

EIN SCHNELLER FALTUNGSALGORITHMUS FÜR
NICHTREFLEKTIERENDE RANDBEDINGUNGEN

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften
der Mathematischen Fakultät
der Eberhard–Karls–Universität Tübingen

vorgelegt von
ACHIM SCHÄDLE
aus Memmingen

JUNI 2002

Tag der mündlichen Qualifikation: 1. August 2002

Dekan: Prof. Dr. Wolfgang Knapp

1. Berichterstatter: Prof. Dr. Christian Lubich

2. Berichterstatter: Prof. Dr. Ralf Hiptmair

Mein Dank gilt meinem Betreuer Prof. Dr. Christian Lubich, den Mitarbeitern des Arbeitsbereiches Numerische Mathematik, meinen Eltern und Prof. Dr. Ralf Hiptmair.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| Einleitung | 9 |
| 1 Nichtreflektierende Randbedingungen | 13 |
| 1.1 Eindimensionale Schrödingergleichung | 14 |
| 1.1.1 Problemstellung | 14 |
| 1.1.2 Räumlich kontinuierlicher Fall | 15 |
| 1.1.3 Räumlich diskreter Fall | 17 |
| 1.2 Zweidimensionale Schrödingergleichung | 22 |
| 1.2.1 Problemstellung | 22 |
| 1.2.2 Räumlich kontinuierlicher Fall | 22 |
| 1.2.3 Räumlich diskreter Fall | 23 |
| 1.3 Wellengleichung | 25 |
| 1.3.1 Nichtreflektierende Randbedingungen für die räumlich diskretisierte 2D und 3D Wellengleichun | 26 |
| 1.4 Maxwellgleichung | 28 |
| 1.4.1 Raumdiskretisierung | 29 |
| 1.4.2 Partielle Sinus- und Cosinustransformationen | 31 |
| 1.4.3 Herleitung der nichtreflektierenden Randbedingungen | 35 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2 | Ein schneller Faltungsalgorithmus | 41 |
| 2.1 | Bereits bekannte Ansätze | 42 |
| 2.1.1 | Faltungsquadratur | 43 |
| 2.2 | Lokale Approximation durch diskretisierte Wegintegrale | 44 |
| 2.2.1 | Quadraturfehler | 51 |
| 2.2.2 | Vernachlässigen der weit entfernt liegenden Singularitäten | 55 |
| 2.3 | Reduktion auf gewöhnliche Differentialgleichungen | 59 |
| 2.4 | Der schnelle Faltungsalgorithmus | 61 |
| 2.4.1 | Der schnelle Faltungsalgorithmus für Basis 2 | 61 |
| 2.4.2 | Der schnelle Faltungsalgorithmus für beliebige Basis | 65 |
| 3 | Stabilität und Konvergenz | 73 |
| 3.1 | Schrödingergleichung: Halbstrahl räumlich kontinuierlich | 73 |
| 3.1.1 | Fehlergleichung | 74 |
| 3.1.2 | Stabilität | 78 |
| 3.1.3 | Konvergenz | 84 |
| 3.2 | Schrödingergleichung: Halbstrahl räumlich diskret | 90 |
| 3.2.1 | Fehlergleichung | 91 |
| 3.2.2 | Stabilität | 92 |
| 3.2.3 | Konvergenz | 97 |
| 3.3 | Schrödingergleichung: Zwei nichtreflektierende Ränder | 99 |
| 3.4 | Wellengleichung und Maxwellgleichung | 103 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 4 | Vollständige Diskretisierung und numerische Beispiele | 105 |
| 4.1 | Schrödingergleichung | 105 |
| 4.1.1 | Eindimensionale Schrödingergleichung – vollständige Diskretisierung | 105 |
| 4.1.2 | Numerisches Beispiel | 108 |
| 4.1.3 | Zweidimensionale Schrödingergleichung – vollständige Diskretisierung | 115 |
| 4.1.4 | Numerisches Beispiel | 118 |
| 4.2 | Wellengleichung | 120 |
| 4.2.1 | Zweidimensionale Wellengleichung – vollständige Diskretisierung | 120 |
| 4.2.2 | Numerisches Beispiel | 122 |
| 4.2.3 | Dreidimensionale Wellengleichung – vollständige Diskretisierung | 125 |
| 4.2.4 | Numerisches Beispiel | 128 |
| | Literaturverzeichnis | 133 |
| | Lebenslauf | 137 |

Einleitung

Fragestellungen, die die Ausbreitung von Wellen betreffen, spielen eine wichtige Rolle bei der mathematischen Untersuchung physikalischer Probleme. Beispiele sind die Ausbreitung von Lichtwellen in einem Glasfaserkabel, der Elektronentransport in einem Halbleiter, die Ausbreitung von Lichtwellen in Flüssigkristallen oder von einer Antenne abgestrahlte elektromagnetische Wellen.

Die Wellenausbreitung wird meist durch eine partielle Differentialgleichung auf einem unbeschränkten Gebiet beschrieben. Dabei ist das Gebiet, auf dem die Lösung interessant ist, meist jedoch sehr klein. So sind die Wellen, die ein Vaporetto auf dem Canale Grande auslöst, in Venedig selbst von Interesse, aber nicht mehr in der Adria, oder die Funkwellen eines Handys nahe beim Benutzer, aber sicher nicht mehr in 10 Meter Entfernung. Wie groß das interessante Gebiet ist, bleibt dem Anwender überlassen, ist also zunächst eine willkürliche Entscheidung.

Das hier vorgestellte Verfahren ist geeignet beispielsweise die zeitabhängige Maxwellgleichung in einem Wellenleiter oder Flüssigkristall oder die lineare Schrödingergleichung zu lösen. So beschreibt die eindimensionale lineare Schrödingergleichung, aufgefasst als Fresnelgleichung, die Ausbreitung einer Lichtwelle in einem Filmwellenleiter. Der dabei interessante Bereich ist der das Licht leitende Kern, der einen Knick macht oder auf ein optisches Bauteil trifft. Mit Hilfe der nichtreflektierenden Randbedingungen für die zeitabhängige Maxwellgleichung in einem Wellenleiter lassen sich elektromagnetische Wellen in einem Gehäuse beschreiben, das von Wellenleitern 'gespeist' wird. Hier sind die Wellen in dem Gehäuse von Interesse, nicht aber die in dem Wellenleiter.

Bei der numerischen Berechnung der Lösung einer solchen auf einem unbeschränkten Gebiet gegebenen Wellengleichung steht man vor dem Problem, die zu diskretisierende Gleichung in geeigneter Form einzuschränken, da man nur endlich viele

Gleichungen lösen kann.

Nun gibt es dazu mehrere grundlegend verschiedene Möglichkeiten. Sehr vereinfacht gesagt verwendet die eine Lösungsmöglichkeit mit zunehmender Entfernung immer weniger Diskretisierungspunkte. Diese Möglichkeit wird etwa durch unendliche finite Elemente genutzt, soll aber in dieser Arbeit nicht dargestellt werden.

Eine andere Möglichkeit ist, das interessierende Gebiet mit einem künstlichen Rand zu begrenzen und für diesen Rand Bedingungen zu formulieren, die auftreffende Wellen durchlassen oder absorbieren, ohne sie zu reflektieren. Diese nichtreflektierenden* Randbedingungen sind idealerweise so zu konstruieren, dass die Lösung der neuen Gleichung mit derjenigen der ursprünglichen Gleichung in dem eingegrenzten Gebiet übereinstimmt. Für die Konstruktion gibt es zwei Vorgehensweisen.

Einmal wird um den künstlich eingeführten Rand eine Schicht gelegt, die eintretende Wellen sehr schnell dämpft. Dabei wird allerdings die ursprüngliche partielle Differentialgleichung durch eine neue Gleichung ersetzt. Dieses Vorgehen kann sehr effektiv sein und liegt den *perfectly matched layers* zugrunde, die erstmals von Bérenger in [6] vorgeschlagen wurden.

Bei der anderen Vorgehensweise, die in dieser Arbeit verfolgt wird, werden ausgehend von der Lösung der partiellen Differentialgleichung im Außenraum Randbedingungen konstruiert. Die neue eingeschränkte Gleichung und die ursprüngliche Gleichung sind insoweit äquivalent, als ihre Lösungen auf dem beschränkten Gebiet übereinstimmen. Das Buch von Givoli [10] und die erst kürzlich erschienen Artikel von Hagstrom [16] und von Tsynkov [31] geben einen Überblick über diese Vorgehensweise.

Für Wellengleichungen, die das Huygensche Prinzip erfüllen, gibt es noch eine weitere in [27] entwickelte Möglichkeit nichtreflektierende Randbedingungen zu erhalten.

In Kapitel 1 werden wir für die lineare Schrödingergleichung, die Wellengleichung und die Maxwellgleichung nichtreflektierende Randbedingungen herleiten. Dazu werden wir zunächst von der partiellen Differentialgleichung ausgehend einen geeigneten künstlichen Rand einführen, die partielle Differentialgleichung im Außenraum lösen und mit Hilfe dieser Lösung räumlich kontinuierliche Randbedingungen erhalten. Die partielle Differentialgleichung im Innenraum und die Randbedingung muss anschließend diskretisiert werden. Wie die Ortsdiskretisierungen des Innenraums und

*Anstelle des Begriffs nichtreflektierend (engl. nonreflecting) werden in der Literatur auch die Begriffe transparent und absorbierend (engl. absorbing) verwendet.

der Randbedingung zu wählen sind, damit die diskretisierte Randbedingung und die Diskretisierung des Innenraumes zusammenpassen, ist nicht klar und die unterschiedliche Diskretisierung kann zu Reflektionen am künstlichen Rand führen.

Diese Reflektionen können vermieden werden, wenn man zuerst das gesamte unbeschränkte Gebiet diskretisiert und aus der im Raum diskretisierten Gleichung nichtreflektierende räumlich diskrete Randbedingungen herleitet.

Für die in dieser Arbeit untersuchten zeitabhängigen Wellenphänomene beinhalten die nichtreflektierenden Randbedingungen charakteristischerweise Faltungen in der Zeit der Form

$$\int_0^t f(t - \tau)g(\tau) d\tau. \quad (1)$$

Diese Faltung muss auf einem Gitter $t = \Delta t, 2\Delta t, \dots, T = N_t \Delta t$ mit Schrittweite Δt berechnet werden. Die Funktionen f und g nehmen hierbei verschiedene Rollen ein. In den meisten Fällen ist die Laplacetransformierte F der Funktion f und nicht der Faltungskern f explizit bekannt. Die Funktion g hingegen wird erst schrittweise aus den Dirichlet- oder Neumanndaten der Lösung am Rand berechnet und ist daher zu Beginn unbekannt. Die exakten nichtreflektierenden Randbedingungen sind also nichtlokal in der Zeit. Auf die Möglichkeit approximierende nichtreflektierende lokale Randbedingungen herzuleiten gehen wir hier nicht ein, sondern verweisen auf die Artikel [9, 11].

Eine naive Diskretisierung von (1) mit einer Quadraturformel wäre zum einen sehr ungenau und andererseits müssten sämtliche Funktionswerte von g gespeichert werden, sodass der Speicheraufwand linear mit der Anzahl der Zeitdiskretisierungsschritte N_t wächst. Zudem wächst der Aufwand zur direkten Auswertung der Faltung quadratisch mit der Anzahl der Zeitdiskretisierungsschritte und wir hätten noch das Problem die Funktion f auszuwerten, also die inverse Laplacetransformation zu berechnen.

Zur Lösung dieser Probleme entwickeln wir in Kapitel 2 ein neues Verfahren, das nur Auswertungen von F benötigt. Zur Berechnung der Faltung benötigt dieses Verfahren einen Aufwand in der Größenordnung von $\mathcal{O}(N_t \log(N_t))$ und der Speicherbedarf wächst nur logarithmisch mit der Anzahl der Zeitdiskretisierungsschritte. Die grundlegende Idee dieses schnellen Faltungsalgorithmus ist es, den Faltungskern f lokal durch eine Summe von Exponentialfunktionen zu approximieren. Dadurch kann die Faltung (1) als Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen aufgefasst werden. Und anstelle von g in allen Zeitdiskretisierungsschritten müssen nur die Lösungen

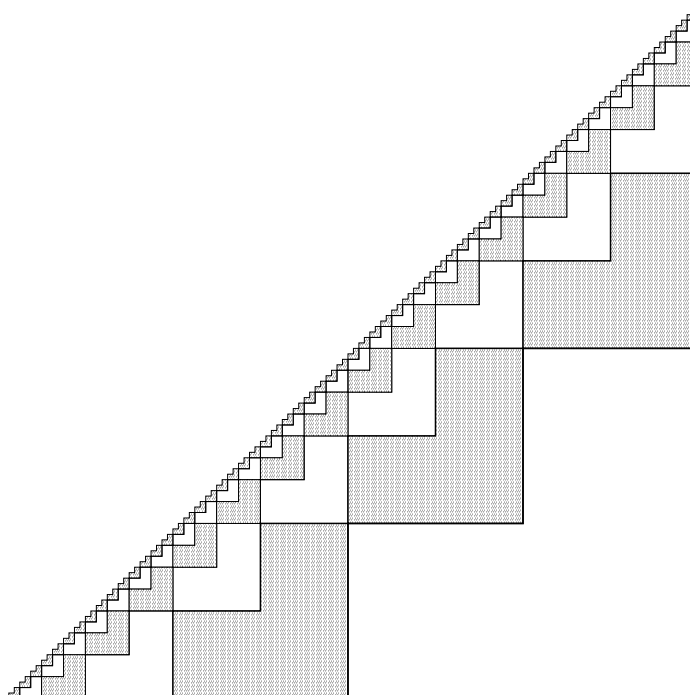


Abbildung 1: Parkettierung der (t, τ) Ebene.

bestimmter einfacher Differentialgleichungen gespeichert werden. Die Intervalle, auf denen f hierbei approximiert wird, werden mit zunehmender Entfernung von der Diagonalen $t - \tau = 0$ rasch größer, wobei die Approximationsgüte gleich bleibt. Die Aufteilung des Faltungsintegrals führt zu der in Abbildung 1 gezeigten Parkettierung der (t, τ) -Ebene. Die Wahl der Exponentialfunktionen geht auf die inverse Laplacetransformation zurück.

Stabilität und Konvergenz dieses neuen schnellen Faltungsalgorithmus werden am Beispiel der linearen homogenen Schrödingergleichung bei Diskretisierung mit einem A-stabilen Verfahren in Abschnitt 3 gezeigt.

In Kapitel 4 finden sich die vollständigen Diskretisierungen und numerische Beispiele zur eindimensionalen Schrödingergleichung, zur zweidimensionalen Schrödingergleichung und Wellengleichung auf einem unendlich ausgedehnten Streifen und zur dreidimensionalen Wellengleichung auf einem unendlich langen rechteckigen Balken.

Kapitel 1

Nichtreflektierende Randbedingungen

In diesem Kapitel werden wir nichtreflektierende Randbedingungen für einige Gleichungen herleiten. Grundsätzlich gibt es für die Formulierung zwei Möglichkeiten: Zum einen als Neumann-nach-Dirichletabbildung (NtD) – hierbei wird die Dirichletrandbedingung zur aktuellen Zeit aus den Neumanndaten der Vergangenheit berechnet – und zum anderen als Dirichlet-nach-Neumannabbildung (DtN). Wir werden uns hauptsächlich auf den Fall der Neumann-nach-Dirichletabbildung konzentrieren.

Die Herleitung soll sehr ausführlich am einfachsten Beispiel der eindimensionalen Schrödingergleichung oder Fresnelgleichung vorgeführt werden. Es werden kontinuierliche und räumlich diskrete Randbedingungen hergeleitet. Anschließend werden wir nichtreflektierende Randbedingungen für die zweidimensionale auf einem unendlichen Streifen mit periodischen Randbedingungen gegebene Schrödingergleichung herleiten.

Dieselbe Technik lässt sich für diese speziellen rechteckigen Geometrien auf die zweidimensionale und dreidimensionale Wellengleichung anwenden. Auch hier leiten wir kontinuierliche und diskrete Randbedingungen her.

Für die Maxwellgleichung leiten wir räumlich diskrete Randbedingungen für einen homogenen rechteckigen Wellenleiter her.

Die Herleitung kontinuierlicher Randbedingungen ist wohlbekannt und kann für alle oben genannten Fälle und einige weitere in den Übersichtsartikeln von Hagstrom [16]

und Tsynkov [31] und dem Buch von Givoli [10] nachgelesen werden.

Räumlich diskrete Randbedingungen sind sehr viel weniger untersucht worden. Für die eindimensionale Schrödingergleichung wurden mit einer anderen als der hier verwendeten Technik diskrete nichtreflektierende Randbedingungen in [3] hergeleitet, die zu den hier gegebenen äquivalent sind. Andere diskrete nichtreflektierende Randbedingungen findet man, Ideen von Deakin und Dryden folgend, in [12].

Die diskreten Randbedingungen für die zweidimensionale Schrödinger- und Wellengleichung in den periodischen Geometrien erhält man nach einer Fouriertransformation in tangentialer Richtung zum Rand mit derselben Technik, die bei der eindimensionalen Schrödingergleichung erfolgreich war.

Die Formulierung und die Raumdiskretisierung der Maxwellgleichung ist von Prof. Dr. Ralf Hiptmair übernommen. In der Herleitung diskreter Randbedingungen für die zeitabhängige Maxwellgleichung stecken einige neue Ideen. Es stellt sich dabei heraus, dass diese Randbedingungen mit denen der dreidimensionalen Wellengleichung übereinstimmen.

1.1 Eindimensionale Schrödingergleichung

1.1.1 Problemstellung

Gesucht ist die Lösung der zeitabhängigen räumlich eindimensionalen Schrödingergleichung, gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t u(x, t) &= \partial_{xx} u(x, t) + \beta(x, t, u) - \alpha^2 u(x, t) \\ &\text{für } (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T] ; T > 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} u(x, t) &= 0 \quad \text{für } t \in [0, T]. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Mit ∂_t und ∂_{xx} werden jeweils die partielle Ableitung nach t beziehungsweise die zweite partielle Ableitung nach x bezeichnet. Nehmen wir an, dass die Lösung nur für x in einem Intervall $[-a, a]$ von Interesse ist und auch nur dort berechnet werden soll. Weiter soll der Träger von u_0 in diesem interessanten Gebiet liegen und es sei $\beta \equiv 0$ für $|x| > a$ und alle t, u . Zusätzlich sei $\alpha \in \mathbb{R}$ eine Konstante und β so, dass obiges Problem wohlgestellt ist.

Die Einschränkung an u_0 ist stärker als unbedingt nötig. Es lassen sich auch nicht-reflektierende Randbedingungen herleiten, falls u_0 außerhalb des Intervalls $[-a, a]$ konstant ist, siehe hierzu [3] und [4].

1.1.2 Räumlich kontinuierlicher Fall

Durch die Aufspaltung von \mathbb{R} in einen Innen- und Außenraum – das Intervall $[-a, a]$ und sein Komplement in \mathbb{R} – erhält man eine Aufspaltung von $u = v \oplus w$. Formal hat man folgendes gekoppelte System von Gleichungen (1.2) und (1.3).

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x, t) &= \partial_{xx} v(x, t) + \beta(x, t, v) - \alpha^2 v(x, t), \\ &\text{für } (x, t) \in [-a, a] \times [0, T]; T > 0, \\ v(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in [-a, a], \\ v(\pm a, t) &= w(\pm a, t) \quad \text{für } 0 \geq t \geq T, \end{aligned} \tag{1.2}$$

wobei w durch

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t w(x, t) &= \partial_{xx} w(x, t) - \alpha^2 w(x, t), \\ &\text{für } (x, t) \in \{(-\infty, -a] \cup [a, \infty)\} \times [0, T]; T > 0, \\ w(x, 0) &= 0 \quad \text{für } x \in \{(-\infty, -a] \cup [a, \infty)\}, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} w(x, t) &= 0 \quad \text{für } 0 \geq t \geq T, \\ -\partial_\nu w(x, t)|_{x=\pm a} &= \partial_\nu v(\pm a, t) \quad \text{für } 0 \geq t \geq T, \end{aligned} \tag{1.3}$$

gegeben ist. ∂_ν bezeichnet hier die nach außen gerichtete Normalenableitung. Nun soll die Gleichung (1.3) gelöst werden. Eine Laplacetransformation in t von (1.3) mit der dualen Variablen s ergibt

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} s W(x, s) &= \partial_{xx} W(x, s) - \alpha^2 W(x, s), \\ -\partial_\nu W(x, s)|_{x=\pm a} &= \partial_\nu V(\pm a, s), \end{aligned} \tag{1.4}$$

wobei die Laplacetransformation durch

$$W(s) := \mathcal{L}(w)(s) := \int_0^\infty \exp(-st) w(t) dt$$

definiert ist. Existiert die Laplacetransformierte für $\operatorname{Re}(s) \geq 0$, so gilt für die inverse Laplacetransformation

$$w(t) = \mathcal{L}^{-1}(W)(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp(st)W(s) ds.$$

Die jeweils in $\pm\infty$ verschwindenden Lösungen der gewöhnlichen Differentialgleichung zweiter Ordnung (1.4) sind

$$W(x, s) = -\frac{1}{\sqrt{\frac{is}{c} + \alpha^2}} \exp\left(-\sqrt{\frac{is}{c} + \alpha^2}(x-a)\right) \partial_\nu V(a, s) \quad \text{für } x \geq a,$$

$$W(x, s) = -\frac{1}{\sqrt{\frac{is}{c} + \alpha^2}} \exp\left(\sqrt{\frac{is}{c} + \alpha^2}(x-a)\right) \partial_\nu V(-a, s) \quad \text{für } x \leq -a,$$

wobei zu beachten ist, dass

$$\partial_\nu W(x, s)|_{x=a} = -\partial_x W(x, s)|_{x=a} \quad \text{und} \quad \partial_\nu W(x, s)|_{x=-a} = \partial_x W(x, s)|_{x=-a}.$$

Eingesetzt in Gleichung (1.2) wird diese zu

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x, t) &= \partial_{xx} v(x, t) + \beta(x, t, v) - \alpha^2 v(x, t) \\ &\quad \text{für } (x, t) \in [-a, a] \times [0, T] \quad \text{und } T > 0, \\ v(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in [-a, a], \\ v(\pm a, t) &= \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{-1}{\sqrt{i(\cdot)/c + \alpha^2}}\right) (t - \tau) \partial_\nu v(\pm a, \tau) d\tau. \end{aligned} \tag{1.5}$$

In obiger Gleichung ist die Randbedingung als Neumann-nach-Dirichletabbildung gegeben. In Abschnitt 2 wird sich zeigen, dass diese Darstellung der Randbedingung geeignet ist, das Faltungsintegral mit dem dort vorgestellten Algorithmus zu lösen. Wesentlich ist hierbei, dass die Laplacetransformierte $F_\alpha(s) := (is/c + \alpha^2)^{-1/2}$ des Faltungskerns für $|s| \rightarrow \infty$ gleichmäßig gegen Null abfällt.

Alternativ kann man auch die Dirichlet-nach-Neumann Abbildung verwenden:

$$\partial_\nu v(\pm a, t) = \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(-\sqrt{i(\cdot)/c + \alpha^2}\right) (t - \tau) v(\pm a, \tau) d\tau, \tag{1.6}$$

wobei das Integral als *Hadamard Finite Part* Integral aufzufassen ist:

$$\begin{aligned} & \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(-\sqrt{i(\cdot)/c + \alpha^2}\right) (t - \tau)v(\pm a, \tau) d\tau \\ & := (i\partial_t + \alpha^2) \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(-\frac{\sqrt{i(\cdot) + \alpha^2}}{i(\cdot) + \alpha^2}\right) (t - \tau)v(\pm a, \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Allerdings ist nach dem oben Ausgeführten die Darstellung (1.6) zur Approximation nicht geeignet. Stattdessen lässt sich die Darstellung (1.7) verwenden, siehe hierzu Kapitel 4.

1.1.3 Räumlich diskreter Fall

Anstatt die Gleichung (1.1) aufzuspalten und die Differentialgleichung im Außenraum zu lösen, kann man diese zuerst mittels finiter Differenzen in x auf dem unbeschränkten Raum diskretisieren und dann aufspalten. Statt die laplacetransformierte Differentialgleichung für W zu lösen, löst man dann die entsprechende Differenzengleichung, deren Lösung der Einfachheit halber wieder mit W bezeichnet werden soll. Auf diese Art vermeidet man Reflektionen in der numerischen Lösung von Gleichung (1.5) am Rand, die durch die Kopplung unterschiedlicher Ortsdiskretisierungen von kontinuierlichen Randbedingungen und der in x diskretisierten Differentialgleichung im Inneren entstehen würden. Die Differenzengleichung für W lautet wie folgt

$$\begin{aligned} \frac{i}{c}sW(x, s) &= \delta_{xx}W(x, s) - \alpha^2W(x, s), \\ \delta_\nu W(\pm a, s) &= -\delta_\nu W(\pm(a - \Delta x), s), \end{aligned} \quad (1.8)$$

wobei

$$\delta_{xx}v(x) := \frac{1}{\Delta x^2}(v(x - \Delta x) - 2v(x) + v(x + \Delta x))$$

der zentrale zweite Differenzenquotient ist und

$$\delta_\nu v(\pm a) := \frac{1}{\Delta x}(v(\pm(a + \Delta x)) - v(\pm a))$$

und

$$\delta_\nu w(\pm a) := \frac{1}{\Delta x}(w(\pm(a - \Delta x)) - w(\pm a))$$

die diskreten Analoga zu den äußeren Normalenableitungen für eine Funktion v auf $[-a, a]$ beziehungsweise eine Funktion w auf $(-\infty, -a] \cup [a, \infty)$ sind.

Das charakteristische Polynom der Differenzgleichung zweiter Ordnung (1.8) ist durch

$$\chi^2 - (2 + (is/c + \alpha^2)\Delta x^2)\chi + 1 = 0$$

gegeben. Seine Wurzeln sind

$$\chi_{\pm}(s, \alpha) = \frac{2 + (is/c + \alpha^2)\Delta x^2 \pm \sqrt{(2 + (is/c + \alpha^2)\Delta x^2)^2 - 4}}{2}. \quad (1.9)$$

Es ist klar, dass $\chi_- \chi_+ = 1$. Sei $\chi_-(s, \alpha)$ diejenige Wurzel, für die $\lim_{n \rightarrow \infty} \chi_-(s, \alpha)^n = 0$ ($|\chi_-(s, \alpha)| < 1$) für $\text{Re}(s) > 0$ gilt, so erhält man nach analytischer Fortsetzung der Funktion $s \mapsto \chi_-(s, \alpha)$ auf die geschlitzte komplexe Ebene für $n = 0, 1, \dots$

$$W(\pm(a + n\Delta x), s) = C\chi_-(s, \alpha)^n.$$

C lässt sich aus der Randbedingung

$$\begin{aligned} \frac{C(1 - \chi_-(s, \alpha)^{-1})}{\Delta x} &= \frac{W(\pm(a, s) - W(\pm(a - \Delta x), s))}{\Delta x} \\ &= \delta_\nu V(\pm(a - \Delta x), s) \end{aligned}$$

als

$$C = \frac{\Delta x}{1 - \chi_+(s, \alpha)} \delta_\nu V(\pm(a - \Delta x), s)$$

berechnen. Insgesamt erhält man am Rand

$$V(\pm(a, s) = W(\pm(a, s) = \frac{\Delta x}{1 - \chi_+(s, \alpha)} \delta_\nu V(\pm(a - \Delta x), s).$$

Es sei $\Delta x = 2a/M$. Setzt man $x_m = -a + m\Delta x$ für $m = 0, 1, \dots, M-1, M$, so erhält man in Analogie zu (1.5) für die wieder mit v bezeichnete in x diskretisierte Lösung folgendes Anfangsrandwertproblem

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x_m, t) &= \delta_{xx} v(x_m, t) + \beta(x_m, t, v) - \alpha^2 v(x_m, t) \\ &\text{für } m = 1, \dots, M-1, t \in [0, T], \\ v(x_m, 0) &= u_0(x_m) \quad \text{für } m = 0, 1, \dots, M, \\ v(x_{0,M}, t) &= \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\Delta x}{1 - \chi_+(\cdot, \alpha)} \right) (t - \tau) \delta_\nu v(x_{1,M-1}, \tau) d\tau \\ &= \int_0^t f_\alpha(t - \tau) \delta_\nu v(x_{1,M-1}, \tau) d\tau \end{aligned} \quad (1.10)$$

mit einem wieder mit $f_\alpha(t)$ bezeichneten diskreten Faltungskern. Dessen Laplace-transformierte $F_\alpha(s) := \Delta x / (1 - \chi_+(s, \alpha))$ hat, wie man leicht im folgenden sehen wird, wieder das gewünschte Abfallverhalten im Unendlichen.

In Abbildung 1.1 ist das Gitter in x angegeben und die zugehörigen Gitterfunktionswerte sind eingezeichnet.

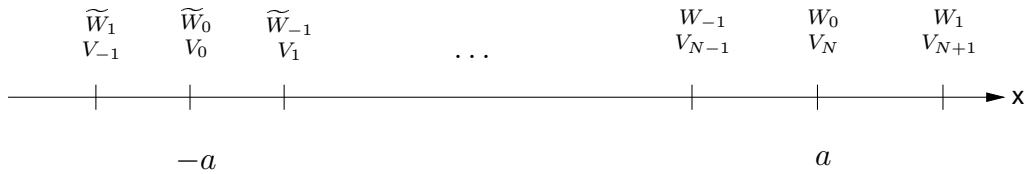


Abbildung 1.1: Überlappende Diskretisierung.

