständige Induktion nach n .

Für $n < K$ gilt die Aussage trivialerweise, da sowohl u^n als auch v^n den gegebenen Anfangswerten entsprechen.

Gilt nun $w_j = 0 \quad \forall j = 0 \dots n-1$, dann vereinfacht sich die Differentialgleichung im n -ten Schritt zu:

$$\frac{i}{\Delta t} \alpha_0 \cdot w^n = \beta_0 (-\partial_x^2 - V(x)) w^n.$$

Die Randbedingungen werden für w^n zu

$$\begin{aligned} \partial_n w^n(x_l) &= \sum_{k=0}^n \psi_k^{(l)} w^{n-k}(x_l) = \psi_0^{(l)} w^n(x_l), \\ \partial_n w^n(x_r) &= \sum_{k=0}^n \psi_k^{(r)} w^{n-k}(x_r) = \psi_0^{(r)} w^n(x_r). \end{aligned}$$

Multipliziert man die obige Differentialgleichung mit $\overline{w^n}$, integriert von x_l bis x_r und integriert partiell, so ergibt sich

$$\frac{i}{\Delta t} \alpha_0 \int_{x_l}^{x_r} |w^n|^2 = \beta_0 \int_{x_l}^{x_r} |\partial_x w^n|^2 + V(x) |w^n|^2 dx - \beta_0 \left(\psi_0^{(l)} |w^n|^2(x_l) + \psi_0^{(r)} |w^n|^2(x_r) \right).$$

Betrachtet man nur noch den Imaginärteil der Gleichung erhält man

$$\frac{\alpha_0}{\Delta t} \|w^n\|_{L^2(x_l, x_r)}^2 = -\beta_0 \left(\Im \left(\psi_0^{(l)} \right) |w^n|^2(x_l) + \Im \left(\psi_0^{(r)} \right) |w^n|^2(x_r) \right).$$

Entscheidend für den Beweis der Aussage ist das Vorzeichen von $\Im \left(\psi_0^{(l,r)} \right)$. Aus der Definition der $\psi_k^{(l,r)}$ in (2.20) erkennt man ψ_0 als führenden Term der Potenzreihe. Man erhält es also durch Auswerten der definierenden Funktion an 0. Eine einfache Rechnung ergibt

$$\psi_0^{(l,r)} = i \sqrt{i \frac{\alpha_0}{\beta_0 \Delta t} - V_{(l,r)}}.$$

Da laut Lemma 2.9 $\delta(0) = \alpha_0/\beta_0 > 0$ gilt und da $V_{(l,r)} \in \mathbb{R}$ überlegt man sich leicht, dass $\Im \left(\psi_0^{(l,r)} \right) > 0$.

Somit sieht man insgesamt, dass

$$\|w^n\|_{L^2}^2 \leq 0.$$

□

Dieses Resultat erlaubt es nun, Konvergenz- und Stabilitätsresultate direkt aus dem Ganzraumproblem zu übernehmen. So erhält man etwa aus der allgemeinen Theorie zur Approximation von stark stetigen Halbgruppen:

Satz 2.11. *Sei u^n die Approximationslösung gegeben durch (2.21) für ein A-stabiles Mehrschrittverfahren der Ordnung p , und sei die Anfangsbedingung u_0 im Definitionsbereich von \mathbf{H}^{p+1} enthalten. Dann erfüllt die Differenz der Lösungen die Abschätzung*

$$\|u(t_n) - u^n\|_{L^2(x_l, x_r)} \leq Ct_n \Delta t^p \|\mathbf{H}^{p+1} u_0\|_{L^2(x_l, x_r)}. \quad (2.22)$$

Beweis. Die Abschätzung für das Ganzraumproblem folgt beispielsweise aus Theorem 1 in [Cro87]. Durch Einschränken unter Berücksichtigung von Satz 2.10 überträgt sich das Resultat auf das Randwertproblem mit transparenten Randbedingungen. \square

2.2. Stabilität und Konvergenz für vordiskrete Verfahren

Als nächstes untersuchen wir, wie sich die Lösungen verhalten, wenn die Koeffizienten ψ_k durch numerische Quadratur berechnet werden und die partielle Differentialgleichung in (2.21) durch ein passendes numerisches Verfahren, z.B. Finite Elemente approximiert wird.

Im Folgenden werden wir eine zusätzliche Voraussetzung an das verwendete Mehrschrittverfahren machen:

$$\delta(z) \text{ hat keinen Pol auf dem Einheitskreis.} \quad (2.23)$$

Diese Voraussetzung wird beispielsweise vom impliziten Euler- oder dem BDF2 Verfahren erfüllt, nicht aber vom Crank-Nicholson Verfahren.

Die Koeffizienten ψ_k sind als Koeffizienten einer Potenzreihe definiert. Nach dem Cauchyschen Integralsatz lassen sie sich berechnen durch:

$$\psi_k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial B_\lambda(0)} i \sqrt{\frac{i\delta(z)}{\Delta t} - V_{(l,r)}} z^{-k-1} dz \quad (2.24)$$

mit $\lambda \in (0, 1)$ beliebig.

Um diese Koeffizienten näherungsweise zu berechnen, diskretisieren wir obiges Integral mit der summierten Trapezregel und erhalten die gestörten Koeffizienten $\tilde{\psi}_k$. Sei Q die Anzahl der Quadraturpunkte, dann sind die Koeffizienten durch

$$\tilde{\psi}_k := \frac{\lambda^{-k}}{Q+1} \sum_{l=0}^Q i \sqrt{is_l - V_{(l,r)}} \xi_{Q+1}^{lk} \quad (2.25)$$

$$\text{mit } \xi_{Q+1} := e^{i\frac{2\pi}{Q+1}} \quad \text{und } s_l := \frac{\delta\left(\lambda \xi_{Q+1}^{-l}\right)}{\Delta t} \quad (2.26)$$

gegeben.

Als nächstes untersuchen wir Stabilität und Approximationseigenschaften der Koeffizienten $\hat{\psi}_k$. Die folgenden zwei Resultate basieren dabei auf den entsprechenden Sätzen in [BS08].

Lemma 2.12. *Die exakten Koeffizienten ψ_k erfüllen die Stabilitätsbedingung*

$$|\psi_k|^2 \leq \frac{C}{\Delta t}$$

mit einer Konstante C , die nur vom verwendeten Verfahren, nicht aber von k oder Δt abhängt.

Beweis. Für $\lambda \in (0, 1)$ gilt mit $f(s) := i\sqrt{is - V_{(l,r)}}$:

$$\begin{aligned} |\psi_k| &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f\left(\frac{\delta(\lambda e^{i\varphi})}{\Delta t}\right) \lambda^{-k} e^{-ik\varphi} d\varphi \right| \\ &\leq \lambda^{-k} \left\| f\left(\frac{\delta(\lambda e^{i\varphi})}{\Delta t}\right) \right\|_{C[0,2\pi]}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Es gilt

$$|f(s)|^2 = |is - V_{(l,r)}| \leq |s| + |V_{(l,r)}|.$$

Nach Voraussetzung (2.23) hat $\delta(z)$ auf dem Einheitskreis keinen Pol. Somit existiert eine Konstante C_δ mit $|\delta(z)| \leq C_\delta$ für alle $|z| \leq 1$. Dies ergibt für $\Delta t \leq C_0$ für ein beliebiges $C_0 \geq 0$:

$$\left| f\left(\frac{\delta(\lambda e^{i\phi})}{\Delta t}\right) \right|^2 \leq \frac{C_\delta}{\Delta t} + |V_{(l,r)}| \leq \frac{C}{\Delta t}.$$

Wählt man nun in (2.27) $\lambda = e^{-\frac{1}{2k}}$, so ergibt sich insgesamt:

$$|\psi_k|^2 \leq \frac{\lambda^{-2k} C}{\Delta t} \leq \frac{e^{1C}}{\Delta t}.$$

□

Als nächstes betrachten wir den Approximationsfehler, der durch die Trapezregel entsteht.

Lemma 2.13. *Seien ψ_k und $\hat{\psi}_k$ wie in (2.24) und (2.25) definiert. Dann existiert eine Konstante C unabhängig von k , λ und Δt , sodass für $k \leq Q + 1$ gilt:*

$$\left| \psi_k - \hat{\psi}_k \right| \leq \frac{C}{\sqrt{\Delta t}} q \quad \text{mit} \quad q := \frac{\lambda^{Q+1}}{1 - \lambda^{Q+1}}. \quad (2.28)$$

Beweis. Wir setzen zunächst die Definitionen der ψ_k und $\hat{\psi}_k$ für $k < 0$ auf die offensichtliche Weise fort und definieren $a_k := \lambda^k \psi_k$, $\hat{a}_k := \lambda^k \hat{\psi}_k$. Damit ergibt sich aus der Definition, dass für $k \leq Q + 1$ die \hat{a}_k der Approximation der a_k durch die diskrete Fourier Transformation entsprechen, siehe hierzu etwa Kapitel 3.1 in [Hen79]. Zum Abschätzen des Fehlers verwenden wir das dortige Theorem 2a und erhalten:

$$\begin{aligned} |a_k - \hat{a}_k| &= \left| \sum_{l=1}^{\infty} a_{k+l(Q+1)} + a_{j-l(Q+1)} \right| \leq \sum_{l=1}^{\infty} |a_{k+l(Q+1)}| \\ &\leq \lambda^k \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^{l(Q+1)} |\psi_{k+l(Q+1)}| \leq \lambda^k \frac{\sqrt{C}}{\sqrt{\Delta t}} \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^{l(Q+1)} \\ &= \lambda^k \frac{\sqrt{C}}{\sqrt{\Delta t}} \frac{\lambda^{Q+1}}{1 - \lambda^{Q+1}}. \end{aligned}$$

Wobei wir in der obigen Rechnung verwendet haben, dass die negativen Koeffizienten der Laurent Reihe aufgrund der Holomorphie der Funktion verschwinden, sowie die Stabilitätsabschätzung aus dem vorigen Lemma. Multipliziert man diese Ungleichung wieder mit λ^{-k} folgt die Behauptung. □

Die beiden obigen Resultate ergeben zusammen eine Stabilitätsaussage für die diskreten Koeffizienten $\hat{\psi}_k$:

Korollar 2.14. *Es gilt:*

$$\left| \hat{\psi}_k \right| \leq \frac{C}{\sqrt{\Delta t}} (1 + q) \quad \text{mit} \quad q := \frac{\lambda^{Q+1}}{1 - \lambda^{Q+1}}. \quad (2.29)$$

Beweis.

$$\left| \hat{\psi}_k \right| \leq \left| \hat{\psi}_k - \psi_k \right| + |\psi_k| \leq \frac{C}{\sqrt{\Delta t}} q + \frac{C}{\sqrt{\Delta t}} \leq (1 + q) \frac{C}{\sqrt{\Delta t}}.$$

□

Mit diesen Hilfsresultaten ist es nun möglich die Stabilität der transparenten Randbedingungen zu untersuchen.

Der einfacheren Notation wegen schreiben wir im Folgenden ψ_k für das Paar $(\psi_k^{(l)}, \psi_k^{(r)})$ und fassen es als Operator auf dem Rand von $[x_l, x_r]$ auf mit $\psi_k u := (\psi_k^{(l)} u(x_l), \psi_k^{(r)} u(x_r))$. Im Folgenden werden wir für das klassische Euklidische Skalarprodukt und deren induzierte Norm $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Gamma$ bzw. $\|\cdot\|_\Gamma$ schreiben, um hervorzuheben, dass die auftretenden Terme von Randwerten von Funktionen stammen. Wir werden in diesem Kontext für H^1 -Funktionen häufig u^n mit dem Paar $(u^n(x_l), u^n(x_r))$ identifizieren. Dies trägt auch der speziellen Struktur der Randwerte für das 1D-Problem als Zahlenpaar Rechnung. In höheren Dimensionen verallgemeinert sich die Notation auf natürliche Weise zu L^2 -Produkten bzw. $H^{-1/2} \times H^{1/2}$ -Dualitätspaaren am Rand. Außerdem führen wir für $\epsilon > 0$ die Kurzschreibweise $\|U\|_\epsilon^2 := \|U\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \epsilon \Delta t \|U\|_{H^1(\mathbb{R})}^2$ ein.

Um auch eine Ortsdiskretisierung zulassen zu können, betrachten wir die schwache Formulierung der Probleme, das heißt wir vergleichen die Lösungen u^n und \hat{u}^n von

$$\begin{aligned} i \sum_{j=0}^K \alpha_j (u^{n-j}, v)_{L^2(x_l, x_r)} &= \Delta t \sum_{j=0}^K \beta_j (\partial_x u^{n-j}, \partial_x v)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t \sum_{j=0}^K \langle \partial_n u^{n-j}, v \rangle_\Gamma \\ &+ \Delta t \sum_{j=0}^K (V u^{n-j}, v)_{L^2(x_l, x_r)} \quad \forall v \in H^1(x_l, x_r) \end{aligned} \quad (2.30)$$

wobei $\partial_n u^n$ zu ersetzen ist durch:

$$\partial_n u^n = \sum_{k=0}^n \psi_k^{(l,r)} u^{n-k},$$

sowie

$$\begin{aligned} i \sum_{j=0}^K \alpha_j (\hat{u}^{n-j}, v)_{L^2(x_l, x_r)} &= \Delta t \sum_{j=0}^K \beta_j (\partial_x \hat{u}^{n-j}, \partial_x v)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t \sum_{j=0}^K \langle \partial_n \hat{u}^{n-j}, v \rangle_\Gamma \\ &+ \Delta t \sum_{j=0}^K (V \hat{u}^{n-j}, v)_{L^2(x_l, x_r)} - \tau_n(v) \quad \forall v \in H^1(x_l, x_r) \end{aligned} \quad (2.31)$$

und statt $\partial_n \hat{u}^n$ mit

$$\partial_n \hat{u}^n = \sum_{k=0}^n \hat{\psi}_k^{(l,r)} \hat{u}^{n-k}.$$

Dabei bezeichnen wir mit $\tau_k : H^1(x_l, x_r) \rightarrow \mathbb{R}$ den Konsistenzfehler, der durch eine Ortsdiskretisierung entsteht. Im Folgenden werden wir den Fehler in den Lösungen, der durch die Diskretisierung der Randbedingungen entsteht mit $e_n := u^n - \hat{u}^n$ bezeichnen.

Lemma 2.15. *Das Potential V sei beschränkt. Außerdem seien die folgende Voraussetzungen an die Diskretisierung erfüllt:*

- zur Zeitdiskretisierung der Schrödingergleichung wird das implizite Eulerverfahren verwendet,
- die $\hat{\psi}_k$ approximieren die ψ_k hinreichend gut, das heißt es gilt:

$$\sum_{k=0}^{n+1} |\psi_k - \hat{\psi}_k| < C \Delta t$$

für eine hinreichend kleine Konstante C (Dies ist für eine summierte Trapezregel mit Q Quadraturpunkten nach Lemma 2.13 bereits für moderate Q gegeben),

- der Konsistenzfehler der Ortsdiskretisierung erfüllt für alle $n \in \mathbb{N}$:

$$|\tau_{n+1}(e_{n+1})| \leq \tau_{1,n+1} \|e_{n+1}\|_\epsilon + \tau_{0,n+1} \|e_n\|_{L^2(x_l, x_r)} \quad (2.32)$$

für Konstanten $\tau_{0,n+1}, \tau_{1,n+1} \geq 0$ und ein $\epsilon \sim \Delta t$ hinreichend klein.

Dann existiert ein $C > 0$, sodass für $n\Delta t \leq T$ gilt:

$$\|e_n\|_{L^2(x_l, x_r)}^2 + (\Delta t)^2 |e_n|_{H^1(x_l, x_r)}^2 \leq C \left(\|e_0\|_{L^2(x_l, x_r)}^2 + (\Delta t)^2 |e_0|_{H^1(x_l, x_r)}^2 + \sum_{k=0}^n f_k^2 + g_k^2 \right)$$

mit

$$f_k^2 := \left\| \sum_{k=0}^n (\psi_k - \hat{\psi}_k) u^{n-k} \right\|_\Gamma^2,$$

$$g_k^2 := \Delta t^{-1} (\tau_{0,k}^2 + \tau_{1,k}^2).$$

Das heißt, der Fehler, der durch die Diskretisierungen entsteht hängt auf stabile Weise vom Quadraturfehler, der Genauigkeit der Ortsdiskretisierung und der Stabilität des semidiskreten Problems ab.

Beweis. Das implizite Eulerverfahren ist in starker Form für (2.30) gegeben durch:

$$\frac{i}{\Delta t} (u^{n+1} - u^n) = -\partial_x^2 u^{n+1} + V u^{n+1}, \quad x \in (x_l, x_r),$$

$$\partial_n u^{n+1} = \sum_{k=0}^{n+1} \psi_k u^{n+1-k}, \quad \text{am Rand}$$

und analog für die gestörten Probleme \hat{u}^n . Zieht man die schwache Form der Randwertprobleme von u^n und \hat{u}^n voneinander ab, so erhält man, dass e_n folgende Gleichung löst:

$$\begin{aligned} \mathfrak{i}(e_{n+1}, v)_{L^2(x_l, x_r)} - \mathfrak{i}(e_n, v)_{L^2(x_l, x_r)} &= \Delta t (\partial_x e_{n+1}, \partial_x v)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t \langle \partial_n e_{n+1}, v \rangle_\Gamma \\ &\quad + \Delta t (V e_{n+1}, v)_{L^2(x_l, x_r)} + \tau_{n+1}(v) \quad \forall v \in H^1(x_l, x_r), \end{aligned}$$

sowie für die Randterme:

$$\begin{aligned} \partial_n e_{n+1} &= \sum_{k=0}^{n+1} (\psi_k - \hat{\psi}_k) u^{n+1-k} + \sum_{k=0}^{n+1} \hat{\psi}_k e_{n+1-k} \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} (\psi_k - \hat{\psi}_k) u^{n+1-k} + \sum_{k=0}^{n+1} (\hat{\psi}_k - \psi_k) e_{n+1-k} + \sum_{k=0}^{n+1} \psi_k e_{n+1-k} \\ &=: \eta_{n+1} + \theta_{n+1} + \gamma_{n+1}, \end{aligned} \tag{2.33}$$

mit folgenden Abkürzungen

$$\begin{aligned} \eta_n &:= \sum_{k=0}^n (\psi_k - \hat{\psi}_k) u^{n-k}, \\ \theta_n &:= \sum_{k=0}^n (\hat{\psi}_k - \psi_k) e_{n-k}, \\ \gamma_n &:= \sum_{k=0}^n \psi_k e_{n-k}. \end{aligned}$$

Außerdem verwenden wir im folgenden die Notation $q_k := \hat{\psi}_k - \psi_k$.

Wir lösen zunächst folgende Hilfsprobleme im Außenraum: Sei $\varphi_0 := 0$. Für $n \in \mathbb{N}$ finde $\varphi_{n+1} \in H^2(\mathbb{R} \setminus [x_l, x_r])$, sodass

$$\begin{aligned} \frac{\mathfrak{i}}{\Delta t} (\varphi_{n+1} - \varphi_n) &= -\partial_x^2 \varphi_{n+1} + V(x) \varphi_{n+1} \quad \text{auf } \mathbb{R} \setminus [x_l, x_r], \\ \varphi_{n+1} &= e_{n+1} \quad \text{am Rand.} \end{aligned}$$

Da das Potential beschränkt (es ist sogar stückweise Konstant) und reell ist, kann man leicht nachrechnen dass die zu der schwachen Formulierung des obigen Problems gehörige Bilinearform koerziv und beschränkt auf $H^1(\mathbb{R})$ ist. Die Existenz, Eindeutigkeit und H^2 -Regularität folgt dann aus der Theorie der elliptischen Differentialgleichungen.

Eine analoge Rechnung wie bei der Herleitung der transparenten Randbedingung für u^n in Kapitel 2 zeigt, dass für die φ_n gilt:

$$\partial_n \varphi_n = - \sum_{k=0}^n \psi_k \varphi_{n-k} = - \sum_{k=0}^n \psi_k e_{n-k} = -\gamma_n.$$

Wir betrachten nun eine neue Funktion auf ganz \mathbb{R} , die sich wie folgt zusammensetzt:

$$E_n(x) := \begin{cases} e_n(x) & x \in [x_l, x_r] \\ \varphi_n(x) & x \in \mathbb{R} \setminus [x_l, x_r] \end{cases}.$$

Nach Konstruktion ist E_n stetig an x_l, x_r und erfüllt die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} \mathfrak{i} (E_{n+1}, v)_{L^2(\mathbb{R})} - \mathfrak{i} (E_n, v)_{L^2(\mathbb{R})} &= \Delta t (\partial_x E_{n+1}, \partial_x v)_{L^2(\mathbb{R})} - \Delta t \langle [\partial_n E_{n+1}], v \rangle_\Gamma \\ &\quad + \Delta t (V E_{n+1}, v)_{L^2(\mathbb{R})} + \tau_{n+1} (v|_{(x_l, x_r)}) \quad \forall v \in H^1(\mathbb{R}), \end{aligned}$$

wobei sich für die auftretenden Randterme nach dem Einsetzen der Randbedingungen ergibt:

$$\begin{aligned} \langle [\partial_n E_{n+1}], v \rangle_\Gamma &:= \langle \partial_n e_{n+1}, v \rangle_\Gamma + \langle \partial_n \varphi_{n+1}, v \rangle_\Gamma \\ &= \langle \eta_{n+1} + \theta_{n+1} + \gamma_{n+1}, v \rangle_\Gamma - \langle \gamma_{n+1}, v \rangle_\Gamma \\ &= \langle \eta_{n+1} + \theta_{n+1}, v \rangle_\Gamma. \end{aligned}$$

Wir wählen nun als Testfunktion $v := E_{n+1}$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathfrak{i} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 - \mathfrak{i} (E_n, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} &= \Delta t |E_{n+1}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 + \Delta t (V E_{n+1}, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\quad - \Delta t \langle \eta_{n+1} + \theta_{n+1}, e_{n+1} \rangle_\Gamma + \tau_{n+1}(e_{n+1}) \end{aligned}$$

bzw. aufgeteilt nach Realteil und Imaginärteil

$$\begin{aligned} \Delta t |E_{n+1}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 + \Delta t (V E_{n+1}, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} &= \Im (E_n, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} + \Delta t \Re \langle \eta_{n+1} + \theta_{n+1}, e_{n+1} \rangle_\Gamma \\ &\quad + \Re (\tau_{n+1}(e_{n+1})). \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 - \Re (E_n, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} = -\Delta t \Im \langle \eta_{n+1} + \theta_{n+1}, e_{n+1} \rangle_\Gamma + \Im (\tau_{n+1}(e_{n+1})) \quad (2.35)$$

Wir beginnen mit der Abschätzung im Realteil. V ist nach unten beschränkt, d.h. es gilt $V(x) \geq -C_V$ für ein $C_V \geq 0$. Somit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Delta t |E_{n+1}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &\leq \Delta t \left(|E_{n+1}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 + ((V + C_V)E_{n+1}, E_{n+1})_{L^2(\mathbb{R})} \right) \\ &\stackrel{(2.34)}{\leq} \|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + \Delta t (\|\eta_{n+1}\|_\Gamma + \|\theta_{n+1}\|_\Gamma) \|e_{n+1}\|_\Gamma \\ &\quad + C_V \Delta t \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + |\tau_{n+1}(e_{n+1})|. \end{aligned}$$

Aus dem Imaginärteil (2.35) ergibt sich folgende Abschätzung:

$$\|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \leq \|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + \Delta t (\|\eta_{n+1}\|_\Gamma + \|\theta_{n+1}\|_\Gamma) \|e_{n+1}\|_\Gamma + |\tau_{n+1}(e_{n+1})|.$$

Wir betrachten nun eine gewichtete Kombination der beiden obigen Ungleichungen:

$$\begin{aligned} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \epsilon \Delta t |E_{n+1}|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &\leq (1 + \epsilon) \|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + \epsilon C_V \Delta t \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \\ &\quad + (1 + \epsilon) \Delta t (\|\eta_{n+1}\|_\Gamma + \|\theta_{n+1}\|_\Gamma) \|e_{n+1}\|_\Gamma \\ &\quad + (1 + \epsilon) |\tau_{n+1}(e_{n+1})|. \end{aligned} \quad (2.36)$$

In $\|\theta_{n+1}\|_\Gamma$ kommt noch ein Ausdruck der Form $q_0 \cdot e_{n+1}$ vor. Wir betrachten diesen Term getrennt, und setzen $\hat{\theta}_{n+1} := \theta_{n+1} - (\hat{\psi}_0 - \psi_0) e_{n+1}$. Die Norm von E_{n+1} am Rand lässt sich nach [AF03, Theorem 5.8] durch

$$\|e_{n+1}\|_\Gamma^2 \leq C \|e_{n+1}\|_{H^1(x_l, x_r)} \|e_{n+1}\|_{L^2(x_l, x_r)} \quad (2.37)$$

abschätzen. Mit Hilfe der Young-Ungleichung erhält man daraus:

$$\begin{aligned} \|e_{n+1}\|_{\Gamma}^2 &\leq C \|e_{n+1}\|_{L^2(x_l, x_r)} \|e_{n+1}\|_{H^1(x_l, x_r)} \leq C \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{H^1(\mathbb{R})} \\ &\leq C \left(\left(\delta + \frac{1}{4\delta} \right) \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \delta \|E_{n+1}\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \right). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Um eine passende Gewichtung der beiden Ausdrücke zu erreichen, fordern wir, dass für ein $\gamma > 0$ gilt:

$$\begin{aligned} \gamma &= \delta + \frac{1}{4\delta} \\ \delta &= \gamma \Delta t \epsilon \end{aligned}$$

Die Lösung davon ist gegeben durch $\delta = \sqrt{\frac{\Delta t \epsilon}{4|1 - \Delta t \epsilon|}}$ bzw. $\gamma = (4|1 - \Delta t \epsilon| \Delta t \epsilon)^{-1/2}$. Wir erhalten damit

$$\|e_{n+1}\|_{\Gamma}^2 \leq C \gamma \left(\|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \Delta t \epsilon \|E_{n+1}\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \right). \quad (2.39)$$

Damit folgt mit $\alpha_1 := (1 + \epsilon) \Delta t q_0 C (4|1 - \Delta t \epsilon| \Delta t \epsilon)^{-1/2}$ für (2.36):

$$\begin{aligned} (1 - \alpha_1 - \epsilon \Delta t C_V) \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + (1 - \alpha_1) \epsilon \Delta t \|E_{n+1}\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \\ \leq (1 + \epsilon) \|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + (1 + \epsilon) \Delta t \left(\|\eta_{n+1}\|_{\Gamma} + \|\hat{\theta}_{n+1}\|_{\Gamma} \right) \|e_{n+1}\|_{\Gamma} + (1 + \epsilon) |\tau_{n+1}(e_{n+1})|. \end{aligned}$$

Wir fordern, dass ϵ und q_0 hinreichend klein sind, sodass $\alpha_2 := \epsilon \Delta t C_V + \alpha_1 < 1$. Damit wir am Ende die Stabilität zeigen können sei außerdem $\alpha_2 = \mathcal{O}(\epsilon)$. Dann gilt:

$$\|E_{n+1}\|_{\epsilon}^2 \leq \frac{1 + \epsilon}{1 - \alpha_2} \left(\|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|E_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + \Delta t \left(\|\eta_{n+1}\|_{\Gamma} + \|\hat{\theta}_{n+1}\|_{\Gamma} \right) \|e_{n+1}\|_{\Gamma} + |\tau_{n+1}(e_{n+1})| \right) \quad (2.40)$$

Wir betrachten nun die rechte Seite der Ungleichung (ohne den Vorfaktor $\frac{1+\epsilon}{1-\alpha_2}$) genauer. Zunächst folgt für die ersten beiden Terme aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung für Summen:

$$\begin{aligned} &\|E_n\|_{L^2} \|E_{n+1}\|_{L^2} + \Delta t \left(\|\eta_{n+1}\|_{\Gamma} + \|\hat{\theta}_{n+1}\|_{\Gamma} \right) \|e_{n+1}\|_{\Gamma} \\ &\leq \sqrt{\|E_n\|_{L^2}^2 + \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \left(\|\eta_{n+1}\|_{\Gamma}^2 + \|\hat{\theta}_{n+1}\|_{\Gamma}^2 \right)} \cdot \sqrt{\|E_{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\epsilon \Delta t}{C_{tr}} \|e_{n+1}\|_{\Gamma}^2} \\ &\leq \sqrt{\|E_n\|_{L^2}^2 + \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \left(\|\eta_{n+1}\|_{\Gamma}^2 + \|\hat{\theta}_{n+1}\|_{\Gamma}^2 \right)} \cdot \sqrt{1 + \epsilon \Delta t} \sqrt{\|E_{n+1}\|_{L^2}^2 + \epsilon \Delta t \|E_{n+1}\|_{H^1}^2} \\ &=: a \|E_{n+1}\|_{\epsilon}. \end{aligned}$$

Wobei wir am Ende die Spurgleichung für Sobolev-Funktionen, $\|e_{n+1}\|_{\Gamma}^2 \leq C_{tr} \|e_{n+1}\|_{H^1(x_l, x_r)}^2$ verwendet haben.

Außerdem erinnern wir uns an die Abschätzung für den Konsistenzfehler:

$$|\langle \tau_{n+1}, e_{n+1} \rangle| \leq \tau_{1, n+1} \|e_{n+1}\|_{\epsilon} + \tau_{0, n+1} \|e_n\|_{L^2(x_l, x_r)}. \quad (2.41)$$

Das heißt, für die rechte Seite aus (2.40) gilt mit $\Theta := \frac{1+\epsilon}{1-\alpha_2}$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|E_{n+1}\|_\epsilon^2 &\leq \Theta (a + \tau_{1,n+1}) \|E_{n+1}\|_\epsilon + \Theta \tau_{0,n+1} \|E_n\|_{L^2} \\ &\leq \Theta^2 \frac{(a + \tau_{1,n+1})^2}{2} + \frac{\|E_{n+1}\|_\epsilon^2}{2} + \frac{\Theta^2 \tau_{0,n+1}^2}{2\epsilon} + \frac{\epsilon \|E_n\|_{L^2}^2}{2} \\ &\leq \Theta^2 (1 + \epsilon) \frac{a^2}{2} + \Theta^2 \left(1 + \frac{1}{\epsilon}\right) \frac{\tau_{1,n+1}^2}{2} + \frac{\|E_{n+1}\|_\epsilon^2}{2} + \frac{\Theta^2 \tau_{0,n+1}^2}{2\epsilon} + \frac{\epsilon \|E_n\|_{L^2}^2}{2}. \end{aligned}$$

Bringt man den Term mit $\|E_{n+1}\|_\epsilon$ auf die linke Seite und multipliziert mit 2, erhält man

$$\|E_{n+1}\|_\epsilon^2 \leq (1 + \alpha_3) a^2 + (1 + \alpha_4) \frac{C}{\epsilon} \tau_{1,n+1}^2 + (1 + \alpha_5) \frac{\tau_{0,n+1}^2}{\epsilon} + \epsilon \|E_n\|_{L^2}^2,$$

wobei $\alpha_k = \mathcal{O}(\epsilon)$ gilt.

Schließlich betrachten wir noch den in a auftretenden Term $\hat{\theta}_{n+1}$, um auch dafür auf die Form $\|E_n\|_\epsilon$ zu kommen. Wir verwenden wieder die gewichtete Spurgleichung für Sobolev-Funktionen:

$$\begin{aligned} \|\hat{\theta}_{n+1}\|_\Gamma &\leq \left\| \sum_{k=1}^{n+1} q_k e_{n+1-k} \right\|_\Gamma \leq \max_{k=0,\dots,n} \|e_k\|_\Gamma \sum_{k=1}^{n+1} |q_k| \\ &\leq \max_{k=0,\dots,n} C(\Delta t \epsilon)^{-1/4} \sqrt{\|E_k\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \Delta t \epsilon |E_k|_{H^1(\mathbb{R})}^2} \sum_{k=1}^{n+1} |q_k|. \end{aligned}$$

Das heißt insgesamt:

$$\|\hat{\theta}_{n+1}\|_\Gamma^2 \leq C(\Delta t \epsilon)^{-1/2} \left(\sum_{k=1}^{n+1} |q_k| \right)^2 \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2.$$

Fordern wir nun an die Approximation der Quadraturgewichte, dass $\frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} C(\Delta t \epsilon)^{-1/2} \left(\sum_{k=1}^{n+1} |q_k| \right)^2 \leq \epsilon$, dann erhalten wir insgesamt

$$\begin{aligned} a^2 &\leq (1 + \epsilon \Delta t) \left(\|E_n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \epsilon \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2 \right) + (1 + \epsilon \Delta t) \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \|\eta_{n+1}\|_\Gamma^2 \\ &\leq (1 + \epsilon \Delta t) \left(\|E_n\|_\epsilon^2 + \epsilon \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2 \right) + (1 + \epsilon \Delta t) \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \|\eta_{n+1}\|_\Gamma^2 \\ &\leq (1 + \epsilon \Delta t) (1 + \epsilon) \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2 + (1 + \epsilon \Delta t) \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \|\eta_{n+1}\|_\Gamma^2. \end{aligned}$$

Fasst man die vorigen Abschätzungen zusammen, so erhält man insgesamt

$$\|E_{n+1}\|_\epsilon^2 \leq (1 + \gamma) \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2 + f_{n+1}^2 + g_{n+1}^2,$$

mit

$$\begin{aligned} f_k^2 &:= (1 + \alpha_3)(1 + \epsilon \Delta t) \frac{\Delta t C_{tr}}{\epsilon} \|\eta_k\|_\Gamma^2, \\ g_k^2 &:= \frac{C}{\epsilon} (\tau_{0,k}^2 + \tau_{1,k}^2), \\ \gamma &= \mathcal{O}(\epsilon). \end{aligned}$$

Das Gronwall Lemma, angewendet auf die Größe $y_n := \max_{k=0,\dots,n} \|E_k\|_\epsilon^2$ liefert dann die endgültige Abschätzung:

$$\|E_{n+1}\|_\epsilon^2 \leq \left(\|E_0\|_\epsilon^2 + \sum_{k=0}^n f_k^2 + g_k^2 \right) e^{n\gamma}.$$

Ist insbesondere $\epsilon \sim \Delta t$, so gilt für eine von Δt unabhängige Konstante C :

$$\|E_{n+1}\|_\epsilon^2 \leq \left(\|E_0\|_\epsilon^2 + \sum_{k=0}^n f_k^2 + g_k^2 \right) e^{CT}.$$

□

Abschließend möchten wir noch die Voraussetzung an die Ortsdiskretisierung aus dem vorigen Lemma für den Fall, dass zur Diskretisierung der Gleichung ein Galerkinverfahren verwendet wird überprüfen. Es gilt das folgende Lemma:

Lemma 2.16. *Sei V_h ein endlich-dimensionaler Teilraum von $H^1(x_l, x_r)$. Für alle $n \in \mathbb{N}$ ist die Galerkin-Approximation $\hat{u}^{n+1} \in V_h$ gegeben als Lösung von*

$$\mathfrak{i}(\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n, v)_{L^2(x_l, x_r)} = \Delta t (\partial_x \hat{u}^{n+1}, \partial_x v)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t \langle \partial_n \hat{u}^{n+1}, v \rangle_\Gamma + \Delta t (V \hat{u}^{n+1}, v)_{L^2(x_l, x_r)}$$

für alle v in V_h , wobei

$$\partial_n \hat{u}^{n+1} := \sum_{k=0}^{n+1} \hat{\psi}_k \hat{u}^{n-k} \quad \text{am Rand von } (x_l, x_r).$$

Ist das Potential V beschränkt, dann erfüllt \hat{u}^{n+1} die Voraussetzungen aus (2.41) mit

$$\begin{aligned} \tau_{1,n+1} &\leq C \|u^{n+1} - v_h\|_{H^1}, \\ \tau_{0,n+1} &\leq C \|u^{n+1} - v_h\|_{L^2} \end{aligned}$$

für beliebige $v_h \in V_h$ mit $v_h = u^{n+1}$ an $x = x_l, x_r$. Das heißt der Konsistenzfehler hängt nur von der Approximierbarkeit der semidiskreten Lösung durch den Raum V_h ab.

Beweis. Der Konsistenzfehler τ aus (2.31) ergibt sich für das Galerkinverfahren zu

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(v) &= \mathfrak{i}(\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n, v)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t (\partial_x \hat{u}^{n+1}, \partial_x v)_{L^2(x_l, x_r)} + \Delta t \langle \partial_n \hat{u}^{n+1}, v \rangle_\Gamma \\ &\quad - \Delta t (V \hat{u}^{n+1}, v)_{L^2(x_l, x_r)}. \end{aligned}$$

Aus der Definition der Galerkin-Lösung folgt, dass $\tau(v_h) = 0$ für $v_h \in V_h$. Daher gilt für ein beliebiges $v_h \in V_h$ mit zusätzlich $v_h(x_l) = v(x_l)$ und $v_h(x_r) = v(x_r)$ aufgrund der Linearität von τ_{n+1} :

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(v) &= \tau_{n+1}(v - v_h) \\ &= \mathfrak{i}(\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n, v - v_h)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t (\partial_x \hat{u}^{n+1}, \partial_x v - \partial_x v_h)_{L^2(x_l, x_r)} \\ &\quad - \Delta t (V \hat{u}^{n+1}, v - v_h)_{L^2(x_l, x_r)}. \end{aligned}$$

Wir subtrahieren die schwache Form der kontinuierlichen Gleichung (2.30) und erhalten

$$\begin{aligned} \tau_{n+1}(v) &= i \left(\hat{u}^{n+1} - u^{n+1} - \hat{u}^n + u^n, v - v_h \right)_{L^2(x_l, x_r)} \\ &\quad - \Delta t \left(\partial_x \hat{u}^{n+1} - \partial_x u^{n+1}, \partial_x v - \partial_x v_h \right)_{L^2(x_l, x_r)} - \Delta t \left(V \left(\hat{u}^{n+1} - u^{n+1} \right), v - v_h \right)_{L^2(x_l, x_r)}. \end{aligned}$$

Aus der Cauchy-Schwarz Ungleichung folgt mit $e_k := u^k - \hat{u}^k$:

$$\begin{aligned} |\tau_{n+1}(v)| &\leq (\|e_{n+1}\|_{L^2} + \|e_n\|_{L^2}) \|v - v_h\|_{L^2} + \Delta t |e_{n+1}|_{H^1} |v - v_h|_{H^1} \\ &\quad + \Delta t \|V\|_{L^\infty} \|e_{n+1}\|_{L^2} \|v - v_h\|_{L^2} \\ &\leq C \|e_{n+1}\|_{L^2} \|v - v_h\|_{L^2} + \Delta t |e_{n+1}|_{H^1} |v - v_h|_{H^1} + \|e_n\|_{L^2} \|v - v_h\|_{L^2} \\ &\leq C \sqrt{\|e_{n+1}\|_{L^2}^2 + (\Delta t)^2 |e_{n+1}|_{H^1}^2} \|v - v_h\|_{H^1} + \|e_n\|_{L^2} \|v - v_h\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Wir sind am Konsistenzfehler für $v = e_{n+1}$ interessiert. Setzen wir $v_h := \hat{u}^{n+1} + \hat{v}_h$, wobei $\hat{v}_h \in \hat{V}_h^{n+1} := \{v \in V_h : v = u^{n+1} \text{ am Rand}\}$, dann ist $e_{n+1} - v_h = u^{n+1} - \hat{v}_h$, und es folgt die Behauptung. \square

Korollar 2.17. *Sei insbesondere V_h ein Finite-Element-Raum der Ordnung p zur Gitterweite h . Außerdem gelte für die exakten semidiskreten Lösungen u^n , dass u^n für alle $n \in \mathbb{N}$ in $H^{p+1}(x_l, x_r)$ liegt. Dann gilt*

$$\begin{aligned} \tau_{0,n+1} &\leq C h^{p+1} \|u^n\|_{H^{p+1}}, \\ \tau_{1,n+1} &\leq C h^p \|u^n\|_{H^{p+1}}. \end{aligned}$$

Beweis. Ein Beweis der entsprechenden Approximationseigenschaft für Finite Elemente findet sich in jedem Lehrbuch zum Thema, etwa [Bra07]. \square

Somit erhalten wir insgesamt für das volldiskrete Eulerverfahren:

Satz 2.18. *Sei Δt hinreichend klein und $n\Delta t \leq T$.*

Für die Diskretisierung der Schrödingergleichung werde ein implizites Eulerverfahren verwendet, die Koeffizienten $\hat{\psi}_k$ werden durch Approximation der Cauchy-Integrale zu beliebigem Radius $\lambda \in (0, 1)$ mittels Trapezregel mit $Q > n$ Quadraturpunkten berechnet, und für die Ortsdiskretisierung komme eine Finite-Elemente-Methode der Ordnung p zum Einsatz. Sei $u_0 \in \text{dom}(\mathbf{H}^2)$. Die exakte semidiskrete Lösung u^n liege für alle n in $H^{p+1}(x_l, x_r)$, und wir fordern, dass $\|u^n\|_{H^{p+1}} \leq C \|u_0\|_{H^{p+1}}$.