Alternativ ist die Dirichlet-nach-Neumann Randbedingung durch

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x} (v(x_{0,M}, t) - v(x_{1,M+1}, t)) \\ &= \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1 - \chi_+(\cdot, \alpha)}{\Delta x} \right) (t - \tau) v(x_{0,M}, \tau) d\tau \end{aligned}$$

gegeben, wobei das Integral wieder als *Hadamard Finite Part* Integral aufzufassen ist.

Bezüglich s hat die Laplacetransformierte des diskreten Neumann-nach-Dirichlet Faltungskerns zusätzlich zu der mit der Laplacetransformierten des kontinuierlichen Faltungskerns gemeinsamen Singularität in $ic\alpha^2$ eine Singularität in $ic(\alpha^2 + 4/\Delta x^2)$, wie man leicht aus folgender Darstellung von F_α abliest.

$$F_\alpha(s) = \frac{-2c}{\Delta x \sqrt{is + c\alpha^2} \left(\sqrt{is + c\alpha^2} + \sqrt{is + c(\alpha^2 + 4/\Delta x^2)} \right)}$$

Dazu folgende Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} F_\alpha(s) &= \frac{\Delta x}{1 - \left(1 + \frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2} + \sqrt{\left(1 + \frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2} \right)^2 - 1} \right)} \\ &= - \frac{\Delta x}{\frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2} + \sqrt{\left(1 + \frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2} \right)^2 - 1}} \end{aligned}$$

$$= -\frac{\Delta x}{\frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2} + \sqrt{\frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2}} \sqrt{2 + \frac{(is/c + \alpha^2)\Delta x^2}{2}}}$$

1.1 Bemerkung. Für $\Delta x \rightarrow 0$ und festes s konvergiert der diskrete Faltungskern gegen den kontinuierlichen Faltungskern. Es gilt

$$\frac{-2}{\Delta x \sqrt{is/c + \alpha^2} \left(\sqrt{is/c + \alpha^2} + \sqrt{is/c + \alpha^2 + 4/\Delta x^2} \right)} \rightarrow \frac{-1}{\sqrt{is/c + \alpha^2}}.$$

Die Konvergenz ist nicht gleichmäßig für $\text{Re}(s) > 0$.

Nun kommen wir zu einer alternativen Herleitung der diskreten nichtreflektierenden Randbedingung mit Hilfe der *zeta*-Transformation. Diese Methode wird zur Herleitung der nichtreflektierenden Randbedingung für die Maxwellgleichung in Abschnitt 1.4 verwendet und soll hier am einfachsten Fall ausführlich dargestellt werden.

Wir betrachten die bereits in t laplacetransformierte Schrödingergleichung im Außenraum und setzen $W_m := W(a + m\Delta x, s)$

$$\frac{i}{c}sW_m = \frac{W_{m+1} - 2W_m + W_{m-1}}{\Delta x^2} - \alpha^2 W_m.$$

Führen wir nun eine *zeta*-Transformation in x mit Variablen χ , $|\chi| < 1$ durch, so erhalten wir aus der Differenzgleichung (nach Multiplikation mit χ^m und Summation von $m = 0$ bis ∞)

$$\begin{aligned} 0 &= W_{m+1} - 2W_m + W_{m-1} - \Delta x^2(is/c + \alpha^2)W_m, \\ 0 &= \sum_{m=0}^{\infty} W_{m+1}\chi^m - \sum_{m=0}^{\infty} (2 + \Delta x^2(is/c + \alpha^2))W_m\chi^m + \sum_{m=0}^{\infty} W_{m-1}\chi^m, \end{aligned}$$

$$\chi^{-1}W_0 - W_{-1} = (\chi^{-1} - (2 + \Delta x^2(is/c + \alpha^2)) + \chi) \sum_{m=0}^{\infty} W_m\chi^m$$

und nach Multiplikation mit χ

$$W_0 - \chi W_{-1} = (1 - (2 + \Delta x^2(is/c + \alpha^2))\chi + \chi^2) \sum_{m=0}^{\infty} W_m\chi^m.$$

Es sind χ_{\pm} wie in der ersten Herleitung räumlich diskreter Randbedingungen Wurzeln von $1 - (2 + \Delta x^2(is/c + \alpha^2))\chi + \chi^2$ und damit gilt

$$1 - (2 + \Delta x^2(is/c + \alpha^2))\chi + \chi^2 = (\chi - \chi_-) \left(\chi - \frac{1}{\chi_-} \right).$$

Eine Partialbruchzerlegung liefert

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{\chi_-} - \chi_-\right) \sum_{m=0}^{\infty} W_m \chi^m &= \left(\frac{1}{\chi - \frac{1}{\chi_-}} - \frac{1}{\chi - \chi_-}\right) (W_0 - \chi W_{-1}) \\
&= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^m - \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^m\right) W_0 - \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^{m+1} - \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^{m+1}\right) W_{-1} \\
&= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^m - \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^m\right) W_0 \\
&\quad - \chi_- \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^{m+1}} \chi^{m+1} W_{-1} + \frac{1}{\chi_-} \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^{m+1} \chi^{m+1} W_{-1} \\
&= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^m - \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^m\right) W_0 \\
&\quad - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^m \chi_- W_{-1} + \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^m W_{-1} \frac{1}{\chi_-} + \chi_- W_{-1} - \frac{1}{\chi_-} W_{-1} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\chi_-^m} \chi^m (W_0 - \chi_- W_{-1}) - \sum_{m=0}^{\infty} \chi_-^m \chi^m \left(W_0 - \frac{1}{\chi_-} W_{-1}\right) + \left(\chi_- - \frac{1}{\chi_-}\right) W_{-1}.
\end{aligned}$$

Die Forderung, dass W_m gegen 0 für $m \rightarrow \infty$ geht, ergibt

$$W_0 - \chi_- W_{-1} = 0$$

und damit

$$V_M - \chi_- V_{M-1} = 0,$$

$$V_M = \chi_- (V_{M-1} - V_M) + \chi_- V_M,$$

$$V_M = \frac{\chi_-}{1 - \chi_-} (V_{M-1} - V_M) = \frac{\Delta x}{1 - \chi_-^{-1}} \frac{V_M - V_{M-1}}{\Delta x}$$

und ebenso für den anderen Rand

$$V_0 = \frac{\Delta x}{1 - \chi_+} \frac{V_0 - V_1}{\Delta x}.$$

Die inverse Laplacetransformation liefert nun nichtreflektierende Randbedingungen. Es sind die gleichen Randbedingungen, wie man sie schon durch die Herleitung über das charakteristische Polynom erhalten hat.

1.2 Zweidimensionale Schrödingergleichung

1.2.1 Problemstellung

Für die zweidimensionale Schrödingergleichung beschränken wir uns hier auf folgenden Spezialfall: Wir nehmen an, dass sowohl der Anfangswert u_0 als auch die Inhomogenität β und damit die Lösung p periodisch in y sind. Zudem seien u_0 und β in x -Richtung außerhalb des Intervalls $[-a, a]$ konstant Null.

Gesucht ist die Lösung der räumlich zweidimensionalen Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t) - \alpha^2 u(x, y, t) + \beta(x, y, t, u) \\ &\text{für } (x, y, t) \in \mathbb{R}^2 \times [0, T] ; T > 0, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in \mathbb{R}^2, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} u(x, y, t) &= 0 \quad \text{für } t \in [0, T], \\ u(x, y + kp, t) &= u(x, y, t) \quad \text{für } k \in \mathbb{Z} \text{ (} p \text{ periodisch in } y \text{)} \end{aligned} \tag{1.11}$$

eingeschränkt auf das Gebiet $[-a, a] \times [0, p] \times [0, T]$. Wie im eindimensionalen Fall ist α eine reelle Konstante. Wir nehmen an, dass β alle Bedingungen erfüllt, sodass das Anfangswertproblem (1.11) wohlgestellt ist.

1.2.2 Räumlich kontinuierlicher Fall

Wie im eindimensionalen Fall lässt sich $L^2(\mathbb{R}^2) = L^2([-a, a] \times \mathbb{R}) \oplus L^2((\mathbb{R} \setminus [-a, a]) \times \mathbb{R})$ und entsprechend $u = v \oplus w$ aufspalten und man erhält ein gekoppeltes System von Gleichungen. Die Periodizität in y führt dazu, dass eine Fouriertransformation in y ein entkoppeltes System für die einzelnen Fourierkoeffizienten liefert. Nach einer Laplacetransformation der Fourierkoeffizienten erhält man wie im eindimensionalen Fall für jeden Fourierkoeffizienten im Außenraum eine gewöhnliche Differentialgleichung.

Setzt man für die Fouriertransformation und die inverse Fouriertransformation

$$\hat{w}(k) = \mathcal{F}(w)(k) = \frac{1}{p} \int_0^p \exp\left(-iky \frac{2\pi}{p}\right) w(y) dy,$$

$$w(y) = \mathcal{F}^{-1}(\hat{w})(y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{w}(k) \exp\left(iky \frac{2\pi}{p}\right),$$

so ergibt sich nach einer Laplacetransformation bezüglich t für die Laplacetransformierten \hat{W} von w im Außenraum für jeden Fourierkoeffizienten $\hat{W}(x, k, s)$ $k = -\infty, \dots, \infty$ eine Differentialgleichung in x

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} s \hat{W}(x, k, s) &= \partial_{xx} \hat{W}(x, k, s) - \left(k \frac{2\pi}{p}\right)^2 \hat{W}(x, k, s) - \alpha^2 \hat{W}(x, k, s), \\ -\partial_\nu \hat{W}(x, k, s) \Big|_{x=\pm a} &= \partial_\nu \hat{V}(\pm a, k, s). \end{aligned}$$

Mit der Definition

$$\alpha_k^2 := \left(k \frac{2\pi}{p}\right)^2 + \alpha^2$$

erhält man wie im eindimensionalen Fall mit α_k^2 anstelle von α^2 nichtreflektierende Randbedingungen für jeden einzelnen Fourierkoeffizienten. Die Rücktransformation ergibt

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x, y, t) &= \partial_{xx} v(x, y, t) + \partial_{yy} v(x, y, t) + \beta(x, y, t, v) - \alpha^2 v(x, y, t) \\ &\quad \text{für } (x, y, t) \in [-a, a] \times [0, p] \times [0, T] \text{ und } T > 0, \\ v(x, y, 0) &= u_0(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in [-a, a] \times [0, p], \\ v(x, 0, t) &= v(x, p, t) \quad \text{für } x \in [-a, a] \text{ und } 0 \leq t \leq T, \\ v(\pm a, y, t) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp(iyk2\pi/p) \\ &\quad \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(-\frac{1}{\sqrt{i(\cdot)/c + \alpha_k^2}}\right)(t - \tau) \\ &\quad \frac{1}{p} \int_0^p \exp(-i\kappa k 2\pi/p) \partial_\nu v(\pm a, \kappa, \tau) d\kappa d\tau \quad \text{für } t \in [0, T]. \end{aligned} \tag{1.12}$$

1.2.3 Räumlich diskreter Fall

Ebenfalls wie im eindimensionalen Fall kann man anstatt die in t laplacetransformierte und in y fouriertransformierte Differentialgleichung zu lösen auch die Differenzgleichung für \hat{W} lösen und vermeidet so Reflektionen am Rand, die dadurch

entstehen, dass im Außen- und Innenraum unterschiedliche räumliche Diskretisierungen verwendet werden.

Wählt man $\Delta x = 2a/M$ und setzt $x_m = -a + m\Delta x$ für $m = 0, 1, \dots, N$, so erhält man ähnlich wie in (1.12)

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x_m, y, t) &= \delta_{xx} v(x_m, y, t) + \partial_{yy} v(x_m, y, t) + \beta(x_m, y, t, v) - \alpha^2 v(x_m, y, t) \\ &\text{für } m = 1, \dots, M-1, \quad t \in [0, T], \\ v(x_m, y, 0) &= u_0(x_m, y) \quad \text{für } m = 0, \dots, M, \\ v(x_{0,M}, y, t) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp(iyk2\pi/p) \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{\Delta x}{1 - \chi_+(\cdot, \alpha_k)}\right) (t - \tau) \\ &\quad \frac{1}{p} \int_0^p \exp(-i\kappa k2\pi/p) \frac{1}{\Delta x} (v(x_{0,M}, \kappa, \tau) - v(x_{1,M-1}, \kappa, \tau)) \, d\kappa \, d\tau. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Die Laplacetransformierte des Faltungskerns

$$F_k(s) : s \mapsto \frac{\Delta x}{1 - \chi_+(s, \alpha_k)} \quad (1.14)$$

hat wie im eindimensionalen Fall zwei Singularitäten in $ic\alpha_k^2$ und in $ic(\alpha_k^2 + 4/\Delta x^2)$.

Anstelle einer Fouriertransformation der Differentialgleichung in y , durch die die zweite Ableitung zu einer Multiplikation mit $-(k\frac{2\pi}{p})^2$ wird, kann man die diskrete Fouriertransformation auf die durch finite Differenzen in y diskretisierte Gleichung anwenden. Das ergibt eine Multiplikation mit

$$\begin{aligned} &\frac{\exp\left(ik\Delta y\frac{2\pi}{p}\right) - 2 + \exp\left(-ik\Delta y\frac{2\pi}{p}\right)}{\Delta y^2} \\ &= -\left(\frac{2 \sin\left(k\frac{\Delta y}{2}\frac{2\pi}{p}\right)}{\Delta y}\right)^2 = -\left(\frac{2 \sin\left(k\frac{\pi}{L}\right)}{\Delta y}\right)^2. \end{aligned}$$

Nun setzt man

$$\alpha_k^2 := \left(\frac{2 \sin\left(k\frac{\pi}{L}\right)}{\Delta y}\right)^2 + \alpha^2.$$

Wir erhalten dann folgendes räumlich vollständig diskretisierte System

$$\begin{aligned}
\frac{i}{c} \partial_t v(x_m, y_l, t) &= \delta_{xx} v(x_m, y_l, t) + \delta_{yy} v(x_m, y_l, t) \\
&+ \beta(x_m, y_l, t, v) - \alpha^2 v(x_m, y_l, t) \\
&\text{für } m = 1, \dots, M-1, \quad l = -L/2, \dots, L/2-1, \quad t \in [0, T], \\
v(x_m, y_l, 0) &= u_0(x_m, y_l) \quad \text{für } m = 0, \dots, M, \quad l = -L/2, \dots, L/2-1 \\
v(x_{0,N}, y_l, t) &= \tag{1.15} \\
&\sum_{k=-L/2}^{L/2-1} \exp\left(i y_l k \frac{2\pi}{L}\right) \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{\Delta x}{1 - \chi_+(\cdot, \alpha_k)}\right) (t - \tau) \\
&\frac{1}{L} \sum_{j=-L/2}^{L/2-1} \exp\left(-i j \frac{2\pi}{L} k \frac{2\pi}{L}\right) \frac{v(x_{0,M}, y_j, \tau) - v(x_{1,M-1}, y_j, \tau)}{\Delta x} d\tau
\end{aligned}$$

für $y_l = l\Delta y$ und $\Delta y = p/L$.

Im nächsten Abschnitt diskutieren wir die Herleitung von nichtreflektierenden Randbedingungen für die Wellengleichung.

1.3 Wellengleichung

Für die eindimensionale Wellengleichung sind nichtreflektierende Randbedingungen trivial. Man setzt am Rand einfach $\partial_\nu v = \partial_t v$. Interessant bleiben die zwei und dreidimensionale Wellengleichung. Zunächst schränken wir die zulässigen Geometrien und die Problemklasse stark ein. Um eine ähnliche Technik wie bei der zweidimensionalen Schrödingergleichung anwenden zu können, setzen wir voraus, dass das zugrundeliegende Gebiet nur in der x -Richtung unbeschränkt und in die anderen Raumrichtungen beschränkt ist. Auf diesem Rand fordern wir entweder periodische Randbedingungen oder homogene Dirichletrandbedingungen, wie in Abbildung 1.2 eingezeichnet.

Wir werden hier nur räumlich diskretisierte Randbedingungen herleiten. Kontinuierliche Randbedingungen erhält man ganz ähnlich wie oben für die Schrödingergleichung. Diese können auch in [16] nachgelesen werden. Es soll im folgenden nur die Herleitung für den periodischen Fall erläutert werden. Die Periodizität der Gleichung erlaubt eine Fouriertransformation und dadurch erhält man entkoppelte Gleichungen. Um homogene Dirichletrandbedingungen zu behandeln verwendet man statt

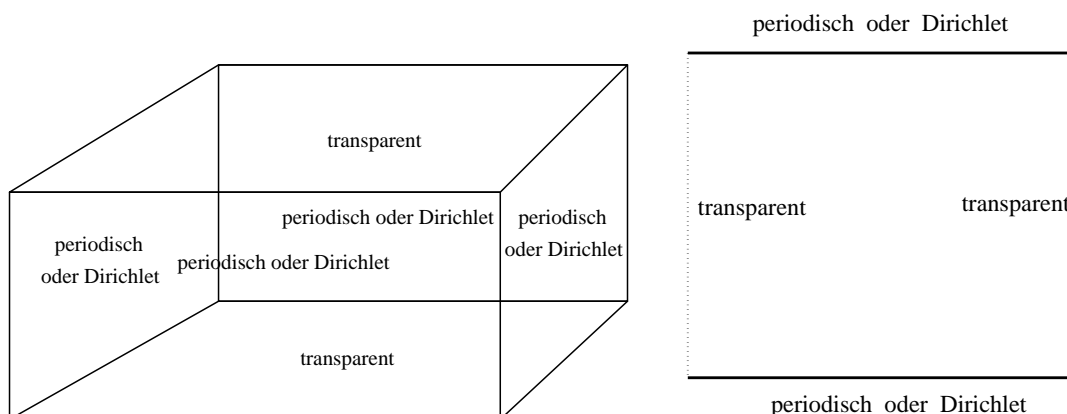


Abbildung 1.2: Spezielle Geometrien.

der Fouriertransformation eine Sinustransformation. Dies wird genauer am Beispiel der Maxwellgleichung in Abschnitt 1.4 ausgeführt.

1.3.1 Nichtreflektierende Randbedingungen für die räumlich diskretisierte 2D und 3D Wellengleichung

Betrachten wir zuerst die zweidimensionale Wellengleichung für $u(x, y, t)$

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} u = \partial_{xx} u + \partial_{yy} u - \beta(x, y, t, u), \quad x, y \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (1.16)$$

Hierbei sei die Funktion β p -periodisch in y und zusätzlich $\beta(x, y, t, u) = 0$ für $|x| \geq a$ und alle y, t, u . Auch die Anfangswerte u_0, \dot{u}_0 seien p -periodisch in y und ihr Träger liege in $|x| \leq a$. Damit ist die Lösung u ebenfalls p -periodisch in y . Zur Ortsdiskretisierung verwenden wir finite Differenzen. Setzt man wie bei der Schrödingergleichung

$$\delta_{xx} u(x) := \frac{1}{\Delta x^2} (u(x - \Delta x) - 2u(x) + u(x + \Delta x)),$$

so erhält man aus (1.16) die im Raum diskretisierte Gleichung

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} u = \delta_{xx} u + \delta_{yy} u - \beta(x, y, t, u), \quad x = m\Delta x, \quad y = l\Delta y, \quad t > 0 \quad (1.17)$$

für $m, l \in \mathbb{N}$, wobei für die Periode $p = L\Delta y$ mit einer natürlichen Zahl L gilt. Durch eine diskrete Fouriertransformation der Länge L bezüglich y erhält man aus (1.17)

im Außenraum

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} \widehat{u}_k = \delta_{xx} \widehat{u}_k - \alpha_k^2 \widehat{u}_k \quad \text{mit} \quad \alpha_k = \frac{2}{\Delta y} \sin(\pi k/L).$$

Die Herleitung der nichtreflektierenden Randbedingung erfolgt nun wie im Fall der Schrödingergleichung, indem formal is/c durch s^2/c^2 ersetzt wird. Die nichtreflektierende Randbedingung für jede einzelne Fouriermode ist damit

$$\widehat{u}_k(\pm a, t) = \int_0^t f_k(t - \tau) \delta_\nu \widehat{u}_k(\pm(a - \Delta x), \tau) d\tau, \quad (1.18)$$

wobei $f_k(t)$ die Funktion ist, deren Laplacetransformierte durch

$$F_k(s) = \frac{\Delta x}{1 - \chi_+(s, \alpha_k)}$$

gegeben ist und

$$\delta_\nu u(\pm a) := \frac{1}{\Delta x} (u(\pm(a + \Delta x)) - u(\pm a))$$

gesetzt wird. $\chi_+(s, \alpha_k)$ ist diejenige Wurzel von

$$\chi^2 - (2 + (s^2/c^2 + \alpha_k^2)\Delta x^2)\chi + 1 = 0, \quad (1.19)$$

deren Betrag für $s \in \mathbb{R}_+$ größer als 1 ist. Die Funktion F_k ist durch die analytische Fortsetzung auf die geschlitzte komplexe Ebene definiert. Die Schlitze laufen dabei parallel zur negativen reellen Achse, ausgehend von den auf der imaginären Achse liegenden Singularitäten von F_k .

Obige Herleitung lässt sich jetzt sehr einfach auf die räumlich dreidimensionale in y und z periodische Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2} \partial_{tt} u = \delta_{xx} u + \delta_{yy} u + \delta_{zz} u - \beta(x, y, z, t, u) \quad (1.20)$$

übertragen. Wendet man die zweidimensionale diskrete Fouriertransformation auf die y - und z -Komponente an, so erhält man die selben nichtreflektierenden Randbedingungen wie oben für die einzelnen Fourierkoeffizienten $\widehat{u}_k(x, t)$ mit $k = (k_y, k_z)$ und

$$\alpha_k^2 = \left(\frac{2}{\Delta y} \sin(\pi k_y/N_y) \right)^2 + \left(\frac{2}{\Delta z} \sin(\pi k_z/N_z) \right)^2.$$

Die Anzahl der Fourierkoeffizienten in y und z ist hierbei N_y und N_z , sodass die Länge der Periode in y -Richtung $N_y \Delta y$ ist und ähnliches für die z Koordinate gilt.

Der Faltungskern $F_k(s)$ lässt sich wie im Fall der Schrödingergleichung umformen zu

$$F_k(s) = \frac{-2}{\Delta x \sqrt{(s/c)^2 + \alpha_k^2} \left(\sqrt{(s/c)^2 + \alpha_k^2} + \sqrt{(s/c)^2 + (\alpha_k^2 + 4/\Delta x^2)} \right)}. \quad (1.21)$$

An dieser Darstellung sieht man, dass F_k sowohl in $\pm ic\alpha_k$ als auch in $\pm ic\sqrt{\alpha_k^2 + 4/\Delta x^2}$ Singularitäten hat.

1.4 Maxwellgleichung

Wir betrachten hier zwei rechteckige, homogene Wellenleiter Ω_1 und Ω_2 mit perfekt leitenden Wänden, die über einen nichthomogenen, beliebig geformten Bereich Ω , wie in Abbildung 1.3 gezeigt, miteinander verbunden sind.

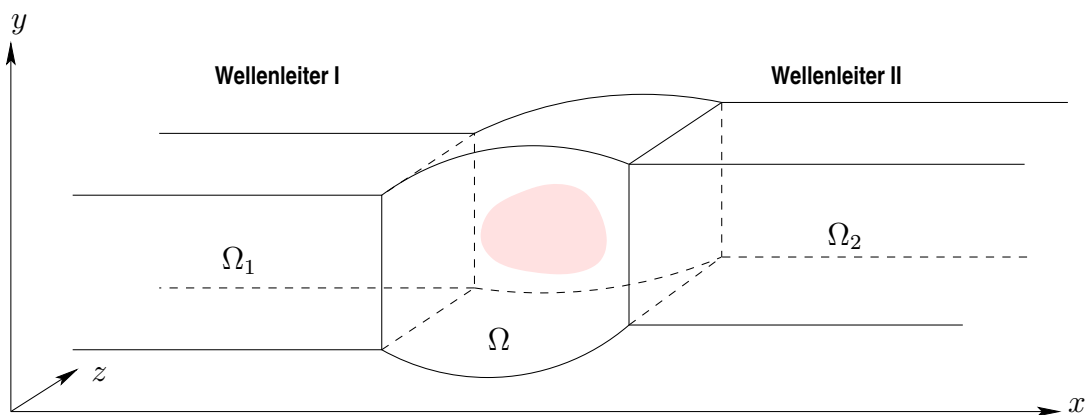


Abbildung 1.3: Zwei miteinander verbundene rechteckige Wellenleiter.

Die zugrundeliegende zeitabhängige elektrische Wellengleichung in den beiden Wellenleitern ist durch

$$-\frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = \mathbf{curl} \mathbf{curl} \mathbf{u}$$

gegeben und muss durch verschwindende tangentielle Komponenten $\mathbf{u} \times \mathbf{n}$ an den Wänden des Wellenleiters ergänzt werden.

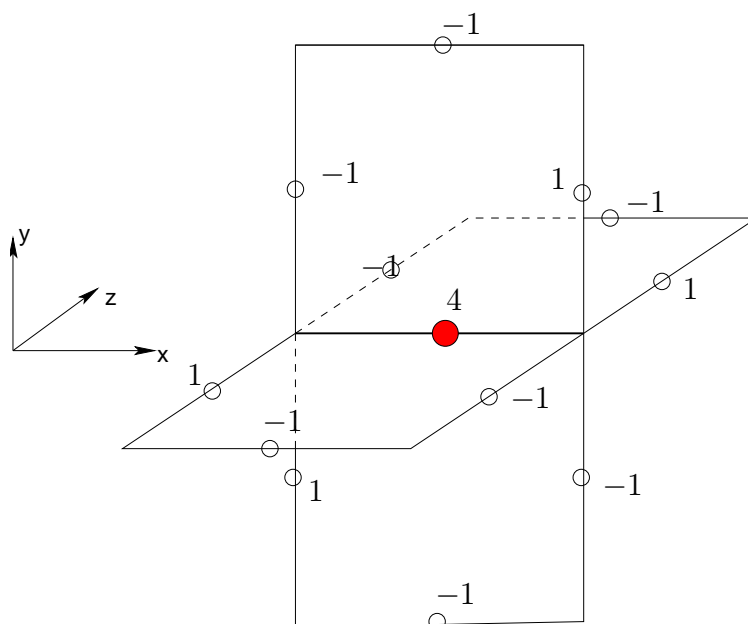


Abbildung 1.4: Diskretisierungsstern für den **curl curl** Operator auf einer Kante in x -Richtung (skaliert mit h^2).

1.4.1 Raumdiskretisierung

Betrachten wir nun eine finite Differenzdiskretisierung auf einem regulären Gitter G_h mit Maschenweite h in einem Wellenleiter, zum Beispiel $\Omega_2 := (0, \infty) \times (0, a) \times (0, b)$, $a, b > 0$, mit $a = N_y h$ und $b = N_z h$ für $N_y, N_z \in \mathbb{N}$, mit dem in [32] vorgestellten Verfahren.

Die Diskretisierungspunkte stimmen mit den Mittelpunkten der Kanten eines regulären Gitters überein. In den Abbildungen 1.4 bis 1.6 sind die entsprechenden Diskretisierungssterne gegeben.

Da offensichtlich zwischen Kanten, die in verschiedene Richtung weisen, unterschieden werden muss, führen wir die folgenden Gitter ein:

$$G_h^x := \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) h, m h, l h \right), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad m \in \{1, \dots, N_y - 1\}, \quad l \in \{1, \dots, N_z - 1\},$$

$$G_h^y := \left(n h, \left(m + \frac{1}{2} \right) h, l h \right), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad m \in \{0, \dots, N_y - 1\}, \quad l \in \{1, \dots, N_z - 1\},$$

$$G_h^z := \left(n h, m h, \left(l + \frac{1}{2} \right) h \right), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad m \in \{1, \dots, N_y - 1\}, \quad l \in \{0, \dots, N_z - 1\}.$$

Mit F_h^d bezeichnen wir den Raum der reellwertigen Gitterfunktionen auf dem Gitter G_h^d . Das diskrete elektrische Feld in Ω_2 kann dann durch Gitterfunktionen auf dem Raum $F_h := F_h^x \times F_h^y \times F_h^z$ beschrieben werden.

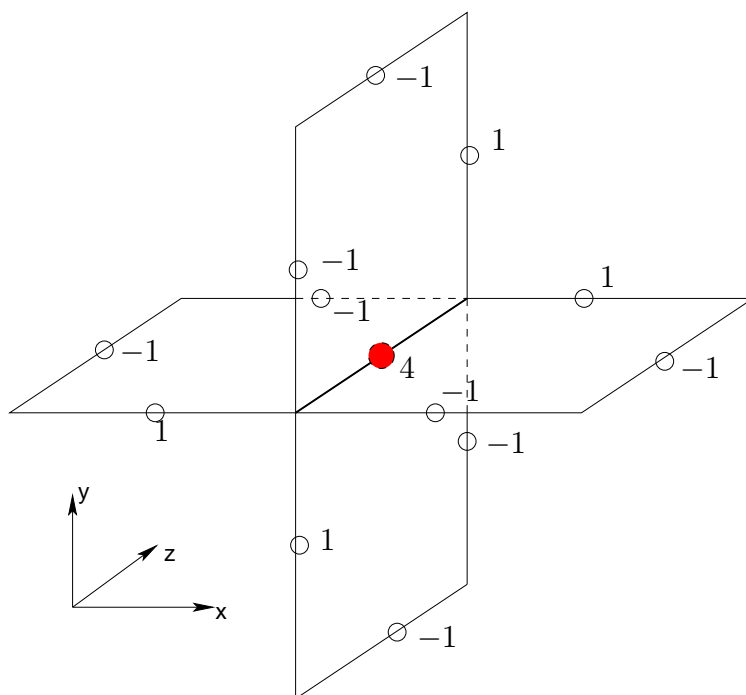


Abbildung 1.5: Diskretisierungsstern für den **curl curl** Operator auf einer Kante in z -Richtung (skaliert mit h^2).