Dann gilt mit $t_n := n\Delta t$:

$$\begin{aligned} \|u(t_n) - \hat{u}^n\|_{L^2(x_l, x_r)} &\leq CT\Delta t \|\mathbf{H}^2 u_0\|_{L^2(x_l, x_r)} + C\sqrt{T} \frac{h^p}{\Delta t} \|u_0\|_{H^{p+1}(x_l, x_r)} \\ &\quad + C \frac{T^{3/2}}{\Delta t^2} \frac{\lambda^{Q+1}}{1 - \lambda^{Q+1}} \|u_0\|_{H^{p+1}(x_l, x_r)}, \end{aligned}$$

das heißt, das volldiskrete Verfahren liefert für quadratische finite Elemente und $h \sim \Delta t$ zumindest in der L^2 -Norm die optimale Konvergenzrate.

Beweis. Einschleiben der semidiskreten Lösung liefert

$$\|u(t_n) - \hat{u}^n\|_{L^2(x_l, x_r)} \leq \|u(t_n) - u^n\|_{L^2(x_l, x_r)} + \|u^n - \hat{u}^n\|_{L^2(x_l, x_r)}. \quad (2.42)$$

Der erste Summand lässt sich mit Satz 2.11 abschätzen. Für den zweiten Term verwenden wir Lemma 2.15. Dort ergibt sich, da $u_0 = \hat{u}_0$ mit Hilfe des vorigen Korollars:

$$\begin{aligned} \|u^n - \hat{u}^n\|_{\Delta t}^2 &\leq C \sum_{k=0}^n \left\| \sum_{j=0}^k (\psi_j - \hat{\psi}_j) u^{n-j} \right\|_{\Gamma}^2 + \Delta t^{-1} \sum_{k=0}^n \tau_{0,k}^2 + \tau_{1,k}^2 \\ &\leq C n^3 \max_{k=0,\dots,n} |\psi_k - \hat{\psi}_k|^2 C_{tr} \max_{k=0,\dots,n} \|u^k\|_{H^1(x_l, x_r)}^2 \\ &\quad + \Delta t^{-1} n C_{fem} (h^{2p+2} + h^{2p}) \max_{k=0,\dots,n} \|u^k\|_{H^{p+1}}^2. \end{aligned}$$

Aus Lemma 2.13 folgt, dass der Quadraturfehler exponentiell abnimmt, mit $\max |\psi_k - \hat{\psi}_k|^2 \leq \frac{C_q}{\Delta t} \left(\frac{\lambda^{Q+1}}{1-\lambda^{Q+1}} \right)^2$. Der Finite-Element-Fehler wird dominiert durch den h^{2p} Term. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \|u^n - \hat{u}^n\|_{\Delta t}^2 &\leq C \left(T^3 \frac{1}{(\Delta t)^4} \left(\frac{\lambda^{Q+1}}{1-\lambda^{Q+1}} \right)^2 + T \left(\frac{h^p}{\Delta t} \right)^2 \right) \|u_0\|_{H^{p+1}}^2 \\ &\leq C \left(T^{3/2} \frac{1}{(\Delta t)^2} \left(\frac{\lambda^{Q+1}}{1-\lambda^{Q+1}} \right) + \sqrt{T} \left(\frac{h^p}{\Delta t} \right) \right)^2 \|u_0\|_{H^{p+1}}^2. \end{aligned}$$

Wir verwenden nur den L^2 -Anteil der linken Seite und können damit insgesamt in (2.42) abschätzen,

$$\|u(t_n) - \hat{u}^n\|_{L^2(x_l, x_r)} \leq CT\Delta t \|\mathbf{H}^2 u_0\| + C\sqrt{T} \frac{h^p}{\Delta t} \|u_0\|_{H^{p+1}} + CT^{3/2} \left(\frac{1}{\Delta t} \right)^2 \frac{\lambda^{Q+1}}{1-\lambda^{Q+1}} \|u_0\|_{H^{p+1}}.$$

□

3. Runge-Kutta Verfahren

In diesem Kapitel werden wir nun versuchen, das Vorgehen zum Herleiten von transparenten Randbedingungen auf den Fall zu verallgemeinern, bei dem zur Semidiskretisierung in der Zeit kein Mehrschrittverfahren sondern ein Runge-Kutta Verfahren verwendet wird. Dies hat den Vorteil, dass im Gegensatz zu Mehrschrittverfahren, welche im A-stabilen Fall nur Ordnung 2 zulassen (2. Dahlquist Schranke) Verfahren beliebiger Ordnung zur Verfügung stehen.

Wir beginnen damit, die Schrödingergleichung auf dem Ganzraum durch ein A-stabiles Runge-Kutta Verfahren, gegeben durch das Butcher-Tableau $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$ (für Beispiele Siehe Anhang C) in der Zeit zu diskretisieren. Wir fordern zusätzlich zur A-Stabilität des Verfahrens die Invertierbarkeit der Matrix A .

Für die Schrödingergleichung

$$iu_t = \mathbf{H}u$$

ist die Approximation zum Zeitpunkt $t_{n+1} = t_n + h$ gegeben durch:

$$U_i^n = u_n + h \sum_{j=1}^m a_{ij} (-i\mathbf{H}U_j^n), \quad i = 1, \dots, m, \tag{3.1}$$

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=1}^m b_j (-i\mathbf{H}U_j^n). \tag{3.2}$$

Um die Notation zu vereinfachen, definieren wir den Matrix-Hamiltonian

$$\underline{\mathbf{H}} := \text{diag}(\mathbf{H}, \dots, \mathbf{H}) = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & & & \\ & \mathbf{H} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{H} \end{pmatrix},$$

sowie den Einsvektor

$$\mathbf{1} := (1, 1, \dots, 1)^T.$$

Damit lässt sich (3.1) schreiben als

$$U^n = u_n \cdot \mathbf{1} - ihA\underline{\mathbf{H}}U^n. \tag{3.3}$$

Da wir nur Verfahren mit invertierbarer Matrix A betrachten, können wir die Gleichung für u_{n+1} vereinfachen, indem wir die Gleichung der U^n einsetzen. Es ergibt sich:

$$u_{n+1} = (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) u_n + \mathbf{b}^T A^{-1} U^n \tag{3.4}$$

Definition 3.1. Ein Runge-Kutta Verfahren heißt A-stabil, falls für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $\Re(z) \leq 0$ die Matrix $\mathbf{I} - zA$ nicht singular ist, und die Stabilitätsfunktion

$$R(z) := 1 + z\mathbf{b}^T (\mathbf{I} - zA)^{-1} \mathbf{1} \tag{3.5}$$

dort die Abschätzung $|R(z)| \leq 1$ erfüllt.

Für Verfahren mit invertierbarem A besitzt die Stabilitätsfunktion auch folgende Darstellung, welche wir öfters verwenden werden (ein Beweis für die Äquivalenz findet sich etwa in [BLM11]):

$$R(z) = (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) + \mathbf{b}^T A^{-1} (I - zA)^{-1} \mathbf{1}. \quad (3.6)$$

Lemma 3.2. *Für die Koeffizientenmatrix A eines A -stabilen Runge-Kutta Verfahrens gilt, falls A invertierbar ist:*

$$\sigma(A) \subset \{\lambda \in \mathbb{C} : \Re(\lambda) > 0\}.$$

Beweis. Nach Voraussetzung gilt $0 \notin \sigma(A)$.

Für $\lambda \neq 0$ mit $\Re(\lambda) \leq 0$ gilt:

$$A - \lambda \mathbf{I} = -\lambda \left(\mathbf{I} + \frac{1}{\lambda} A \right)$$

Es gilt

$$\Re\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \Re\left(\frac{\bar{\lambda}}{|\lambda|^2}\right) \leq 0.$$

Da das Verfahren A -stabil ist, ist $(\mathbf{I} + \frac{1}{\lambda}A)$ daher invertierbar und somit $\lambda \notin \sigma(A)$. \square

Es gelten folgende a-priori Schranken, welche wir für die Existenz und die Differenzierbarkeit der Z -Transformierten der Lösungsfolge benötigen werden.

Lemma 3.3. *Sei das Potential V zusätzlich zu den allgemeinen Annahmen aus Kapitel 1 auch noch nach unten beschränkt, d.h. $V(x) \geq -C \forall x \in \mathbb{R}$.*

Dann existieren die Approximationslösungen für ein A -stabiles Runge-Kutta Verfahren. Sie erfüllen $\mathbf{U}^n \in \text{dom } \mathbf{H} \subset (H^2(\mathbb{R}))^m$. Es gelten die folgenden Abschätzungen:

$$\|u_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad (3.7)$$

$$\|\mathbf{U}^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad (3.8)$$

$$\|\mathbf{U}^n\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq \frac{C}{\sqrt{h}} \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad (3.9)$$

wobei die Konstanten C vom verwendeten Verfahren, aber nicht von n oder der Schrittweite h abhängen.

Gilt zusätzlich $u_0 \in \text{dom } \mathbf{H}$ sowie $V \in L^\infty(\mathbb{R})$, so gilt eine analoge Abschätzung mit einer Konstante unabhängig von h . Es gilt:

$$\|\mathbf{H}u^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|\mathbf{H}u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} \quad (3.10)$$

sowie

$$\|\mathbf{U}^n\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq C \left(\|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|\mathbf{H}u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} \right). \quad (3.11)$$

Beweis. Wir zeigen zunächst die Abschätzung für die u_n . Da \mathbf{H} selbstadjungiert ist können wir den Spektralsatz (Satz 1.6) anwenden. Um Verwechslungen mit den Approximationslösungen zu vermeiden bezeichnen wir die unitäre Transformation mit T . Es ist einfach einzusehen (die entsprechende Rechnung verläuft analog zu der später im Beweis von Lemma 3.9 vorgeführten,

wobei dort aber noch zusätzliche Schwierigkeiten zu beachten sind), dass die transformierte Variable $\hat{u}_{n+1} := Tu_{n+1}$ gegeben ist durch

$$\begin{aligned}\hat{u}_{n+1}(s) &= (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) \hat{u}_n(s) + (\mathbf{I} - ihf(s)A)^{-1} (\hat{u}_n(s) \mathbf{1}) \\ &= R(-ihf(s)) \hat{u}_{n+1}(s),\end{aligned}$$

wobei wir für die Stabilitätsfunktion des RK-Verfahrens $R(z)$ die Darstellung aus (3.6) verwendet haben.

Da das verwendete Verfahren A-stabil ist, gilt $|R(it)| \leq 1 \quad \forall t \in \mathbb{R}$. Daher gilt aufgrund der Unitarität von T :

$$\|u_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|\hat{u}_{n+1}\|_{L^2(\Omega)} = \|R(-ihf(\cdot)) \hat{u}_n(\cdot)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\hat{u}_n\|_{L^2(\Omega)} = \|u_n\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Induktiv folgt damit sofort

$$\|u_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Außerdem gilt:

$$(T\mathbf{H}u_{n+1})(s) = (T\mathbf{H}T^* \hat{u}_{n+1})(s) = f(s) \hat{u}_{n+1}(s) = f(s) R(-ihf(s)) \hat{u}_n(s).$$

Für die Norm ergibt sich somit:

$$\begin{aligned}\|\mathbf{H}u_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &= \|T\mathbf{H}u_{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |f(s) R(-ihf(s)) \hat{u}_n|^2 d\mu(s) \\ &\leq \int_{\Omega} |f(s) \hat{u}_n|^2 d\mu(s) = \|T(\mathbf{H}u_n)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|\mathbf{H}u_n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2.\end{aligned}$$

Ist also $\|\mathbf{H}u_0\|_{L^2(\mathbb{R})} < \infty$ so folgt induktiv der letzte Teil des Satzes.

Als nächstes zeigen wir, dass wir die L^2 -Norm der Zwischenstufen gleichmäßig in n beschränken können. Wir starten dabei von (3.3), multiplizieren mit A^{-1} und bringen die Matrix auf Jordan-Normalform, $A^{-1} = XJX^{-1}$:

$$\begin{aligned}(A^{-1} + ih\mathbf{H}) \mathbf{U}^n &= u_n A^{-1} \mathbf{1} \\ \iff X(J + ih\mathbf{H}) X^{-1} \mathbf{U}^n &= u_n A^{-1} \mathbf{1} \\ \iff (J + ih\mathbf{H}) X^{-1} \mathbf{U}^n &= u_n X A^{-1} \mathbf{1}\end{aligned}$$

Zur einfacheren Notation setzen wir $\mathbf{V} := X^{-1} \mathbf{U}^n$ und $\mathbf{v} := u_n X A^{-1} \mathbf{1}$.

Da J Jordan-Normalform hat und \mathbf{H} ein Diagonaloperator ist, können wir uns im Folgenden auf das Betrachten eines einzelnen Jordan-Kästchens beschränken. Sei also J_j ein Jordan-Kästchen der Größe k zum Eigenwert λ_j , und seien \mathbf{V}^j sowie \mathbf{v}^j die dazugehörigen Teilvektoren von \mathbf{V} bzw. \mathbf{v} . Dann hat die obige Gleichung die Gestalt:

$$\begin{pmatrix} \lambda_j & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_j & 1 \\ & & & \lambda_j \end{pmatrix} \mathbf{V}^j + ih \begin{pmatrix} \mathbf{H} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{H} \end{pmatrix} \mathbf{V}^j = \mathbf{v}^j$$

Wir möchten nun induktiv zeigen, dass gilt:

$$\|\mathbf{V}_k^j\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \|\mathbf{v}^j\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Für die letzte Zeile gilt:

$$\lambda_j \mathbf{V}_k^j + ih \mathbf{H} \mathbf{V}_k^j = \mathbf{v}_k^j. \quad (3.12)$$

Da der Operator \mathbf{H} selbstadjungiert ist, ist sein Spektrum rein reell. Das heißt $\frac{1}{ih} \lambda_j$ ist in der Resolventenmenge enthalten und der Operator auf der linken Seite stetig invertierbar. Daraus sieht man, dass die obige Gleichung eine Lösung hat mit $\mathbf{V}_k^j \in \text{dom } \mathbf{H} \subset H^2(\mathbb{R})$.

Existiere nun eine Lösung für den $l+1$ -ten Eintrag. Wir zeigen: sie existiert auch für den l -ten. Die l -te Zeile der Gleichung ist nach einfacher Umformung

$$\left(\frac{\lambda_j}{ih} + \mathbf{H} \right) \mathbf{V}_l^j = \frac{1}{ih} \left(\mathbf{v}_l^j - \mathbf{V}_{l+1}^j \right). \quad (3.13)$$

Wieder kann der Operator auf der linken Seite stetig invertiert werden, und es ergibt sich mit Hilfe der Induktionsvoraussetzung die Existenz von $\mathbf{V}_k^j \in \text{dom } \mathbf{H} \subset H^2(\mathbb{R})$.

Transformiert man die \mathbf{V} nun wieder zurück, so erhält man eine Lösung $\mathbf{U}^n \in \text{dom } \mathbf{H} \subset H^2(\mathbb{R})$.

Multiplizieren wir Gleichung (3.12) mit $\overline{\mathbf{V}_k^j}$ und integrieren so erhalten wir:

$$\lambda_j \left\| \mathbf{V}_k^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + ih \left(\mathbf{H} \mathbf{V}_k^j, \mathbf{V}_k^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} = \left(\mathbf{v}_k^j, \mathbf{V}_k^j \right)_{L^2(\mathbb{R})}.$$

\mathbf{H} ist ein selbstadjungierter Operator. Daraus folgt, dass das auftretende Skalarprodukt reell ist. Wenn wir nun also nur noch den Realteil der Gleichung betrachten gilt:

$$\left\| \mathbf{V}_k^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = \frac{1}{\Re(\lambda_j)} \Re \left(\mathbf{v}_k^j, \mathbf{V}_k^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} \leq \frac{1}{|\Re(\lambda_j)|} \left\| \mathbf{v}_k^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \left\| \mathbf{V}_k^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Das heißt, die Abschätzung gilt für die k -te Zeile. Gelte die Abschätzung nun für den $l+1$ -ten Eintrag. Wir zeigen, dass sie auch für den l -ten gilt:

Die l -te Zeile der Gleichung ist

$$\lambda_j \mathbf{V}_l^j + \mathbf{V}_{l+1}^j + ih \mathbf{H} \mathbf{V}_l^j = \mathbf{v}_l^j.$$

Ganz analoges Vorgehen zum vorigen Fall liefert dann:

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{V}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &= \frac{1}{\Re(\lambda_j)} \Re \left(\mathbf{v}_l^j, \mathbf{V}_l^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} - \frac{1}{\Re(\lambda_j)} \Re \left(\mathbf{V}_{l+1}^j, \mathbf{V}_l^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\leq \frac{1}{|\Re(\lambda_j)|} \left(\left\| \mathbf{v}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left\| \mathbf{V}_{l+1}^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \right) \left\| \mathbf{V}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Kürzen und Einsetzen der Induktionsvoraussetzung liefert dann die Behauptung.

Da \mathbf{V} und \mathbf{v} durch von n unabhängige Transformationen aus \mathbf{U}^n bzw u_n hervorgehen folgt damit aus dem ersten Schritt:

$$\left\| \mathbf{U}^n \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \left\| u_n \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \left\| u_0 \right\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Als letztes bleibt noch, die H^1 -Norm abzuschätzen. Wir beginnen wieder mit der ursprünglichen Gleichung für die \mathbf{U}^n :

$$(A^{-1} + ih \mathbf{H}) \mathbf{U}^n = u_n \mathbb{1}.$$

Das bedeutet für die j -te Komponente:

$$\begin{aligned} ih\mathbf{H}U_j^n &= u_n - (A^{-1}\mathbf{U}^n)_j \iff \\ ih(-\partial_x^2 U_j^n + V(x)U_j^n) &= u_n - (A^{-1}\mathbf{U}^n)_j. \end{aligned}$$

Wir multiplizieren mit $\overline{U_j^n}$, integrieren partiell und erhalten

$$ih \int_{\mathbb{R}} |\partial_x U_j^n|^2 + ih \int_{\mathbb{R}} V(x) |U_j^n|^2 = \int_{\mathbb{R}} \left(u_n - (A^{-1}\mathbf{U}^n)_j \right) \overline{U_j^n}.$$

Da das Potential nach unten beschränkt ist, mit $V(x) \geq -C$, lässt sich weiter abschätzen:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} |\partial_x U_j^n|^2 &= - \int_{\mathbb{R}} V(x) |U_j^n|^2 + \frac{1}{ih} \int_{\mathbb{R}} \left(u_n - (A^{-1}\mathbf{U}^n)_j \right) \overline{U_j^n} \\ &\leq C \|U_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \frac{1}{h} \|u_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|U_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \frac{1}{h} \|A^{-1}\| \|\mathbf{U}^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|U_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\leq C(h) \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2, \end{aligned}$$

wobei die letzte Abschätzung aus den vorigen Schritten folgt.

Um die gleichmäßige Abschätzung in h zu bekommen, gehen wir zurück zu Gleichung (3.12) bzw. (3.13). Für den j -ten Eintrag gilt:

$$\mathbf{H}\mathbf{V}_l^j = \frac{1}{ih} \left(\mathbf{v}_l^j - \mathbf{V}_{l+1}^j - \lambda_j \mathbf{V}_l^j \right).$$

Wir multiplizieren mit ih und dann dem komplex Konjugierten der rechten Seite und integrieren über \mathbb{R} . Somit erhalten wir:

$$ih \left(\mathbf{H}\mathbf{V}_l^j, \left(\mathbf{v}_l^j - \mathbf{V}_{l+1}^j - \lambda_j \mathbf{V}_l^j \right) \right)_{L^2(\mathbb{R})} = \left\| \left(\mathbf{v}_l^j - \mathbf{V}_{l+1}^j - \lambda_j \mathbf{V}_l^j \right) \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2.$$

Das heißt der Imaginärteil der Gleichung erfüllt:

$$h\Re \left(\mathbf{H}\mathbf{V}_l^j, \left(\mathbf{v}_l^j - \mathbf{V}_{l+1}^j - \lambda_j \mathbf{V}_l^j \right) \right)_{L^2(\mathbb{R})} = 0.$$

Aus der Selbstadjungiertheit von \mathbf{H} folgt:

$$\Re(\lambda_j) \left(\mathbf{H}\mathbf{V}_l^j, \mathbf{V}_l^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} = \Re \left(\mathbf{V}_l^j, \mathbf{H}\mathbf{v}_l^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} - \Re \left(\left(\mathbf{H}\mathbf{V}_l^j, \mathbf{V}_{l+1}^j \right)_{L^2(\mathbb{R})} \right).$$

Einsetzen der Definition von \mathbf{H} und partielle Integration liefert zusammen mit der Cauchy-Schwarz Ungleichung:

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{V}_l^j \right|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &\leq \frac{1}{|\Re(\lambda_j)|} \left\| \mathbf{V}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \left\| \mathbf{H}\mathbf{v}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|V(x)\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \left\| \mathbf{V}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \\ &\quad + \frac{1}{|\Re(\lambda_j)|} \left(\left| \mathbf{V}_l^j \right|_{H^1(\mathbb{R})} \left| \mathbf{V}_{l+1}^j \right|_{H^1(\mathbb{R})} + \|V(x)\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \left\| \mathbf{V}_l^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \left\| \mathbf{V}_{l+1}^j \right\|_{L^2(\mathbb{R})} \right). \end{aligned}$$

Setzt man die bereits bekannten Abschätzungen zusammen mit (3.10) ein, so erhält man, indem man wieder mit Hilfe der Youngschen Ungleichung den H^1 -Term mit hinreichend kleinem Gewicht auf die linke Seite bringt

$$\gamma \left| \mathbf{V}_l^j \right|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_1 \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_2 \|\mathbf{H}u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_3 \left| \mathbf{V}_{l+1}^j \right|_{H^1(\mathbb{R})}^2.$$

Für $l = k$ gilt die selbe Aussage, wobei der Term von V_{l+1}^j verschwindet. Dadurch lässt sich wieder induktiv die Aussage für die anderen l gewinnen. \square

Mit diesen Abschätzungen können wir nun wieder über die Methode der erzeugenden Funktion die transparenten Randbedingungen für die Lösungsfolge \mathbf{U}^n herleiten. Wir betrachten zunächst die Gleichung für die Zwischenstufen \mathbf{U}^n .

Multiplikation mit z^n und Summation über alle $n = 1 \dots N$ liefert:

$$\sum_{n=0}^N z^n \mathbf{U}^n = \sum_{n=0}^N u_n z^n \cdot \mathbf{1} - ih \sum_{n=0}^N A \underline{\mathbf{H}} z^n \mathbf{U}^n.$$

Wir möchten wieder die Abgeschlossenheit von $\underline{\mathbf{H}}$ ausnutzen und bringen die Gleichung daher auf die explizite Form:

$$\frac{iA^{-1}}{h} \sum_{n=0}^N z^n \mathbf{U}^n - \frac{iA^{-1}}{h} \sum_{n=0}^N u_n z^n \mathbf{1} = \underline{\mathbf{H}} \sum_{n=0}^N z^n \mathbf{U}^n.$$

Aus den a-priori Schranken erhalten wir, dass sowohl die Reihe $\sum_{n=0}^N z^n \mathbf{U}^n$ als auch die gesamte linke Seite der Gleichung für alle $|z| < 1$ (im L^2 -Sinn) konvergiert. Wir können also wegen der Abgeschlossenheit von $\underline{\mathbf{H}}$ den Grenzübergang durchführen und erhalten als Gleichung für die Z-Transformierten

$$\frac{iA^{-1}}{h} \left(\hat{\mathbf{U}}(z) - \hat{u}(z) \cdot \mathbf{1} \right) = \underline{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}}(z), \quad (3.14)$$

beziehungsweise durch einfache Umformung

$$\hat{\mathbf{U}}(z) = \hat{u}(z) \cdot \mathbf{1} - ih A \underline{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}}(z). \quad (3.15)$$

Aus Gleichung (3.2) erhält man:

$$u_{n+1} = u_n - ih \mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} \mathbf{U}^n.$$

Multipliziert man mit z^n ergibt sich:

$$z^{-1} (u_{n+1} z^{n+1}) = u_n z^n - ih \mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} z^n \mathbf{U}^n.$$

Es ist einfach einzusehen, dass $\mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} \mathbf{U}^n$ auch geschrieben werden kann als $\underline{\mathbf{H}} \mathbf{b}^T \mathbf{U}^n$. Da $\underline{\mathbf{H}}$ abgeschlossen ist, können wir analog zum vorigen Vorgehen über alle n summieren, den auftretenden Grenzübergang mit $\underline{\mathbf{H}}$ vertauschen und den Operator wieder auf die Form $\mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}}$ bringen. Einsetzen der Definition der Z-Transformierten ergibt dann:

$$z^{-1} (\hat{u}(z) - u_0) = \hat{u}(z) - ih \mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}}(z).$$

u_0 verschwindet außerhalb von (x_l, x_r) , das heißt dort gilt:

$$\left(\frac{1-z}{z} \right) \hat{u}(z) = -ih \mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}}(z).$$

Setzt man diesen Ausdruck in die obige Formel für die Zwischenstufen \hat{U} ein, so ergibt sich:

$$\hat{U}(z) = -\frac{z}{1-z}ih \left(\mathbf{b}^T \underline{\mathbf{H}} \hat{U}(z) \right) \cdot \mathbf{1} - ihA \underline{\mathbf{H}} \hat{U}(z).$$

Hebt man \hat{U} heraus, erhält man:

$$0 = \left(\mathbf{I} + ih \left(\mathbf{1} \cdot \mathbf{b}^T \frac{z}{1-z} + A \right) \underline{\mathbf{H}} \right) \hat{U}(z).$$

Definiert man die Matrixfunktion $\Delta(z)$ als:

$$\Delta(z) := \left(A + \mathbf{1} \mathbf{b}^T \frac{z}{1-z} \right)^{-1}, \quad (3.16)$$

lässt sich die obige Gleichung einfacher schreiben als:

$$\left(\frac{i\Delta(z)}{h} - \underline{\mathbf{H}} \right) \hat{U}(x, z) = 0 \quad \forall |z| < 1, \quad \forall x \notin [x_l, x_r]. \quad (3.17)$$

Setzen wir die Definition des Hamilton-Operators ein und betrachten zunächst nur den rechten Randpunkt x_r , so erhalten wir

$$\partial_x^2 \hat{U}(z) = - \left(\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I} \right) \hat{U}(z). \quad (3.18)$$

Die allgemeine Lösung des obigen Gleichungssystem lässt sich wie im Fall von Mehrschrittverfahren als Linearkombination von Exponentialfunktionen schreiben. Es gilt:

$$\hat{U}(x, z) = e^{i\sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}} x} A^+(z) + e^{-i\sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}} x} A^-(z) \quad (3.19)$$

mit

$$A^\pm(z) \in \mathbb{C}^m, \quad (3.20)$$

wobei die Wurzel aus einer Matrix noch passend definiert werden muss. Wir verwenden hierzu den Riesz-Dunfordschen Funktionalkalkül für holomorphe Funktionen:

Definition 3.4. Sei U eine offene Menge, $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, sodass $\sigma(A) \subset U$. Für eine auf U holomorphe Funktion f definiert man:

$$f(A) := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z) (z\mathbf{I} - A)^{-1} dz, \quad (3.21)$$

wobei Γ einen stückweise C^1 -Weg in U bezeichnet, der das Spektrum von A einmal positiv umläuft.

Für manche Anwendungen ist es praktischer eine äquivalente Charakterisierung über die Jordan-Normalform von A zu verwenden. Sei $XAX^{-1} = \text{diag}(J_1, \dots, J_p)$ die Jordan-Normalform von A mit Jordan-Kästchen der Größen m_i und Gestalt

$$J_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \lambda_i \end{pmatrix}.$$

Dann gilt

$$f(A) = X \operatorname{diag}(f(J_1), \dots, f(J_p)) X^{-1}, \quad (3.22)$$

mit

$$f(J_i) = \begin{pmatrix} f(\lambda_i) & f^{(1)}(\lambda_i) & \dots & \dots & \frac{f^{(m_i-1)}(\lambda_i)}{(m_i-1)!} \\ 0 & f(\lambda_i) & \ddots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & f^{(1)}(\lambda_i) \\ 0 & \dots & \dots & \dots & f(\lambda_i) \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Für diagonalisierbare A ist die obige Definition äquivalent ist zu:

$$f(A) := f(JDJ^{-1}) := J f(D) J^{-1}$$

mit

$$f(D) := f(\operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)) = \operatorname{diag}(f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_n)).$$

Für eine Einführung und Herleitung der wichtigsten Eigenschaften dieses Funktionalkalküls siehe zum Beispiel Kapitel 11.1 in [GL96].

Wir brauchen noch folgende Information über das Spektrum von $\Delta(z)$:

Lemma 3.5. *Für ein Runge-Kutta Verfahren mit invertierbarer Matrix A gilt für $|z| < 1$:*

$$\sigma(\Delta(z)) \subset \sigma(A^{-1}) \cup \{w \in \mathbb{C} : R(w)z = 1\}$$

wobei $R(z)$ die Stabilitätsfunktion des Verfahrens bezeichnet (siehe (3.5)).

Insbesondere gilt für A -stabile Verfahren, dass $\sigma(\Delta(z))$ innerhalb der offenen rechten Halbebene $\{z \in \mathbb{C} : \Re z > 0\}$ liegt.

Beweis. Dieses Lemma findet sich als Lemma 2.6 in [BLM11] □

Somit folgt für die im Exponenten auftretende Matrix:

$$\sigma\left(\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}\right) = \frac{i}{h} \sigma(\Delta(z)) - V_r \subset \{w \in \mathbb{C} : \Im(w) > 0\}.$$

Die Wurzel der Matrix ist also wohldefiniert, wenn man im Skalaren den Hauptzweig wählt, und es gilt, da $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$:

$$\sigma\left(\sqrt{\frac{i\Delta z}{h}} - V_r \mathbf{I}\right) \subset \{w \in \mathbb{C} : \Re(w) > 0, \Im(w) > 0\}. \quad (3.24)$$

Da für die Matrix-Exponentialfunktion die selben Rechenregeln wie im Komplexen gelten, folgt direkt, dass (3.19) tatsächlich die allgemeine Lösung ist.

Genauso wie für Mehrschrittverfahren möchten wir nun schließen, dass eine der beiden Komponenten der Lösung verschwinden muss. Dazu benötigen wir folgendes Resultat über das Verhalten der Matrixexponentialfunktion:

Lemma 3.6. Sei $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$, dann gilt für jeden Vektor $\mathbf{v} \neq 0$:

(i) Ist $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) < 0\}$ dann ist $e^{Ax}\mathbf{v} \in L^2([0, \infty))$.

(ii) Ist $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) > 0\}$ dann ist $e^{Ax}\mathbf{v} \notin L^2([0, \infty))$.

Es gilt sogar $\lim_{x \rightarrow \infty} \|e^{Ax}\mathbf{v}\| = \infty$.

Beweis. ad (i): Sei $\lambda_0 > 0$ so, dass sogar $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) < -\lambda_0\}$. Wir verwenden die Darstellung der Exponentialfunktion als Cauchy-Integral und berechnen:

$$\begin{aligned} \|e^{Ax}\| &= \left\| \int_{\Gamma} e^{\lambda x} (A - \lambda)^{-1} d\lambda \right\| \leq \max_{\lambda \in \Gamma} |e^{\lambda x}| \left\| (A - \lambda)^{-1} \right\| l(\Gamma) \\ &\leq |e^{-\lambda_0 x}| \max_{\lambda \in \Gamma} \left\| (A - \lambda)^{-1} \right\| l(\Gamma) \leq C e^{-\lambda_0 x}. \end{aligned}$$

Somit folgt sofort:

$$\int_0^{\infty} \|e^{Ax}\mathbf{v}\|^2 dx \leq \int_0^{\infty} \|e^{Ax}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 dx \leq C \|\mathbf{v}\|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda_0 x} dx < \infty.$$

ad (ii): Für die zweite Aussage betrachten wir zunächst den Fall dass A diagonalisierbar ist, sich also schreiben lässt als $A = XDX^{-1}$ mit $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$. Wir betrachten wieder ein $\lambda_0 > 0$. Diesmal so, dass $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) > \lambda_0\}$. Es gilt:

$$\|e^{Ax}\mathbf{v}\|^2 = \|Xe^{Dx}X^{-1}\mathbf{v}\|^2 \geq \frac{1}{\|X^{-1}\|^2} \|e^{Dx}X^{-1}\mathbf{v}\|^2.$$

Sei $\mathbf{w} := X^{-1}\mathbf{v}$, dann gilt weiter:

$$\begin{aligned} \|e^{Ax}\mathbf{v}\|^2 &\geq \frac{1}{\|X^{-1}\|^2} \sum_{j=1}^m |e^{\lambda_j x}|^2 |w_j|^2 \geq \frac{1}{\|X^{-1}\|^2} \sum_{j=1}^m e^{2\lambda_0 x} |w_j|^2 \\ &= e^{2\lambda_0 x} \frac{1}{\|X^{-1}\|^2} \|\mathbf{w}\|^2. \end{aligned}$$

Für $\mathbf{w} \neq 0$, d.h. $\mathbf{v} \neq 0$ geht dieser Ausdruck für $x \rightarrow \infty$ gegen Unendlich.

Der nicht-diagonalisierbare Fall verläuft ähnlich. Wir betrachten die Jordan-Normalform von A , $A = XJX^{-1}$. Wieder gilt $e^{Ax} = Xe^{Jx}X^{-1}$.

Betrachtet man die Exponentialfunktion für ein einzelnes Jordan-Kästchen $J_i = \lambda_i + N$ der Größe k gilt

$$e^{J_i x} \mathbf{w} = e^{\lambda_i x} e^{N_k x} \mathbf{w}$$

mit

$$e^{N_k x} = \begin{pmatrix} 1 & x & \frac{x^2}{2} & \cdots & \frac{x^{k-1}}{(k-1)!} \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{x^2}{2} \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit gilt

$$\|e^{Jix}\mathbf{w}\|^2 = \left\| e^{\lambda_i x} e^{N_k x} \mathbf{w} \right\|^2 = e^{2\Re(\lambda_i)} |P(x)|^2 \geq e^{2\lambda_0} |P(x)|^2,$$

wobei $P(x) := \|e^{N_k x} \mathbf{w}\|$ ein Polynom in x ist, welches nur für $\mathbf{w} = 0$ konstant gleich 0 ist. Somit gilt $\lim_{x \rightarrow \infty} \|e^{Jix}\mathbf{w}\|^2 = \infty$.

Das bedeutet, dass, sobald \mathbf{v} auf einem der Haupträume nicht verschwindet, die Lösung bereits unbeschränkt wird und somit wieder $\mathbf{v} = 0$ gelten muss. \square

Aus diesem Resultat folgt aufgrund von (3.24), dass in (3.19) der Term A^- verschwinden muss. Am linken Rand führt die analoge Argumentation dazu, dass A^+ verschwindet. Für den rechten Randpunkt folgt somit durch Ableiten von (3.19):

$$\partial_x \hat{U}(x_r, z) = i \sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}} \hat{U}(x_r, z). \quad (3.25)$$

Da nach Lemma 3.3 die Potenzreihe von \hat{U} auch im Raum $H^1(\mathbb{R})$ konvergiert, können wir wieder Ableitung und Z-Transformation vertauschen, und wir erhalten

$$\mathcal{Z}(\partial_x U^n(x_r))(z) = i \sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}} \mathcal{Z}(U(x_r))(z). \quad (3.26)$$

Die Funktion $z \mapsto i \sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}}$ ist für $|z| < 1$ als Zusammensetzung holomorpher Funktionen wieder eine holomorphe Funktion. Wir können sie also in eine Potenzreihe entwickeln und erhalten:

$$i \sqrt{\frac{i\Delta(z)}{h} - V_r \mathbf{I}} = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^{(r)} z^n, \quad \forall |z| < 1, \quad (3.27)$$

mit Koeffizienten $\Psi_n^{(r)} \in \mathbb{C}^{m \times m}$.

Mit Hilfe von Satz 2.7 lässt sich (3.26) zurücktransformieren und wir erhalten die Randbedingung:

$$\partial_x U^n(x_r) = \sum_{k=0}^n \Psi_k^{(r)} U^{n-k}(x_r). \quad (3.28)$$

Wieder erhält man durch analoge Rechnung die (bis auf das Vorzeichen) selbe Aussage auch für den linken Randpunkt x_l . Zusammenfassend ergibt sich in jedem Schritt also folgendes Randwertproblem:

$$\begin{cases} (\mathbf{I} + ihA\mathbf{H}) U^n(x) = u_n(x) \mathbf{1} & x \in (x_l, x_r), \\ \partial_n U^n(x) = \sum_{k=0}^n \Psi_k^{(l,r)} U^{n-k}(x) & x \in \{x_l, x_r\}, \\ u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=1}^m b_j (-i\mathbf{H}U_j^n). \end{cases} \quad (3.29)$$

Satz 3.7. Die Lösung von (3.29) ist eindeutig. Sie stimmt auf $[x_l, x_r]$ mit der Lösung des Ganzraumproblems (3.1) - (3.2) überein.

Beweis. Wie bereits im Fall der Mehrschrittverfahren bleibt nach Konstruktion der transparenten Randbedingungen nur die Eindeutigkeit zu zeigen.

Wir betrachten erneut Folgen von Funktionen $\mathbf{U}^n, \mathbf{V}^n, u^n, v^n$, welche (3.29) erfüllen, und setzen $\mathbf{W}^n := \mathbf{U}^n - \mathbf{V}^n, w^n := u^n - v^n$. Es bleibt zu zeigen, dass $\mathbf{W}^n = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Wir führen den Beweis durch vollständige Induktion. Für $n = 0$ erfüllen sowohl u^0 als auch v^0 die Anfangsbedingung, d.h. $w^0 = 0$.

Sei nun nach Induktionsvoraussetzung $\mathbf{W}^j = 0$ für $j = 0, \dots, n-1$ sowie $w^j = 0$ für $j = 0, \dots, n$. Wir zeigen, dass $\mathbf{W}^n = 0$ und $w^{n+1} = 0$.