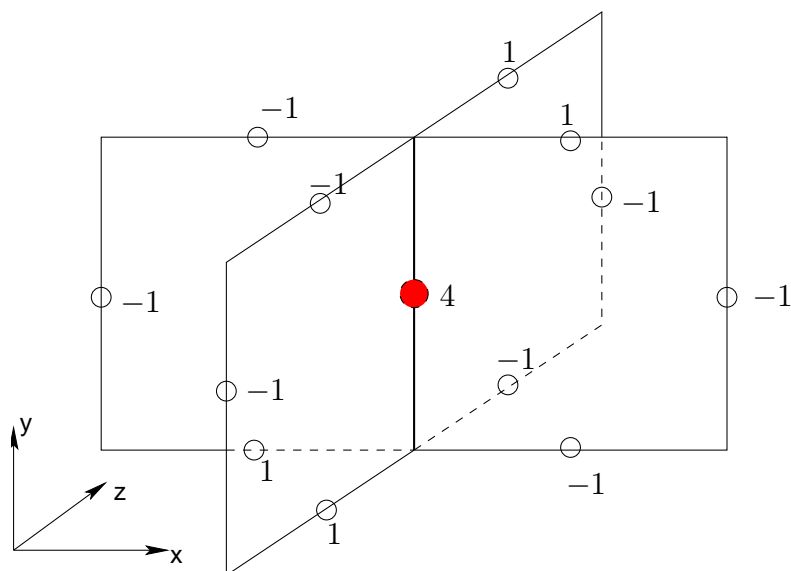


Abbildung 1.6: Diskretisierungsstern für den **curl curl** Operator auf einer Kante in y -Richtung (skaliert mit h^2).

Der diskrete **curl curl** Operator auf Ω_2 mit homogenen Dirichletrandbedingungen ist eine lineare Abbildung $\mathcal{C}_h : F_h \rightarrow F_h: \mathbf{u}_h = (u_h^x, u_h^y, u_h^z) \mapsto \mathcal{C}_h \mathbf{u}_h = (v_h^x, v_h^y, v_h^z)$, wobei

$$\begin{aligned} v_h^x(\mathbf{p}) &= \frac{1}{h^2} \cdot \left((\Delta_h^{(y,z)} u_h^x)(\mathbf{p}) + (R_h^{(y,x)} u_h^y)(\mathbf{p}) + (R_h^{(z,x)} u_h^z)(\mathbf{p}) \right), \quad \mathbf{p} \in G_h^x, \\ v_h^y(\mathbf{p}) &= \frac{1}{h^2} \cdot \left((R_h^{(x,y)} u_h^x)(\mathbf{p}) + (\Delta_h^{(x,z)} u_h^y)(\mathbf{p}) + (R_h^{(z,y)} u_h^z)(\mathbf{p}) \right), \quad \mathbf{p} \in G_h^y, \\ v_h^z(\mathbf{p}) &= \frac{1}{h^2} \cdot \left((R_h^{(x,z)} u_h^x)(\mathbf{p}) + (R_h^{(y,z)} u_h^y)(\mathbf{p}) + (\Delta_h^{(x,y)} u_h^z)(\mathbf{p}) \right), \quad \mathbf{p} \in G_h^z \end{aligned} \quad (1.22)$$

ist. Bezeichnet man mit \mathbf{e}_d für $d \in \{x, y, z\}$ den Einheitsvektor in Richtung d , so ist $\Delta_h^{(d,f)} : F_h^g \rightarrow F_h^g$ für $\{d, f, g\} = \{x, y, z\}$ eine durch

$$\begin{aligned} (\Delta_h^{(d,f)} u_h^g)(\mathbf{p}) &= \\ &4u_h^g(\mathbf{p}) - u_h^g(\mathbf{p} - h\mathbf{e}_d) - u_h^g(\mathbf{p} + h\mathbf{e}_d) - u_h^g(\mathbf{p} - h\mathbf{e}_f) - u_h^g(\mathbf{p} + h\mathbf{e}_f), \end{aligned}$$

für $\mathbf{p} \in G_h^g$ gegebene Abbildung. Ganz ähnlich ist $R_h^{(d,f)} : F_h^d \rightarrow F_h^f$ durch

$$\begin{aligned} (R_h^{(d,f)} u_h^d)(\mathbf{p}) &= u_h^d(\mathbf{p} + \frac{h}{2}(\mathbf{e}_d + \mathbf{e}_f)) - u_h^d(\mathbf{p} + \frac{h}{2}(\mathbf{e}_d - \mathbf{e}_f)) - \\ &- u_h^d(\mathbf{p} + \frac{h}{2}(-\mathbf{e}_d + \mathbf{e}_f)) + u_h^d(\mathbf{p} + \frac{h}{2}(-\mathbf{e}_d - \mathbf{e}_f)) \end{aligned}$$

für $\mathbf{p} \in G_h^f$ und $\{d, f, g\} = \{x, y, z\}$ gegeben.

Eine Laplacetransformation bezüglich t mit dualer Variablen s der räumlich diskretisierten Maxwellgleichung

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_h}{dt^2} = -\mathcal{C}_h \mathbf{u}_h$$

ergibt

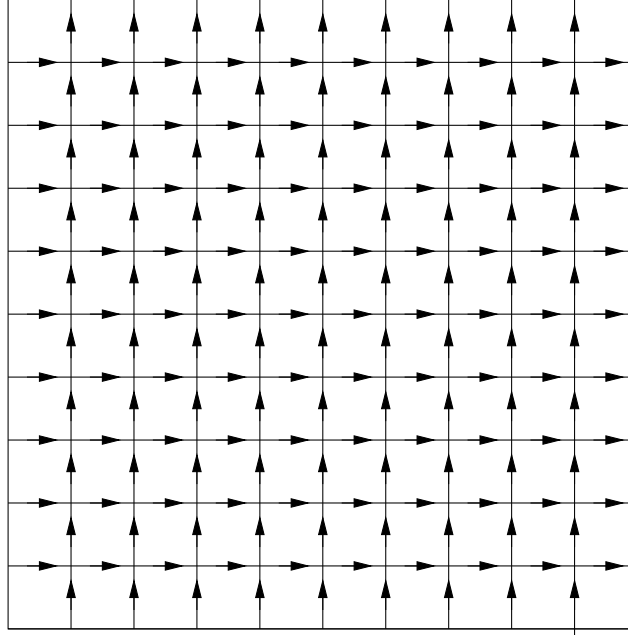
$$S \widehat{\mathbf{u}}_h := (\mathcal{C}_h + s^2) \widehat{\mathbf{u}}_h = 0. \quad (1.23)$$

Aus dieser Gleichung werden wir nun nichtreflektierende Randbedingungen herleiten. Anstelle der Fouriertransformation verwenden wir zum Entkoppeln der Gleichungen die im nächsten Abschnitt beschriebenen partiellen Sinus- und Cosinustransformationen.

1.4.2 Partielle Sinus- und Cosinustransformationen

Sei Γ_h das in Abbildung 1.7 gezeichnete Gitter in der y - z Ebene zwischen Ω und Ω_2 . Es liegen nur Knoten der y - und z -Komponenten auf Γ_h . Diese bilden Untergitter

$$\Gamma_h^y := \left(0, \left(m + \frac{1}{2}\right)h, lh\right), \quad m \in \{0, \dots, N_y - 1\}, \quad l \in \{1, \dots, N_z - 1\},$$

Abbildung 1.7: Gitter Γ_h .

$$\Gamma_h^z := (0, mh, (l + \frac{1}{2})h), \quad m \in \{1, \dots, N_y - 1\}, \quad l \in \{0, \dots, N_z - 1\}$$

mit zugehörigen Räumen von Gitterfunktionen P_h^y und P_h^z .

Setzt man

$$Y^{(\eta, \theta)}(y, z) := \cos(\eta y) \sin(\theta z) \quad \text{und} \quad Z^{(\eta, \theta)}(y, z) := \sin(\eta y) \cos(\theta z),$$

so gilt

$$P_h^y = \text{Span} \left\{ \mathbf{q} \mapsto Y^{(\eta, \theta)}(\mathbf{q}), \quad \eta = m\pi/a, \quad m \in \{0, \dots, N_y - 1\}, \right. \\ \left. \theta = l\pi/b, \quad l \in \{1, \dots, N_z - 1\}, \quad \mathbf{q} \in \Gamma_h^y \right\},$$

$$P_h^z = \text{Span} \left\{ \mathbf{q} \mapsto Z^{(\eta, \theta)}(\mathbf{q}), \quad \eta = m\pi/a, \quad m \in \{1, \dots, N_y - 1\}, \right. \\ \left. \theta = l\pi/b, \quad l \in \{0, \dots, N_z - 1\}, \quad \mathbf{q} \in \Gamma_h^z \right\}.$$

Abgesehen von $Y^{(\eta, \theta)}$ und $Z^{(\eta, \theta)}$ benötigen wir einen weiteren Satz von Wellenfunktionen

$$X^{(\eta, \theta)}(y, z) := \sin(\eta y) \sin(\theta z)$$

mit $\eta = m\pi/a$ für $m \in \{1, \dots, N_y - 1\}$ und $\theta = l\pi/b$ für $l \in \{1, \dots, N_z - 1\}$. Untersuchen wir nun die Wirkung der Differenzenoperatoren auf den speziellen Gitterfunktionen für festes η und θ .

$$\begin{aligned}
u_h^x(x, y, z) &= X^{(\eta, \theta)}(y, z) \tilde{u}_h(x), & (x, y, z) \in G_h^x \\
u_h^y(x, y, z) &= Y^{(\eta, \theta)}(y, z) \tilde{v}_h(x), & (x, y, z) \in G_h^y \\
u_h^z(x, y, z) &= Z^{(\eta, \theta)}(y, z) \tilde{w}_h(x), & (x, y, z) \in G_h^z
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Mit $\tilde{u}_h(x)(\eta, \theta)$, $\tilde{v}_h(x)(\eta, \theta)$ und $\tilde{w}_h(x)(\eta, \theta)$ werden hierbei Sinus-Sinus-, Cosinus-Sinus- und Sinus-Cosinus-Transformationen von u , v und w bezeichnet. Dafür definieren wir

$$\text{Sinus-Sinus-Transformation: } \mathcal{SS}(u(x, \cdot, \cdot))(\eta, \theta) := \tilde{u}_h(x)(\eta, \theta),$$

$$\text{Cosinus-Sinus-Transformation: } \mathcal{CS}(v(x, \cdot, \cdot))(\eta, \theta) := \tilde{v}_h(x)(\eta, \theta),$$

$$\text{Sinus-Cosinus-Transformation: } \mathcal{SC}(w(x, \cdot, \cdot))(\eta, \theta) := \tilde{w}_h(x)(\eta, \theta)$$

und die entsprechenden inversen Transformationen \mathcal{SS}^{-1} , \mathcal{CS}^{-1} und \mathcal{SC}^{-1} . Es ist hierbei \tilde{u}_h eine Funktion $\{(n + \frac{1}{2})h\}_{n \in \mathbb{N}_0} \rightarrow \mathbb{R}$ und \tilde{v}_h und \tilde{w}_h sind Funktionen $\{nh\}_{n \in \mathbb{N}_0} \rightarrow \mathbb{R}$, wie in Abbildung 1.8 eingezeichnet.

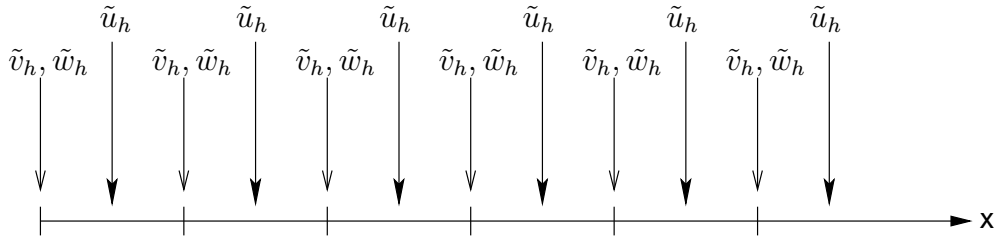


Abbildung 1.8: Knoten von \tilde{u}_h und \tilde{v}_h, \tilde{w}_h auf der x -Achse.

Mit einfachen Umformungen erhält man beispielsweise

$$\begin{aligned}
R_h^{(y,x)} u_h^y(p) &= R_h^{(y,x)} (\cos(\eta y) \cdot \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x)) \\
&= \cos(\eta(y + h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x + h/2) \\
&\quad - \cos(\eta(y + h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x - h/2) \\
&\quad - \cos(\eta(y - h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x + h/2) \\
&\quad + \cos(\eta(y - h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x - h/2) \\
&= (\cos(\eta y) \cos(\eta h/2) - \sin(\eta y) \sin(\eta h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x + h/2) \\
&\quad - (\cos(\eta y) \cos(\eta h/2) + \sin(\eta y) \sin(\eta h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x - h/2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\cos(\eta y) \cos(\eta h/2) + \sin(\eta y) \sin(\eta h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x - h/2) \\
& - (\cos(\eta y) \cos(\eta h/2) - \sin(\eta y) \sin(\eta h/2)) \sin(\theta z) \tilde{v}_h(x - h/2) \\
& = -2 \sin(\eta h/2) \sin(\eta y) \sin(\theta z) (\tilde{v}_h(x + h/2) - \tilde{v}_h(x - h/2))
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\Delta_h^{(y,z)} u_h^x(p) &= \Delta_h^{(y,z)} (\sin(\eta y) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x)) \\
&= 4 \sin(\eta y) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - \sin(\eta y - h) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) - \sin(\eta y) \sin(\theta z + h) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - \sin(\eta y + h) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) - \sin(\eta y) \sin(\theta z - h) \tilde{u}_h(x) \\
&= 4 \sin(\eta y) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - (\sin(\eta y) \cos(\eta h) - \cos(\eta y) \sin(\eta h)) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - (\sin(\eta y) \cos(\eta h) + \cos(\eta y) \sin(\eta h)) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - (\sin(\theta z) \cos(\theta h) - \cos(\theta z) \sin(\theta h)) \sin(\eta y) \tilde{u}_h(x) \\
&\quad - (\sin(\theta z) \cos(\theta h) + \cos(\theta z) \sin(\theta h)) \sin(\eta y) \tilde{u}_h(x) \\
&= ((2 \sin(\eta h/2))^2 + (2 \sin(\theta h/2))^2) \sin(\eta y) \sin(\theta z) \tilde{u}_h(x)
\end{aligned}$$

und ähnliches für die anderen Terme in (1.22), sodass sich insgesamt

$$S \begin{pmatrix} X^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{u}_h \\ Y^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{v}_h \\ Z^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{w}_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{u}'_h \\ Y^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{v}'_h \\ Z^{(\eta,\theta)} \cdot \tilde{w}'_h \end{pmatrix}$$

ergibt, wobei die \tilde{u}'_h , \tilde{v}'_h , und \tilde{w}'_h durch

$$\begin{aligned}
\tilde{u}'_h &= (r_\eta^2 + r_\theta^2) \tilde{u}_h - r_\eta \delta_{h/2}^x \tilde{v}_h - r_\theta \delta_{h/2}^x \tilde{w}_h, \\
\tilde{v}'_h &= r_\eta \delta_{h/2}^x \tilde{u}_h + (\Delta_h^x + r_\theta^2) \tilde{v}_h - r_\eta r_\theta \tilde{w}_h, \\
\tilde{w}'_h &= r_\theta \delta_{h/2}^x \tilde{u}_h - r_\theta r_\eta \tilde{v}_h + (\Delta_h^x + r_\eta^2) \tilde{w}_h
\end{aligned}$$

gegeben sind. Hierbei wurden folgende Abkürzungen verwendet:

$$\begin{aligned}
r_\eta &:= \frac{2}{h} \sin\left(\frac{1}{2}h\eta\right), \quad r_\theta := \frac{2}{h} \sin\left(\frac{1}{2}h\theta\right), \\
(\delta_{h/2}^x \tilde{f}_h)(x) &:= \frac{\tilde{f}_h(x + \frac{1}{2}h) - \tilde{f}_h(x - \frac{1}{2}h)}{h}, \quad x = (n + \frac{1}{2})h, \quad n \in \mathbb{N}_0, \\
(\Delta_h^x \tilde{f}_h)(x) &:= \frac{2\tilde{f}_h(x) - \tilde{f}_h(x - h) - \tilde{f}_h(x + h)}{h^2}, \quad x = nh, \quad n \in \mathbb{N}_0.
\end{aligned}$$

Diese Transformationen entsprechen der Fouriertransformation bei der Wellengleichung.

1.4.3 Herleitung der nichtreflektierenden Randbedingungen

Damit wird (1.23) zu

$$\begin{aligned}
(r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)\tilde{u}_h - r_\eta\delta_{h/2}^x\tilde{v}_h - r_\theta\delta_{h/2}^x\tilde{w}_h &= 0, \\
r_\eta\delta_{h/2}^x\tilde{u}_h + (\Delta_h^x + r_\theta^2 + s^2)\tilde{v}_h - r_\eta r_\theta\tilde{w}_h &= 0, \\
r_\theta\delta_{h/2}^x\tilde{u}_h - r_\theta r_\eta\tilde{v}_h + (\Delta_h^x + r_\eta^2 + s^2)\tilde{w}_h &= 0.
\end{aligned} \tag{1.25}$$

Ein charakteristisches Polynom zu einem solchen System gibt es nicht. Wie schon bei der eindimensionalen Schrödingergleichung ist nun die andere verbleibende Möglichkeit, nichtreflektierende Randbedingungen herzuleiten, eine *zeta*-Transformation mit Variabler χ , $|\chi| < 1$, auf (1.25) anzuwenden. Das Problem dabei ist, dass die \tilde{u}_h in Gleichung (1.25) auf dazwischenliegenden Gitterpunkten gegeben sind (vergleiche Abbildung 1.8) und die transformierte Gleichung dadurch 'unsymmetrisch' wird. Statt also die *zeta*-Transformation direkt anzuwenden, wird sie auf Differenzen von \tilde{u}_h angewandt. Setzt man

$$\begin{aligned}
U(\chi) &:= \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{u}_h((n-1/2)h) - \tilde{u}_h((n+1/2)h))\chi^n, \\
V(\chi) &:= \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{v}_h(nh)\chi^n \quad \text{und} \quad W(\chi) := \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{w}_h(nh)\chi^n,
\end{aligned}$$

so erhält man aus (1.25) folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
&(r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)U(\chi) - \frac{r_\eta}{h}(\chi^{-1} - 2 + \chi)V(\chi) - \frac{r_\theta}{h}(\chi^{-1} - 2 + \chi)W(\chi) \\
&= -\frac{r_\eta}{h}(\chi^{-1}\tilde{v}_h(0) - \tilde{v}_h(-h)) - \frac{r_\theta}{h}(\chi^{-1}\tilde{w}_h(0) - \tilde{w}_h(-h)), \\
r_\eta U(\chi) - \left(\frac{1}{h^2}\chi^{-1} - \left(\frac{2}{h^2} + r_\theta^2 + s^2\right) + \frac{1}{h^2}\chi\right)V(\chi) - r_\eta r_\theta W(\chi) \\
&= \frac{1}{h^2}(\tilde{v}_h(-h) - \chi^{-1}\tilde{v}_h(0)), \\
r_\theta U(\chi) - r_\eta r_\theta V(\chi) - \left(\frac{1}{h^2}\chi^{-1} - \left(\frac{2}{h^2} + r_\eta^2 + s^2\right) + \frac{1}{h^2}\chi\right)W(\chi) \\
&= \frac{1}{h^2}(\tilde{w}_h(-h) - \chi^{-1}\tilde{w}_h(0)).
\end{aligned} \tag{1.26}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystem $U(\chi)$, $V(\chi)$ und $W(\chi)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} U(\chi) &= h \frac{r_\eta(\tilde{v}_h(-h)\chi - \tilde{v}_h(0)) + r_\theta(\tilde{w}_h(-h)\chi - \tilde{w}_h(0))}{-1 + ((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)h^2 + 2)\chi - \chi^2}, \\ V(\chi) &= \frac{-\tilde{v}_h(0) + \tilde{v}_h(-h)\chi}{-1 + ((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)h^2 + 2)\chi - \chi^2}, \\ W(\chi) &= \frac{-\tilde{w}_h(0) + \tilde{w}_h(-h)\chi}{-1 + ((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)h^2 + 2)\chi - \chi^2}. \end{aligned}$$

Alle drei Gleichungen sind von der Form

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n \chi^n = \frac{1}{1 - ((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)h^2 + 2)\chi + \chi^2} P(\chi),$$

mit einem Polynom $P(\chi) = P_0 + P_1\chi$, dessen Koeffizienten von den Anfangswerten abhängen (Anfangswerte der Differentialgleichung in x nach Fourier- und Laplace-transformation). Eine Aufspaltung ergibt

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n \chi^n &= \rho \left(\frac{1}{\chi_-^{-1} - \chi} - \frac{1}{\chi_- - \chi} \right) (P_0 + P_1\chi) \\ &= \rho \left(\sum_{n=0}^{\infty} \chi_-^n \chi^n - \frac{1}{\chi_-} \chi^n \right) (P_0 + P_1\chi) \\ &= \rho \left(\sum_{n=0}^{\infty} P_0 \left(\chi_-^n - \frac{1}{\chi_-} \right) \chi^n + \sum_{n=0}^{\infty} P_1 \left(\chi_-^n - \frac{1}{\chi_-} \right) \chi^{n+1} \right) \\ &= \rho \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(P_0 \left(\chi_-^n - \frac{1}{\chi_-} \right) + P_1 \left(\chi_-^{n-1} - \frac{1}{\chi_-^{n-1}} \right) \right) \chi^n - P_1(\chi_- - \chi_-^{-1}) \right) \\ &= \rho \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(\left(P_0 + P_1 \frac{1}{\chi_-} \right) \chi_-^n - (P_0 + P_1 \chi_-) \frac{1}{\chi_-^n} \right) \chi^n - P_1(\chi_- - \chi_-^{-1}) \right) \end{aligned}$$

mit $\rho = (\chi_- - \chi_+)^{-1}$. Es sind χ_\pm die Wurzeln von $1 - ((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)h^2 + 2)\chi + \chi^2$, wobei gelten soll, dass $|\chi_-| < 1$ für $s \in \mathbb{R}_+$ und diese Wurzel analytisch auf die geschlitzte komplexe Ebene fortgesetzt wird. Ein Koeffizientenvergleich ergibt, dass die Forderung, die Folge der σ_n möge für $n \rightarrow \infty$ abfallen, äquivalent ist zu

$$P_0 + P_1\chi_- = 0.$$

Damit erhält man die nichtreflektierenden Randbedingungen

$$\begin{aligned} \tilde{v}_h(0) - \tilde{v}_h(-h)\chi_- &= 0, \\ \tilde{w}_h(0) - \tilde{w}_h(-h)\chi_- &= 0, \\ \tilde{u}_h(-h/2) - \tilde{u}_h(h/2) &= -h(r_\eta \tilde{v}_h(0)) + r_\theta \tilde{w}_h(0) \end{aligned}$$

und äquivalent dazu

$$\begin{aligned}\tilde{v}_h(0)(\chi_+ - 1) &= \tilde{v}_h(-h) - \tilde{v}_h(0), \\ \tilde{w}_h(0)(\chi_+ - 1) &= \tilde{w}_h(-h) - \tilde{w}_h(0), \\ \tilde{u}_h(-h/2) - \tilde{u}_h(h/2) &= -h(r_\eta \tilde{v}_h(0)) + r_\theta \tilde{w}_h(0)\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}\tilde{v}_h(0) &= \frac{\tilde{v}_h(-h) - \tilde{v}_h(0)}{\chi_+ - 1}, \\ \tilde{w}_h(0) &= \frac{\tilde{w}_h(-h) - \tilde{w}_h(0)}{\chi_+ - 1}, \\ \tilde{u}_h(-h/2) - \tilde{u}_h(h/2) &= -h(r_\eta \tilde{v}_h(0) + r_\theta \tilde{w}_h(0)).\end{aligned}$$

Durch eine Rücktransformation erhält man die folgenden Beziehungen zwischen Randwerten (Dirichletdaten) und Differenzen von Randwerten (Neumanndaten)

$$\begin{aligned}u_h^x(h/2, y, z, t) &= u_h^x(-h/2, y, z, t) + \\ &\mathcal{SS}^{-1}\left(h(r_\eta \mathcal{SS}(u_h^y(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) + r_\theta \mathcal{SS}(u_h^z(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta))\right)(y, z), \\ u_h^y(0, y, z, t) &= \\ &\mathcal{CS}^{-1}\left(\int_0^t f_{\eta, \theta}(t - \tau) \mathcal{CS}\left(\frac{u_h^y(-h, \cdot, \cdot, \tau) - u_h^y(0, \cdot, \cdot, \tau)}{h}\right)(\eta, \theta) d\tau\right)(y, z), \\ u_h^z(x, y, z, t) &= \\ &\mathcal{SC}^{-1}\left(\int_0^t f_{\eta, \theta}(t - \tau) \mathcal{SC}\left(\frac{u_h^z(-h, \cdot, \cdot, \tau) - u_h^z(0, \cdot, \cdot, \tau)}{h}\right)(\eta, \theta) d\tau\right)(y, z).\end{aligned}$$

Hierbei bezeichnen \mathcal{SS} , \mathcal{CS} und \mathcal{SC} jeweils schnelle Sinus-Sinus, Cosinus-Sinus und Sinus-Cosinus Transformationen. Die Laplacetransformierte $F_{\eta, \theta}(s)$ der Faltungskerns $f_{\eta, \theta}(t)$ ist durch

$$\begin{aligned}F_{\eta, \theta}(s) &= \frac{h}{\chi_+ - 1} \\ &= \frac{2}{h \left((r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2) + (r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2)^{1/2} (r_\eta^2 + r_\theta^2 + s^2 + \frac{4}{h^2})^{1/2} \right)}\end{aligned}\quad (1.27)$$

gegeben. Gleichung (1.27) macht deutlich, dass $F_{\eta, \theta}(s)$ sowohl in $\pm\alpha_k$ mit $\alpha_k := i\sqrt{r_\eta^2 + r_\theta^2}$ ($k = (m, l)$ und $\eta = m2\pi/N_y$, $\theta = l2\pi/N_z$) und in $\pm i\sqrt{\alpha_k^2 + 4/h^2}$ Singularitäten besitzt.

Da wir im Inneren des Rechengebietes das Leap-Frog Verfahren verwenden wollen, sollte auch die Randbedingung explizit sein. Dazu müssen wir den direkten Schritt

im Faltungsalgorithmus des Kapitels 2 modifizieren. Anstatt Differenzen von Randwerten zu interpolieren verwenden wir eine lineare Extrapolation.

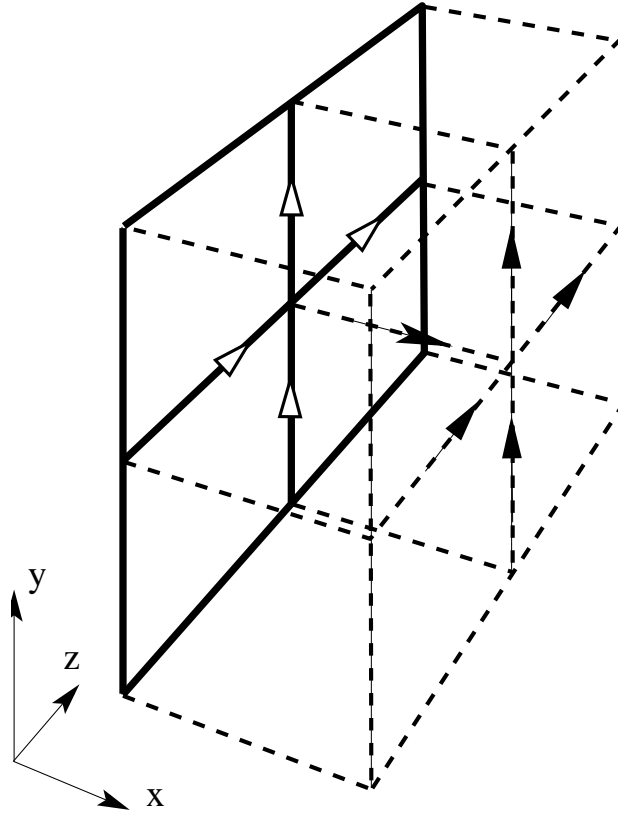


Abbildung 1.9: Randschicht.