Die Randbedingungen für die Zwischenstufen vereinfachen sich durch die Induktionsvoraussetzungen zu:

$$\partial_n \mathbf{W}^n = \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{W}^{n-k} = \Psi_0 \mathbf{W}^n.$$

Da Ψ_0 der führende Term in der Potenzreihenentwicklung in (3.27) ist, erhält man ihn durch einsetzen von $z = 0$ in die erzeugende Funktion. Somit gilt

$$\Psi_0 = i \sqrt{\frac{i\Delta(0)}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{I} = i \sqrt{\frac{iA^{-1}}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{I}.$$

Sei zunächst A diagonalisierbar, d.h. wir können es schreiben als XDX^{-1} mit $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$. Die Gleichung für die Zwischenstufen wird dann zu:

$$(XX^{-1} + ihXDX^{-1}\underline{\mathbf{H}}) \mathbf{W}^n = 0,$$

bzw. da der Diagonaloperator $\underline{\mathbf{H}}$ mit der konstanten Matrix X vertauscht

$$X(\mathbf{I} + ihD\underline{\mathbf{H}})X^{-1}\mathbf{W}^n = 0.$$

Schreibt man nun $\mathbf{V} := X^{-1}\mathbf{W}$ so erhält man ein Gleichungssystem in Diagonalgestalt

$$(\mathbf{I} + ihD\underline{\mathbf{H}})\mathbf{V} = 0.$$

Die Randbedingung transformiert sich ähnlich, es gilt:

$$\begin{aligned} \partial_n \mathbf{V} &= X^{-1}\Psi_0 \mathbf{U}^n = X^{-1}\Psi_0 X \mathbf{V}^n \\ &= X^{-1} i \sqrt{X \left(\frac{iD^{-1}}{h} - V_{(l,r)} \mathbf{I} \right) X^{-1}} X \mathbf{V}^n \\ &= i \sqrt{\left(\frac{iD^{-1}}{h} - V_{(l,r)} \mathbf{I} \right)} \mathbf{V}^n. \end{aligned}$$

Das heißt auch in der Randbedingung sind die einzelnen Komponenten voneinander entkoppelt. Wir können die Gleichungen also für jede Komponente getrennt voneinander betrachten. Sei V_j die j -te Komponente von \mathbf{V}^n . Multipliziert man die Gleichung mit $\overline{\lambda_j V_j}$ und integriert von x_l bis x_r so ergibt sich:

$$\int_{x_l}^{x_r} \lambda_j |V_j|^2 + ih |\lambda_j|^2 \mathbf{H} V_j \overline{V_j} dx = 0,$$

sowie nach Einsetzen der Definition von \mathbf{H} und partielle Integration:

$$\int_{x_l}^{x_r} \lambda_j |V_j|^2 + ih |\lambda_j|^2 |V_j'|^2 + ihV(x) |V_j|^2 dx - \left(ih |\lambda_j|^2 V'(x)V(x) \right) \Big|_{x_l}^{x_r} = 0.$$

Davon der Realteil erfüllt somit

$$\begin{aligned} \Re(\lambda_j) \|V_j\|_{L^2}^2 &= \Re \left(ih |\lambda_j|^2 V'(x)V(x) \Big|_{x_l}^{x_r} \right) \\ &= -h |\lambda_j|^2 \Im \left(\sqrt{\frac{i\lambda_j^{-1}}{h} - V_{(l,r)}} \right) |V_j(x_{l,r})|^2. \end{aligned}$$

Das Spektrum von A liegt aufgrund der A-Stabilität in der rechten Halbebene, somit sind sowohl $\Re(\lambda_j)$ als auch $\Im \left(\sqrt{\frac{i\lambda_j^{-1}}{h} - V_{(l,r)}} \right)$ positiv. Wir erhalten also $\|V_j\|_{L^2} = 0$ für jede Komponente j und daher $\mathbf{V} = 0$ bzw. $\mathbf{W}^n = X\mathbf{V} = 0$.

Betrachten wir nun den Fall dass A nicht diagonalisierbar ist. Wir multiplizieren die definierende Gleichung der \mathbf{W}^n mit A^{-1} und erhalten, dass \mathbf{W}^n das folgende Problem löst:

$$\begin{cases} (A^{-1} + ih\mathbf{H}) \mathbf{W}^n = 0, & \text{in } (x_l, x_r), \\ \partial_n \mathbf{W}^n = \sqrt{\frac{iA^{-1}}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{I} \mathbf{W}^n, & x = x_l, x_r. \end{cases}$$

Wir bringen A^{-1} auf Jordan-Normalform und schreiben $A^{-1} = XJX^{-1}$. Damit ergibt sich, da \mathbf{H} mit X kommutiert:

$$(XJX^{-1} + ihX\mathbf{H}X^{-1}) \mathbf{W}^n = 0$$

und durch einfache Umformung mit $\mathbf{V} := X^{-1}\mathbf{W}^n$:

$$(J + ih\mathbf{H}) \mathbf{V} = 0.$$

Transformiert man auch die Randbedingung auf \mathbf{V} , so wird diese zu:

$$\begin{aligned} \partial_n \mathbf{V} &= X^{-1} \Psi_0 X \mathbf{V} = X^{-1} \sqrt{\frac{iXJX^{-1}}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{I} X \mathbf{V} \\ &= \sqrt{\frac{iJ}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{V}. \end{aligned}$$

J hat blockweise Diagonalgestalt, $V_{(l,r)}$ und \mathbf{H} sind sogar diagonal. Wir können die einzelnen Jordan-Kästchen also unabhängig voneinander betrachten. Bezeichne J_i ein Jordan-Kästchen der Größe k und \mathbf{V}_i den zugehörigen Teilvektor von \mathbf{V} . Dann werden die Gleichungen zu:

$$(J_i + ih\mathbf{H}) \mathbf{V}_i = 0.$$

Die Wurzel aus einem Jordankästchen hat die explizite Darstellung (3.23). Insbesondere hat die Matrix obere Dreiecksgestalt. Wir können also schreiben:

$$\partial_n \mathbf{V}_i = \sqrt{\frac{iJ_i}{h} - V_{(l,r)}} \mathbf{I} \mathbf{V}_i = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1k} \\ & \alpha_{22} & \ddots & \alpha_{2k} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \alpha_{kk} \end{pmatrix} \mathbf{V}_i,$$

mit $\alpha_{jj} = \sqrt{\frac{i\lambda_j}{h} - V_{(l,r)}}$.

Wir betrachten zunächst die letzte Zeile der Gleichung. Es gilt:

$$\begin{aligned}\lambda_j V_k + ih\mathbf{H} V_k &= 0, & \text{in } (x_l, x_r), \\ \partial_n V_k &= \alpha_{kk} V_k, & x \in \{x_l, x_r\},\end{aligned}$$

wobei wir V_k für den k -ten Eintrag von \mathbf{V}_i schreiben.

Wir multiplizieren die Gleichung mit $\overline{V_k}$, integrieren über das Intervall $[x_l, x_r]$ und integrieren partiell. Das ergibt

$$\begin{aligned}0 &= \int_{x_l}^{x_r} \lambda_i |V_k|^2 dx + ih \int_{x_l}^{x_r} -\partial_x^2 V_k \overline{V_k} dx + ih \int_{x_l}^{x_r} V(x) |V_k|^2 dx \\ &= \lambda_i \|V_k\|_{L^2}^2 + ih \|V_k\|_{H^1}^2 - ih (V_k' \overline{V_k})|_{x_l}^{x_r} + ih \int_{x_l}^{x_r} V(x) |V_k|^2 dx.\end{aligned}$$

Der Realteil dieser Gleichung ist nach Einsetzen der Randbedingung:

$$\Re(\lambda_i) \|V_k\|_{L^2}^2 = -h \left(\Im(\alpha_{kk}^{(l)}) |V_k|^2(x_l) + \Im(\alpha_{kk}^{(r)}) |V_k|^2(x_l) \right).$$

Die Eigenwerte λ_i haben Realteil größer 0. Genauso besitzen die α_{kk} positiven Imaginärteil und daher folgt $\|V_k\| = 0$.

Da V_k somit gleichmäßig verschwindet ergibt sich für die $k - 1$ -te Zeile die Gleichung:

$$\begin{aligned}0 &= \lambda_i V_{k-1} + V_k + ih\mathbf{H}V_{k-1} \\ &= \lambda_i V_{k-1} + ih\mathbf{H}V_{k-1},\end{aligned}$$

sowie wegen der Dreiecksstruktur der Matrix in den Randbedingungen:

$$\partial_n V_{k-1} = \alpha_{k-1,k-1} V_{k-1} + \alpha_{k-1,k} V_k = \alpha_{k-1,k-1} V_{k-1}.$$

Man ist also wieder in der selben Situation wie für die k -te Zeile und schließt auf analoge Weise $V_{k-1} = 0$.

Induktiv kann man nun schließen, dass alle V_j gleich Null sein müssen. Daher muss auch das ursprüngliche \mathbf{W}^n bereits verschwinden.

Aus der Definition der w_{n+1} , der Tatsache dass nach Induktionsvoraussetzung $w_n = 0$ und dass nach obiger Rechnung $\mathbf{W}^n = 0$ gilt, folgt sofort, dass auch $w_{n+1} = 0$. \square

3.1. Stabilität

In diesem Abschnitt untersuchen wir die Stabilität des Systems (3.29), wenn die Koeffizienten $\Psi_k^{(l,r)}$ durch numerische Quadratur bestimmt werden. Um die Notation etwas zu vereinfachen sei $V_l = V_r$ und somit $\Psi_k^{(l)} = \Psi_k^{(r)} =: \Psi_k$. Für den Rest des Kapitels fordern wir für das Potential V zusätzlich, dass es nach unten beschränkt ist, d.h. $V(x) \geq -C$. Wir betrachten also folgende zwei Gleichungssysteme:

$$\begin{cases} (\mathbf{I} + ih\mathbf{A}\mathbf{H}) \mathbf{U}^n(x) = u_n(x) \mathbf{1}, & x \in (x_l, x_r), \\ \partial_n \mathbf{U}^n(x) = \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{U}^{n-k}(x), & x \in \{x_l, x_r\}, \\ u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=1}^m b_j (-i\mathbf{H}\mathbf{U}_j^n). \end{cases} \quad (3.30)$$

Außerdem betrachten wir das gestörte System

$$\begin{cases} (I + ihA\mathbf{H}) \tilde{U}^n(x) = \tilde{u}_n(x)\mathbf{1}, & x \in (x_l, x_r), \\ \partial_n \tilde{U}^n(x) = \sum_{k=0}^n \tilde{\Psi}_k \tilde{U}^{n-k}(x), & x \in \{x_l, x_r\}, \\ \tilde{u}_{n+1} = \tilde{u}_n + h \sum_{j=1}^m b_j (-i\mathbf{H}\tilde{U}_j^n). \end{cases} \quad (3.31)$$

Dabei sind die Matrizen $\tilde{\Psi}_k$ Approximationen von Ψ_k . Wir setzen $\mathbf{Q}_k := \tilde{\Psi}_k - \Psi_k$. Durch Abziehen der Gleichungen (3.30) und (3.31) erhält man, dass die Differenzen $\mathbf{E}^n := U^n - \tilde{U}^n$, $e_n := u_n - \tilde{u}_n$ das folgende Problem lösen (wir verwenden die vereinfachte Darstellung der e_{n+1} aus (3.4)):

$$\begin{cases} (I + ihA\mathbf{H}) \mathbf{E}^n(x) = e_n(x)\mathbf{1}, & x \in (x_l, x_r), \\ \partial_n \mathbf{E}^n(x) = \sum_{k=0}^n \Psi_k U^{n-k}(x) - \sum_{k=0}^n \tilde{\Psi}_k \tilde{U}^{n-k}(x), & x \in \{x_l, x_r\}, \\ e_{n+1} = (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) e_n + \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{E}^n. \end{cases} \quad (3.32)$$

Den Randterm spalten wir nun genau wie in Kapitel 2.2 in mehrere Ausdrücke auf. Es gilt:

$$\begin{aligned} \partial_n \mathbf{E}^n &= \sum_{k=0}^n \Psi_k U^{n-k}(x) - \sum_{k=0}^n \tilde{\Psi}_k \tilde{U}^{n-k} \\ &= \sum_{k=0}^n (\Psi_k - \tilde{\Psi}_k) U^{n-k} - \sum_{k=0}^n (\Psi_k - \tilde{\Psi}_k) \mathbf{E}^{n-k} + \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{E}^{n-k} \\ &= \boldsymbol{\eta}_n + \boldsymbol{\theta}_n + \boldsymbol{\gamma}_n \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta}_n &:= \sum_{k=0}^n (\Psi_k - \tilde{\Psi}_k) U^{n-k}, \\ \boldsymbol{\theta}_n &:= - \sum_{k=0}^n (\Psi_k - \tilde{\Psi}_k) \mathbf{E}^{n-k}, \\ \boldsymbol{\gamma}_n &:= \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{E}^{n-k}. \end{aligned}$$

Wir setzen die Lösung wieder auf den ganzen Raum fort, indem wir folgende Dirichletprobleme im Außenraum lösen:

$$\begin{cases} (I + ihA\mathbf{H}) \mathbf{W}^n(x) = w_n(x)\mathbf{1}, & x \in \mathbb{R} \setminus (x_l, x_r), \\ \mathbf{W}^n(x) = \mathbf{E}^n(x), & x \in \{x_l, x_r\}, \\ w_{n+1} = (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) w_n + \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{W}^n. \end{cases} \quad (3.33)$$

Analog zur Herleitung der transparenten Randbedingungen erhalten wir, dass die \mathbf{W}^n an x_l , x_r erfüllen:

$$\partial_n \mathbf{W}^n(x) = - \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{W}^{n-k}(x) = - \sum_{k=0}^n \Psi_k \mathbf{E}^{n-k}(x) = -\boldsymbol{\gamma}_n.$$

Der Einfachheit halber bezeichnen wir die Funktion, die durch Zusammensetzen von \mathbf{E}^n und \mathbf{W}^n entsteht, wieder mit \mathbf{E}^n . Wir erhalten also eine Funktion auf ganz \mathbb{R} , die stückweise in H^2 liegt und global stetig ist. Sie erfüllt:

$$\begin{cases} (I + ihA\mathbf{H}) \mathbf{E}^n(x) = e_n(x)\mathbf{1}, & x \in \mathbb{R} \setminus \{x_l, x_r\}, \\ [\partial_n \mathbf{E}^n] = \boldsymbol{\eta}_n + \boldsymbol{\theta}_n, & x \in \{x_l, x_r\}, \\ e_{n+1} = (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) e_n + \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{E}^n, \end{cases} \quad (3.34)$$

wobei $[\partial_n \mathbf{E}^n](x) := \partial_{n_i} \mathbf{E}^n + \partial_{n_e} \mathbf{W}^n$ den Sprung der Normalableitung über x_l bzw. x_r bezeichnet.

Ziel der nächsten Sätze ist nun, passende Abschätzungen für die \mathbf{E}^n und e_n herzuleiten.

Wir beginnen mit einer relativ groben Abschätzung für die Zwischenstufen.

Lemma 3.8. *Es existieren Konstanten C_1 und C_2 , die nur vom verwendeten Runge-Kutta Verfahren abhängen, sodass gilt:*

$$\|\mathbf{E}^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h \|\mathbf{E}^n\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_1 \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_2 h \left(\|\boldsymbol{\theta}_n\|_{\Gamma}^2 + \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma}^2 \right). \quad (3.35)$$

Beweis. Wir beginnen damit, die Gleichung der Zwischenstufen mit A^{-1} zu multiplizieren und bringen A^{-1} auf Jordan-Normalform, $A^{-1} = XJX^{-1}$. Somit gilt:

$$X(J + ih\mathbf{H})X^{-1} \mathbf{E}^n = e_n A^{-1} \mathbf{1}.$$

Setzen wir $\mathbf{F}^n := X^{-1} \mathbf{E}^n$, $\mathbf{f}^n := e_n J X^{-1} \mathbf{1}$, so gilt:

$$(J + ih\mathbf{H}) \mathbf{F}^n = \mathbf{f}^n,$$

sowie am Rand von $[x_l, x_r]$:

$$[\partial_n \mathbf{F}^n] = X^{-1} \boldsymbol{\eta}_n + X^{-1} \boldsymbol{\theta}_n =: \boldsymbol{\delta}^n.$$

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit betrachten wir nur den Fall, dass J aus einem einzigen Jordan-Kästchen der Größe m zum Eigenwert λ besteht. Dann gelten die skalaren Gleichungen:

$$\lambda F_j^n + F_{j+1}^n + ih\mathbf{H}F_j^n = f_j^n, \quad j = 1, \dots, m-1,$$

sowie

$$\lambda F_m^n + ih\mathbf{H}F_m^n = f_m^n.$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung mit $\overline{F_j^n}$, integrieren über \mathbb{R} und integrieren partiell.

$$\begin{aligned} \lambda \|F_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + (F_{j+1}^n, F_j^n)_{L^2(\mathbb{R})} + ih \|F_j^n\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 - ih \langle \delta_j^n, F_j^n \rangle_{\Gamma} + ih (V(x) F_j^n, F_j^n)_{L^2(\mathbb{R})} \\ = (f_j^n, F_j^n)_{L^2(\mathbb{R})} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Der Realteil dieser Gleichung liefert:

$$\begin{aligned} \Re(\lambda) \|F_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &= -\Re (F_{j+1}^n, F_j^n)_{L^2(\mathbb{R})} + \Re (f_j^n, F_j^n)_{L^2(\mathbb{R})} - h \Im \langle \delta_j^n, F_j^n \rangle_{\Gamma} \\ &\leq \left(\|F_{j+1}^n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \|f_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})} \right) \|F_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})} + h \|\delta_j^n\|_{\Gamma} C_{tr} \|F_j^n\|_{H^1(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Aus dem Imaginärteil der vorigen Gleichung ergibt sich

$$\Im(\lambda) \|F_j^n\|_{L^2}^2 + h |F_j^n|_{H^1}^2 + h (V(x)F_j^n, F_j^n)_{L^2} = h \Re \langle \delta_j^n, F_j^n \rangle_\Gamma + \Im(f_j^n, F_j^n)_{L^2} - \Im(F_{j+1}^n, F_j^n)_{L^2}.$$

Da das Potential nach unten beschränkt ist ($V(x) > -C_V$), gilt:

$$h |F_j^n|_{H^1}^2 \leq (-\Im(\lambda) + hC_V) \|F_j^n\|_{L^2}^2 + h \|\delta_j^n\|_\Gamma C_{tr} \|F_j^n\|_{H^1} + \left(\|f_j^n\|_{L^2} + \|F_{j+1}^n\|_{L^2} \right) \|F_j^n\|_{L^2}$$

Kombinieren wir nun diese Abschätzungen, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \|F_j^n\|_{L^2}^2 + h |F_j^n|_{H^1}^2 &\leq \left(\frac{1 - \Im(\lambda) + hC_V}{\Re(\lambda)} \right) \left(\left(\|F_{j+1}^n\|_{L^2} + \|f_j^n\|_{L^2} \right) \|F_j^n\|_{L^2} + h \|\delta_j^n\|_\Gamma C_{tr} \|F_j^n\|_{H^1} \right) \\ &\quad + h \|\delta_j^n\|_\Gamma C_{tr} \|F_j^n\|_{H^1} + \left(\|f_j^n\|_{L^2} + \|F_{j+1}^n\|_{L^2} \right) \|F_j^n\|_{L^2} \\ &\leq C_1 \left(\|F_{j+1}^n\|_{L^2} + \|f_j^n\|_{L^2} \right) \|F_j^n\|_{L^2} + C_2 h \|\delta_j^n\|_\Gamma \|F_j^n\|_{H^1} \\ &\leq \sqrt{C_1^2 \left(\|F_{j+1}^n\|_{L^2}^2 + \|f_j^n\|_{L^2}^2 \right) + h C_2^2 \|\delta_j^n\|_\Gamma^2} \sqrt{(1+h) \|F_j^n\|_{L^2}^2 + h |F_j^n|_{H^1}^2}. \end{aligned}$$

Kürzen liefert damit:

$$\|F_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h |F_j^n|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq (1+h)C_1^2 \left(\|F_{j+1}^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \|f_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \right) + (1+h)h C_2^2 \|\delta_j^n\|_\Gamma^2.$$

Für die letzte Zeile gilt dieselbe Aussage, aber der Term für $\|F_{j+1}^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2$ verschwindet. Somit lässt sich induktiv von unten nach oben die folgende Ungleichung zeigen:

$$\|F_j^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h |F_j^n|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_1 \|f^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + hC_2 \|\delta^n\|_\Gamma^2,$$

bzw.

$$\|\mathbf{F}^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h |\mathbf{F}^n|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_1 \|f^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + hC_2 \|\delta^n\|_\Gamma^2.$$

Transformiert man nun wieder zurück auf \mathbf{E}^n und e_n , so erhält man die Behauptung. \square

Lemma 3.9. *Es existiert eine Konstante C die nur vom RK-Verfahren abhängt, sodass*

$$\|e_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + C h^{3/4} (\|\boldsymbol{\eta}_n\|_\Gamma + \|\boldsymbol{\theta}_n\|_\Gamma). \quad (3.37)$$

Beweis. Wir beginnen wieder mit der Gleichung der Zwischenstufen aus (3.32). Da die erste Ableitung von \mathbf{E}^n bei x_l und x_r springt, liegt die Funktion global nicht in H^2 und der Ausdruck $\underline{\mathbf{H}}\mathbf{E}^n$ ist stückweise auf $[x_l, x_r]$ und $\mathbb{R} \setminus [x_l, x_r]$ zu verstehen. Um \mathbf{H} als selbstadjungierten Operator auf $L^2(\mathbb{R})$ auffassen zu können, multiplizieren wir die Gleichung zunächst mit einem $\mathbf{W} \in \text{dom } \underline{\mathbf{H}} \subset (H^2(\mathbb{R}))^m$, welches wir später konkret wählen werden, und integrieren zweimal partiell. Da $\mathbf{W} \in H^2(\mathbb{R})$, entsteht dabei nur ein Randterm, und wir erhalten:

$$(\mathbf{E}^n, \mathbf{W})_{L^2(\mathbb{R})} + (ihA\mathbf{E}^n, \underline{\mathbf{H}}\mathbf{W})_{L^2(\mathbb{R})} - ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_\Gamma = (e_n \mathbf{1}, \mathbf{W})_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Wir wenden nun Satz 1.6 auf den Operator \mathbf{H} an. Wir schreiben im Folgenden $\underline{\mathbf{U}} := \text{diag}(U, \dots, U)$. Außerdem verwenden wir für die transformierten Funktionen die Notation $\hat{\mathbf{X}} := \underline{\mathbf{U}}\mathbf{X}$, bzw. für skalare Funktionen $\hat{x} := Ux$. Damit erhalten wir aufgrund der Unitarität von U :

$$\int_\Omega \hat{\mathbf{E}}^n(s)^T (\underline{\mathbf{U}} (\mathbf{I} - ihA^T \underline{\mathbf{H}}) \mathbf{W})(s) d\mu(s) = \int_\Omega \hat{e}_n \mathbf{1}^T \hat{\mathbf{W}} d\mu + ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_\Gamma$$

Wir betrachten den auftretenden Operator genauer. Es gilt:

$$\begin{aligned}
(\underline{\mathbf{U}}(\mathbf{I} - ihA^T\underline{\mathbf{H}})\mathbf{W})(s) &= \hat{\mathbf{W}}(s) - ih\left(\underline{\mathbf{U}}A^T\underline{\mathbf{H}}\mathbf{U}^*\hat{\mathbf{W}}\right)(s) \\
&= \hat{\mathbf{W}}(s) - ihA^T\left(\underline{\mathbf{U}}\underline{\mathbf{H}}\mathbf{U}^*\hat{\mathbf{W}}\right)(s) \\
&= \hat{\mathbf{W}}(s) - ihA^T\left(f(s)\hat{\mathbf{W}}(s)\right) \\
&= (\mathbf{I} - ihf(s)A^T)\hat{\mathbf{W}}(s),
\end{aligned}$$

wobei wir verwendet haben, dass $UU^* = \mathbf{I}$, sowie, dass der Operator $\underline{\mathbf{U}}$ mit A^T kommutiert, da er Diagonalgestalt hat mit einem festen Operator U als Eintrag.

Wir wählen nun $\hat{\mathbf{W}}$ von spezieller Gestalt als

$$\mathbf{W} := (\mathbf{I} - ihA^T\underline{\mathbf{H}})^{-1}(wA^{-T}\mathbf{b}), \quad \text{für ein } w \in C_0^\infty(\mathbb{R}),$$

bzw. (wie man mit Hilfe der obigen Gleichung leicht nachrechnet) nach der unitären Transformation:

$$\hat{\mathbf{W}}(s) := (\mathbf{I} - ihf(s)A^T)^{-1}(\hat{w}(s)A^{-T}\mathbf{b}).$$

Wir erhalten somit die Gleichung:

$$\int_{\Omega} \hat{\mathbf{E}}^n(s)^T \hat{w} A^{-T} \mathbf{b} d\mu(s) = \int_{\Omega} \hat{e}_n \mathbf{1}^T (\mathbf{I} - ihf(s)A^T)^{-1} (\hat{w} A^{-T} \mathbf{b}) d\mu(s) + ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_{\Gamma}.$$

Durch einfache Umformung folgt:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \left(\mathbf{b}^T A^{-1} \hat{\mathbf{E}}^n(s)\right)^T \hat{w} d\mu(s) &= \int_{\Omega} \hat{e}_n \left(\mathbf{b}^T A^{-1} (\mathbf{I} - ihf(s)A)^{-1} \mathbf{1}\right)^T \hat{w} d\mu(s) \\
&\quad + ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_{\Gamma},
\end{aligned}$$

wobei wir die äußersten Transpositionen auch weglassen können, da die auftretenden Ausdrücke skalar sind.

Wir addieren auf beiden Seiten den Ausdruck $\int_{\Omega} (1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1}) \hat{e}_n \hat{w} d\mu$ und erhalten durch einfaches Umformen:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \left((1 - \mathbf{b}^T A^{-1}) \hat{e}_n + \mathbf{b}^T A^{-1} \hat{\mathbf{E}}^n\right) \hat{w} d\mu &= \int_{\Omega} \hat{e}_n \left(1 - \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{1} + \mathbf{b}^T A^{-1} (\mathbf{I} - ihf(s)A)^{-1} \mathbf{1}\right) \hat{w} d\mu(s) \\
&\quad + ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_{\Gamma}.
\end{aligned}$$

Auf der linken Seite erkennt man genau den unter U transformierten Ausdruck für e_{n+1} aus (3.34). Auf der rechten Seite erkennt man genau die Stabilitätsfunktion $R(z)$ des RK-Verfahrens aus (3.6). Das heißt obiger Ausdruck lässt sich schreiben als

$$\int_{\Omega} \hat{e}_{n+1} \hat{w} d\mu = \int_{\Omega} \hat{e}_n(s) R(-ihf(s)) \hat{w}(s) d\mu(s) + ih \langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_{\Gamma}.$$

Da das betrachtete RK-Verfahren A-stabil ist, gilt $|R(it)| \leq 1$ für alle $t \in \mathbb{R}$. Da f nur Werte in \mathbb{R} annimmt, gilt somit:

$$\left| \int_{\Omega} \hat{e}_{n+1} \hat{w} d\mu \right| \leq \int_{\Omega} |\hat{e}_n(s) \hat{w}(s)| d\mu(s) + h |\langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_{\Gamma}|,$$

bzw. zurücktransformiert nach $L^2(\mathbb{R})$:

$$\left| (e_{n+1}, w)_{L^2(\mathbb{R})} \right| \leq \|e_n\|_{L^2} \|w\|_{L^2(\mathbb{R})} + h |\langle A[\partial_n \mathbf{E}^n], \mathbf{W} \rangle_\Gamma|.$$

\mathbf{W} erfüllt die Gleichung

$$(I - ihA^T \underline{\mathbf{H}}) \mathbf{W} = wA^{-T} \mathbf{b}.$$

Wir bemerken, dass für Lösungen $u \in H^2(\mathbb{R})$ von Gleichungen der Form $(\lambda - ih\Delta + ihV)u = w$ mit $w \in L^2(\mathbb{R})$ folgende einfache Abschätzungen gelten:

$$\begin{aligned} \|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &\leq \frac{1}{|\Re(\lambda)|} \|w\|_{L^2(\mathbb{R})}^2, \\ h|u|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &\leq C \|w\|_{L^2(\mathbb{R})}^2. \end{aligned}$$

Für die erste Abschätzung testen wir die Gleichung mit u und integrieren partiell. Dann gilt:

$$(\lambda u, u)_{L^2(\mathbb{R})} + ih(\nabla u, \nabla u)_{L^2(\mathbb{R})} + ih(Vu, u)_{L^2(\mathbb{R})} = (w, u)_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Betrachtet man nur den Realteil davon, erhält man, da das Potential rein reell ist:

$$\Re(\lambda) \|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = (w, u)_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Die Cauchy-Schwarz Ungleichung liefert dann die erste der Ungleichungen. Für die H^1 -Abschätzung betrachten wir stattdessen den Imaginärteil der vorigen Gleichung und verwenden dass das Potential nach unten Beschränkt ist mit $V(x) \geq -C_V$:

$$\begin{aligned} h|u|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &= -\Im(\lambda) \|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 - h(Vu, u)_{L^2(\mathbb{R})} + \Im(w, u)_{L^2(\mathbb{R})} \\ &\leq (-\Im(\lambda) + hC_V) \|u\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \|w\|_{L^2(\mathbb{R})} \|u\|_{L^2(\mathbb{R})} \end{aligned}$$

Einsetzen der L^2 -Abschätzung liefert dann die Behauptung.

Durch Bringen auf Jordan-Normalform von A und ähnliche Argumente wie im vorigen Lemma oder der A-priori Schranke aus Lemma 3.3 erhält man damit leicht, dass

$$\begin{aligned} \|\mathbf{W}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &\leq C \|w\|_{L^2(\mathbb{R})}^2, \\ \|\mathbf{W}\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 &\leq \frac{C}{h} \|w\|_{L^2(\mathbb{R})}^2. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir durch die Ungleichung (2.37) bzw. [AF03, Theorem 5.8] die Abschätzung:

$$\left| (e_{n+1}, w)_{L^2(\mathbb{R})} \right| \leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|w\|_{L^2(\mathbb{R})} + h \|A\| \|\partial_n \mathbf{E}^n\|_\Gamma C \sqrt{\|w\|_{L^2(\mathbb{R})} h^{-1/2} \|w\|_{L^2(\mathbb{R})}}.$$

Für w haben wir bisher nur gefordert, dass es in $C_0^\infty(\mathbb{R})$ liegt. Betrachten wir nun eine Folge $w_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ welche im H^1 -Sinn gegen e_{n+1} konvergiert, so erhalten wir im Grenzfall:

$$\|e_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \|e_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})} + h^{3/4} \|A\| \|\partial_n \mathbf{E}^n\|_\Gamma C \|e_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}.$$

Kürzen durch $\|e_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R})}$ sowie Einsetzen für $[\partial_n \mathbf{E}^n]$ ergibt dann die Behauptung. \square

Diese zwei Lemmata erlauben zusammen eine schärfere Aussage über die Stabilität. Wir setzen $\|\mathbf{E}^n\|^2 := \|\mathbf{E}^n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h|\mathbf{E}^n|_{H^1(\mathbb{R})}^2$. Es gilt:

Satz 3.10. Sei $nh \leq T$, $\|\mathbf{Q}_{max}\| := \max_{k=1\dots n} \|\mathbf{Q}_k\| \leq Ch^{2p-1/2}$ für ein $p > 0$, wobei $\mathbf{Q}_k := \Psi_k - \hat{\Psi}_k$. Dann existieren Konstanten $C > 0, \gamma > 0$, sodass gilt

$$\|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \left(\|e_0\|_{L^2(\mathbb{R})} + h^{3/4} \sum_{k=0}^n \|\eta_k\|_{\Gamma} \right) e^{\gamma Th^{p-1}}.$$

Beweis. Wir setzen $s_n := \sum_{k=0}^n \|\mathbf{E}^k\|$ für $n \geq 0$ sowie $s_{-1} := 0$.

Wir betrachten zunächst, wie wir die Randterme von \mathbf{E}^k durch die in s_n auftretenden gewichteten Sobolev-Normen abschätzen können. Wie in Lemma 2.15 verwenden wir erneut die Abschätzung $\|\mathbf{E}^k\|_{\Gamma}^2 \leq C \|\mathbf{E}^k\|_{L^2(\mathbb{R})} \|\mathbf{E}^k\|_{H^1(\mathbb{R})}$. Damit folgt, in analoger Rechnung zum Fall der Mehrschrittverfahren, wieder mit der Young Ungleichung

$$\begin{aligned} \|\mathbf{E}^k\|_{\Gamma}^2 &\leq C_{tr} \|\mathbf{E}^k\|_{L^2(\mathbb{R})} \|\mathbf{E}^k\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq C_{tr} (4|1-h|h)^{-1/2} \left(\|\mathbf{E}^k\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + h \|\mathbf{E}^k\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \right) \\ &\leq (4|1-h|h)^{-1/2} (s_n - s_{n-1})^2 =: \rho^2 \cdot (s_n - s_{n-1})^2. \end{aligned}$$

Dabei ist $\rho := (4|1-h|h)^{-1/4} \leq Ch^{-1/4}$.

Aus der Definition der $\boldsymbol{\theta}_n$ folgt damit nun,

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\theta}_n\|_{\Gamma} &\leq \sum_{k=0}^n \|\mathbf{Q}_k\| \|\mathbf{E}^k\|_{\Gamma} \leq \|\mathbf{Q}_{max}\| \rho \sum_{k=0}^n \|\mathbf{E}^k\| \\ &= \|\mathbf{Q}_{max}\| \rho s_n. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir aus (3.35)

$$\begin{aligned} (s_n - s_{n-1})^2 &= \|\mathbf{E}^n\|^2 \leq C_1 \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + C_2 h \left(\|\boldsymbol{\theta}_n\|_{\Gamma}^2 + \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma}^2 \right) \\ &\leq \left(\sqrt{C_1} \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \sqrt{C_2} h^{1/2} \|\boldsymbol{\theta}_n\|_{\Gamma} + \sqrt{C_3} h^{1/2} \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma} \right)^2. \end{aligned}$$

Daher gilt:

$$\begin{aligned} s_n - s_{n-1} &\leq \sqrt{C_1} \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\| s_n + \sqrt{C_3} h^{1/2} \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma} \iff \\ \left(1 - \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\| \right) s_n &\leq \sqrt{C_1} \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + s_{n-1} + \sqrt{C_3} h^{1/2} \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma}. \end{aligned}$$

Sei $\sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\| \leq c_0 < 1$, dann gilt für eine neue Konstante C :

$$s_n \leq C \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \frac{1}{1 - \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|} s_{n-1} + Ch^{1/2} \|\boldsymbol{\eta}_n\|_{\Gamma}. \quad (3.38)$$

Für den Vorfaktor von s_{n-1} gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|} &= 1 + \frac{1 - 1 + \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|}{1 - \sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|} \\ &\leq 1 + \frac{\sqrt{C_2} h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|}{1 - c_0} = 1 + Ch^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|. \end{aligned}$$

Sei $\epsilon > 0$, wobei wir es später speziell wählen werden. Außerdem definieren wir den häufig auftretenden Faktor $q_0 := h^{1/2} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\|$. Wir betrachten die Größe $\|e_{n+1}\| + \epsilon s_n$ und wenden darauf das Gronwallsche Lemma an.

Aus (3.37) und der vorigen Abschätzung folgt nun

$$\begin{aligned}
\|e_{n+1}\| + \epsilon s_n &\leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + Ch^{3/4} \|\theta_n\|_\Gamma + Ch^{3/4} \|\eta_n\|_\Gamma + \epsilon s_n \\
&\leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left(Ch^{3/4} \rho \|\mathbf{Q}_{max}\| + \epsilon \right) s_n + Ch^{3/4} \|\eta_n\|_\Gamma \\
&\leq \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left(Ch^{1/4} q_0 + \epsilon \right) \left(C \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + (1 + Cq_0) s_{n-1} + Ch^{1/2} \|\eta_n\|_\Gamma \right) \\
&\quad + Ch^{3/4} \|\eta_n\|_\Gamma \\
&\leq \left(1 + Ch^{1/4} q_0 + C\epsilon \right) \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \epsilon \left(\frac{Ch^{1/4} q_0 + \epsilon}{\epsilon} (1 + Cq_0) \right) s_{n-1} \\
&\quad + C \left(h^{3/4} q_0 + \epsilon h^{1/2} + h^{3/4} \right) \|\eta_n\|_\Gamma \\
&\leq \left(1 + Ch^{1/4} q_0 + C\epsilon \right) \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \epsilon \left(1 + Cq_0 + Ch^{1/4} q_0 \epsilon^{-1} (1 + Cq_0) \right) s_{n-1} \\
&\quad + C \left(h^{3/4} q_0 + \epsilon h^{1/2} + h^{3/4} \right) \|\eta_n\|_\Gamma.
\end{aligned}$$

Wir wählen $\epsilon := \sqrt{h^{1/4} q_0}$. Dann erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\|e_{n+1}\| + \epsilon s_n &\leq (1 + \epsilon + C_1 \epsilon^2) \|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \left(1 + C_2 \epsilon^2 h^{-1/4} + C_3 \epsilon \right) \epsilon s_{n-1} \\
&\quad + C \left(h^{3/4} q_0 + \epsilon h^{1/2} + h^{3/4} \right) \|\eta_n\|_\Gamma.
\end{aligned}$$

Sei $\gamma := \max(\epsilon + C_1 \epsilon^2, C_2 \epsilon^2 h^{-1/4} + C_3 \epsilon)$. Damit gilt dann:

$$\begin{aligned}
\|e_{n+1}\| + \epsilon s_n &\leq (1 + \gamma) \left(\|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \epsilon s_{n-1} \right) \\
&\quad + C \left(h^{3/4} q_0 + \epsilon h^{1/2} + h^{3/4} \right) \|\eta_n\|_\Gamma.
\end{aligned}$$

Wir betrachten den Vorfaktor für $\|\eta_n\|$ genauer. Es gilt:

$$\epsilon h^{1/2} = \left(q_0 h^{1/4} h \right)^{1/2} \leq C \left(\|\mathbf{Q}_{max}\| h^{1/2} h^{-1/4} h^{1/4} h \right)^{1/2} \leq C \|\mathbf{Q}_{max}\|^{1/2} h^{3/4}.$$

Das heißt der $h^{3/4}$ Term dominiert. Wir erhalten:

$$\|e_{n+1}\| + \epsilon s_n \leq (1 + \gamma) \left(\|e_n\|_{L^2(\mathbb{R})} + \epsilon s_{n-1} \right) + Ch^{3/4} \|\eta_n\|_\Gamma.$$

Aus dem Gronwall Lemma (Lemma 2.2) folgt damit:

$$\begin{aligned}
\|e_{n+1}\|_{L^2} + \epsilon s_n &\leq \left(\|e_0\|_{L^2} + s_{-1} + Ch^{3/4} \sum_{k=0}^n \|\eta_k\|_\Gamma \right) \exp \left(\sum_{k=0}^n \gamma \right) \\
&\leq \left(\|e_0\|_{L^2} + C_2 h^{3/4} \sum_{k=0}^n \|\eta_k\|_\Gamma \right) \exp((n+1)\gamma).
\end{aligned}$$

Ist $\|\mathbf{Q}_{max}\| \leq Ch^{2p-1/2}$ für ein $p > 1$, Dann gilt

$$\begin{aligned}
\gamma &\leq C \left(\epsilon + \epsilon^2 h^{-1/4} \right) \leq C\epsilon \leq C \left(h^{1/4} h^{1/2} h^{-1/4} \|\mathbf{Q}_{max}\| \right)^{1/2} \leq C \left(h^{1/2} h^{2p-1/2} \right)^{1/2} \\
&\leq Ch^p.
\end{aligned}$$

Dies ergibt insgesamt:

$$\|e_{n+1}\|_{L^2} + \epsilon s_n \leq \left(\|e_0\|_{L^2} + C_2 h^{3/4} \sum_{k=0}^n \|\eta_k\|_{\Gamma} \right) \exp(CT h^{p-1}).$$

□

4. Zusammenhang zur Faltungsquadratur

Ein alternativer Zugang zur Herleitung transparenter Randbedingungen ist es, die Randbedingung bereits auf dem kontinuierlichen Level einzuführen, und dann zusammen mit der Differentialgleichung zu diskretisieren. Dieser Zugang wird etwa in [Sch02a] ausführlich behandelt. Wir möchten hier nur die wichtigsten Resultate wiedergeben und auf den Zusammenhang mit dem vorher hergeleiteten semidiskreten Zugang eingehen.