Am künstlichen Rand des Gebietes (durchgezogene Linien in Abbildung 1.9) führen wir eine Grenzschrift (gestrichelte Linien) ein. Damit das Leap-Frog Verfahren die Randwerte (weiße Pfeile) aktualisieren kann, benötigt es die Werte der Grenzschrift (schwarze Pfeile), die mit dem Faltungsalgorithmus berechnet werden. Genauer ist:

$$\begin{aligned}
 u_h^x(h/2, y, z, t + \Delta t) &= u_h^x(-h/2, y, z, t + \Delta t) \\
 &+ \mathcal{S}\mathcal{S}^{-1} \left(h \left(r_\eta \mathcal{S}\mathcal{S}(u_h^y(0, \cdot, \cdot, t + \Delta t))(\eta, \theta) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. r_\theta \mathcal{S}\mathcal{S}(u_h^z(0, \cdot, \cdot, t + \Delta t))(\eta, \theta) \right) \right) (y, z),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_h^y(0, y, z, t + \Delta t) &= \mathcal{CS}^{-1} \left(\phi_1 \mathcal{CS}(u_h^y(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^y(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) \right. \\
&+ \frac{\phi_2}{\Delta t} \mathcal{CS}(u_h^y(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^y(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) \\
&- \frac{\phi_2}{\Delta t} \mathcal{CS}(u_h^y(-h, \cdot, \cdot, t - \Delta t) - u_h^y(0, \cdot, \cdot, t - \Delta t))(\eta, \theta) \\
&\left. + \underbrace{\int_0^t f_{\eta, \theta}(t + \Delta t - \tau) \mathcal{CS}(u_h^y(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^y(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) d\tau}_{\text{berechnet mit dem schnellen Faltungsalgorithmus}} \right) (y, z),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
u_h^z(0, y, z, t + \Delta t) &= \mathcal{SC}^{-1} \left(\phi_1 \mathcal{SC}(u_h^z(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^z(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) \right. \\
&+ \frac{\phi_2}{\Delta t} \mathcal{SC}(u_h^z(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^z(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) \\
&- \frac{\phi_2}{\Delta t} \mathcal{SC}(u_h^z(-h, \cdot, \cdot, t - \Delta t) - u_h^z(0, \cdot, \cdot, t - \Delta t))(\eta, \theta) \\
&\left. + \underbrace{\int_0^t f_{\eta, \theta}(t + \Delta t - \tau) \mathcal{SC}(u_h^z(-h, \cdot, \cdot, t) - u_h^z(0, \cdot, \cdot, t))(\eta, \theta) d\tau}_{\text{berechnet mit dem schnellen Faltungsalgorithmus}} \right) (y, z).
\end{aligned}$$

Zur Definition von ϕ_1 und ϕ_2 wird auf Kapitel 2 und die Gleichung (2.10) verwiesen.

Kapitel 2

Ein schneller Faltungsalgorithmus

In diesem Kapitel wird ein Algorithmus zur Auswertung der Faltungsintegrale vorgestellt. Dieser ist die Grundlage zur Berechnung nichtreflektierender Randbedingungen. Die Grundzüge dieses Verfahrens wurden in der Arbeit [24] entwickelt. Hier soll es genauer analysiert werden.

Die bis jetzt hergeleiteten Laplacetransformierten der Faltungskerne und deren Singularitäten sind noch einmal zusammengefasst in folgender Übersicht wiedergegeben.

| | diskret | kontinuierlich |
|--|--|-----------------------------------|
| Schrödinger- gleichung Faltungskern | $\frac{-2c}{\Delta x \sqrt{is + k} \left(\sqrt{is + k} + \sqrt{is + k + 4c/\Delta x^2} \right)}$ | $-\frac{\sqrt{c}}{\sqrt{is + k}}$ |
| Singularitäten | $ik, \quad i(k + 4c/\Delta x^2)$ | ik |
| Wellen- Maxwell- gleichung Faltungskern | $\frac{-2c^2}{\Delta x \sqrt{s^2 + k^2} \left(\sqrt{s^2 + k^2} + \sqrt{s^2 + k^2 + 4c^2/\Delta x^2} \right)}$ | $-\frac{c}{\sqrt{s^2 + k^2}}$ |
| Singularitäten | $\pm ik, \quad \pm i \sqrt{k^2 + 4c^2/\Delta x^2}$ | $\pm ik$ |

Hierbei hat der Parameter k verschiedene Bedeutungen.

Für die Schrödingergleichung ist k im eindimensionalen Fall eine durch die Problemstellung gegebene Konstante, $k = c\alpha^2$, vergleiche Abschnitt 1.1, und im zweidimensionalen Fall erhält man für jede der L Fouriermoden eine andere Konstante. So ist

für die k -te Mode für die in y kontinuierliche Gleichung $k = c((k2\pi/p)^2 + \alpha^2)$ und für die in y -Richtung diskretisierte Gleichung $k = c((2 \sin(\pi k/L)/\Delta y)^2 + \alpha^2)$, wobei eine rechteckige in y -Richtung periodische Geometrie mit Periode p und $\Delta y = p/L$ angenommen wird.

Für die Wellengleichung ist k im zwei- und dreidimensionalen Fall ebenfalls eine ganze Schar von Parametern. So ist für die k -te Fouriermode im zweidimensionalen Fall wie bei der Schrödingergleichung $k = 2c \sin(k\Delta y\pi/p)/\Delta y$. Im dreidimensionalen Fall erhält man für die (k_y, k_z) -te Fouriermode die Konstante $k^2 = c^2((2 \sin(\pi k_y/N_y)/\Delta y)^2 + (2 \sin(\pi k_z/N_z)/\Delta z)^2)$.

Für die Maxwellgleichung ($c = 1$) ist k für die (m, l) -te Sinus-Cosinus- oder Cosinus-Sinus-Mode gegeben durch $k^2 = (2/h \sin(\pi m/N_y))^2 + (2/h \sin(\pi l/N_z))^2$, wobei h die Maschenweite der Raumdiskretisierung ist.

Das Problem ist nun die Berechnung der Faltung

$$\int_0^t f(t - \tau)g(\tau) dt$$

auf dem Gitter $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots, T = N_t\Delta t$ mit Schrittweite Δt . Die Funktionen f und g nehmen verschiedene Rollen ein. Zur Berechnung von $g(\tau)$ für $\tau = n\Delta t$ muss bereits der Wert des Faltungsintegrals zum Zeitpunkt $(n - 1)\Delta t$ bekannt sein. Die Laplacetransformierte $F(s)$ des Faltungskerns $f(t)$ ist *a priori* bekannt und kann leicht ausgewertet werden.

In diesem Kapitel wird der Index α beim Faltungskern f und seiner Laplacetransformierten F weggelassen.

2.1 Bereits bekannte Ansätze

In besonderen Fällen ist F eine rationale Funktion, sodass sich f als Summe von Exponentialfunktionen schreiben lässt. Das Faltungsintegral kann dann als schrittweise Lösung von gewöhnlichen eindimensionalen linearen Differentialgleichungen berechnet werden. Dieses Verfahren wird in den Arbeiten von Grote und Keller [13, 14, 15] für die dreidimensionale Wellengleichung auf einer Kugeloberfläche angewandt.

Ist F keine rationale Funktion, so kann man um die Faltung zu berechnen eine geeignete Modifikation von F rational approximieren. Dadurch lässt sich f wieder als

Summe von Exponentialfunktionen schreiben, sodass das Faltungsintegral schrittweise aus den Lösungen von Differentialgleichungen berechnet werden kann.

In den Arbeiten von Alpert, Greengard und Hagstrom [1, 2, 16] wird der Faltungskern durch eine *least square approximation* approximiert. Eine andere Möglichkeit ist die Approximation des Faltungskerns durch eine *Tschebyscheff-Padé Approximation*. Dieser Ansatz wird in den Arbeiten von Dedner und Sofronov [29, 7] verfolgt. In beiden Ansätzen wird der Faltungskern global approximiert.

Eine weitere Möglichkeit ist die Approximation der Faltung mittels Faltungsquadratur. Dieses Vorgehen soll im nächsten Abschnitt kurz erläutert werden, da es für die Stabilitätsanalyse des hier vorgestellten schnellen Faltungsalgorithmus eine wichtige Rolle spielt.

2.1.1 Faltungsquadratur

Unter Faltungsquadratur versteht man die Approximation von $\int_0^t f(\tau)g(t-\tau)d\tau$ für $t \leq T$ durch $\sum_{j \geq 0} \omega_j g(t-j\Delta t)$, wobei im allgemeinen nur die Laplacetransformierte $F(s)$ von $f(t)$ bekannt ist. Die Berechnung der Faltungsgewichte erfolgt mit Hilfe der von Lubich in [23] und [21, 22] entwickelten Ideen. Äquivalent hierzu sind die von Schmidt [28] für den kontinuierlichen Faltungskern und von Arnold [4, 3] für den diskreten Faltungskern der Schrödingergleichung entwickelten Verfahren.

Zur Auswertung der Faltungsquadratur müssen allerdings alle Werte von $g(j\Delta t)$ für $j = 1, \dots, N_t$ abgespeichert werden. Eine naive Implementierung würde hierzu $\mathcal{O}(N_t^2)$ Operationen benötigen. Dies lässt sich mit dem in [17] entwickelten schnellen Faltungsalgorithmus auf $\mathcal{O}(N_t \log(N_t)^2)$ reduzieren, allerdings wächst auch hier die Anzahl der zu speichernden Werte linear.

Die Quadraturgewichte ω_j sind als die Koeffizienten der erzeugenden Potenzreihe

$$\sum_{j \geq 0} \omega_j \zeta^j := F\left(\frac{\delta(\zeta)}{\Delta t}\right) \quad (2.1)$$

für $|\zeta| < 1$ gegeben, wobei $\delta(\zeta)$ die erzeugende Funktion eines A-stabilen Mehrschrittverfahrens ist. So ist zum Beispiel für die Trapezregel $\delta(\zeta) = 2\frac{1-\zeta}{1+\zeta}$. Die Quadraturgewichte ω_j lassen sich mit Hilfe der Cauchyschen Integralformel aus (2.1) berechnen, siehe Abschnitt 7 in [22]

Das Faltungsintegral der nichtreflektierenden Randbedingung mit der Faltungsquadratur zu approximieren ist vorteilhaft, da man sehr leicht die Stabilität der Zeitdiskretisierung erhält. Verwendet man zur Berechnung der Faltungsgewichte das gleiche A-stabile Verfahren, das auch zur Zeitdiskretisierung des Innenraumproblems verwendet wird, so sind die in t semidiskretisierten Gleichungen (1.5) und (1.1) in dem Sinne äquivalent sind, dass die Lösungen der in t diskretisierten Gleichungen auf dem Intervall $[-a, a]$ übereinstimmen. Ist nun die Diskretisierung mit dem A-stabilen Verfahren angewandt auf die Gleichung (1.1) stabil, so ist es auch die Diskretisierung von (1.5).

Ziel der folgenden Abschnitte ist es nun, einen Algorithmus zu beschreiben, dessen Speicherbedarf nur logarithmisch mit N_t wächst und der nur einen Aufwand von $\mathcal{O}(N_t \log(N_t))$ zur Auswertung der Faltung benötigt.

2.2 Lokale Approximation durch diskretisierte Wegintegrale

Statt den Kern $f(t)$ global durch eine Summe von Exponentialfunktionen zu approximieren geschieht dies hier lokal auf einer Folge schnell wachsender Zeitintervalle I_ℓ , die das Intervall $[\Delta t, T]$ überdecken:

$$I_\ell = [B^{\ell-1}\Delta t, (2B^\ell - 1)\Delta t] \quad (2.2)$$

Hierbei ist die Basis $B > 1$ eine natürliche Zahl und $\ell = 1, \dots, K_t$ mit $(2B^{K_t} - 1) \geq N_t$. Die Approximation von $f(t)$ auf I_ℓ erhält man durch Anwendung der Trapezregel auf eine Parametrisierung des Wegintegrals zur Berechnung der inversen Laplace-transformation,

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_\ell} F(\lambda) e^{t\lambda} d\lambda \approx \sum_{j=-N}^N w_j^{(\ell)} F(\lambda_j^{(\ell)}) e^{t\lambda_j^{(\ell)}}, \quad t \in I_\ell, \quad (2.3)$$

wobei Γ_ℓ eine geeignete, unten näher beschriebene Kurve in der komplexen Ebene ist. Die Anzahl der Quadraturpunkte auf Γ_ℓ , $2N+1$, wird unabhängig von ℓ gewählt. Verglichen mit der Anzahl von Quadraturpunkten, die für eine gleichmäßige entsprechend genaue Approximation des Wegintegrals auf ganz $[0, T]$ nötig wäre, ist sie bei dieser lokalen Approximation sehr viel geringer, siehe hierzu Abschnitt 2.2.1.

Die Approximation des Wegintegrals kann effektiv berechnet werden, da $F(s)$ höchstens vier Singularitäten auf der imaginären Achse hat und für $|s| \rightarrow \infty$ gleichmäßig gegen Null geht. Daher kann Γ_ℓ so gewählt werden, dass nur kurze Stücke in und nahe der rechten Halbebene verlaufen und Γ_ℓ asymptotisch gegen eine Parallele der negativen reellen Achse strebt, sodass die Exponentialfunktion entlang solcher Kurven schnell abfällt.

Zur numerischen Integration in (2.3) wendet man die Trapezregel mit äquidistanter Schrittweite auf eine Parametrisierung eines *Talbotweges* an, die durch

$$s : (-\pi, \pi) \rightarrow \Gamma \quad \theta \mapsto s(\theta) = \sigma + \mu(\theta \cot(\theta) + i\nu\theta) \quad (2.4)$$

gegeben ist. Die Wahl dieser Parametrisierung wurde von Talbot in [30] zur Auswertung der Inversen der Laplacetransformierten $F(s)$ an einer Stelle t vorgeschlagen und analysiert. In der Arbeit von Rizzardi [26, 25] wird eine Modifikation des Verfahrens von Talbot untersucht, die die gleichzeitige Auswertung von $\mathcal{L}(F)^{-1}(t)$ für t aus einem Intervall ermöglicht.

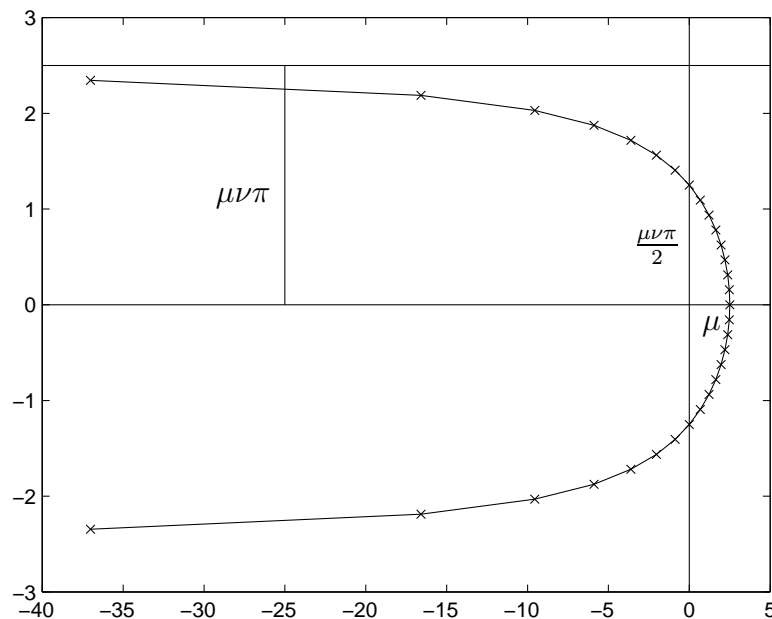


Abbildung 2.1: Talbotweg in der komplexen Ebene.

Die Parameter μ , ν und σ werden so gewählt, dass die Singularitäten von $F(s)$ links des Weges liegen, vergleiche Abbildung 2.1. Wegen der zwei wohlbekanntesten

Singularitäten im Fall der Schrödingergleichung kann es vorteilhaft sein, statt eines einzigen “großen” Talbotweges bis zu zwei verschobene Talbotwege zu verwenden um alle Singularitäten von F zu umschließen. Gleiches gilt für die vier Singularitäten der Wellengleichung, die mit bis zu vier Talbotwegen umschlossen werden.

Es ist

$$s'(\theta) = \mu \frac{\cos(\theta) \sin(\theta) - \theta}{\sin^2(\theta)} + i\mu\nu$$

und damit

$$\lambda_j = s(\theta_j), \quad w_j = \frac{1}{2\pi i} \frac{\pi}{N} s'(\theta_j)$$

in (2.3), wobei $\theta_j = j\pi/N$ für $j = -N - 1, \dots, N - 1$.

Zahlreiche numerische Experimente haben gezeigt, dass folgende Wahl der Parameter günstig ist, das heißt der Fehler bei der Approximation (2.3) klein wird. Man setzt $\sigma_0 = 0$, $\mu_0 = 8$, $\mu := \mu_0 / ((2B^\ell - 1)\Delta t)$, $\nu_0 = 0.6$ und $\psi := \pi\mu\nu_0/2$. Dadurch ist ψ der Imaginärteil des Schnittpunktes des durch ν_0 , μ und $\sigma = 0$ gegebenen Talbotweges mit der imaginären Achse. Der Parameter μ hängt nur von ℓ ab, wohingegen die Parameter ν und σ von der Lage der Singularitäten des Kerns abhängen.

Nun führen wir zwei Bezeichnungen für die Singularitäten der Faltungskerne ein:

$$\kappa := ik$$

bezeichnet diejenige Singularität, die sowohl für den kontinuierlichen Faltungskern als auch für den diskreten Kern auftritt und

$$\iota := i(k + 4c/\Delta x^2) \text{ (S)} \quad \text{oder} \quad \iota := i\sqrt{k^2 + 4c^2/\Delta x^2} \text{ (W)}$$

bezeichnet die nur bei den diskreten Kernen – (S) beim Schrödingergleichungskern und (W) beim Wellengleichungskern – auftretende Singularität.

Kommen wir nun zur Wahl des Integrationsweges. Im Fall der Schrödingergleichung benötigt man, falls man den kontinuierlichen Kern verwendet, nur einen Weg, der durch die Parameter μ , $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \kappa$ gegeben ist.

Soll der diskrete Kern verwendet werden, so sind je nach Abstand der beiden Singularitäten bis zu zwei Konturen zu wählen. Man wählt einen aus einer Kontur bestehenden Weg, falls $\iota - \kappa \leq 2\psi$ ist, und setzt $\nu = \nu_0 * (1 + (\iota - \kappa)/(2\psi))$ und $\sigma = (\iota + \kappa)/2$. Anderenfalls wählt man einen aus zwei verschobenen Konturen bestehenden Weg gegeben durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \kappa, \iota$.

Die oben beschriebene Wahl des Integrationsweges Γ ergibt den in Abbildung 2.2 gezeigten Pseudocode `talbotweg`.

Hierbei bezeichnet $s(\mu, \nu, \sigma)$ die durch die Parameter μ , ν und σ gegebene Talbotkurve und $sd(\mu, \nu)$ die zugehörige Ableitung.

```

( $S, Sd$ ) = talbotweg(  $c, \Delta t, \Delta x, K, \kappa, \iota, B, N, \mu_0, \nu_0$ )
Eingabe
   $c, \Delta t, \Delta x, \mu_0, \nu_0$  reelle Skalare
   $B, K, N$  natürliche Skalare
   $\kappa, \iota$  reelle Skalare
Ausgabe
   $S, Sd$  Vektoren der Länge  $K$ , deren Einträge Vektoren der Länge ein Vielfaches von  $(2 * N - 1)$  sind
benötigte Funktionen
   $s, sd$ 
for  $\ell = 1, \dots, K$ 
   $\mu = \mu_0 / (\Delta t * (2 * B^\ell - 1))$ 
   $\psi = \pi * \mu * \nu_0 / 2$ 
  if  $(\iota - \kappa) > 2 * \psi$ 
     $S_\ell = [s(\mu, \nu_0, \kappa), s(\mu, \nu_0, \iota)]$ 
     $Sd_\ell = [sd(\mu, \nu_0), sd(\mu, \nu_0)]$ 
  else
     $S_\ell = [s(\mu, \nu_0 * (1 + (\iota - \kappa) / (2 * \psi))), (\kappa + \iota) / 2]$ 
     $Sd_\ell = [sd(\mu, \nu_0 * (1 + (\iota - \kappa) / (2 * \psi)))]$ 
  end
end

```

Abbildung 2.2: Pseudocode zur Wahl des Integrationsweges für den diskreten Schrödingerkern.

Im Fall der Wellengleichung soll hier die Wahl der Talbotkurven bei Verwendung des diskreten Kernes besprochen werden. Die Laplacetransformierte des Faltungskerns hat insgesamt vier Singularitäten. Je nach Abstand der Singularitäten und abhängig vom Approximationsintervall sind insgesamt vier verschiedene Fälle zu unterscheiden. Siehe hierzu die folgenden Abbildungen 2.3 bis 2.6.

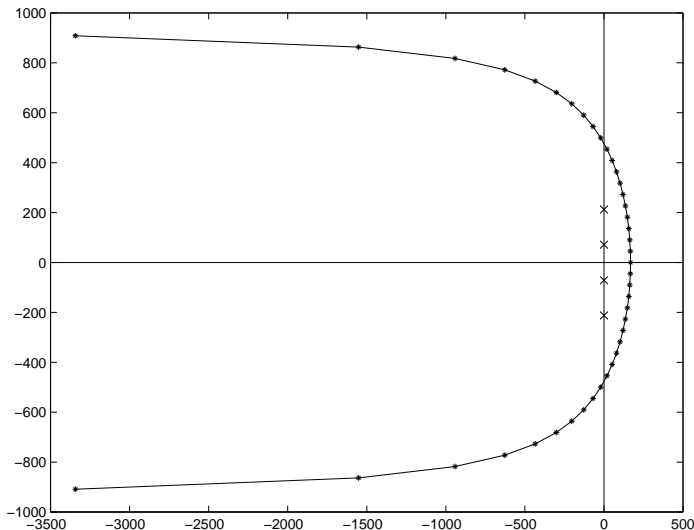


Abbildung 2.3: Eine Kontur, die alle Singularitäten umschließt.

Der Integrationsweg Γ wird als die Kurve Γ_0 gewählt, die alle vier Singularitäten umschließt, falls $\kappa < \psi$ und $\psi < (\iota - \kappa)/2$ ist. Dazu wird $\nu = \nu_0(1 + \kappa/\psi)$ und $\sigma = \sigma_0$ gesetzt.

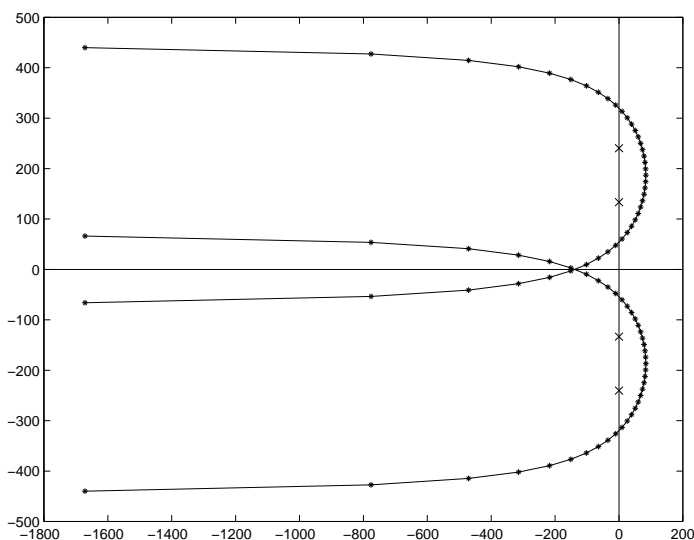


Abbildung 2.4: Zwei Konturen, die alle Singularitäten umschließen.

Wir wählen zwei Konturen Γ_0 und $\widehat{\Gamma}_0$, falls $\kappa \geq \psi$ und $\psi > (\iota - \kappa)/2$, wobei Γ_0 durch $\nu = \nu_0(1 + (\iota - \kappa)/(2\psi))$ und $\sigma = (\iota + \kappa)/2$ und $\widehat{\Gamma}_0$ durch $\nu = \nu_0(1 + (\iota - \kappa)/(2\psi))$ und $\sigma = -(\iota + \kappa)/2$ gegeben ist.

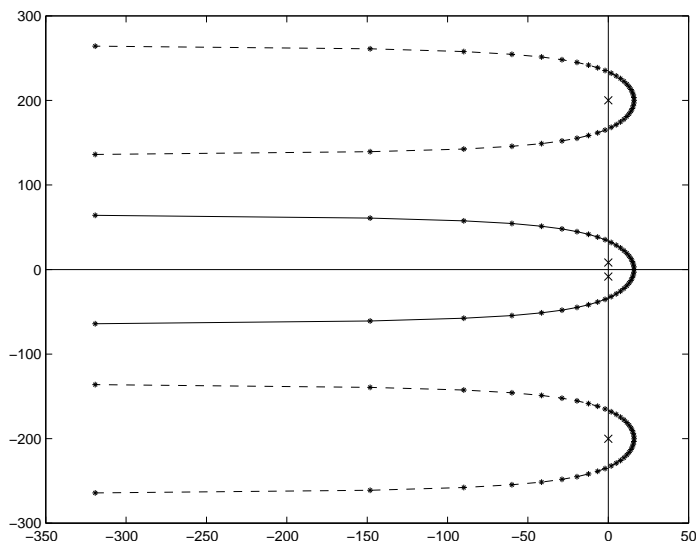


Abbildung 2.5: Drei Talbotwege. Die gestrichelten Linien zeigen hier Γ_1 und $\widehat{\Gamma}_1$.

Wir wählen einen aus drei Kurven bestehenden Integrationsweg Γ .

Γ_0 umschließt $\pm\kappa$, Γ_1 die Singularität in ι und $\widehat{\Gamma}_1$ diejenige in $-\iota$, falls $\kappa < \psi$ und $\psi \geq (\iota - \kappa)/2$ ist. Hierbei ist Γ_0 durch $\nu = \nu_0(1 + \iota/\psi)$ und $\sigma = \sigma_0$, Γ_1 durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \iota$ sowie $\widehat{\Gamma}_1$ durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = -\iota$ gegeben.

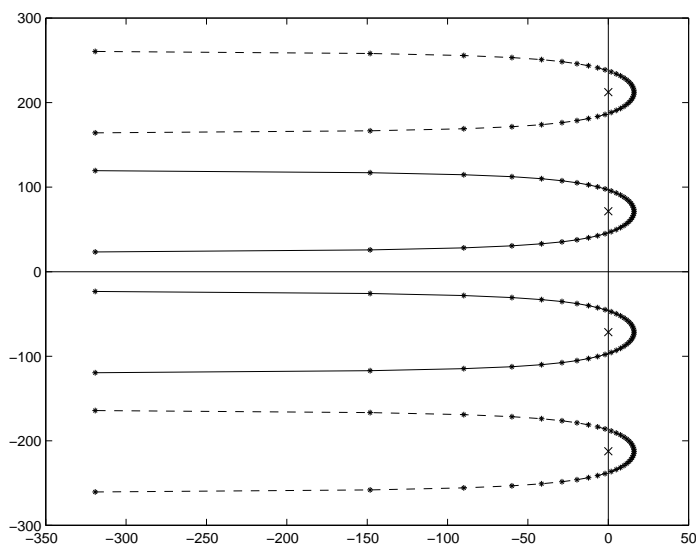


Abbildung 2.6: Vier Talbotwege. Die gestrichelten Linien zeigen hier Γ_1 und $\widehat{\Gamma}_1$.

Wir wählen vier Kurven Γ_0 , $\widehat{\Gamma}_0$, Γ_1 und $\widehat{\Gamma}_1$, falls $\kappa \geq \psi$ und $\psi < (\iota - \kappa)/2$ ist, wobei Γ_0 durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \kappa$, $\widehat{\Gamma}_0$ durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = -\kappa$, Γ_1 durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = \iota$ und $\widehat{\Gamma}_1$ durch $\nu = \nu_0$ und $\sigma = -\iota$ gegeben ist.

```
(S, Sd) = talbotweg( $\Delta t, K, \kappa, \iota, B, N, \mu_0, \nu_0$ )
```

Eingabe

$dt, \mu_0, \nu_0, \kappa, \iota$ reelle Skalare

B, K, N natürliche Skalare

Ausgabe

S, Sd Vektoren der Länge K , deren Einträge Vektoren sind

benötigte Funktionen

s, sd

.* Elementweise Vektormultiplikation

```
for  $\ell = 1, \dots, K$ 
```

```
 $\mu = \mu_0 / (\Delta t * (2 * B^\ell - 1))$ 
```

```
 $\psi = \pi * \mu * \nu_0 / 2$ 
```

```
if  $\kappa < \psi$ 
```

```
  if  $\psi < (\iota - \kappa) / 2$ 
```

```
     $S_\ell = \mathbf{s}(\mu, \nu_0 * (1 + \kappa / \psi), 0)$ 
```

```
     $Sd_\ell = \mathbf{sd}(\mu, \nu_0 * (1 + \kappa / \psi))$ 
```

```
  else
```

```
     $S_\ell = [\mathbf{s}(\mu, \nu_0(1 + \iota / \psi), 0), \mathbf{s}(\mu, \nu_0, \iota), \mathbf{s}(\mu, \nu_0, -\iota)]$ 
```

```
     $Sd_\ell = [\mathbf{sd}(\mu, \nu_0(1 + \iota / \psi)), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0)]$ 
```

```
  end
```

```
else
```

```
  if  $\psi > (\iota - \kappa) / 2$ 
```

```
     $S_\ell = [\mathbf{s}(\mu, \nu_0(1 + (\iota - \kappa) / 2), (\iota + \kappa) / 2), \mathbf{s}(\mu, \nu_0(1 + (\iota - \kappa) / 2), -(\iota + \kappa) / 2)]$ 
```

```
     $Sd_\ell = [\mathbf{sd}(\mu, \nu_0(1 + (\iota - \kappa) / 2)), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0(1 + (\iota - \kappa) / 2))]$ 
```

```
  else
```

```
     $S_\ell = [\mathbf{s}(\mu, \nu_0, \kappa), \mathbf{s}(\mu, \nu_0, -\kappa), \mathbf{s}(\mu, \nu_0, \iota), \mathbf{s}(\mu, \nu_0, -\iota)]$ 
```

```
     $Sd_\ell = [\mathbf{sd}(\mu, \nu_0), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0), \mathbf{sd}(\mu, \nu_0)]$ 
```

```
  end
```

```
end
```

```
end
```

Abbildung 2.7: Pseudocode zur Wahl von Γ für den diskreten Wellenkern.

Die Wahl von Γ_ℓ ist in dem in Abbildung 2.7 wiedergegebenen Pseudocode zusammengefasst. Dort bezeichnet $\mathfrak{s}(\mu, \nu, \sigma)$ wie schon bei der Schrödingergleichung die durch die Parameter μ , ν und σ gegebene Talbotkurve und $\mathfrak{sd}(\mu, \nu)$ die Ableitung mit je $2N - 1$ Diskretisierungspunkten.

Bei der Wellengleichung lässt sich aufgrund der Symmetrie der Talbotwege zur reellen Achse und weil für den Faltungskern $F(\bar{s}) = \overline{F(s)}$ gilt die Hälfte der Diskretisierungspunkte auf einer Talbotkontur einsparen.

2.2.1 Quadraturfehler

Der Quadraturfehler, der durch die Approximation der Wegintegrale mit der Trapezregel entsteht, fällt exponentiell mit der Anzahl der verwendeten Quadraturpunkte, siehe hierzu die Arbeiten von Talbot [30] und von Rizzardi [26]. Dort wird gezeigt, dass der Fehler in der Größenordnung von

$$\mathcal{O}(N^2 \exp(c_1 \lambda t^* - c_2 \sqrt{\lambda t^* N}))$$

liegt. c_1 und c_2 sind hierbei positive Konstanten und t^* bezeichnet den Mittelpunkt des jeweiligen Approximationsintervalls I_ℓ .

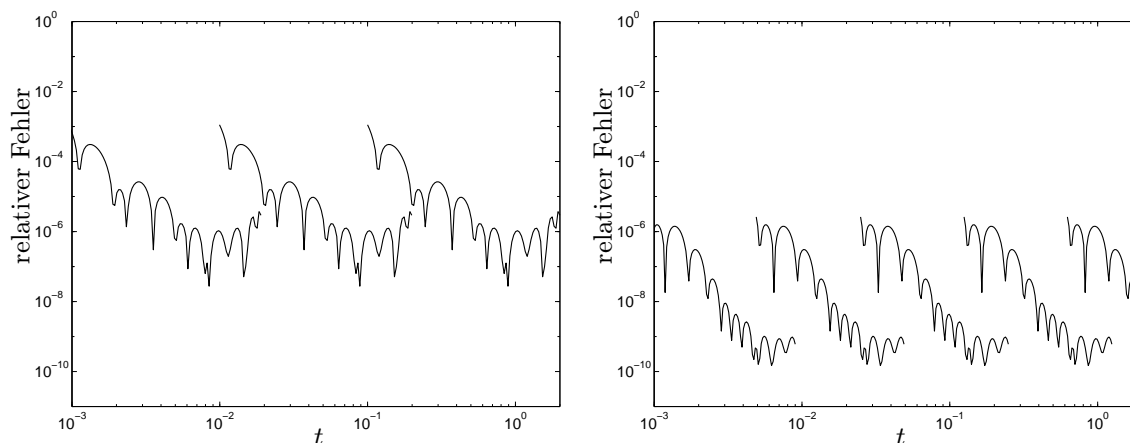


Abbildung 2.8: Relativer Quadraturfehler gegen die Zeit für $N = 10$ und $B = 10$ (linkes Bild) und für $N = 15$ und $B = 15$ (rechtes Bild).

Im Fall des kontinuierlichen Schrödingergleichungskerns erhält man für $\mu_0 = 8$ und $\nu_0 = 0.6$ den in der Abbildung 2.8 wiedergegebenen Verlauf des relativen Fehlers

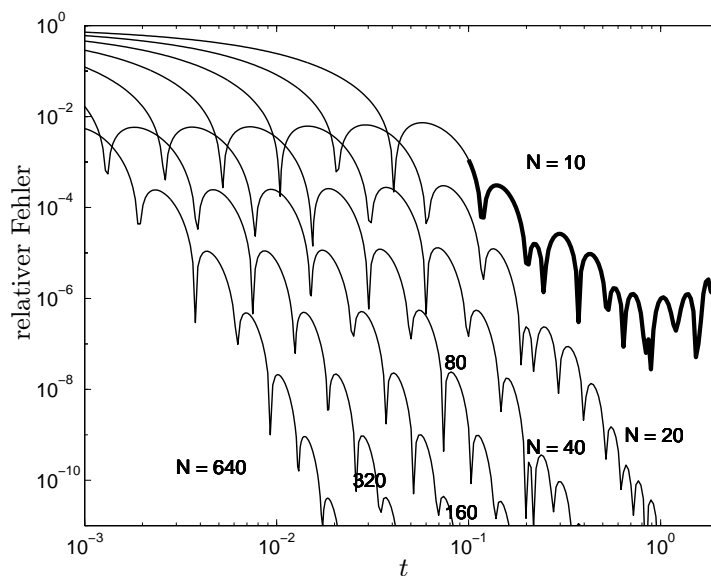


Abbildung 2.9: Quadraturfehler gegen Zeit.

$|f_{\text{approx}}(t) - f(t)|/|f(t)|$. Dieser ist unabhängig von k und von c .

Um einen relativen Fehler kleiner als $1 \cdot 10^{-3}$ zu erreichen wählt man $N = 10$ und $B = 10$ und hat dann zur Überdeckung des Intervalls $[1 \cdot 10^{-3}, 2]$ drei schnell größer werdende Intervalle $I_1 = [1 \cdot 10^{-3}, 2 \cdot 10^{-2}]$, $I_2 = [1 \cdot 10^{-2}, 2 \cdot 10^{-1}]$ und $I_3 = [1 \cdot 10^{-1}, 2]$. Soll der relative Fehler kleiner als $2 \cdot 10^{-6}$ sein, so kann man beispielsweise $N = 15$ und $B = 5$ wählen und benötigt dann zur Überdeckung des Intervalls $[1 \cdot 10^{-3}, 2]$ vier schnell größer werdende Intervalle $I_1 = [1 \cdot 10^{-3}, 1 \cdot 10^{-3}]$, $I_2 = [5 \cdot 10^{-3}, 5 \cdot 10^{-2}]$, $I_3 = [2.5 \cdot 10^{-2}, 2.5 \cdot 10^{-1}]$ und $I_4 = [0.125, 1.25]$.

Da $|f(t)| = (\pi t)^{-1/2}$ ist, erhält man den gleichen Fehlerverlauf für $B = 10$ auf jedem Intervall $[a, 20a]$ und für $B = 5$ auf jedem Intervall $[a, 10a]$ für ein beliebiges $a > 0$.

Die Unterteilung des Intervalls ist sinnvoll, wie man an der Abbildung 2.9 sieht. Dort ist der relative Fehler über das Intervall $[1 \cdot 10^{-3}, 2]$ gezeigt. Der fett gezeichnete Teil der Linie für $N = 10$ entspricht der Kurve ganz links im rechten Bild von Abbildung 2.8. Der Fehlerverlauf zeigt deutlich den Vorteil der lokalen Approximation. Für $B = 10$ benötigt man drei Approximationsintervalle zur Überdeckung von $[1 \cdot 10^{-3}, 2]$. Wählt man zur Approximation des Wegintegrals $N = 10$, so erhält man damit einen geringeren relativen Fehler als wenn man das gesamte Intervall $[1 \cdot 10^{-3}, 2]$ mit einem einzigen Approximationsintervall überdecken und $N = 640$ wählen würde.

Im Fall des diskreten Schrödingerkerns erhält man in Abhängigkeit von der Lage der beiden Singularitäten zueinander (das heißt in Abhängigkeit von $c/\Delta x^2$ und unabhängig von der Fouriermode k) bei Wahl des Integrationsweges mit dem in Abbildung 2.2 gegebenen Pseudocode für $\mu_0 = 8$ und $\nu_0 = 0.6$ für $B = 10$ und $N = 10$ und für $B = 5$ und $N = 5$ das in Abbildung 2.10 gezeigte Fehlerverhalten.

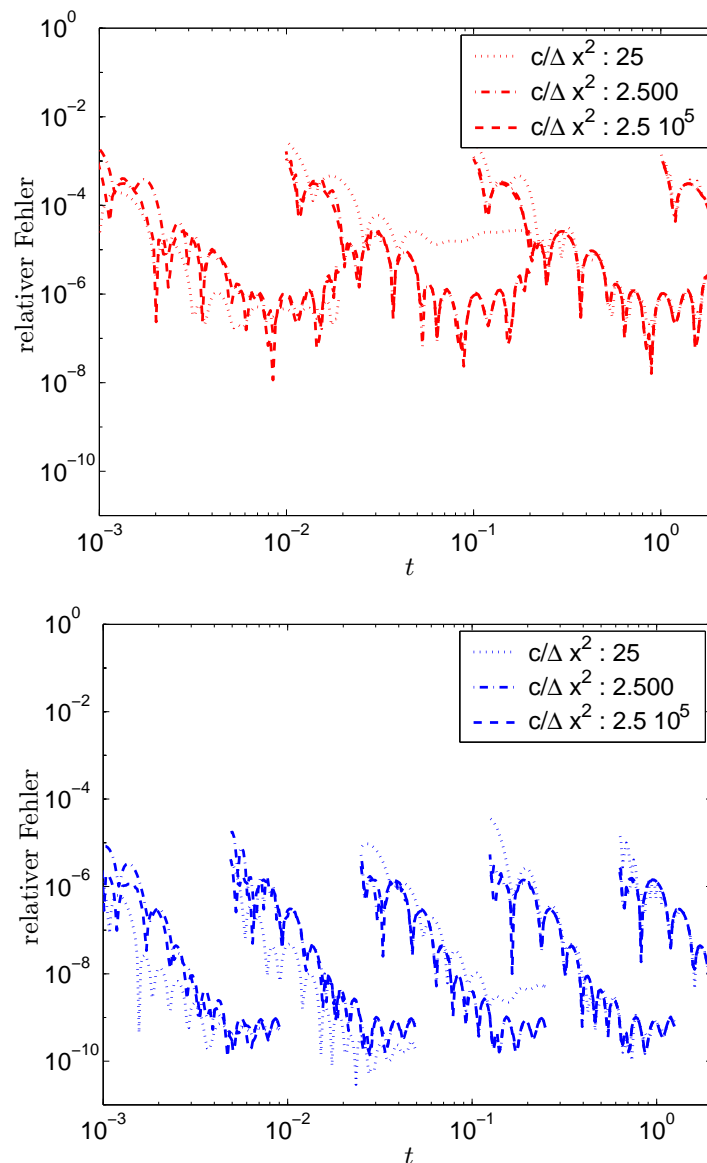


Abbildung 2.10: Quadraturfehler gegen Zeit für $N = 10$ und $B = 10$ (oberes Bild) und für $N = 15$ und $B = 5$ (unteres Bild) in Abhängigkeit von $c/\Delta x^2$.

Bei der Untersuchung des Quadraturfehlers unter Verwendung des diskreten Wellengleichungskerns erhält man Fehlerkurven in Abhängigkeit von der Lage der vier Singularitäten $\pm\kappa$ und $\pm\iota$. Dabei hat sich die Wahl von $\mu_0 = 7$ und $\nu_0 = 0.6$ als günstig erwiesen. Für $c = 1$ zeigen die Abbildungen 2.11 und 2.12 Fehlerkurven für $\Delta x = 1/20, 1/100, 1/200$ und für die Fouriermoden $k = 0, 10, 40$ mit $\Delta y = 1/100$ und $L = 100$.

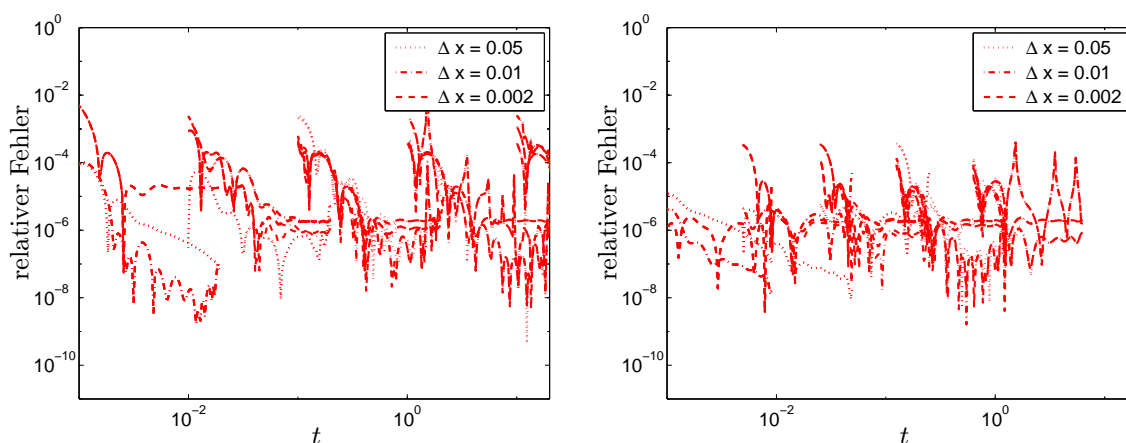


Abbildung 2.11: Quadraturfehler gegen Zeit für $N = 10$ und $B = 10$ (linkes Bild) und für $N = 10$ und $B = 5$ (rechtes Bild) in Abhängigkeit von Δx für verschiedene Fouriermoden.

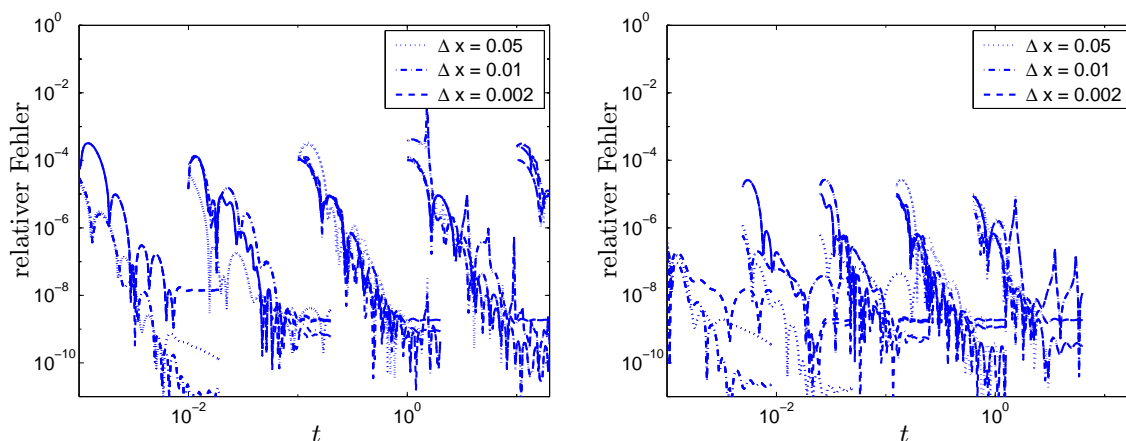


Abbildung 2.12: Quadraturfehler gegen Zeit für $N = 15$ und $B = 10$ (linkes Bild) und für $N = 15$ und $B = 5$ (rechtes Bild) in Abhängigkeit von Δx für verschiedene Fouriermoden.

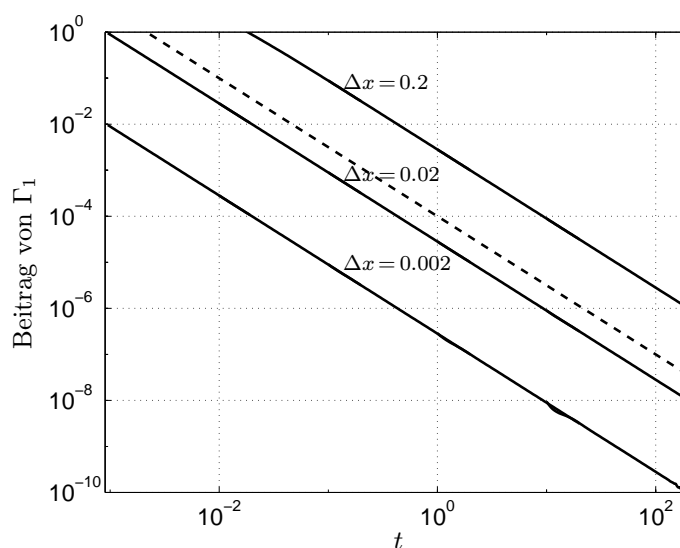


Abbildung 2.13: Beitrag von Γ_1 gegen t (durchgezogene Linie). Gestrichelte Linie: Gerade der Steigung $-3/2$.

2.2.2 Vernachlässigen der weit entfernt liegenden Singularitäten

Der Beitrag der gestrichelten Kontur Γ_1 kann, wie die numerischen Beispiele in Abschnitt 4 zeigen, zumindest für implizite Zeitdiskretisierungsverfahren vernachlässigt werden. Berechnet man den Beitrag von Γ_1 , so erhält man für den von der Schrödingergleichung kommenden Faltungskern obiges Bild 2.13. Hier ist für verschiedene Δx der Beitrag von Γ_1 in Abhängigkeit von t aufgetragen.

Dieses Verhalten lässt sich auch analytisch zeigen. Es gilt folgender Satz:

2.1 Satz. *Der Anteil des durch Γ_1 berechneten Wegintegrals verhält sich für große t im Fall der Schrödingergleichung wie $\Delta x^2/t^{3/2}$, das heißt es ist*

$$\left| \int_{\Gamma_1} \exp(st) F(s) ds \right| \leq C \frac{\Delta x^2}{t^{3/2}}$$

für eine Kurve Γ_1 , die die Singularität $\iota = i(k + 4c/\Delta x^2)$ von F umschließt.

Beweis: Aus

$$\int_{\Gamma_1} \exp(st) \frac{-2c}{\Delta x \sqrt{is + k} \left(\sqrt{is + k} + \sqrt{is + k + 4c/\Delta x^2} \right)} ds$$

erhält man durch die Substitution $w = st - itk - 4it/\Delta x^2$, $ds = \frac{dw}{t}$ und die Einführung der Bezeichnung $\eta := 4it/\Delta x^2$

$$\int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta + itk) \frac{2ic}{\Delta x} \frac{1}{\sqrt{w + \eta}(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw$$

für einen Integrationsweg Γ_0 , der die 0 umschließt. Nach dem Cauchyschen Integralsatz ist für $\eta \neq 0$

$$\int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta) \frac{1}{w + \eta} dw = 0$$

für ein geeignetes Γ_0 , das nicht η umschließt. Man erhält damit

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta) \frac{2ic}{\Delta x} \frac{1}{\sqrt{w + \eta}(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \\ &= \int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta) \frac{2ic}{\Delta x} \left(\frac{1}{\sqrt{w + \eta}(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} - \frac{1}{w + \eta} \right) dw \\ &= \frac{2ic}{\Delta x} \int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw. \end{aligned}$$

Nun wählt man eine Parametrisierung von Γ_0

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_0} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \\ &= \int_{-\infty - i\varepsilon}^{-R - i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \\ &+ \int_{-R - i\varepsilon}^{-i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \\ &+ \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \exp(\varepsilon \exp(iw) + \eta) \frac{-\sqrt{\varepsilon \exp(iw)}}{(\varepsilon \exp(iw) + \eta)(\sqrt{\varepsilon \exp(iw)} + \eta + \sqrt{\varepsilon \exp(iw)})} \varepsilon i \exp(iw) dw \\ &+ \int_{-R + i\varepsilon}^{i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \\ &+ \int_{-\infty + i\varepsilon}^{-R + i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \end{aligned}$$

und schätzt die einzelnen Teile ab:

Falls $R = 3/2 \ln(|\eta|)$ ist, so gilt für den ersten Term, das Integral parallel der reellen Achse von $-\infty$ bis $-R$, dass

$$\left| \int_{-\infty - i\varepsilon}^{-R - i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \right| < \frac{1}{|\eta^{3/2}|}. \quad (2.5)$$

Denn es gilt, dass η rein imaginär und

$$\left| \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} \right| \leq 1$$

ist. Weiter erhält man

$$\begin{aligned} & \left| \int_{-R-i\varepsilon}^{-i\varepsilon} \exp(w + \eta) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} dw \right| \\ & \leq \int_{-R-i\varepsilon}^{-i\varepsilon} |\exp(1/2w)| \left| \exp(1/2w) \frac{-\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} \right| dw \\ & \leq \int_{-R-i\varepsilon}^{-i\varepsilon} |\exp(1/2w)| dw \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \left| \exp(1/2w) \frac{\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} \right| \\ & \leq (2 - 2 \exp(-1/2R)) \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \left| \exp(1/2w) \frac{\sqrt{w}}{(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})} \right| \quad (2.6) \\ & = (2 - 2 \exp(-1/2R)) \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \frac{|\exp(1/2w)\sqrt{w}|}{|(w + \eta)(\sqrt{w + \eta} + \sqrt{w})|} \\ & \leq (2 - 2 \exp(-1/2R)) \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \frac{|\exp(1/2w)\sqrt{w}|}{|(w + \eta)|^{3/2}} \\ & = (2 - 2 \exp(-1/2R)) \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \left| \frac{\exp(1/2w)\sqrt{w}}{(w + \eta)^{3/2}} \right|. \end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned} \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \left| \frac{\exp(1/2w)\sqrt{w}}{(w + \eta)^{3/2}} \right| &= \frac{1}{|\eta|^{3/2}} \max_{(w-i\varepsilon) \in [-R, 0]} \exp(1/2w) |\sqrt{w}| \left| \frac{\eta}{(w + \eta)} \right|^{3/2} \\ &\leq \frac{1}{|\eta|^{3/2}} \max_{w \in [-R, 0]} \exp(1/2w) |\sqrt{w}| \\ &= \frac{1}{|\eta|^{3/2}} \exp(-1/2), \end{aligned}$$

da die Funktion $\exp(1/2w)|\sqrt{w}|$ für $w < -1$ steigt und für $w > -1$ fällt.

Den dritten Term, das Integral entlang eines ε Halbkreises in der rechten Halbebene, kann man für $\varepsilon \rightarrow 0$ und $\eta \neq 0$ durch

$$\left| \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \exp(\varepsilon \exp(iw) + \eta) \frac{-\sqrt{\varepsilon \exp(iw)}}{(\varepsilon \exp(iw) + \eta)(\sqrt{\varepsilon \exp(iw) + \eta} + \sqrt{\varepsilon \exp(iw)})} \varepsilon i \exp(iw) dw \right| < \frac{1}{|\eta|^{3/2}}$$

abschätzen.

Die Integrale von $-\infty + i\varepsilon$ bis $-R + i\varepsilon$ und von $-R + i\varepsilon$ bis $i\varepsilon$ werden wie in (2.5) und (2.6) abgeschätzt.

Damit erhält man

$$\left| \int_{\Gamma_1} \exp(st) F(s) ds \right| \leq (2 + 4 \exp(-1/2) + 1) \frac{2c}{\Delta x |\eta|^{3/2}} = \frac{\Delta x^2 C}{(4t)^{3/2}}.$$

□

2.2 Bemerkung. Einen Beitrag von Γ_1 für kleines t gibt es nicht, da dazu $4ic/\Delta x^2 = \iota - \kappa \leq 2\psi$ sein müsste, andererseits aber $\psi = \pi\nu_0\mu_0 t/(4B - 2)$ ist.

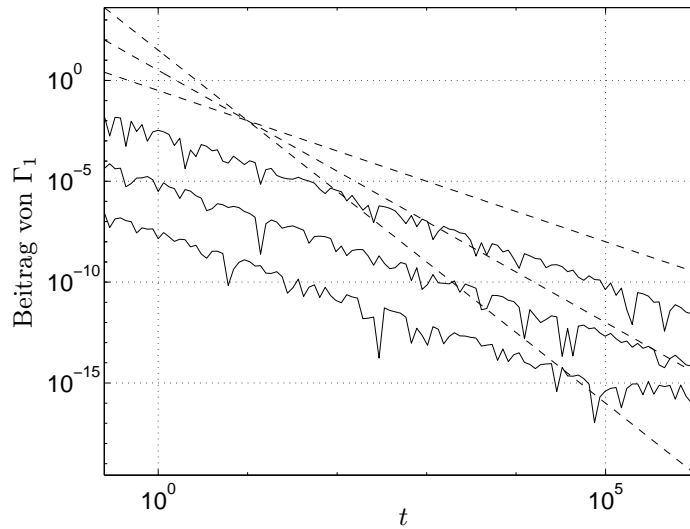


Abbildung 2.14: Beitrag von Γ_1 für verschiedene Δx . Die gestrichelten Linien sind Geraden der Steigungen $-3/2$, $-5/2$ und $-7/2$.

Für die Wellen- und Maxwellgleichung erhält man das in Abbildung 2.14 gezeigte Verhalten. Hierbei ist der Beitrag der beiden entfernten Kurven Γ_1 gegen t aufgetragen. Die einzelnen Kurven sind für verschiedene Parameter $\Delta x = 0.1, 0.01, 0.001$ gegeben. Eine gesetzmäßige Abhängigkeit von den Fouriermoden lässt sich nicht feststellen. Das Abfallverhalten für große t ließe sich wahrscheinlich, wenn auch mit ungleich größerem Aufwand, analytisch zeigen, soll aber hier nicht untersucht werden.

2.3 Reduktion auf gewöhnliche Differentialgleichungen

Für allgemeine Integrationsgrenzen $a < b$ im Integral gilt

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t - \tau) g(\tau) d\tau &= \int_a^b \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} F(\lambda) e^{(t-\tau)\lambda} d\lambda g(\tau) d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} F(\lambda) e^{(t-b)\lambda} \int_a^b e^{(b-\tau)\lambda} g(\tau) d\tau d\lambda, \end{aligned}$$

wobei das innere Integral, nachfolgend mit $y(b, a, \lambda)$ bezeichnet, als Lösung zur Zeit b des skalaren linearen Anfangswertproblems

$$y' = \lambda y + g, \quad y(a) = 0. \quad (2.7)$$

aufgefasst wird.

Falls $[t - b, t - a] \subset I_{\ell}$, so wird das Wegintegral entlang der Talbotkontur $\Gamma = \Gamma_{\ell}$ mit Hilfe der Trapezregel approximiert (2.3). Damit erhält man (zur Vereinfachung der Notation sind die Indices ℓ weggelassen)

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t - \tau) g(\tau) d\tau &\approx \int_a^b \sum_{j=-N}^N w_j F(\lambda_j) e^{(t-\tau)\lambda_j} g(\tau) d\tau \\ &= \sum_{j=-N}^N w_j F(\lambda_j) e^{(t-b)\lambda_j} y(b, a, \lambda_j). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Die $2N + 1$ Differentialgleichungen (2.7) mit $\lambda = \lambda_j$ werden näherungsweise gelöst indem man die Funktion g stückweise linear approximiert und die Differentialgleichung dann exakt löst.

Setzt man $g_n = g(a + n\Delta t)$, so erhält man die Approximationen $y_n \approx y(a + n\Delta t)$ rekursiv über

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= e^{\Delta t \lambda} y_n + h \int_0^1 e^{(1-\theta)\Delta t \lambda} (\theta g_{n+1} + (1-\theta)g_n) d\theta \\ &= y_n + \frac{e^{\Delta t \lambda} - 1}{\Delta t \lambda} \left(\Delta t \lambda y_n + \Delta t g_n + \Delta t \frac{g_{n+1} - g_n}{\Delta t \lambda} \right) - \Delta t \frac{g_{n+1} - g_n}{\Delta t \lambda} \\ &= y_n + \Phi(\Delta t \lambda) \left(\Delta t \lambda y_n + \Delta t g_n + \Delta t \frac{g_{n+1} - g_n}{\Delta t \lambda} \right) - \Delta t \frac{g_{n+1} - g_n}{\Delta t \lambda}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

```

Y = dglsol(Y, S, PhiS, gn, gn1, Δt, K)
Eingabe
Y, S, Sinv, PhiS Vektoren der Länge K von komplexen Vektoren
(d.h.  $S_\ell \in \mathbb{C}^{m(2N-1)}$ ,  $1 \leq \ell \leq K$ ,  $m, N \in \mathbb{N}$ )
Δt reelle Zahl
gn, gn1 komplexe Zahlen
K natürliche Zahl
Ausgabe
Y Vektoren der Länge K von komplexen Vektoren
benötigte Funktionen
.* Elementweises Produkt zweier Vektoren
./ Elementweise Division
dg = gn1 - gn
dgDdt = dg/Δt
for ℓ = 1, ..., K
  Yℓ = Yℓ + PhiSℓ .* (Sℓ .* Yℓ + gn + dgDdt./Sℓ) - dgDdt./Sℓ
end

```

Abbildung 2.15: Pseudocode zur Lösung der Differentialgleichungen.

wobei $\Phi(s) := (e^s - 1)/s$. Man beachte, dass die in dem in Abbildung 2.15 gegebenen Pseudocode `dglsol` verwendeten $PhiS$ – Auswertungen von Φ auf Γ – nur einmal zu Beginn des Verfahrens berechnet werden müssen; ebenso die Talbotkonturen S .

Um den gesamten Fehler abzuschätzen mache man sich klar, dass wir sowohl den Faltungskern f (Talbotfehler) als auch die Funktion g (lineare Approximation in der Lösung der Differentialgleichung) approximieren.

$$\int_a^b f(t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \int_a^b \tilde{f}(t - \tau) \tilde{g}(\tau) d\tau$$

Der Faltungskern \tilde{f} ist die durch lokale Approximation über diskretisierte Wegintegrale konstruierte Näherung an f , deren Approximationsgüte durch die Anzahl der Punkte N auf einer Talbotkontur und die Basis B kontrolliert wird. \tilde{g} ist die stückweise lineare Interpolation von g . Damit gilt $g = \tilde{g} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$.

2.4 Der schnelle Faltungsalgorithmus

2.4.1 Der schnelle Faltungsalgorithmus für Basis 2

Die Approximationen der Abschnitte 2.2 und 2.3 können zu einem schnellen Faltungsalgorithmus kombiniert werden, der zur Auswertung der Faltung $\mathcal{O}(N_t \log N_t)$ Operationen benötigt und dessen Speicherbedarf sich wie $\mathcal{O}(\log N_t)$ verhält. Am besten lässt sich dieser Algorithmus erklären, indem man die ersten Schritte beschreibt. Wir beschränken uns zudem zunächst auf den Fall $B = 2$.