Auf kontinuierlicher Ebene ist die Schrödingergleichung mit transparenten Randbedingungen gegeben durch:

$$i \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + V(x)u(x, t), \quad (x, t) \in (u_l, u_r) \times (0, \infty), \quad (4.1)$$

$$\partial_n u(x, t) = \int_0^t f(t - \tau)u(x, \tau) d\tau, \quad x = x_l, x_r; t > 0, \quad (4.2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x). \quad (4.3)$$

mit $\mathcal{L}(f)(s) = F(s) = -\sqrt{-is + V_{(l,r)}}$

Da in der zitierten Arbeit bei der Herleitung der Randbedingungen eine leicht andere Lösungsbasis für die Differentialgleichung $y'' = -\lambda y$ verwendet wurde als in dieser Arbeit, bemerken wir noch, dass für $\Re s > 0$ gilt:

$$-\sqrt{-is + V_{(l,r)}} = i\sqrt{is - V_{(l,r)}}.$$

Dies sieht man leicht ein, da das Quadrat beider Ausdrücke übereinstimmt und beide Ausdrücke nichtnegativen Realteil besitzen.

Diskretisieren durch ein Mehrschritt- oder Runge-Kutta Verfahren überführt die erste Gleichung in die entsprechenden Gleichungen in (2.21) bzw. (3.29). Interessanter ist die Diskretisierung der Randbedingungen. Die Gestalt der Randbedingung als Faltungsintegral, von dessen Kernfunktion nur die Laplace-Transformierte bekannt ist, legt nahe, zur Diskretisierung die Methode der

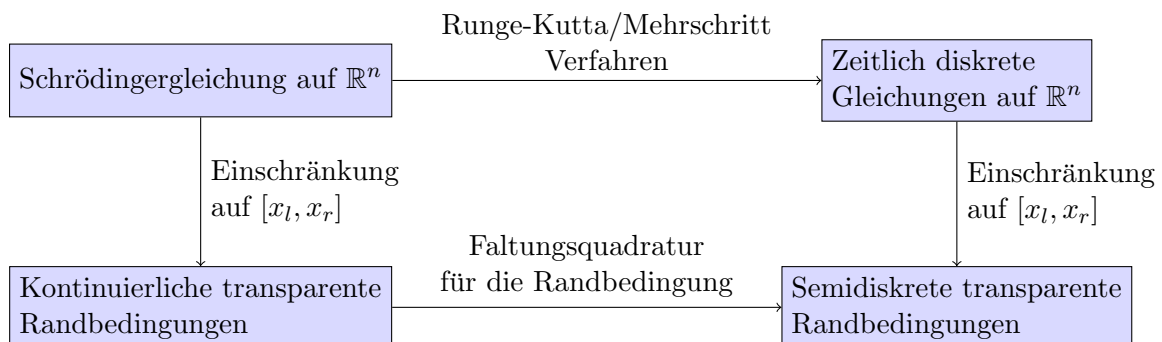


Abbildung 4.1.: Verschiedene Vorgehen für transparente Randbedingungen

Faltungsquadratur, welche von Lubich für Mehrschrittverfahren in [Lub88], sowie im Fall von Runge-Kutta Verfahren von Lubich und Ostermann in [LO93] eingeführt wurde, zu verwenden. Verwendet man zur Diskretisierung ein Mehrschrittverfahren mit Schrittweite h , so ist die Approximation des Faltungsintegrals

$$v = \int_0^t f(t - \tau)g(\tau) d\tau \quad (4.4)$$

gegeben durch

$$v_h := \sum_{0 \leq jh \leq t} \omega_j(h)g(t - jh), \quad (4.5)$$

wobei die $\omega_j(h)$ definiert sind als Koeffizienten der Potenzreihe

$$F(\delta(\xi)/h) = \sum_{j=0}^{\infty} \omega_j(h)\xi^j. \quad (4.6)$$

Dabei ist $\delta(\xi)$ definiert wie in (2.17).

Den Zusammenhang zwischen den beiden Zugängen für transparente Randbedingungen stellt der folgende Satz her:

Satz 4.1. *Diskretisiert man (4.1) durch ein Mehrschrittverfahren und die Randbedingung mittels Faltungsquadratur zum selben Verfahren, so stimmt diese Lösung mit der aus dem semidiskreten Problem (2.21) gewonnenen Lösung überein.*

Beweis. Nach Konstruktion der Approximationslösung erfüllt diese die Differentialgleichung und die Anfangsbedingung in (2.21). Betrachtet man (4.4), so ist $\partial_n v$ durch die selbe Formel gegeben wie in (2.21). Das heißt, die Probleme stimmen überein. \square

Auch im Fall, dass für die Approximation jeweils ein Runge-Kutta Verfahren verwendet wird gilt ein ähnliches Resultat. Sei ein m -stufiges Runge-Kutta Verfahren durch sein Tableau $A, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ gegeben. Es sei A -stabil und zusätzlich gelte $\mathbf{b}^T A^{-1} = (0, 0, \dots, 1)$. Dann ist die Approximation von $v(t) = \int_0^t f(t - \tau)g(\tau) d\tau$ zu den Zeitpunkten $t_n + c_j h$ gegeben durch:

$$\begin{pmatrix} v_{n1} \\ \vdots \\ v_{nm} \end{pmatrix} := \sum_{j=0}^n W_{n-j}^h(f) \begin{pmatrix} g(t_j + c_1 h) \\ \vdots \\ g(t_j + c_m h) \end{pmatrix},$$

wobei $W_j^h(f) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ gegeben ist durch:

$$f\left(\frac{\Delta(z)}{h}\right) = \sum_{j=0}^{\infty} W_j^h(f) z^j.$$

Dabei ist $\Delta(z)$ durch (3.16) definiert und $f\left(\frac{\Delta(z)}{h}\right)$ im Sinne von Definition 3.4 zu verstehen. Verwendet man dieses Verfahren zur Diskretisierung der Randbedingung in (4.1), so ergibt sich:

$$\partial_n U^n = \sum_{j=0}^n W_{n-j}^h U^j$$

mit

$$\sum_{n=0}^{\infty} W_n^h z^n = -\sqrt{-i \frac{\Delta(z)}{h} + V_{(l,r)} \mathbf{I}}.$$

Dies entspricht der Randbedingung aus (3.29). Das heißt auch im Fall von Runge-Kutta Verfahren sind die beiden Zugänge zu transparenten Randbedingungen äquivalent, oder mit anderen Worten, das Diagramm aus Abbildung 4.1 kommutiert.

5. Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt geht es darum, die in den vorigen Kapiteln bewiesenen Resultate zu Konvergenz und Stabilität numerisch zu überprüfen. Wir wenden daher eine Reihe verschiedener Runge-Kutta Verfahren auf ein Modellproblem mit bekannter exakter Lösung an und vergleichen die Resultate.

Wir betrachten den Fall der freien Schrödinger Gleichung, d.h. verschwindendem Potential $V(x) \equiv 0$, und Gaußscher Anfangsbedingung. Für Parameter $x_c, k_0 \in \mathbb{R}$ ist diese gegeben durch:

$$u_0(x) := \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \exp(-(x - x_c)^2 + ik_0(x - x_c)) \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (5.1)$$

Man überprüft dann leicht, dass die exakte Lösung der Schrödinger Gleichung (1.1) gegeben ist durch:

$$u_{ex}(x, t) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{i}{-4t + i}} \exp\left(\frac{-i(x - x_c)^2 - k_0(x - x_c) + k_0^2 t}{-4t + i}\right). \quad (5.2)$$

Wir betrachten das Problem auf $\Omega := (-12, 3)$, und zentrieren die Anfangsbedingung bei $x_c = -6$ mit $k_0 = 0.5$. Als Endzeit wird $T = 4$ gewählt. In Abbildung 5.1 ist der Realteil der exakten Lösung zum Anfangs- sowie zum Endzeitpunkt dargestellt. Man sieht, wie sich die Glockenkurve aus dem Intervall (x_l, x_r) bewegt und die Randbedingungen daher entscheidend sind.

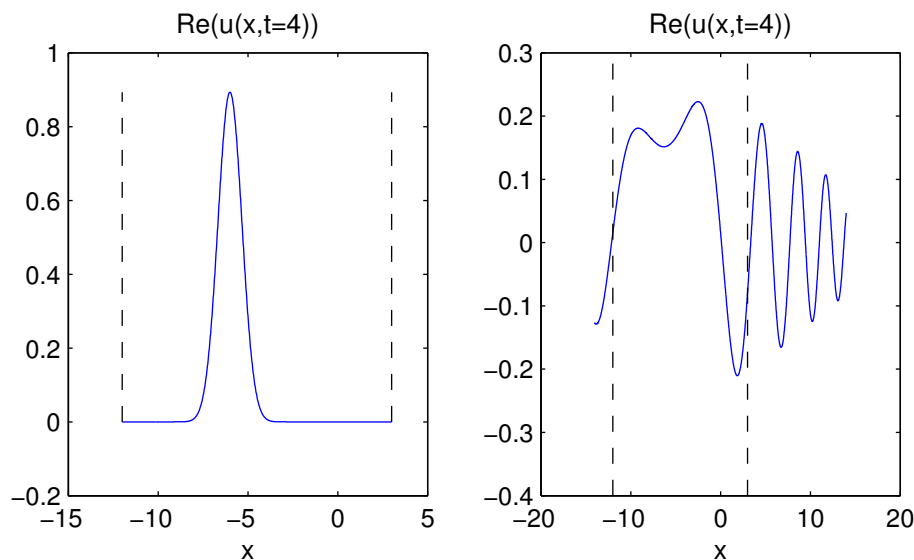


Abbildung 5.1.: Exakte Lösung der freien Schrödinger Gleichung zum Anfangs- und Endzeitpunkt

Abbildung 5.2 zeigt einen Vergleich von verschiedenen Runge-Kutta Verfahren angewendet auf das obige Modellproblem, wobei das Maximum über die L^2 -Fehler in den einzelnen Zeitschritten

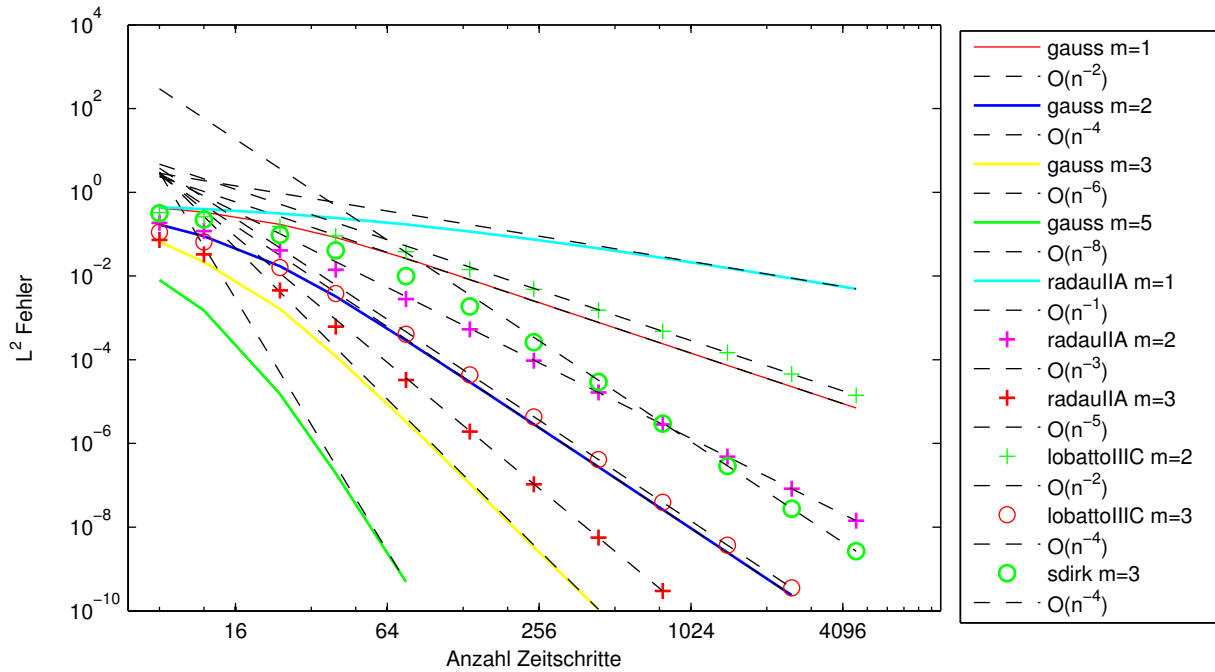


Abbildung 5.2.: Vergleich RK-Verfahren

als Indikator für den Gesamtfehler verwendet wurde. Die gestrichelten Linien stellen dabei jeweils die erwartete Ordnung der einzelnen Verfahren dar.

Um die Approximation mit n Zeitschritten, für ein Verfahren der Ordnung p zu erhalten, wurde für die numerische Quadratur jeweils $(p+1)n$ -Quadraturpunkte verwendet. Für die Ortsdiskretisierung wurde eine Finite-Elemente-Methode p -ter Ordnung mit jeweils n Elementen verwendet um den Ortsdiskretisierungsfehler vernachlässigbar zu halten. Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass alle Verfahren die jeweils vorhergesagte optimale Rate erreichen.

Als nächstes möchten wir die Abhängigkeit des Approximationsfehlers von der Genauigkeit der Quadratur untersuchen. In Abbildung 5.3 vergleichen wir verschiedene Quadraturordnungen für ein dreistufiges Gaußverfahren. Um die Fehler durch die Ortsdiskretisierung zu vermeiden wurde eine Finite-Elemente-Approximation der Ordnung 4 mit jeweils n Elementen verwendet. Bezeichne Q die Anzahl Quadraturpunkte, welche für die summierte Trapezregel verwendet werden. Man sieht, dass für $Q \geq n$ das Verfahren optimal konvergiert, während für $Q < n$ der Fehler stark ansteigt. Dies liegt aber nicht an der Instabilität der Schrödinger Gleichung, sondern, wie die rechte Abbildung zeigt, liefert bereits die numerische Quadratur in diesem Fall keine zufriedenstellende Genauigkeit. Dies ist in Übereinstimmung mit den Voraussetzungen von Lemma 2.13.

In Lemma 2.13 haben wir die Voraussetzung, dass die Anzahl Quadraturpunkte größer als die Anzahl Zeitschritte n ist. Aus Abbildung 5.4 ist ersichtlich, dass diese Forderung bereits ausreichend ist, um auch für Verfahren höherer Ordnung (in der Abbildung ein dreistufiges Gaußverfahren der Ordnung 6) die volle Konvergenzordnung zu erhalten.

Verfahren	Stufen	Ordnung
Gauss	1	2
	2	4
	3	6
	5	10
RadauIIA	1	1
	2	3
	3	5
Lobatto III C	2	2
	3	4
SDIRK	3	4

Tabelle 5.1.: Die in Abbildung 5.2 Verwendeten Runge-Kutta Verfahren (siehe auch Abschnitt C)

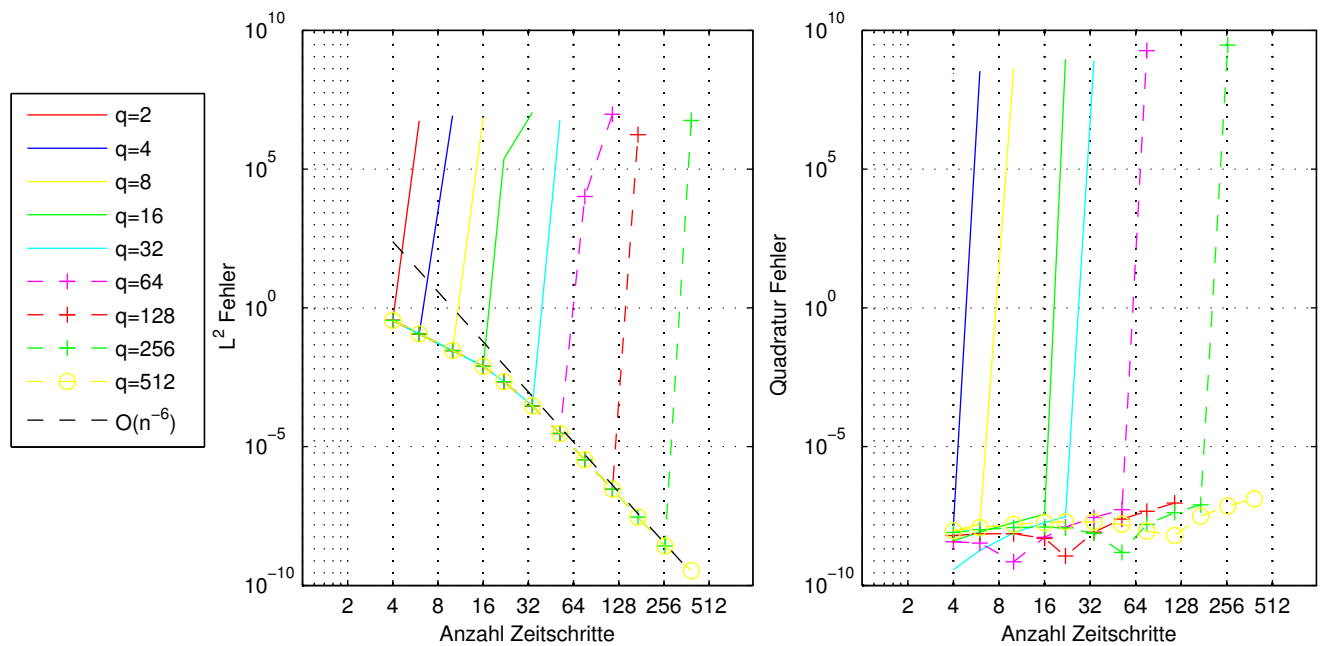


Abbildung 5.3.: Vergleich Stabilität bezüglich Quadraturordnung

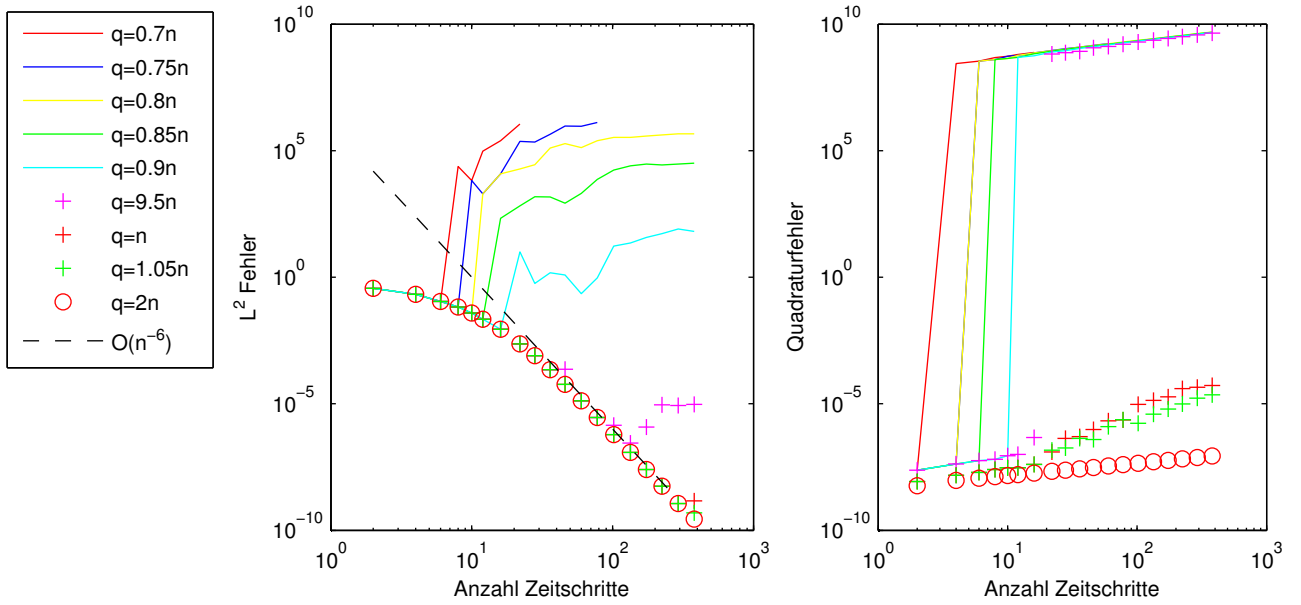


Abbildung 5.4.: Vergleich Stabilität bezüglich Quadraturordnung

6. Der Höherdimensionale Fall

Zum Abschluss werden wir noch kurz skizzieren, wie sich die in den vorigen Kapiteln präsentierten Resultate auch auf höhere Raumdimensionen übertragen lassen. Der wesentliche Unterschied liegt darin, dass die Gleichungen (2.16) bzw. (3.18) sich nicht mehr analytisch lösen lassen. Stattdessen können die daraus resultierenden Beziehungen zwischen Funktionswert und Normalableitung am Rand des Gebietes Ω aber durch Methoden der Randelementmethode berechnet werden.