Erster Schritt. Zur Berechnung des Faltungsintegrals für $t = \Delta t$ wird $g(\tau)$ linear approximiert.

$$\int_0^{\Delta t} f(\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \int_0^{\Delta t} f(\Delta t - \tau) d\tau g(0) + \int_0^{\Delta t} f(\Delta t - \tau) \tau d\tau \frac{g(\Delta t) - g(0)}{\Delta t}.$$

Die nun verbleibenden Integrale werden als inverse Laplacetransformierte von $F(s)/s$ und $F(s)/s^2$ an der Stelle t berechnet:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \int_0^{\Delta t} f(\Delta t - \tau) d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j F(\lambda_j) / \lambda_j e^{\Delta t \lambda_j}, \\ \phi_2 &= \int_0^{\Delta t} f(\Delta t - \tau) \tau d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j F(\lambda_j) / \lambda_j^2 e^{\Delta t \lambda_j}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die Gewichte w_j und Knoten λ_j erhält man mittels einer Talbotkontur mit den zu $t = \Delta t$ und den Singularitäten von $F(s)/s$ und $F(s)/s^2$ gehörigen Parametern μ , ν und σ .

2.3 Bemerkung. Da ϕ_1 und ϕ_2 nur ein einziges Mal im Verlauf des gesamten Verfahrens berechnet werden, kann man dazu N relativ groß wählen ($N = 40$).

Zweiter Schritt. Das Integral über $[0, 2\Delta t]$ wird in Integrale über $[0, \Delta t]$ und $[\Delta t, 2\Delta t]$ aufgeteilt. Letzteres wird wie im ersten Schritt approximiert:

$$\int_{\Delta t}^{2\Delta t} f(2\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \phi_1 g(\Delta t) + \phi_2 \frac{g(2\Delta t) - g(\Delta t)}{\Delta t}.$$

Das Integral über $[0, \Delta t]$ wird wie in (2.8) angegeben approximiert:

$$\int_0^{\Delta t} f(2\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j^{(1)} F(\lambda_j^{(1)}) e^{\Delta t \lambda_j^{(1)}} y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(1)}).$$

Die Gewichte und Knoten $w_j^{(1)}, \lambda_j^{(1)}$ kommen dabei von einer Talbotkontur Γ_1 für das Approximationsintervall $I_1 = [\Delta t, 3\Delta t]$. Zur Berechnung von $y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(1)})$ müssen $2N + 1$ Differentialgleichungen (2.7) mit $\lambda = \lambda_j^{(1)} \in \Gamma_1$ durch einen Schritt von (2.9) gelöst werden.

Dritter Schritt. Man berechnet

$$\int_{2\Delta t}^{3\Delta t} f(3\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \phi_1 g(2\Delta t) + \phi_2 \frac{g(3\Delta t) - g(2\Delta t)}{\Delta t}$$

und

$$\int_0^{2\Delta t} f(3\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j^{(1)} F(\lambda_j^{(1)}) e^{\Delta t \lambda_j^{(1)}} y(2\Delta t, 0, \lambda_j^{(1)}),$$

wozu werden die Lösungen der Differentialgleichungen zu Γ_1 zur Zeit $2\Delta t$ benötigt. Diese werden aus $y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(1)})$ durch einen weiteren Schritt von (2.9) berechnet.

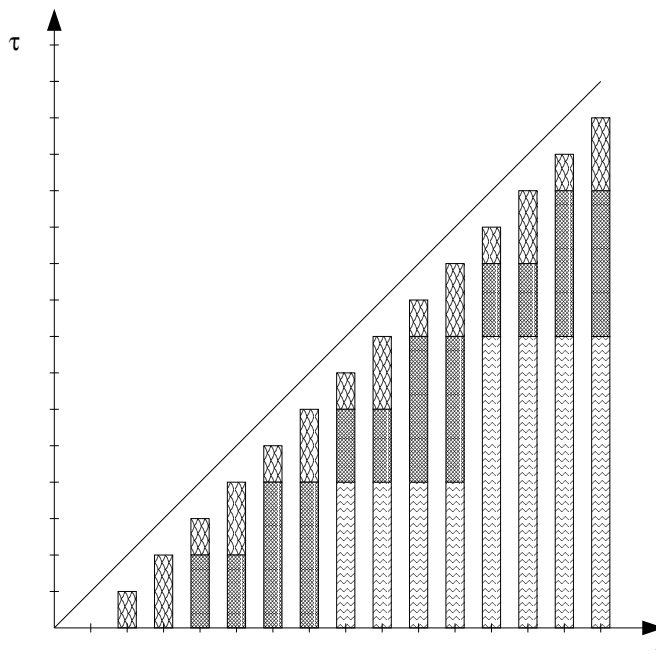


Abbildung 2.16: Aufteilung zur Basis $B = 2$.

Vierter Schritt. Hier tritt eine neue Situation auf. Würde man wie bei den beiden vorhergehenden Schritten fortfahren, so müsste man $f(t - \tau)$ für $t - \tau \in [\Delta t, 4\Delta t] \not\subset I_1$ approximieren. Wie in Abbildung 2.16 durch verschiedene Schraffuren der Spalte für $t = 4\Delta t$ angezeigt, wird das Integral von 0 bis $4\Delta t$ in Integrale über Intervalle

$[0, 2\Delta t]$, $[2\Delta t, 3\Delta t]$ und $[3\Delta t, 4\Delta t]$, die zu verschiedenen Klassen von Abständen von der Winkelhalbierenden gehören, aufgespalten.

Das Integral über das Intervall $[3\Delta t, 4\Delta t]$, das der Diagonalen am nächsten liegt, wird wie im dritten Schritt direkt durch die Formel mit ϕ_1 und ϕ_2 approximiert, wobei die Argumente von g um Δt erhöht werden.

Das Integral über das Intervall $[2\Delta t, 3\Delta t]$, für dessen Punkte τ gilt, dass $t - \tau \in I_1$ liegt, wird durch

$$\int_{2\Delta t}^{3\Delta t} f(4\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j^{(1)} F(\lambda_j^{(1)}) e^{\Delta t \lambda_j^{(1)}} y(3\Delta t, 2\Delta t, \lambda_j^{(1)})$$

approximiert. Dazu benötigt man das Ergebnis eines Schrittes von (2.9) für zur Anfangszeit $2\Delta t$ gehörende Differentialgleichungen zu Γ_1 .

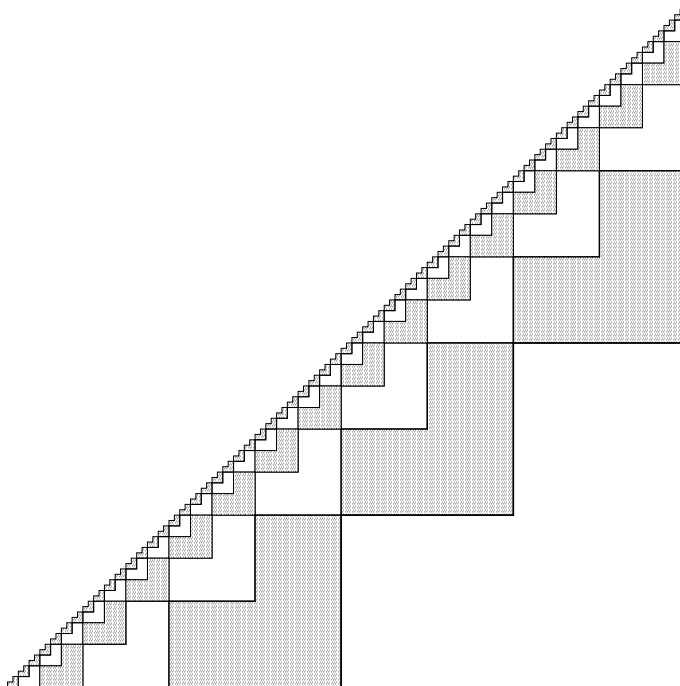
Zur Approximation von f über dem Intervall $[0, 2\Delta t]$, das der Diagonalen am fernsten liegt, benötigt man die Gewichte und Knoten der Talbotkontur Γ_2 , die zum Approximationsintervall $I_2 = [2\Delta t, 7\Delta t]$ gehört

$$\int_0^{2\Delta t} f(4\Delta t - \tau) g(\tau) d\tau \approx \sum_{j=-N}^N w_j^{(2)} F(\lambda_j^{(2)}) e^{2\Delta t \lambda_j^{(2)}} y(2\Delta t, 0, \lambda_j^{(2)}) .$$

Hier wird die Lösung eines weiteren Satzes von $2N + 1$ Differentialgleichungen (2.7) zu $\lambda = \lambda_j^{(2)} \in \Gamma_2$ benötigt. Die unterschiedlichen Schraffuren in Abbildung 2.16 beziehen sich also auf verschiedene Sätze von Differentialgleichungen (2.7), die zu verschiedenen Talbotkonturen Γ_ℓ gehören, und diese wiederum gehören zu den Approximationsintervallen I_ℓ .

Gleiche Schraffuren in verschiedenen Spalten von Abbildung 2.16 gehören zu den selben Sätzen von Differentialgleichungen/Talbotkonturen/Approximationsintervallen/Abstandsklassen von der Diagonalen.

Berechnet man $y(2\Delta t, 0, \lambda_j^{(2)})$ zum Zeitpunkt, an dem es benötigt wird, so braucht man dazu die Werte $g(0)$, $g(\Delta t)$, $g(2\Delta t)$, die man zuvor hätte abspeichern müssen. Dadurch hätte der Algorithmus nicht den behaupteten logarithmischen Speicheraufwand bezüglich der Anzahl der Zeitschritte N_t . Um diesen zu erreichen muss bereits im zweiten Schritt abgesehen von $y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(1)})$ auch $y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(2)})$ für die zweite Talbotkontur und auch $y(\Delta t, 0, \lambda_j^{(\ell)})$ für alle weiteren Konturen Γ_ℓ berechnet werden, die man benötigt um das Intervall $[\Delta t, T]$ durch die Approximationsintervalle I_ℓ , siehe (2.2) mit $B = 2$, zu überdecken.

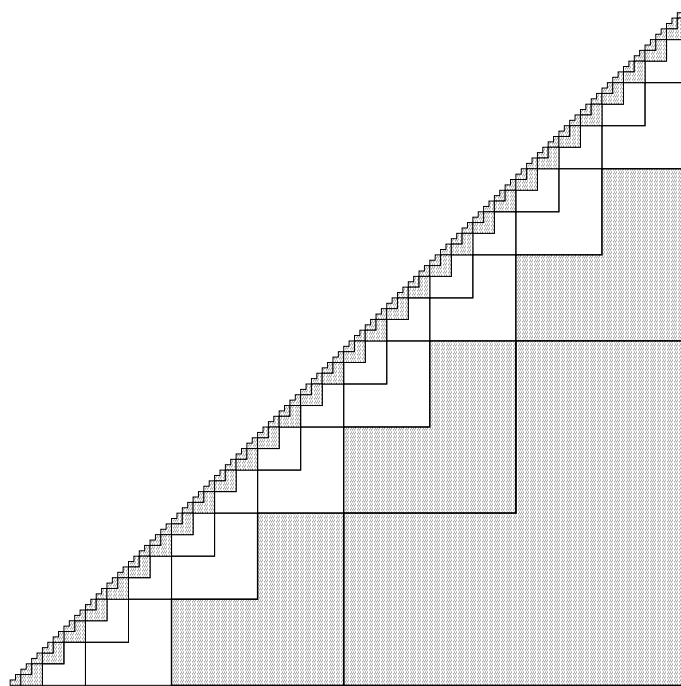
Abbildung 2.17: Parkettierung für Basis $B = 2$.

Im dritten Schritt werden dann die Lösungen $y(t, 0, \lambda_j^{(\ell)})$ ausgehend von Δt einen Schritt zu $2\Delta t$ für alle $\ell \geq 1$ berechnet. Im vierten Schritt wird $y(t, 0, \lambda_j^{(\ell)})$ ausgehend von $2\Delta t$ zu $3\Delta t$ für alle $\ell \geq 2$ und die Lösung von $y(t, 2\Delta t, \lambda_j^{(\ell)})$ für $t = 3\Delta t$ und $\ell = 1$ berechnet, so wie in Abbildung 2.16 eingezeichnet. Auf diese Art wird Schritt für Schritt von unten nach oben und nicht von links nach rechts das Dreieck aufgebaut.

Nun ist klar wie der Algorithmus weitergeht. Im nächsten, dem *fünften Schritt*, benötigt man $y(4\Delta t, 2\Delta t, \lambda_j^{(1)})$ und wieder $y(2\Delta t, 0, \lambda_j^{(2)})$. Der *sechste Schritt* verwendet $y(5\Delta t, 4\Delta t, \lambda_j^{(1)})$ und $y(4\Delta t, 0, \lambda_j^{(2)})$.

Ein dritter Satz von Differentialgleichungen zur Kontur Γ_3 , kommt im *achten Schritt* ins Spiel, wo $y(4\Delta t, 0, \lambda_j^{(3)})$ benötigt wird. Führt man Abbildung 2.16 fort, so erhält man die in Abbildung 2.17 gezeigte Parkettierung des (t, τ) -Dreiecks.

Für ein gegebenes Intervall $[0, T]$ und die dazu benötigten Talbotkonturen sind in jedem Schritt von $t \rightarrow t + \Delta t$ die dazugehörigen Differentialgleichungen zu lösen. Dadurch ist es nicht notwendig alte Werte von $g(t)$ zu speichern, sondern nur die aktuellen Lösungen der Differentialgleichungen und einen alten Lösungswert. So muss zum Beispiel $y(4\Delta t, 0, \lambda_j^{(3)})$ während der Schritte 4 bis 11 abgespeichert werden und

Abbildung 2.18: Parkettierung für Basis $B = 4$.

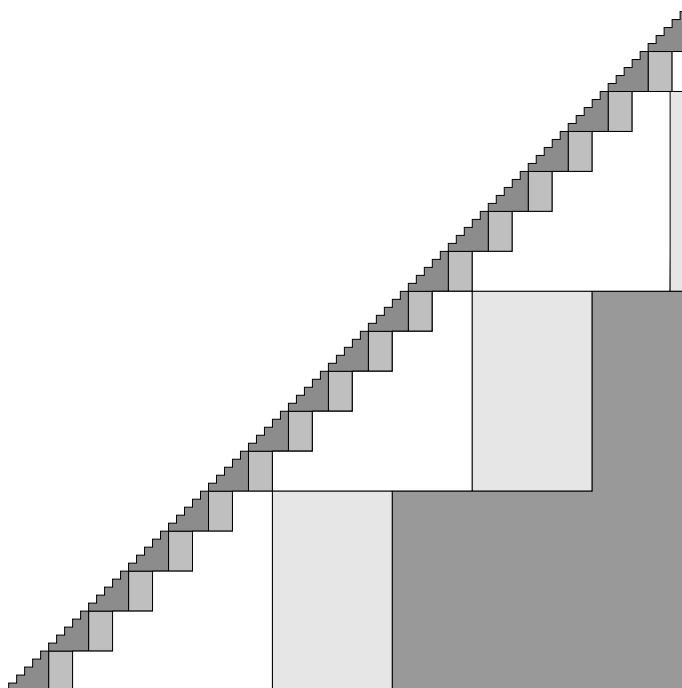
gleichzeitig muss der zu $\lambda_j^{(3)}$ gehörende Satz von Differentialgleichungen jeweils aktualisiert werden.

Die Anzahl der Operationen ist damit proportional zu $N_t K_t N$, wobei N_t die Anzahl der Zeitschritte, $K_t \leq \log_2 N_t$ die Anzahl der verschiedenen Talbotkonturen ist und $2N + 1$ die Anzahl der Quadraturpunkte auf jeder Kontur ist.

Der Speicherbedarf ist etwa $10 K_t N$. Abgesehen von den aktuell berechneten Lösungen der Differentialgleichung $y(t, t_0, \lambda_j^{(\ell)})$ und etwaigen zwischengespeicherten Differentialgleichungslösungen sind die Quadraturpunkte $\lambda_j^{(\ell)}$, die Exponentialfunktion ausgewertet in den Quadraturpunkten $\exp(\Delta t \lambda_j^{(\ell)})$ und die gewichteten Funktionswerte $w_j^{(\ell)} F(\lambda_j^{(\ell)})$ zu speichern.

2.4.2 Der schnelle Faltungsalgorithmus für beliebige Basis

Der oben beschriebene Basis-2-Algorithmus lässt sich jetzt zu einem Basis-4-Algorithmus, $B = 4$ in (2.2), erweitern, indem $\Gamma_1 = \Gamma_2$ gesetzt wird. Dementsprechend ist das neue Approximationsintervall die Vereinigung der alten Basis-2-

Abbildung 2.19: Parkettierung für Basis $B = 5$.

Approximationsintervalle $I_1 \cup I_2 = [\Delta t, 7\Delta t]$. Die Talbotkontur $\Gamma_3 = \Gamma_4$ gehört zum Approximationsintervall $I_3 \cup I_4 = [4\Delta t, 31\Delta t]$, die Kontur $\Gamma_5 = \Gamma_6$ zu $[16\Delta t, 127\Delta t]$ und so weiter. Damit halbiert sich die Anzahl der Sätze von Differentialgleichungen. Jedoch muss, um die gleiche Genauigkeit beizubehalten, die Anzahl N der Quadraturpunkte auf einer Talbotkontur etwas größer gewählt werden, was die Größe eines Satzes von Differentialgleichungen erhöht.

Abbildung 2.18 zeigt die zur Basis 4 gehörende Unterteilung des (t, τ) -Dreiecks, die man aus der in Abbildung 2.17 gezeigten erhält, indem man von der Diagonalen ausgehend je zwei der aufeinander folgenden L-förmigen Teile vereinigt.

Ganz ähnlich erhält man einen Basis-8-Algorithmus, indem man $\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma_3$ als die zu $I_1 \cup I_2 \cup I_3 = [\Delta t, 15\Delta t]$ gehörige Talbotkontur setzt und $\Gamma_4 = \Gamma_5 = \Gamma_6$ die Kontur zu $[8\Delta t, 127\Delta t]$, etc. Den Basis 2^m Algorithmus erhält man, indem man jeweils m aufeinanderfolgende Basis-2-Konturen gleichsetzt.

Der allgemeine Basis- B -Algorithmus approximiert das Faltungsintegral wie folgt: Im

n -ten Schritt ($n = 1, \dots, N_t$) setze $t = n\Delta t$ und approximiere

$$\int_{t-\Delta t}^t f(t-\tau) g(\tau) d\tau \approx \phi_1 g(t-\Delta t) + \phi_2 \frac{g(t) - g(t-\Delta t)}{\Delta t} \quad (2.11)$$

mit ϕ_1 und ϕ_2 aus (2.10). Sei L die kleinste natürliche Zahl mit $t < 2B^L\Delta t$. Für $\ell = 1, 2, \dots, L-1$ bestimmt man natürliche Zahlen $q_\ell \geq 1$ so, dass für

$$\tau_\ell = q_\ell B^\ell \Delta t \quad t - \tau_\ell \in [B^\ell \Delta t, (2B^\ell - 1)\Delta t]$$

erfüllt ist. Das heißt q_ℓ wird in jedem B^ℓ -ten Schritt um 1 erhöht und es ist $t - \Delta t > \tau_1 > \dots > \tau_{L-1} > 0$.

Sei $\tau_0 = t - \Delta t$ und $\tau_L = 0$. Dann ist

$$\int_0^{t-\Delta t} f(t-\tau) g(\tau) d\tau \approx \sum_{\ell=1}^L \sum_{j=-N}^N w_j^{(\ell)} F(\lambda_j^{(\ell)}) e^{(t-\tau_{\ell-1})\lambda_j^{(\ell)}} y(\tau_{\ell-1}, \tau_\ell, \lambda_j^{(\ell)}), \quad (2.12)$$

wobei $w_j^{(\ell)}$ und $\lambda_j^{(\ell)}$ die Gewichte und Quadraturpunkte der Talbotkontur Γ_ℓ sind, die zum Basis B Approximationsintervall $I_\ell = [B^{\ell-1}\Delta t, (2B^\ell - 1)\Delta t]$ von (2.2) gehört. Es ist $[t - \tau_{\ell-1}, t - \tau_\ell] \subset I_\ell$ für alle ℓ . Wie für den Basis-2-Algorithmus beschrieben, werden in jedem Schritt die Lösungen der Differentialgleichungen (2.7) mit einem Schritt von (2.9) für alle benötigten Werte λ für alle Talbotkonturen aktualisiert. Die Anzahl der Rechenoperationen ist wieder proportional zu $N_t K_t N$.

Die Approximation (2.12) wird mit dem in Abbildung 2.20 gegebenen Pseudocode `faltungssint` berechnet. Um Rechenoperationen zu sparen berechnet man zu Beginn für jedes Approximationsintervall I_ℓ den Vektor $ExpSFSSd_\ell$, das Produkt der drei Vektoren $w^{(\ell)}$, $F(\lambda^{(\ell)})$ (dem auf der Talbotkontur Γ_ℓ ausgewerteten Faltungskernen) und $\exp(\lambda^{(\ell)}\Delta t B^{\ell-1})$ (einer Potenz der Exponentialfunktion ausgewertet in $\lambda^{(\ell)}$). Ebenfalls zu Beginn berechnet man $ExpS$ die Auswertung Exponentialfunktion auf der mit Δt multiplizierten Talbotkontur.

Der Pseudocode des Algorithmus, der die Lösungen der Differentialgleichung (2.7) abspeichert, ist in Abbildung 2.21 angegeben. Zusätzlich zu der einen im Basis-2-Algorithmus zwischenspeichernden Differentialgleichungslösung ist hier ein weiterer Lösungsvektor zwischenspeichern. In Abbildung 2.19 sind das die hellgrauen eingeschobenen Rechtecke.

In dem Pseudocode bezeichnet Y die Lösung der Differentialgleichung, die in jedem Schritt durch `dglsol` aktualisiert wird und jeweils mit Startwert 0 wiedergestartet

```

(b, YT) = faltungsint(ExpSFSSd, YT, ExpS, L)
Eingabe
  ExpSFSSd, YT, ExpS Vektoren komplexer Vektoren
  L natürliche Zahl
Ausgabe
  b komplexe Zahl
  YT Vektor komplexer Vektoren
benötigte Funktionen
  sum Summe über die Einträge eines Vektors
  .* elementweise Vektor-Vektormultiplikation
b = sum(ExpSFSSd1 .* YT1)
for k = 2 ... L
  b = b + sum(ExpSFSSdk .* YTk)
  YTk = ExpSk .* YTk
end

```

Abbildung 2.20: Pseudocode zur Berechnung der Faltungsintegrale.

werden muss, falls n ein Vielfaches von B^ℓ ist.

In YM werden die Lösungen der Differentialgleichungen abgespeichert, sobald die Oberkante einer der eckigen Formen erreicht wird.

YT enthält die Lösungen von (2.7), die zur Berechnung von (2.12) mit dem Verfahren **faltungsint** benötigt werden und YA bezieht sich auf die hellgrauen eingeschobenen Rechtecke in Abbildung 2.19.

Man kann auch hier Auswertungen der Exponentialfunktion sparen, wenn man zu Beginn für jede Talbotkontur Γ_ℓ den Vektor $ExpSJ_\ell = \exp(\lambda^{(\ell)} \Delta t B^{\ell-1})$ berechnet.

```
(Y, YA, YM, YT, YAt, YMt, L, q) =
yaktuel(Y, YA, YM, YT, YAt, YMt, L, q, ExpSJ, n, dt, K, B)
```

Eingabe

$Y, YA, YM, YT, ExpSJ$ Vektoren der Länge K von komplexen Vektoren

YAt, YMt Vektoren der Länge K von reellen Vektoren der Länge 2

q reeller Vektor variabler Länge

L, n, K, B natürliche Zahlen

dt reelle Zahl

Ausgabe

Y, YA, YM, YT Vektoren der Länge K von komplexen Vektoren

YAt, YMt Vektoren der Länge K von reellen Vektoren der Länge 2

q reeller Vektor variabler Länge

L natürliche Zahl

benötigte Funktionen

\wedge elementweise Potenz von Vektoren

\cdot^* elementweises Produkt zweier Vektoren

mod Modulus

length Länge eines Vektors

```
 $\tau = [ ]$ 
```

```
 $n1 = n + 1$ 
```

```
if  $2B^L == n1 + 1$ 
```

```
     $L = L + 1$ 
```

```
end
```

```
 $\ell = 1$ 
```

```
while mod( $n1 + 1, B^\ell$ ) == 0 &  $\ell < L$ 
```

...

Abbildung 2.21: Aktualisieren und verwalten der Parkettierung (Teil 1).

```

...
  if l > length(q)
    q = [ q , 0 ]
  end
  ql = ql + 1
  l = l + 1
end
tau = q .* (B .^ [ 1 : length(q) ])
tau = dt * [ n1 , tau , 0 ]
m = 1
while mod(n1, B^(m-1)) == 0 & m < K
  if mod(n1, B^m) == 0
    YA_m = Y_m, YAt_m = [ n1 * Delta_t , YMt_m(2) ]
    YM_m = Y_m, YMt_m = [ n1 * Delta_t , YAt_m(2) ]
    Y_m = 0 * Y_m
  else
    YM_m = Y_m, YMt_m = [ n1 * Delta_t , YAt_m(1) ]
  end
  m = m + 1
end
for k = 1 ... length(tau) - 1
  if tau_k = YMt_k(1)
    YT_k = YM_k
  if tau_{k+1} != YMt_k(2)
    YA_k = ExpSJ .* YA_k
    YT_k = YT_k + YA_k
  end
end
end
end

```

Abbildung 2.22: Aktualisieren und verwalten der Parkettierung (Teil 2).

Um zu einem vollständig expliziten Algorithmus zu gelangen, was eventuell zur Lösung der zweidimensionalen, sicher aber für die dreidimensionale Wellengleichung oder für die dreidimensionale Maxwellgleichung wünschenswert ist, muss man den direkten Schritt des Verfahrens ändern. Anstatt den Wert $g(n\Delta t)$ zu verwenden, der im Fall der NtD Formulierung der Randbedingung der unbekanntes Normalenableitung entspricht, kann man entweder konstant $g(n\Delta t) \approx g((n-1)\Delta t)$ oder linear $g(n\Delta t) \approx 2g((n-1)\Delta t) - g((n-2)\Delta t)$ extrapolieren.

Man erhält dann für den direkten Schritt

$$\int_{t-\Delta t}^t f(t-\tau)g(\tau) d\tau \approx \phi_1 g(t-\Delta t) \text{ oder}$$

$$\int_{t-\Delta t}^t f(t-\tau)g(\tau) d\tau \approx \phi_1 g(t-\Delta t) + \phi_2 \frac{g(t-\Delta t) - g(t-2\Delta t)}{\Delta t}.$$

Für die DtN Formulierung der nichtreflektierenden Randbedingung gibt es im Fall der Wellengleichung eine weitere Möglichkeit zu einem vollständig expliziten Verfahren zu gelangen, siehe dazu den Abschnitt 4.2.

Kapitel 3

Stabilität und Konvergenz

Nun wollen wir den in Kapitel 2 vorgestellten Algorithmus, der sich in allen numerischen Beispielen als stabil erwiesen hat, näher auf seine Stabilität untersuchen. Für die Schrödingergleichung geben wir ein Kriterium an, das es erlaubt zu entscheiden, ob das Verfahren stabil ist. Es wird vorausgesetzt, dass die inverse Laplacetransformation exakt berechnet wird, das heißt der Fehler durch die Approximation der Wegintegrale wird nicht berücksichtigt. Zudem werden wir uns auf den homogenen Fall beschränken. Aufgrund der Fouriertransformation am Rand in tangentialer Richtung genügt es den eindimensionalen Fall zu betrachten. Für die Stabilität des zweidimensionalen Problems muss dann das Stabilitätskriterium gleichmäßig für alle Fouriermoden erfüllt sein.

3.1 Schrödingergleichung: Halbstrahl räumlich kontinuierlich

Wir untersuchen der besseren Übersicht wegen zuerst das auf einem Halbstrahl in x -Richtung gegebene räumlich kontinuierliche Modellproblem. Für dieses sollen in diesem Abschnitt Kriterien hergeleitet werden, die es erlauben zu beurteilen, ob die Zeitdiskretisierung der Schrödingergleichung mit nichtreflektierenden Randbedingungen stabil ist. Dazu betrachten wir den Fehler, der zusätzlich durch die Diskretisierung mit dem schnellen Faltungsalgorithmus entsteht.

Für den Spezialfall $\alpha = 0$ zeigen wir anschliessend ein Konvergenzresultat.

3.1.1 Fehlergleichung

Gesucht ist die Lösung u der homogenen linearen Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t u(x, t) &= \partial_{xx} u(x, t) - \alpha^2 u(x, t) \\ &\text{für } (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T] \text{ und } T > 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, \\ u(x, t) &= 0 \quad \text{für } |x| \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (3.1)$$

eingeschränkt auf das Intervall $(-\infty, 0]$, wobei der Träger des Anfangswerts u_0 ebenfalls im Intervall $(-\infty, 0]$ liegt und α^2 und c positive reelle Konstanten sind. Wie in der Herleitung nichtreflektierender Randbedingungen gezeigt, suchen wir daher eine Lösung v folgender Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x, t) &= \partial_{xx} v(x, t) - \alpha^2 v(x, t) \\ &\text{für } (x, t) \in (-\infty, 0] \times [0, T] \text{ und } T > 0, \\ v(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ v(x, t) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ v(0, t) &= \int_0^t f_\alpha(t - \tau) \partial_\nu v(0, \tau) d\tau \quad \text{für } t \in [0, T], \end{aligned} \quad (3.2)$$

wobei $F_\alpha(s) = -(i/cs + \alpha^2)^{-1/2}$ die Laplacetransformierte des Faltungskerns f_α ist.

Diskretisiert man obige Gleichung (3.2) in der Zeit, die Gleichung auf $(-\infty, 0] \times [0, T]$ beispielsweise mit Hilfe der Trapezregel oder einem anderen A-stabilen Mehrschrittverfahren und die Randbedingung mit dem in Abschnitt 2 vorgestellten Algorithmus, so erhält man mit $v^n = v^n(x) \approx v(x, n\Delta t)$ für $n = 1, \dots$

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (\partial_{xx} - \alpha^2) (v^{n+1} + v^n), \\ &\text{für } x \in (-\infty, 0] \text{ und } n \in \mathbb{N}, \\ v^0(x) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ v(x, t) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ v^{n+1}(0) &= \sum_{j=0}^n \int_{j\Delta t}^{(j+1)\Delta t} f_\alpha((n+1)\Delta t - \tau) \\ &\quad \left(\partial_\nu v^j(0) + \frac{\tau - j\Delta t}{\Delta t} (\partial_\nu v^{j+1}(0) - \partial_\nu v^j(0)) \right) d\tau \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$(3.4)$$

$$= \sum_{j=0}^{n+1} \omega_{n+1-j} \partial_\nu v^j(0)$$

mit zum schnellen Faltungsalgorithmus gehörenden Faltungsgewichten ω_n , die im Verfahren allerdings nie berechnet werden.

3.1 Lemma. Für die zum schnellen Faltungsalgorithmus gehörenden Faltungsgewichte ω_n gilt

$$\omega_n = \int_{-\Delta t}^{\Delta t} f_\alpha(n\Delta t + \theta) \Lambda(\theta) d\theta. \quad (3.5)$$

Hierbei ist die Hutfunktion $\Lambda(\theta) := \max(1 - |\theta|/\Delta t, 0)$ und wir setzen den auf \mathbb{R}_+ definierten Faltungskern f_α konstant Null auf \mathbb{R}_- fort.

Beweis: Setzt man $g_j := \partial_\nu v^j(0)$ und führt eine *zeta*-Transformation der Gleichung (3.4) durch, so lassen sich aus folgender Gleichung durch Koeffizientenvergleich die ω_n bestimmen.

$$\begin{aligned} & \sum_{n \geq 0} \sum_{j=0}^n \omega_{n-j} g_j \zeta^n \\ &= \sum_{n \geq 0} \int_0^{n\Delta t} f_\alpha(n\Delta t - \tau) \sum_{j=0}^n g_j \Lambda_j(\tau) d\tau \zeta^n \\ &= \sum_{n \geq 0} \sum_{j=0}^n \int_0^{n\Delta t} f_\alpha(n\Delta t - \tau) \Lambda_j(\tau) d\tau g_j \zeta^n \end{aligned}$$

Mit $\Lambda_j(\tau)$ werden die um $j\Delta t$ verschobenen Hutfunktionen bezeichnet.

$$\Lambda_j(\tau) := \Lambda(\tau - j\Delta t)$$

Es ist

$$\begin{aligned} \omega_{n-j} &= \int_0^{n\Delta t} f(n\Delta t - \tau) \Lambda_j(\tau) d\tau \\ &= \int_{(j-1)\Delta t}^{(j+1)\Delta t} f(n\Delta t - \tau) \Lambda_j(\tau) d\tau \\ &= \int_{(j-1)\Delta t}^{(j+1)\Delta t} f(n\Delta t - \tau) \Lambda(\tau - j\Delta t) d\tau. \end{aligned}$$

Eine Variablensubstitution, $\tau := \tau - j\Delta t$, liefert nun die Behauptung. \square

Andererseits erhält man durch eine Diskretisierung in der t Komponente sowohl der Differentialgleichung als auch der Randbedingung mit dem gleichen in Abschnitt 2.1.1 erklärten Verfahren eine Lösung \tilde{v}^n folgender Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \frac{\tilde{v}^{n+1} - \tilde{v}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}(\partial_{xx} - \alpha^2)(\tilde{v}^{n+1} + \tilde{v}^n) \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ \tilde{v}^0(x) &= u_0(x) \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ \tilde{v}^n(x) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ \tilde{v}^{n+1}(0) &= \sum_{j=0}^{n+1} \tilde{\omega}_{n+1-j} \partial_\nu \tilde{v}^j(0). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Diese Diskretisierung ist aufgrund der in Abschnitt 2.1.1 erläuterten Äquivalenz stabil, falls die Zeitdiskretisierung der auf ganz \mathbb{R} gegebenen Schrödingergleichung (3.1) es ist. Die Faltungsgewichte $\tilde{\omega}_n$ sind über die Gleichung (2.1) definiert.

Die Differenz $e^n(x) := v^n(x) - \tilde{v}^n(x)$ ist der Fehler, der dadurch entsteht, dass die Randbedingung mit dem schnellen Faltungsalgorithmus und nicht mit der zur Zeitdiskretisierung der partiellen Differentialgleichung passenden Faltungsquadratur diskretisiert wird. Für ihn gilt

$$\begin{aligned} \frac{i}{c\Delta t} \frac{e^{n+1} - e^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}(\partial_{xx} - \alpha^2)(e^{n+1} + e^n) \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ e^0(x) &= 0 \quad \text{für } x \in (-\infty, 0], \\ e^n(x) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ e^{n+1}(0) &= \sum_{j=0}^{n+1} \omega_{n+1-j} \partial_\nu v^j(0) - \tilde{\omega}_{n+1-j} \partial_\nu \tilde{v}^j(0) \\ &= \sum_{j=0}^{n+1} \omega_{n+1-j} \partial_\nu (e^j(0) + \tilde{v}^j(0)) - \tilde{\omega}_{n+1-j} \partial_\nu \tilde{v}^j(0). \end{aligned} \tag{3.7}$$

Führt man nun eine *zeta*-Transformation mit Variable ζ , $|\zeta| \leq 1$, in t -Richtung durch (man multipliziert obige Gleichung (3.7) mit ζ^{n+1} und summiert über n), so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{i}{c\Delta t} \left((1 - \zeta)E(x, \zeta) \right) &= \frac{1}{2}(\partial_{xx} - \alpha) \left((1 + \zeta)E(x, \zeta) \right), \\ E(x, \zeta) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ E(0, \zeta) &= \omega(\zeta) \partial_\nu E(0, \zeta) + (\omega(\zeta) - \tilde{\omega}(\zeta)) \partial_\nu \tilde{V}(0, \zeta) \end{aligned} \tag{3.8}$$

mit

$$E(x, \zeta) := \sum_{n=0}^{\infty} e^n(x) \zeta^n, \quad \omega(\zeta) := \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \zeta^n \quad \text{und} \quad \tilde{\omega}(\zeta) := \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{\omega}_n \zeta^n.$$

Setzt man zur Vereinfachung der Notation

$$\delta(\zeta)^* := \frac{2(1-\zeta)}{(1+\zeta)} \quad \text{und} \quad \gamma^2 := \gamma(\zeta)^2 = \frac{i}{c} \frac{\delta(\zeta)}{\Delta t} + \alpha^2$$

so wird (3.8) zu

$$\begin{aligned} \gamma(\zeta)^2 E(x, \zeta) &= \partial_{xx} E(x, \zeta), \\ E(x, \zeta) &= 0 \quad \text{für } x \rightarrow -\infty, \\ E(0, \zeta) &= \omega(\zeta) \partial_\nu E(0, \zeta) + (\omega(\zeta) - \tilde{\omega}(\zeta)) \partial_\nu \tilde{V}(0, \zeta). \end{aligned} \tag{3.9}$$

Aufgrund der A-Stabilität der Trapezregel ist der Realteil von $\delta(\zeta)$ für $|\zeta| < 1$ positiv. Durch die Multiplikation mit i und die Addition von α^2 erhält man, dass der Imaginärteil von $\gamma^2(\zeta)$ positiv ist. Insbesondere ist also $\text{Re}(\gamma(\zeta)) > 0$ für $|\zeta| < 1$. Die Lösung der Differentialgleichung (3.9) ist damit

$$E(x, \zeta) = E(0, \zeta) \exp(\gamma(\zeta)x).$$

Berechnet man die Normalenableitung an der Stelle $x = 0$

$$\partial_\nu E(x, \zeta)|_{x=0} = \partial_x E(x, \zeta)|_{x=0} = \gamma(\zeta) E(0, \zeta)$$

und setzt die Randbedingung ein, so erhält man

$$\begin{aligned} E(x, \zeta) &= \frac{\omega(\zeta) - \tilde{\omega}(\zeta)}{1 - \omega(\zeta)\gamma(\zeta)} \partial_\nu \tilde{V}(\zeta, 0) \exp(\gamma(\zeta)x) \\ &= \frac{\omega(\zeta) + 1/\gamma(\zeta)}{1 - \omega\gamma(\zeta)} \partial_\nu \tilde{V}(\zeta, 0) \exp(\gamma(\zeta)x) \\ &= \frac{1 + \omega(\zeta)\gamma(\zeta)}{1 - \omega(\zeta)\gamma(\zeta)} \tilde{V}(\zeta, 0) \exp(\gamma(\zeta)x), \end{aligned} \tag{3.10}$$

wobei verwendet wurde, dass $\tilde{V}(\zeta, 0) = \tilde{\omega}(\zeta) \partial_\nu \tilde{V}(\zeta, 0)$ ist und für die *zeta*-Transformierte $\tilde{\omega}(\zeta)$ der Faltungsquadraturgewichte nach Definition (2.1)

$$\tilde{\omega}(\zeta) = F_\alpha \left(\frac{\delta(\zeta)}{\Delta t} \right) = -\frac{1}{\gamma(\zeta)} = -\frac{\sqrt{c\Delta t}}{\sqrt{i\delta(\zeta) + c\Delta t\alpha^2}}$$

* $\delta(\zeta)$ ist die erzeugende Funktion des A-stabilen Mehrschrittverfahrens; in dem Beispiel hier der Trapezregel.

gilt, wobei F_α die Laplacetransformierte des kontinuierlichen Faltungskerns ist. Durch die Gleichung (3.10) erhalten wir in Satz 3.3 ein Kriterium, das es erlaubt die Stabilität nachzuprüfen.

3.1.2 Stabilität

Zur Vorbereitung zuerst noch einige aus [20] übernommene Definitionen und Eigenschaften der Fouriertransformation.

Für differenzierbare komplexwertige Funktionen v und u auf \mathbb{R} definiert

$$\langle u, v \rangle_{H^1(\mathbb{R})} := \int_{\mathbb{R}} u(x) \overline{v(x)} + \partial_x u(x) \overline{\partial_x v(x)} dx \quad (3.11)$$

das $H^1(\mathbb{R})$ Skalarprodukt, wobei \bar{u} die zu u komplexkonjugierte Funktion ist. Dieses Skalarprodukt induziert eine Norm

$$\|u\|_{H^1(\mathbb{R})} := \left(\int_{\mathbb{R}} |u(x)|^2 + |\partial_x u(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Den Hilbertraum $H^1(\mathbb{R})$ erhält man durch Vervollständigung von $C_0^\infty(\mathbb{R})$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{H^1(\mathbb{R})}$.

Für eine integrierbare Funktion v auf \mathbb{R} , $v \in L^1(\mathbb{R})$, ist die Fouriertransformierte \hat{v} durch

$$\hat{v}(\xi) := \int_{\mathbb{R}} \exp(-ix\xi) v(x) dx \quad (3.12)$$

gegeben. Es gilt die Umkehrformel

$$v(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \exp(ix\xi) \hat{v}(\xi) d\xi.$$

Für $u, v \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ gilt die Parsevalsche Gleichung

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} v(x) \overline{u(x)} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \hat{v}(\xi) \overline{\hat{u}(\xi)} d\xi, \\ \int_{\mathbb{R}} |v(x)|^2 dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi. \end{aligned}$$

Eine direkte Folgerung daraus und aus elementaren Eigenschaften der Fouriertransformation ist, dass

$$\|v\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} (1 + |\xi|^2) |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi \quad (3.13)$$

gilt.

Zum Beweis des Satzes 3.3 benötigen wir zudem ein Lemma, das es erlaubt Funktionswerte einer Funktion durch ihre H^1 -Norm abzuschätzen.

3.2 Lemma. Sei $u \in H^1(\mathbb{R})$. Dann gibt es eine Konstante C_M , so dass

$$|u(0)| \leq C_M \|u\|_{H^1(\mathbb{R})}. \quad (3.14)$$

Beweis: Mit Hilfe der Fouriertransformation und der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung erhält man

$$\begin{aligned} |u(0)| &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(\xi) d\xi \right| \\ &= \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{1+\xi^2}} \sqrt{1+\xi^2} \hat{u}(\xi) d\xi \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{1+\xi^2} d\xi \right)^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} (1+\xi^2) |\hat{u}(\xi)|^2 d\xi \right)^{1/2} \\ &= C_M \|u\|_{H^1(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

□

Für einen anderen Beweis und ein stärkere Aussage siehe Morreys Ungleichung in Kapitel 5, Seite 266 in [8]. Damit erhalten wir den folgenden Satz.

3.3 Satz (Stabilität des Modellproblems). *Gilt*

$$\left| \frac{1 + \omega(\zeta)\gamma(\zeta)}{1 - \omega(\zeta)\gamma(\zeta)} \right| \leq C \quad \text{für } |\zeta| \leq 1 \quad (3.15)$$

für eine Konstante C unabhängig von Δt und ζ , so ist die Zeitdiskretisierung von (3.2) mit der Trapezregel im Inneren und mit dem schnellen Faltungsalgorithmus am Rand stabil. $\gamma(\zeta)$ und $\omega(\zeta)$ sind wie oben definiert.

Stabilität bedeutet hierbei, dass für den Fehler $e^n(x)$

$$\left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |e^n(x)|^2 \right)^{1/2} \leq C' \|v^0\|_{H^1(\mathbb{R}_-)} \quad (3.16)$$

mit einer von x und Δt unabhängigen Konstanten C' gilt.

Beweis: Zur besseren Übersicht werden wir im Beweis ω und γ anstelle von $\omega(\zeta)$ und $\gamma(\zeta)$ schreiben. Es ist

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^n(x) \zeta^n = \frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{v}^n(0) \zeta^n \exp(\gamma x).$$

Da der Realteil von γ für $|\zeta| < 1$ größer als 0 ist, genügt es den Fehler $e^n(x)$ am Rand, für $x = 0$, zu betrachten. Zweimalige Anwendung der Parsevalschen Formel für Fourierreihen mit der Setzung $\zeta = \exp(i\rho)$ liefert

$$\sum_{n=0}^{\infty} |e^n(0)|^2 = \int_0^{2\pi} \left| \frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \tilde{V}(0) \right|^2 d\rho \leq C^2 \sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{v}^n(0)|^2. \quad (3.17)$$

Es sei daran erinnert, dass \tilde{v}^n die Lösung der mit der Trapezregel diskretisierten Gleichung (3.6) ist. Bezeichnet man mit u^n die Lösung der auf ganz \mathbb{R} gegebenen und mit der Trapezregel diskretisierten Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t u(x, t) &= \partial_{xx} u(x, t) - \alpha^2 u(x, t) \\ &\text{für } (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]; T > 0, \\ u(x, 0) &= \begin{cases} v_0(x) & \text{für } x \in \mathbb{R}_-, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \\ \lim_{x \rightarrow \infty} u(x, t) &= 0 \text{ für } t \in [0, T], \end{aligned} \quad (3.18)$$

so gilt

$$\|u^n\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq \|u^0\|_{H^1(\mathbb{R})},$$

da die Trapezregel A-stabil ist und

$$\operatorname{Re} \langle -ic(\partial_{xx} - \alpha^2)u(\cdot, t), u(\cdot, t) \rangle_{H^1(\mathbb{R})} \leq 0 \quad (3.19)$$

ist. Das bedeutet, dass die partielle Differentialgleichung kontraktiv ist, vergleiche hierzu Abschnitt IV.11. in [18]. Die Kontraktivität lässt sich leicht nachrechnen, indem man entweder partiell integriert oder die Fouriertransformation verwendet. Nach Konstruktion ist \tilde{v}^n die Einschränkung von u^n auf das Intervall $(-\infty, 0]$, sodass

$$\|\tilde{v}^n\|_{H^1(\mathbb{R}_-)} \leq \|u^n\|_{H^1(\mathbb{R})}$$

für alle n gilt. Lemma 3.2 erlaubt es, Funktionswerte einer Funktion durch ihre H^1 Norm abzuschätzen. Damit ergibt sich, dass

$$\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |\tilde{v}^n(0)|^2 \leq C_M^2 \frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} \|u^n\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C_M^2 \|u^0\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 = C_M^2 \|v^0\|_{H^1(\mathbb{R}_-)}^2$$

für die Konstante C_M aus Lemma 3.2 ist.

Da die Werte der $e^n(0)$ für $n = 1, \dots, N_t$ nur von den ersten N_t Werten von $\tilde{v}^n(0)$ abhängen gilt

$$\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |e^n(x)|^2 \leq C^2 \frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |\tilde{v}^n(0)|^2.$$

Die Behauptung folgt für $C' = C_M C$. □

3.4 Bemerkung. Die Stabilität für die zweidimensionale Schrödingergleichung erhält man, falls die Stabilitätsfunktion

$$\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma}$$

aus (3.15) für $|\zeta| \leq 1$ betragsmäßig durch eine Konstante C unabhängig von α beschränkt ist.

3.5 Bemerkung. In der Herleitung des Stabilitätskriteriums ist entscheidend, dass der Realteil von $\gamma(\zeta)$ für $|\zeta| < 1$ positiv ist. Dies ist auch ganz allgemein für A-stabile Verfahren richtig, sodass Satz 3.3 nicht nur für die Trapezregel gilt, sondern für alle A-stabilen Verfahren.

Der vorliegende Satz liefert nun ein Kriterium die Stabilität zu untersuchen. Dazu muss allerdings $\omega(\zeta)$ für $|\zeta| \leq 1$ berechnet werden. Es ist

$$\omega(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n \zeta^n$$

mit den in Lemma 3.1 gegebenen Faltungsgewichten ω_n . Diese Reihendarstellung von $\omega(\zeta)$ ist zur Berechnung allerdings nicht geeignet. Es ist

$$\begin{aligned} \omega_n &= \int_{-\Delta t}^0 f_\alpha(n\Delta t - \tau) \frac{\tau + \Delta t}{\Delta t} d\tau + \int_0^{\Delta t} f_\alpha(n\Delta t - \tau) \frac{\Delta t - \tau}{\Delta t} d\tau \\ &= \int_{-1}^0 f_\alpha((n-t)\Delta t) (t+1)\Delta t dt - \int_{-1}^0 f_\alpha((n-1-t)\Delta t) t\Delta t dt \end{aligned}$$

und somit

$$\omega_n = I_n^0 + (I_n^1 - I_{n-1}^1) = I_n^0 + \nabla I_n^1,$$

wobei I_n^0 und I_n^1 wie folgt definiert sind:

$$I_n^0 := \int_{-1}^0 f_\alpha((n-\tau)\Delta t) \Delta t d\tau,$$

$$I_n^1 := \int_{-1}^0 f_\alpha((n-\tau)\Delta t) \tau \Delta t d\tau$$

für $n \geq 0$ und $\nabla I_n^1 := I_n^1 - I_{n-1}^1$ und $I_{-1}^1 := 0$.

Speziell für den kontinuierlichen Faltungskern der Schrödingergleichung ist die inverse Laplacetransformierte von F_α bekannt. Es gilt

$$\mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{\frac{i}{c}(\cdot) + \alpha^2}} \right) (t) = \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{i\pi}} \frac{e^{i\alpha^2 t}}{\sqrt{t}}.$$

Damit erhält man für I_n^0 und I_n^1

$$I_n^0 = \int_{-1}^0 \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{i\pi}} \frac{e^{i\alpha^2(n-\tau)\Delta t}}{\sqrt{(n-\tau)\Delta t}} \Delta t d\tau = \sqrt{\frac{c\Delta t}{i\pi}} \int_{-1}^0 \frac{e^{-i\alpha^2\tau\Delta t}}{\sqrt{n-\tau}} d\tau e^{i\alpha^2 n\Delta t},$$

$$I_n^1 = \int_{-1}^0 \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{i\pi}} \frac{e^{i\alpha^2(n-\tau)\Delta t}}{\sqrt{(n-\tau)\Delta t}} \tau \Delta t d\tau = \sqrt{\frac{c\Delta t}{i\pi}} \int_{-1}^0 \frac{e^{-i\alpha^2\tau\Delta t}}{\sqrt{n-\tau}} \tau d\tau e^{i\alpha^2 n\Delta t}$$

für $n \geq 0$ und $\nabla I_n^1 = I_n^1 - I_{n-1}^1$ und $I_{-1}^1 = 0$. Um die unendliche Reihe über n zu berechnen verwenden wir eine Formel aus [5] Band 1, Seite 27. Definiert man

$$\Phi(z, s, \nu) := \sum_{n=0}^{\infty} (\nu + n)^{-s} z^n,$$

so gilt folgendes

$$\Phi(z, s, \nu) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{y^{s-1} e^{-\nu y}}{1 - z e^{-y}} dy = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{y^{s-1} e^{-(\nu-1)y}}{e^y - z} dy.$$

Hierbei ist $\Gamma(s)$ die Gammafunktion – nicht zu verwechseln mit der Talbotkontur. Man erhält nun

$$\sqrt{\frac{i\pi}{c\Delta t}} \sum_{n=0}^{\infty} I_n^j \zeta^n$$

$$= \int_{-1}^0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-i\alpha^2\Delta t\tau}}{(-\tau+n)^{\frac{1}{2}}} \left(\zeta e^{i\alpha^2\Delta t} \right)^n \frac{(\tau)^j}{j!} d\tau$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-1}^0 \frac{e^{-i\alpha^2 \Delta t \tau} (\tau)^j}{\sqrt{-\tau} j!} d\tau + \\
 &\quad \left(\zeta e^{i\alpha^2 \Delta t} \right) \int_{-1}^0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-i\alpha^2 \Delta t \tau}}{((- \tau + 1) + n)^{\frac{1}{2}}} \left(\zeta e^{i\alpha^2 \Delta t} \right)^n \frac{(\tau)^j}{j!} d\tau \\
 &= \int_{-1}^0 \frac{e^{-i\alpha^2 \Delta t \tau} (\tau)^j}{\sqrt{-\tau} j!} d\tau + \zeta e^{i\alpha^2 h} \int_{-1}^0 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{y^{-\frac{1}{2}} e^{\tau(y - i\alpha^2 \Delta t)} (\tau)^j}{e^y - \zeta e^{i\alpha^2 h}} \frac{(\tau)^j}{j!} dy d\tau \\
 &= \int_{-1}^0 \frac{e^{-i\alpha^2 \Delta t \tau} (\tau)^j}{\sqrt{-\tau} j!} d\tau + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \zeta e^{i\alpha^2 \Delta t} \int_{-1}^0 \int_0^{\infty} \frac{e^{\tau(\sigma^2 - i\alpha^2 \Delta t)} (\tau)^j}{e^{\sigma^2} - \zeta e^{i\alpha^2 \Delta t}} \frac{(\tau)^j}{j!} d\sigma d\tau.
 \end{aligned}$$

Das Integral wurde in einen singulären Teil mit Singularität in $\tau = 0$ und einen bezüglich τ nichtsingulären Teil aufgespalten. Letzterer hat jedoch bezüglich σ in $\sigma = \pm \sqrt{\ln(\zeta e^{i\alpha^2 h})}$ eine Singularität. Für $\omega(\zeta)$ ergibt sich mit einer ähnlichen Rechnung

$$\begin{aligned}
 \omega(\zeta) &= \sqrt{\frac{c\Delta t}{i\pi}} \int_{-1}^0 e^{-i\alpha^2 \Delta t \tau} \left(\frac{1 + \tau}{\sqrt{1 - \tau}} e^{-i\alpha^2 \tau \zeta} + \frac{\tau}{\sqrt{-\tau}} \right) \\
 &\quad + \sqrt{\frac{c\Delta t}{i}} \frac{2}{\pi} \int_{-1}^0 \int_0^{\infty} \frac{e^{(\sigma^2 - i\alpha^2 \Delta t)\tau}}{e^{\sigma^2} - e^{i\alpha^2 \Delta t} \zeta} \left(e^y (1 + \tau) \left(e^{i\alpha^2 \Delta t} \zeta \right)^2 - \tau e^{i\alpha^2 \Delta t} \zeta \right) d\sigma d\tau.
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe dieser Formel lässt sich jetzt $\omega(\zeta)$ numerisch durch Quadraturformeln berechnen. Das uneigentliche Integral schneidet man einfach ab. Das ist gerechtfertigt, weil der Integrand für große σ rasch klein wird. Aufgrund der Singularität in $\sigma = 0$ ist die Approximation mit einfachen Quadraturformeln allerdings nicht sehr effektiv. Zur Effektivitätssteigerung kann man für den Fall $\alpha = 0$ wiederum das Integral in einen singulären Anteil, der exakt berechnet wird, und einen nichtsingulären Anteil aufspalten. Man setzt

$$\int_a^b f(t)w(t) dt = f(t_0) \int_a^b w(t) dt + \int_a^b (f(t) - f(t_0))w(t) dt,$$

wobei $w(t)$ eine Singularität von höchstens Ordnung 1 in t_0 hat. Somit lässt sich $\omega(\zeta)$ effizient numerisch berechnen.

Das Produkt von $\omega(\zeta)$ mit $\gamma(\zeta)$ ist nicht von α , c und Δt abhängig, sondern nurmehr vom Produkt aus Δt , c und α^2 .

Das Ergebnis für die lineare Interpolation der Randdaten und die Trapezregel im Inneren ist in Abbildung 3.1 gezeigt. Dort ist der Imaginärteil der Stabilitätsfunktion $(1 + \omega(\zeta)\gamma(\zeta))/(1 - \omega(\zeta)\gamma(\zeta))$ gegen den Realteil für $|\zeta| = r$ aufgetragen. Die äußerste Linie gehört dabei zu $r = 0.999$ und die innerste zu $r = 0.3$. Für verschiedene $c\alpha^2\Delta t$

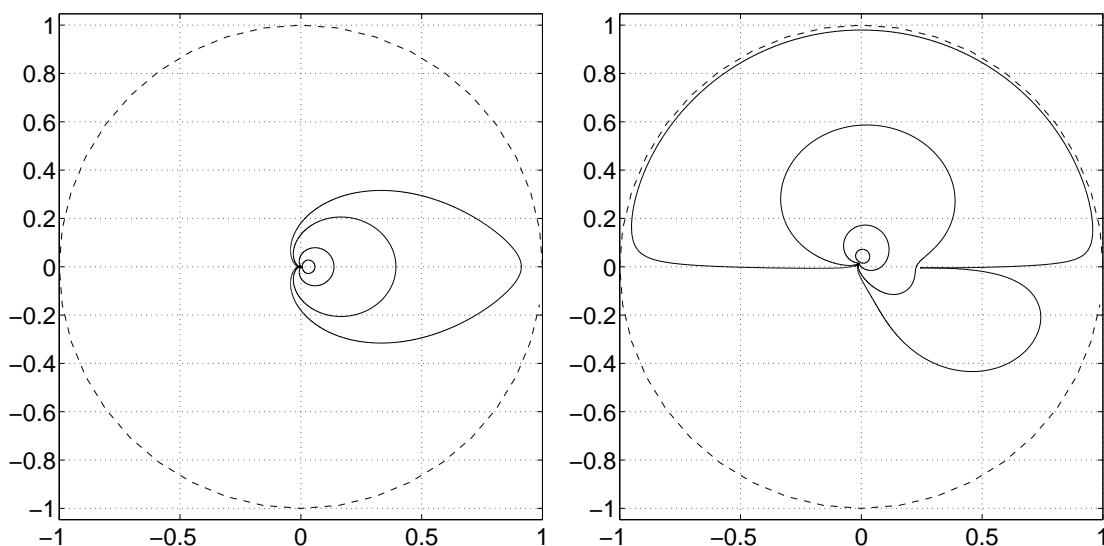


Abbildung 3.1: Werte der Stabilitätsfunktion für $c\alpha^2\Delta t = 0$ (links) und für $c\alpha^2\Delta t = 10$ (rechts) und Einheitskreis (gestrichelte Linie).

erhält man nun ähnliche Bereiche in der komplexen Ebene. Die berechneten Werte der Stabilitätsfunktion liegen immer im Einheitskreis, sodass die Voraussetzung von Satz 3.3 gleichmäßig in α erfüllt ist.

3.1.3 Konvergenz

In diesem Abschnitt wollen wir die Konvergenz unserer Zeitdiskretisierung nachweisen. Dazu zeigen wir zunächst ein Lemma, das eine Modifikation der Poissonschen Summenformel zum Inhalt hat.

3.6 Lemma (Modifizierte Poissonsche Summenformel). *Für eine integrierbare und stetige Funktion f auf $[0, \infty)$ gilt, falls man sie konstant Null auf \mathbb{R} fortsetzt und diese Fortsetzung wieder mit f bezeichnet,*

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n\Delta t + \theta) \exp(-s\Delta tn) = \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F\left(s + i2\pi\frac{n}{\Delta t}\right) \exp\left(\left(i2\pi\frac{n}{\Delta t} + s\right)\theta\right),$$

wobei F die Laplacetransformierte von f bezeichnet.