In d Raumdimensionen ist die Schrödingergleichung gegeben durch,

$$i\partial_t u(\mathbf{x}, t) = -\Delta u(\mathbf{x}, t) - V(\mathbf{x})u(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, t > 0, \quad (6.1)$$

$$u(\mathbf{x}, t = 0) = u_0(\mathbf{x}). \quad (6.2)$$

Der mehrdimensionale Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$(\mathbf{H}u)(\mathbf{x}) := -\Delta u(\mathbf{x}) - V(\mathbf{x})u(\mathbf{x}). \quad (6.3)$$

Sei im folgenden Ω ein beschränktes Gebiet in \mathbb{R}^d mit Rand Γ .

Erneut machen wir eine Reihe von Annahmen an das Potential:

- $V(\mathbf{x}) \in \mathbb{R} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$,
- der zu V gehörige Hamiltonian \mathbf{H} ist ein dicht definierter selbstadjungierter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^d)$,
- $V(x) \equiv V_{ext} \in \mathbb{R}$ für $x \in \Omega^c := \mathbb{R}^d \setminus \Omega$.

Für die Anfangsbedingung u_0 gelte im Folgenden:

- $\text{supp } u_0 \subset \Omega$,
- $u_0 \in \text{dom}(\mathbf{H})$, sodass das obige Problem wohlgestellt ist.

6.1. Mehrschrittverfahren

In mehr als einer Raumdimension ergibt analoges Vorgehen zu Kapitel 2.1, dass die Z-Transformierte die Differentialgleichung

$$\left(\frac{i\delta(z)}{\Delta t} - \mathbf{H} \right) \hat{u} = 0$$

löst, wobei $\delta(z)$ wieder wie in (2.17) definiert ist.

Einsetzen der Definition des Hamiltonians liefert

$$-\Delta \hat{u} + \left(\frac{i\delta(z)}{\Delta t} - V_{ext} \right) \hat{u} = 0. \quad (6.4)$$

Das heißt, die Z-Transformierte ist Lösung einer Helmholtz Gleichung und liegt als Grenzwert von L^2 Funktionen wieder in L^2 . Da $\Im\left(\frac{i\delta(z)}{\Delta t}\right) > 0$ ist dies bereits hinreichend um aus der Asymptotik der Hankelfunktionen eine passende Abstrahlbedingung zu erhalten.

Die Randlelementmethode liefert eine Möglichkeit die Dirchlet-to-Neumann Beziehung dieser Lösung sowohl analytisch als auch numerisch zu berechnen. Wir geben das Vorgehen hierzu nur skizzenhaft wieder. Für Details zu Randlelementmethoden sei etwa auf [SS10] verwiesen.

Definition 6.1. Die Greensche Funktion für die Helmholtzgleichung zur Wellenzahl s ist gegeben durch

$$G(x, y; s) := \begin{cases} \frac{1}{4}iH_0^{(1)}(s|\mathbf{x} - \mathbf{y}|), & d = 2, \\ \frac{e^{is|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}, & d = 3, \end{cases} \quad (6.5)$$

wobei $H_0^{(1)}$ die Hankelfunktion 1. Art der Ordnung 0 bezeichnet.

Wir definieren damit den Einfachschichtoperator $V(s)$ zumindest für glatte Funktionen φ durch

$$(V(s)\varphi)(x) := \int_{y \in \Gamma} G(x, y; s)\varphi(y)dS(y), \quad x \in \Gamma. \quad (6.6)$$

Der Doppelschichtoperator $K(s)$ ist definiert als

$$(K(s)\varphi)(x) := \int_{y \in \Gamma} \frac{\partial G(x, y; s)}{\partial \nu(y)}\varphi(y)dS(y), \quad x \in \Gamma. \quad (6.7)$$

Als Lösung einer Helmholtzgleichung erfüllt \hat{u} die folgende Beziehung:

$$V\left(\sqrt{\frac{i\delta(z)}{\Delta t}} - V_0\right)\partial_n \hat{u}(z) = \left(-\frac{1}{2}\text{Id} + K\left(\sqrt{\frac{i\delta(z)}{\Delta t}} - V_0\right)\right)\hat{u}(z). \quad (6.8)$$

Wir entwickeln die auftretenden Operatoren in Potenzreihen bezüglich z , d.h. wir setzen:

$$\begin{aligned} V\left(\sqrt{\frac{i\delta(z)}{\Delta t}} - V_0\right) &=: \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n z^n, & \Psi_k &\in \mathcal{B}(H^{-1/2}, H^{1/2}), \\ K\left(\sqrt{\frac{i\delta(z)}{\Delta t}} - V_0\right) &=: \sum_{n=0}^{\infty} \eta_n z^n, & \eta_k &\in \mathcal{B}(H^{1/2}, H^{1/2}). \end{aligned}$$

Damit wird (6.8) zu

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n z^n\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty} \partial_\nu u^n z^n\right) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \eta_n z^n\right)\left(\sum_{n=0}^{\infty} u^n z^n\right) - \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty} u^n z^n.$$

Ausmultiplizieren der Reihen und Koeffizientenvergleich liefert nach der Cauchyschen Produktformel

$$\sum_{k=0}^n \Psi_k \partial_\nu u^{n-k} = \sum_{k=0}^n \eta_k u^{n-k} - \frac{1}{2}u^n.$$

$\Psi_0 = V \left(\sqrt{\frac{i\delta(0)}{\Delta t}} - V_0 \right)$ ist ein koerziver Operator und kann daher stetig invertiert werden. Dies ergibt:

$$\partial_\nu u^n = \Psi_0^{-1} \left(- \sum_{k=1}^n \Psi_k \partial_\nu u^{n-k} + \sum_{k=0}^n \eta_k u^{n-k} - \frac{1}{2} u^n \right). \quad (6.9)$$

Wir haben somit wieder eine explizite Form für die Dirchlet-to-Neumann-Abbildung gefunden, welche auch für numerische Berechnungen verwendet werden kann. Das numerische Verhalten dieser Methode wurde beispielsweise in [Sch02b] untersucht.

6.2. Runge-Kutta Verfahren

Im Runge-Kutta Fall erfüllt die Z-Transformierte die Gleichung (3.18):

$$-\Delta \hat{U}(z) = - \left(\frac{i\delta(z)}{h} - V_0 \mathbf{I} \right) \hat{U}(z),$$

wobei wir um Verwechslungen mit dem Laplace-Operator zu Vermeiden $\delta(z)$ für die Matrixfunktion

$$\delta(z) := \left(A + \mathbf{1} \mathbf{b}^T \frac{z}{1-z} \right)^{-1}$$

schreiben.

Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass $\left(\frac{i\delta(z)}{h} - V_0 \mathbf{I} \right)$ diagonalisierbar ist. Dann kann diese Gleichung auf die skalare Helmholtzgleichung zurückgeführt werden.

Sei $\frac{i\delta(z)}{h} - V_0 \mathbf{I} := J D J^{-1}$, $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ und $\mathbf{W} := J^{-1} \hat{U}$. Dann löst \mathbf{W} komponentenweise

$$-\Delta W_j = -\lambda_j W_j.$$

Damit lässt sich der Dirichlet-to-Neumann Zusammenhang wieder schreiben als:

$$V(\sqrt{\lambda_j}) \partial_\nu W_j = \left(K(\sqrt{\lambda_j}) - \frac{1}{2} \text{Id} \right) W_j.$$

Zusammengefasst zu Operatoren $\hat{V}(z) = \text{diag}(V(\sqrt{\lambda_1}), \dots, V(\sqrt{\lambda_m}))$, $\hat{K}(z) = \text{diag}(K(\sqrt{\lambda_1}), \dots, K(\sqrt{\lambda_m}))$ ergibt sich damit:

$$\hat{V}(z) \partial_\nu \mathbf{W} = \left(\hat{K}(z) - \frac{1}{2} \text{Id} \right) \mathbf{W}.$$

Setzt man dann noch $\tilde{\mathbf{V}}(z) := J^{-1} \hat{V}(z) J$ und $\tilde{\mathbf{K}}(z) := J^{-1} \hat{K}(z) J$, dann erhält man eine analoge Gleichung zu (6.8):

$$\tilde{\mathbf{V}}(z) \partial_\nu \hat{U}(z) = \left(\tilde{\mathbf{K}}(z) - \frac{1}{2} \text{Id} \right) \hat{U}(z).$$

Es sei analog zu vorhin

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{V}}(z) &=: \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n z^n, & \Psi_k &\in \mathcal{B}(H^{-1/2}, H^{1/2}), \\ \tilde{\mathbf{K}}(z) &=: \sum_{n=0}^{\infty} \eta_n z^n, & \eta_k &\in \mathcal{B}(H^{1/2}, H^{1/2}).\end{aligned}$$

Damit kann man die obige Gleichung völlig analog zurück transformieren und erhält mit

$$\sum_{k=0}^n \Psi_k \partial_\nu \mathbf{U}^{n-k} = \sum_{k=0}^n \eta_k \mathbf{U}^{n-k} - \frac{1}{2} \mathbf{U}^n$$

eine Gleichung für die Dirichlet-to-Neumann Abbildung.

A. Abbildungsverzeichnis

4.1. Verschiedene Vorgehen für transparente Randbedingungen	48
5.1. Exakte Lösung der freien Schrödinger Gleichung zum Anfangs- und Endzeitpunkt	51
5.2. Vergleich RK-Verfahren	52
5.3. Vergleich Stabilität bezüglich Quadraturordnung	53
5.4. Vergleich Stabilität bezüglich Quadraturordnung	54

B. Notation

Sind X, Y Banachräume, A ein linearer Operator, so bezeichnen wir:

$\mathcal{B}(X, Y)$...	der Raum aller beschränkten, linearen Operatoren von X nach Y ,
$\sigma(A)$...	das Spektrum von A ,
$\text{dom}(A)$...	der Definitionsbereich von A ,
Id	...	die Identitätsabbildung auf X .

Für Matrizen benutzen wir die folgenden Notationen:

$\sigma(A)$...	Das Spektrum der Matrix A ,
$\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$...	die $n \times n$ Diagonal-Matrix mit $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ als Diagonaleinträgen,
\mathbf{I}	...	Die Einheitsmatrix, $\text{diag}(1, \dots, 1)$.

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen. Wir verwenden folgende Funktionenräume:

$L^2(\Omega)$...	der Raum aller quadratintegrierbaren, messbaren Funktionen: $\{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}, \text{ messbar mit } \int_{\Omega} f ^2 < \infty\}$,
$L^\infty \Omega$...	der Raum aller wesentlich beschränkten, messbaren Funktionen: $\{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}, \text{ messbar mit } \ f\ _{L^\infty(\Omega)} < \infty\}$,
$C_0^\infty(\Omega)$...	der Raum aller beliebig oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger,
$H^k(\Omega)$...	der Sobolevraum $\{f \in L^2(\Omega) : D^\alpha f \in L^2(\Omega) \ \forall \alpha \leq k\}$, wobei für einen Multiindex $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ der Grad definiert ist als $ \alpha := \sum_{i=1}^d \alpha_i$ und die Ableitungen $D^\alpha f$ im schwachen Sinn zu verstehen sind (siehe [AF03]).

Sei u eine messbare Funktion von Ω nach \mathbb{C} , $z \in \mathbb{C}$, dann schreiben wir:

$\text{supp } u$...	der Träger von u : $\overline{\{x \in \Omega : u(x) \neq 0\}}$,
$\Re(z)$...	der Realteil von z ,
$\Im(z)$...	der Imaginärteil von z .

Für die verschiedenen Normen und inneren Produkte verwenden wir die folgende Notation:

$\ u\ _{L^\infty(\Omega)}$:=	$\inf\{M \in \mathbb{R} : u \leq M \text{ fast-überall}\}$,
$\ u\ _{L^2(\Omega)}$:=	$\sqrt{\int_{\Omega} u ^2}$,
$(u, v)_{L^2(\Omega)}$:=	$\int_{\Omega} u \bar{v} \, dx$,
$\ u\ _{H^k(\Omega)}$:=	$\sqrt{\sum_{ \alpha \leq k} \ D^\alpha u\ _{L^2(\Omega)}^2}$,
$ u _{H^k(\Omega)}$:=	$\sqrt{\sum_{ \alpha =k} \ D^\alpha u\ _{L^2(\Omega)}^2}$.

C. Verwendete Runge-Kutta Verfahren

C.1. Gauss-Verfahren

Ordnung = $2m$

$$m = 1: \begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

$$m = 2: \begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$m = 3: \begin{array}{c|ccc} -\frac{\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} & \frac{5}{36} & -\frac{\sqrt{15}}{15} + \frac{2}{9} & -\frac{\sqrt{15}}{30} + \frac{5}{36} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{15}}{24} + \frac{5}{36} & \frac{2}{9} & -\frac{\sqrt{15}}{24} + \frac{5}{36} \\ \frac{\sqrt{15}}{10} + \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{15}}{30} + \frac{5}{36} & \frac{\sqrt{15}}{15} + \frac{2}{9} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array}$$

C.2. Radau-IIA-Verfahren

Ordnung = $2m - 1$

$$m = 1: \begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

$$m = 2: \begin{array}{c|cc} \frac{1}{3} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array}$$

$$m = 3: \begin{array}{c|ccc} -\frac{1}{10}\sqrt{6} + \frac{2}{5} & -\frac{7}{360}\sqrt{6} + \frac{11}{45} & -\frac{169}{1800}\sqrt{6} + \frac{37}{225} & \frac{1}{75}\sqrt{6} - \frac{2}{225} \\ \frac{1}{10}\sqrt{6} + \frac{2}{5} & \frac{169}{1800}\sqrt{6} + \frac{37}{225} & \frac{7}{360}\sqrt{6} + \frac{11}{45} & -\frac{1}{75}\sqrt{6} - \frac{2}{225} \\ 1 & -\frac{1}{36}\sqrt{6} + \frac{4}{9} & \frac{1}{36}\sqrt{6} + \frac{4}{9} & \frac{1}{9} \\ \hline & -\frac{1}{36}\sqrt{6} + \frac{4}{9} & \frac{1}{36}\sqrt{6} + \frac{4}{9} & \frac{1}{9} \end{array}$$

C.3. Lobatto IIIC-Verfahren

Ordnung = $2m - 2$

$$m = 2: \begin{array}{c|cc} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$m = 3: \begin{array}{c|ccc} 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

C.4. Andere Verfahren

SDIRK-Verfahren der Ordnung 4:

$$\begin{array}{c|ccc} \gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\gamma + \frac{1}{2} & \gamma & 0 \\ 1 - \gamma & 2\gamma & -4\gamma + 1 & \gamma \\ \hline & \delta & -2\delta + 1 & \delta \end{array}$$

Mit

$$\gamma := \frac{1}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\pi}{18}\right) + \frac{1}{2}$$

$$\delta := \frac{1}{6(2\gamma - 1)^2}$$

Literaturverzeichnis

- [AAB⁺08] Xavier Antoine, Anton Arnold, Christophe Besse, Matthias Ehrhardt, and Achim Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Comput. Phys.*, 4(4):729–796, 2008.
- [AF03] R.A. Adams and J.J.F. Fournier. *Sobolev Spaces*. Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science, 2003.
- [BLM11] Lehel Banjai, Christian Lubich, and Jens Markus Melenk. Runge-kutta convolution quadrature for operators arising in wave propagation. *Numer. Math.*, 119(1):1–20, September 2011.
- [Bra07] Dietrich Braess. *Finite Elemente*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [BS08] L. Banjai and S. Sauter. Rapid solution of the wave equation in unbounded domains. *SIAM J. Numerical Analysis*, 47(1):227–249, 2008.
- [Cro87] Michel Crouzeix. On multistep approximation of semigroups in Banach spaces. In *Proceedings of the 2nd international conference on computational and applied mathematics (Leuven, 1986)*, volume 20, pages 25–35, 1987.
- [GL96] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 3rd edition, 1996.
- [Hen79] Peter Henrici. Fast Fourier Methods in Computational Complex Analysis. *Siam Review*, 21, 1979.
- [Hol] John M. Holte. Discrete Gronwall lemma and applications. <http://homepages.gac.edu/~holte/publications/GronwallLemma.pdf>.
- [HW10] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II*, volume 14 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2010. Stiff and differential-algebraic problems, Second revised edition, paperback.
- [Kal] Michael Kaltenböck. Funktionalanalysis 2. <http://asc.tuwien.ac.at/funkana/skripten/main.pdf>.
- [LO93] Ch. Lubich and A. Ostermann. Runge-Kutta methods for parabolic equations and convolution quadrature. *Math. Comp.*, 60(201):105–131, 1993.
- [Lub88] C. Lubich. Convolution quadrature and discretized operational calculus. I. *Numer. Math.*, 52(2):129–145, 1988.
- [RS75] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics. II: Fourier Analysis, Self-Adjointness*. Academic Press, 1975.

- [Sch02a] Achim Schädle. *Ein schneller Faltungsalgorithmus für nichtreflektierende Randbedingungen*. PhD thesis, Universität Tübingen, Wilhelmstr. 32, 72074 Tübingen, 2002.
- [Sch02b] Achim Schädle. Non-reflecting boundary conditions for the two-dimensional Schrödinger equation. *Wave Motion*, 35(2):181 – 188, 2002.
- [SS10] Stefan Sauter and Christoph Schwab. *Boundary Element Methods*. Springer-Verlag, Heidelberg, 2010.
- [Wer07] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. Springer-Lehrbuch. Springer-Verlag GmbH, 2007.