Beweis: Für die auf \mathbb{R} fortgesetzte Funktion f gilt die Poissonsche Summenformel aus [20] von Seite 128 f.

$$2\pi\lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(2\pi\lambda n) = 2\pi\lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(2\pi\lambda n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}\left(\frac{n}{\lambda}\right),$$

wobei mit $\mathcal{F}(f)(\xi) := \hat{f}(\xi)$ die Fouriertransformierte von $f(t)$ bezeichnet wird. Setzt man nun $\Delta t = 2\pi\lambda$ und beachtet, dass für die Fouriertransformierte der um θ verschobenen und mit $\exp(-st)$ multiplizierten Funktion gilt

$$\mathcal{F}\left(\exp(-s\cdot)f(\cdot + \theta)\right)(\xi) = \hat{f}(\xi - is) \exp(i\theta(\xi - is)),$$

so erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n\Delta t + \theta) \exp(-s\Delta t n) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}\left(2\pi\frac{n}{\Delta t} - is\right) \exp\left(i\left(2\pi\frac{n}{\Delta t} - is\right)\theta\right) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-i\left(2\pi\frac{n}{\Delta t} - is\right)t\right) f(t) dt \exp\left(i\left(2\pi\frac{n}{\Delta t} - is\right)\theta\right) \\ &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F\left(s + i2\pi\frac{n}{\Delta t}\right) \exp\left(i\left(2\pi\frac{n}{\Delta t} - is\right)\theta\right). \end{aligned}$$

Damit ist die Behauptung des Lemmas gezeigt. \square

Nun können wir für die spezielle Situation $\alpha = 0$ die Konvergenz unseres Verfahrens zeigen. Die gleiche Aussage gilt mit einer zusätzlichen Voraussetzung für die vollständig diskretisierte Gleichung, siehe Satz 3.11.

3.7 Satz (Konvergenz für das Modellproblem). *Falls die Lösung $v(x, t)$ der Gleichung (3.2) für $\alpha = 0$ in t glatt ist, die Ableitungen bezüglich t beschränkt bleiben und die Diskretisierung in obigem Sinne stabil ist, so gilt für den Fehler am Rand*

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |v(0, n\Delta t) - v^n(0)|^2 \right)^{1/2} \\ & \leq \Delta t^2 C \left(\max_{\tau \in [0, \Delta t N_t]} \|\partial_t^2 u(\cdot, \tau)\|_{H_1(\mathbb{R})} + \max_{\tau \in [0, \Delta t N_t]} \|\partial_t^3 u(\cdot, \tau)\|_{H_1(\mathbb{R})} \right) \end{aligned}$$

für eine von Δt unabhängige Konstante C mit den oben eingeführten Bezeichnungen für v , v^n und u .

Beweis: Es ist

$$|v(0, n\Delta t) - v^n(0)| \leq |v(0, n\Delta t) - \tilde{v}^n(0)| + |\tilde{v}^n(0) - v^n(0)|. \quad (3.20)$$

Die beiden Terme lassen sich nun wie folgt abschätzen.

Für den ersten Term ist

$$|v(n\Delta t, 0) - \tilde{v}^n(0)| = |u(n\Delta t, 0) - u^n(0)| \leq C_M \|u(n\Delta t, \cdot) - u^n\|_{H^1(\mathbb{R})} \quad (3.21)$$

nach Lemma 3.2, Hierbei sind u und u^n wie schon im Beweis von Satz 3.3 die Lösung der Gleichung (3.18), beziehungsweise die Lösung der mit der Trapezregel diskretisierten Gleichung (3.18).

Es gilt weiter

$$\|u(n\Delta t, \cdot) - u^n\|_{H^1} \leq \frac{1}{12} \Delta t^2 \max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^3 u(\tau, \cdot)\|_{H^1(\mathbb{R})}, \quad (3.22)$$

da die Trapezregel ein Verfahren zweiter Ordnung ist. Siehe hierzu das *Theorem 15.8* auf Seite 250 in [18]. Die Voraussetzung dieses Theorems, die Kontraktivität der partiellen Differentialgleichung, ist wegen (3.19) erfüllt. Damit erhalten wir

$$\left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |v(0, n\Delta t) - \tilde{v}^n(0)|^2 \right)^{1/2} \leq \frac{1}{12} \Delta t^2 \max_{\tau \in [0, N_t \Delta t]} \|\partial_t^3 u(\tau, \cdot)\|_{H^1(\mathbb{R})}.$$

Um den zweiten Term in (3.20) abzuschätzen betrachten wir die *zeta*-Transformierte des Fehlers

$$\begin{aligned} V(x, \zeta) - \tilde{V}(x, \zeta) &= \frac{\omega\gamma + 1}{1 - \omega\gamma} \tilde{V}(0) \exp(\gamma x) \\ &= \Delta t^2 \frac{\omega\gamma + 1}{(1 - \omega\gamma)(1 - \zeta)^2} \frac{(1 - \zeta)^2}{\Delta t^2} \tilde{V}(0) \exp(\gamma x). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ausgehend von (3.23) zeigen wir, dass

(i) der Faktor

$$\frac{(1 - \zeta)^2}{\Delta t^2} \tilde{V}(0) \exp(\gamma x)$$

sich als *zeta*-Transformierte von höheren Zeitableitungen der analytischen Lösung schreiben lässt und

(ii) der Betrag des anderen Faktors

$$\left| \frac{\omega\gamma + 1}{(1 - \omega\gamma)(1 - \zeta)^2} \right| < C'$$

beschränkt ist.

Hier und im folgenden bezeichnet C' jeweils eine Konstante, die wir nicht weiter unterscheiden werden. Mit diesen beiden Aussagen lässt sich ähnlich wie bei der Stabilität der zweite Term in (3.20) abschätzen.

Zum Beweis von (i): Es ist

$$\begin{aligned} & \frac{(1 - \zeta)^2}{\Delta t^2} \tilde{V}(0) \\ &= \frac{(1 - \zeta)^2}{\Delta t^2} \sum \tilde{v}^j(0) \zeta^j \\ &= \frac{(1 - \zeta)^2}{\Delta t^2} \sum_{j=0}^{\infty} (v(j\Delta t, 0) + \Delta t^2 d_j) \zeta^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{v(j\Delta t, 0) - 2v((j-1)\Delta t, 0) + v((j-2)\Delta t, 0)}{\Delta t^2} + (1 - \zeta)^2 d_j \right) \zeta^j \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \left(\partial_t^2 v(0, (j-1)\Delta t) + \frac{\Delta t}{6} \partial_t^3 v(0, \tau_j) + (1 - \zeta)^2 d_j \right) \zeta^j, \end{aligned} \tag{3.24}$$

wobei eine Taylorentwicklung um $(j-1)\Delta t$ durchgeführt wurde und d_j mit (3.21) und (3.22) abgeschätzt werden kann:

$$|d_j| \leq C' \max_{\tau \in [0, j\Delta t]} \|\partial_t^3 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})}.$$

Es ist $\tau_j \in [0, j\Delta t]$.

Beweis von (ii): Wir werden zeigen, dass der Faktor

$$\frac{1 + \omega\gamma}{(1 - \omega\gamma)(1 - \zeta)^2} \tag{3.25}$$

beschränkt ist. Da vorausgesetzt wird, dass das Verfahren stabil und somit das Stabilitätskriterium aus Satz 3.3 erfüllt ist, müssen wir nur zeigen, dass (3.25) für $\zeta \rightarrow 1$ beschränkt bleibt. Das heißt, es ist $\zeta = \exp(-s\Delta t)$ für $\text{Re}(s) > 0$ und

$$|s\Delta t| =: \rho \leq \rho_0$$

für einen kleinen Parameter ρ_0 , etwa $\rho_0 = 1/4$.

Nach Lemma 3.1 ist

$$\omega_n = \int_{-\Delta t}^{\Delta t} f(n\Delta t + \theta) \Lambda(\theta) d\theta.$$

Damit gilt

$$\omega(\exp(-s\Delta t)) = \int_{-\Delta t}^{\Delta t} \sum_{n=0}^{\infty} f(n\Delta t + \theta) \exp(-s\Delta t n) \Lambda(\theta) d\theta.$$

Mit der modifizierten Poissonschen Summenformel aus Lemma 3.6 erhalten wir

$$\begin{aligned} \omega(\exp(-s\Delta t)) &= \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F\left(s + i2\pi \frac{n}{\Delta t}\right) \int_{-\Delta t}^{\Delta t} \exp\left(\left(i2\pi \frac{n}{\Delta t} + s\right)\theta\right) \Lambda(\theta) d\theta \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} F\left(s + i2\pi \frac{n}{\Delta t}\right) \frac{\exp(-s\Delta t) - 2 + \exp(s\Delta t)}{(2\pi i n + s\Delta t)^2}. \end{aligned}$$

Es ergibt sich, dass

$$\omega(\exp(-s\Delta t)) = F(s) (1 + c_1 \rho^2 + \mathcal{O}(\rho^4)) + c_2 \rho^2 + \mathcal{O}(\rho^4)$$

ist für eine Konstante $|c_1| \leq 1/12$ und eine Konstante c_2 , die

$$|c_2| \leq \frac{1}{6} \max_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \left| F\left(\frac{1}{\Delta t}(s\Delta t + i2\pi n)\right) \right|$$

erfüllt. Da $|F(s)|$ für $|s| \rightarrow \infty$ gleichmäßig gegen 0 strebt und die Singularitäten von F in einem beschränkten Gebiet liegen, kann Δt so gewählt werden dass c_2 klein ist.

Im Fall der kontinuierlichen Schrödingergleichung ist

$$\frac{1}{\gamma(\exp(-s\Delta t))} = -F\left(\frac{\delta(\exp(-s\Delta t))}{\Delta t}\right).$$

Für die Trapezregel gilt

$$\left| \frac{\delta(\exp(-s\Delta t))}{s\Delta t} \right| = 1 - \frac{1}{12} \rho^2 + \mathcal{O}(\rho^4).$$

Damit erhält man für $1 + \omega\gamma$

$$\begin{aligned} &1 + \omega(\exp(-s\Delta t))\gamma(\exp(-s\Delta t)) \\ &= \frac{F\left(\frac{\delta(\exp(-s\Delta t))}{s\Delta t} s\right) - F(s)(1 + c_1 \rho^2) - c_2 \rho^2}{F\left(\frac{\delta(\exp(-s\Delta t))}{s\Delta t} s\right)} \\ &= \frac{F(s(1 + \epsilon^2)) - F(s)(1 + c_1 \rho^2) - c_2 \rho^2}{F(s(1 + \epsilon^2))} \end{aligned}$$

mit $|\epsilon^2| = 1/12\rho^2 + \mathcal{O}(\rho^4)$. Nun ist

$$\begin{aligned} |F(s(1+\epsilon^2)) - F(s)| &= \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_S} \frac{F(\lambda)}{\lambda - s(1+\epsilon^2)} - \frac{F(\lambda)}{\lambda - s} d\lambda \right| \\ &= \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_S} \frac{F(\lambda)}{(\lambda - s)(\lambda - s(1+\epsilon^2))} d\lambda s\epsilon^2 \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \max_{\lambda \in \Gamma_S} |F(\lambda)| \frac{2}{s} \frac{3}{s} 2\pi \frac{s}{2} s\epsilon^2 \\ &\leq 3\epsilon^2 \max_{|\lambda - s| < |s/2|} |F(\lambda)|, \end{aligned}$$

wobei Γ_S ein Kreis um s mit Radius $|s/2|$ ist. Da $|\epsilon| < 1/6$ ist, gilt

$$\left| \frac{1}{\lambda - s(1+\epsilon^2)} \right| < \frac{3}{|s|}$$

für $\lambda \in \Gamma_S$.

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} &\frac{|1 + \omega(\exp(-s\Delta t))\gamma(\exp(-s\Delta t))|}{|(1 - \exp(-s\Delta t))|} \\ &\leq 3 \frac{\epsilon^2}{|(1 - \exp(-s\Delta t))|} \frac{\max_{\lambda \in \Gamma_S} |F(\lambda)|}{|F(s(1+\epsilon^2))|} \\ &\leq \frac{1}{2} \frac{\max_{\lambda \in \Gamma_S} |F(\lambda)|}{|F(s(1+\epsilon^2))|}. \end{aligned}$$

Da $\alpha = 0$ ist, gilt für die Funktion $F(s) = (ics)^{-1/2}$

$$\begin{aligned} \frac{\max_{|\lambda - s| < |s/2|} |F(\lambda)|}{|F(s(1+\epsilon^2))|} &= \frac{\max_{|\lambda - s| < |s/2|} |(ic\lambda)^{-1/2}|}{|(ics(1+\epsilon^2))^{-1/2}|} \\ &\leq \frac{\sqrt{1+\epsilon^2}\sqrt{2}|s^{-1/2}|}{|s^{-1/2}|} \\ &\leq 2. \end{aligned}$$

Da für $\zeta \rightarrow 1$ der Betrag von $\omega\gamma$ gegen -1 geht und dann $\omega\gamma - 1$ betragsmäßig durch 1 beschränkt ist, erhalten wir (ii).

Mit den beiden Aussagen (i) und (ii) können wir nun

$$E(x, \zeta) = V(x, \zeta) - \tilde{V}(x, \zeta)$$

abschätzen. Dazu wenden wir auf die Gleichung (3.23) zweimal die Parsevalformel an und erhalten aus (3.24)

$$\sum_{n=0}^{\infty} |e^n(0)|^2 \leq (\Delta t^2 C')^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^2 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 + \max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^3 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \right),$$

indem wir die höheren Zeitableitungen der analytischen Lösung über geeigneten Intervallen abschätzen.

Weil die ersten N_t Fehlerterme e^n , $n = 1, \dots, N_t$ nur von den ersten N_t berechneten Lösungswerten abhängen, gilt

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |e^n(0)|^2 \right)^{1/2} \\ & \leq \Delta t^2 C' \left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} \max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^2 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 + \max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^3 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \right)^{1/2} \\ & \leq \Delta t^2 C \left(\max_{\tau \in [0, N_t\Delta t]} \|\partial_t^2 v(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})} + \max_{\tau \in [0, n\Delta t]} \|\partial_t^3 u(\cdot, \tau)\|_{H^1(\mathbb{R})} \right). \end{aligned}$$

Damit folgt die Behauptung des Satzes. \square

3.8 Bemerkung. Im Beweis der Konvergenz benötigt man nur ganz zu Ende die Bedingung, dass $\alpha = 0$ ist. Um den Quotienten aus dem Maximum von F über einen Kreis um s mit Radius $|s/2|$ und F an der Stelle s zu beschränken, ist wesentlich, dass F nur in 0 einen Pol hat. Dadurch wird für den Fall, dass s gegen diesen Pol strebt, der Radius des Kreises proportional zu s kleiner.

Ist $\alpha \neq 0$, so hat F in ica^2 einen Pol. Der oben beschriebene Quotient bleibt dann nur unter der zusätzlichen Voraussetzung, dass der Realteil von s proportional zu ca^2 ist, beschränkt. Diese Bedingung an s führt zu größeren Konstanten in der Fehlerabschätzung und zu einem in t exponentiellen Fehlerwachstum.

3.2 Schrödingergleichung: Halbstrahl räumlich diskret

Wir wollen nun die Stabilität und Konvergenz des in x diskretisierten Verfahrens für die Schrödingergleichung auf dem Halbstrahl untersuchen. Dazu gehen wir wie im kontinuierlichen Fall vor.

3.2.1 Fehlergleichung

Gesucht ist die Lösung u_m der im Ort diskretisierten linearen Schrödingerleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t u_m(t) &= \delta_{xx} u_m(t) - \alpha^2 u_m(t) \\ &\text{für } m \in \mathbb{Z}, t \in [0, T] \text{ und } T > 0, \\ u_m(0) &= u_0(m\Delta x) \text{ für } m \in \mathbb{Z}, \\ u_m(t) &= 0 \text{ für } m \rightarrow \pm\infty, \end{aligned} \quad (3.26)$$

eingeschränkt auf den negativen Halbstrahl \mathbb{Z}_- . Das heißt wir suchen eine Lösung v^n der Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v_m(t) &= \delta_{xx} v_m(t) - \alpha^2 v_m(t) \\ &\text{für } -m \in \mathbb{N}, t \in [0, T] \text{ und } T > 0, \\ v_m(0) &= v_0(m\Delta x) \text{ für } -m \in \mathbb{N}_0, \\ v_m(t) &= 0 \text{ für } m \rightarrow -\infty, \\ v_0(t) &= \int_0^t \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{\Delta x}{1 - \chi_+}\right) (t - \tau) \delta_\nu v_{-1}(\tau) d\tau \text{ für } t \in [0, T]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Eine Zeitdiskretisierung der Differenzgleichung und der Randbedingung einmal mit dem schnellen Faltungsalgorithmus das andere Mal mit Hilfe der Faltungsquadratur führt zu Gleichungen für v_m^n und \tilde{v}_m^n . Die Bezeichnungen sind hierbei aus dem letzten Abschnitt übernommen.

Eine *zeta*-Transformation in t mit der Variablen ζ , $|\zeta| \leq 1$, des Fehlers $e_m^n = v_m^n - \tilde{v}_m^n$ ergibt mit den Definitionen des letzten Abschnitts

$$\gamma^2(\zeta) E_m(\zeta) = \delta_{xx} E_m(\zeta) \text{ für } -m \in \mathbb{N}, \quad (3.28)$$

$$E_0(\zeta) = \omega(\zeta) \delta_\nu (E_{-1}(\zeta) + \tilde{V}_{-1}(\zeta)) - \tilde{\omega}(\zeta) \delta_\nu \tilde{V}_{-1}(\zeta). \quad (3.29)$$

Zur Lösung der Differenzgleichung in x führt man eine *zeta*-Transformation bezüglich x mit Variabler durch. Bezeichnet man wie zuvor mit χ_- diejenige Wurzel von $1 - (2 + \Delta x^2 \gamma^2(\zeta)) \chi + \chi^2$ deren Betrag kleiner 1 ist, so erhält man

$$E_m(\zeta) = E_0(\zeta) \chi_-^{-m}.$$

$E_0(\zeta)$ lässt sich aus der Randbedingung

$$E_0(\zeta) = \omega(\zeta) \frac{E_0(\zeta) - E_0(\zeta) \chi_-}{\Delta x} + (\omega(\zeta) - \tilde{\omega}(\zeta)) \delta_\nu \tilde{V}_{-1}(\zeta)$$

berechnen. Für den Fehler gilt somit folgende Gleichung

$$E_m(\zeta) = \frac{\omega \frac{1 - \chi_+}{\Delta x} - 1}{1 - \omega \frac{1 - \chi_-}{\Delta x}} \tilde{V}_0(\zeta) \chi_-^{-m}, \quad (3.30)$$

wobei verwendet wurde, dass im diskreten Fall die erzeugende Funktion $\tilde{\omega}(\zeta)$ der Faltungsquadraturgewichte $\tilde{\omega}_n$ gegeben ist durch

$$\tilde{\omega}(\zeta) = F_\alpha \left(\frac{\delta(\zeta)}{\Delta t} \right) = \frac{\Delta x}{1 - \chi_+}$$

für die Laplacetransformierte F_α des diskreten Faltungskerns. Die zum schnellen Faltungsalgorithmus gehörenden Faltungsgewichte ω_n sind in Lemma 3.1 gegeben, falls man dort den diskreten Faltungskern verwendet.

3.2.2 Stabilität

Mit Hilfe der Fehlergleichung (3.30) ist es möglich ein Kriterium für die Stabilität anzugeben.

Zur Vorbereitung geben wir zuerst noch einige Definitionen und Eigenschaften der Fouriertransformation auf Folgen an. Für Folgen (u_n) und (v_n) definieren wir ein $H_{\Delta x}^1$ Skalarprodukt

$$\langle (u_n), (v_n) \rangle := \Delta x \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n \overline{v_n} + \delta_x u_n \overline{\delta_x v_n}, \quad (3.31)$$

wobei

$$\delta_x u_n := \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2\Delta x}$$

ist. Durch dieses Skalarprodukt wird die diskrete $H_{\Delta x}^1$ Norm induziert. Die Fouriertransformierte $\hat{u}(\xi)$ einer Folge (u_n) wird durch

$$\hat{u}(\xi) := \Delta x \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-in\Delta x\xi) u_n \quad (3.32)$$

definiert. Es gilt die Umkehrformel

$$u_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \exp(in\Delta x\xi) \hat{u}(\xi) d\xi \quad (3.33)$$

und die diskrete Parseval Gleichung

$$\Delta x \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n \overline{v_n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \hat{u}(\xi) \overline{\hat{v}(\xi)} d\xi. \quad (3.34)$$

Zum Beweis der Stabilität benötigen wir noch ein Lemma, ähnlich dem Lemma 3.2, das es erlaubt, ein Folgenglied durch die diskrete $H_{\Delta x}^1$ -Norm abzuschätzen.

3.9 Lemma. Für eine Folge (v_n) gilt

$$|v_0| \leq C_D \|v\|_{H_{\Delta x}^1},$$

wobei C_D unabhängig von Δx ist.

Beweis: Mit Hilfe der Fouriertransformation und der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung erhält man

$$\begin{aligned} |v_0| &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \hat{v}(\xi) d\xi \right| \\ &= \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{1}{\sqrt{1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2}} \sqrt{1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2} \hat{v}(\xi) d\xi \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{1}{1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2} d\xi \right)^{1/2} \\ &\quad \cdot \left(\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} (1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2) |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi \right)^{1/2} \\ &\leq 2 \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} (1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2) |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi \right)^{1/2} \\ &= C_D \|v\|_{H_{\Delta x}^1}, \end{aligned}$$

denn es ist

$$\frac{\sin(\xi\Delta x)}{\Delta x} > \frac{1}{\Delta x} \frac{2\Delta x}{\pi} \xi$$

für $\xi \in [0, \pi/(2\Delta x)]$ und damit

$$\begin{aligned} &\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{1}{1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2} d\xi \\ &= 4 \int_0^{\pi/(2\Delta x)} \frac{1}{1 + (\sin(\xi\Delta x)/\Delta x)^2} d\xi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&< 4 \int_0^{\pi/(2\Delta x)} \frac{1}{1 + (2\xi/\pi)^2} d\xi \\
&= 4 \int_0^{1/\Delta x} \frac{1}{1 + z^2} \frac{2}{\pi} dz \\
&< \frac{8}{\pi} \int_0^\infty \frac{1}{1 + z^2} dz \\
&= 4.
\end{aligned}$$

□

Mit diesen Vorbereitungen können wir nun den folgenden Satz zeigen.

3.10 Satz (Stabilität der vollständig diskretisierten Schrödingergleichung). *Falls*

$$\left| \frac{\omega \frac{1 - \chi_+}{\Delta x} - 1}{1 + \omega \frac{1 - \chi_-}{\Delta x}} \right| \leq C \quad |\zeta| \leq 1$$

ist für eine Konstante C unabhängig von Δt , so ist die Zeitdiskretisierung der in x diskretisierten Gleichung 3.2 im Sinne von Satz 3.3 stabil:

$$\left(\frac{1}{N_t + 1} \sum_{n=0}^{N_t} |e_m^n|^2 \right)^{1/2} \leq C' \|v^0\|_{H_{\Delta x}^1(\mathbb{R}_-)}$$

mit einer von m , Δx und Δt unabhängigen Konstanten C' .

Beweis: (Vergleiche den Beweis von Satz 3.3). Da $|\chi_-| \leq 1$ ist, reicht es, den Fehler am Rand e_0^n abzuschätzen. Wie im Beweis von 3.3 liefert das zweimalige Anwenden der Parsevalschen Gleichung

$$\sum_{n=0}^{\infty} |e_0^n|^2 \leq C^2 \sum_{n=0}^{\infty} |\tilde{v}_0^n|^2.$$

\tilde{v} ist hierbei die Lösung der vollständig mit der Trapezregel diskretisierten Gleichung (3.27).

Auch die in x diskretisierte auf ganz \mathbb{R} gegebene Schrödingergleichung ist kontraktiv, da mit Parseval

$$\begin{aligned}
&\operatorname{Re} \langle ic \delta_{xx} u, u \rangle_{H_{\Delta x}^1} \\
&= \operatorname{Re} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} ic \frac{\exp(-i\Delta x \xi) - 2 + \exp(i\Delta x \xi)}{\Delta x^2} \hat{u}(\xi) \overline{\hat{u}(\xi)} d\xi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \operatorname{Re} \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} ic \frac{-\sin^2(\Delta x \xi/2)}{\Delta x^2} \hat{u}(\xi) \overline{\hat{u}(\xi)} d\xi \\
&= 0
\end{aligned}$$

gilt. Damit folgt wie im Beweis von Satz 3.3 die Behauptung, wenn man anstelle von Lemma 3.2 die in Lemma 3.9 angegebene diskrete Variante verwendet. \square

Zur Berechnung von $\omega(\zeta)$ müssen wir jetzt die Reihendarstellung verwenden. Bereits im kontinuierlichen Fall wurde gezeigt, dass die zum schnellen Faltungsalgorithmus gehörenden Faltungsgewichte ω_n durch

$$\omega_n = I_n^0 + (I_n^1 - I_{n-1}^1) = I_n^0 + \nabla I_n^1$$

gegeben sind, wobei I_n^0 und I_n^1 durch

$$\begin{aligned}
I_n^0 &:= \int_{-1}^0 \mathcal{L}^{-1}(F_\alpha(\cdot))((n-\tau)\Delta t) \Delta t d\tau, \\
I_n^1 &:= \int_{-1}^0 \mathcal{L}^{-1}(F_\alpha(\cdot))((n-\tau)\Delta t) \tau \Delta t d\tau
\end{aligned}$$

für $n \geq 0$ und $\nabla I_n^1 := I_n^1 - I_{n-1}^1$ und $I_{-1}^1 := 0$ definiert sind.

Nach Voraussetzung lässt sich der Faltungskern f_α durch seine Laplacetransformierte über das Wegintegral entlang einer Talbotkontur berechnen, sodass gilt:

$$\begin{aligned}
I_n^0 &= \int_{-1}^0 \int_{\Gamma} F_\alpha(s) e^{s(n-\tau)\Delta t} ds \Delta t d\tau \\
&= \int_{\Gamma} F_\alpha(s) \int_{-1}^0 e^{s(n-\tau)\Delta t} d\tau \Delta t ds \\
&= \int_{\Gamma} F_\alpha(s) \frac{e^{s(n+1)\Delta t} - e^{sn\Delta t}}{s\Delta t} \Delta t ds \\
&= \int_{\Gamma} \frac{F_\alpha(s)}{s} e^{s(n+1)\Delta t} - \int_{\Gamma} \frac{F_\alpha(s)}{s} e^{sn\Delta t} ds \\
I_n^1 &= \int_{-1}^0 \int_{\Gamma} F_\alpha(s) e^{s(n-\tau)\Delta t} ds \tau \Delta t d\tau \\
&= \int_{\Gamma} F_\alpha(s) \int_{-1}^0 e^{s(n-\tau)\Delta t} \tau d\tau \Delta t ds \\
&= \int_{\Gamma} F_\alpha(s) \frac{e^{s(n+1)\Delta t} - s\Delta t e^{s\Delta t(n+1)} - e^{sn\Delta t}}{s^2 \Delta t^2} \Delta t ds \\
&= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_\alpha(s)}{s^2} e^{s(n+1)\Delta t} ds - \int_{\Gamma} \frac{F_\alpha(s)}{s} e^{s(n+1)\Delta t} ds - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_\alpha(s)}{s^2} e^{sn\Delta t} ds
\end{aligned}$$

Für $n \geq 1$ erhält man durch Einsetzen

$$\begin{aligned}
\omega_n &= I_n^0 + (I_n^1 - I_{n-1}^1) \\
&= \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s} e^{s(n+1)\Delta t} - \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s} e^{sn\Delta t} ds \\
&\quad + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{s(n+1)\Delta t} ds - \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s} e^{s(n+1)\Delta t} ds - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{sn\Delta t} ds \\
&\quad - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{sn\Delta t} ds + \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s} e^{sn\Delta t} ds + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{s(n-1)\Delta t} ds \\
&= \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{s(n+1)\Delta t} - 2 \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{sn\Delta t} ds + \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{s(n-1)\Delta t} ds \right) \\
&= \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s/\Delta t)}{s^2} e^{sn} (e^s - 2 + e^{-s}) ds.
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde dabei eine Variablensubstitution $s \leftrightarrow \Delta t s$ durchgeführt. Für $n = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= I_0^0 + I_0^1 \\
&= - \int_{\Gamma} \left(\frac{F_{\alpha}(s)}{s} + \frac{1}{\Delta t} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} \right) ds + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s)}{s^2} e^{s\Delta t} ds \\
&= \int_{\Gamma} \frac{F_{\alpha}(s/\Delta t)}{s^2} (e^s - 1 - s) ds.
\end{aligned}$$

Mit diesen Formeln lässt sich jetzt $\omega(\zeta)$ zumindest näherungsweise berechnen, wenngleich die Berechnung für $|\zeta| \approx 1$ ausgesprochen aufwendig ist, da sehr viele ω_n benötigt werden.

Das Ergebnis für die lineare Interpolation der Randdaten und die Trapezregel im Inneren ist in Abbildung 3.2 gezeigt. Dort ist Imaginärteil der Stabilitätsfunktion

$$\frac{\omega \frac{1 - \chi_+}{\Delta x} - 1}{1 - \omega \frac{1 - \chi_-}{\Delta x}}$$

gegen seinen Realteil für $|\zeta| = r$ und verschiedene α , Δt und Δx aufgetragen. Die äußerste Linie gehört dabei zu $r = 0.999$ und die innerste Linie zu $r = 0.3$. Für verschiedene α , Δt und Δx erhält man nun ähnliche Bereiche in der komplexen Ebene. Für kleine Δx ähneln diese denjenigen im kontinuierlichen Fall. Die Stabilitätsfunktion kann, wie schon die hier angegebenen Beispiele zeigen, Werte annehmen, deren Betrag größer als 1 ist.

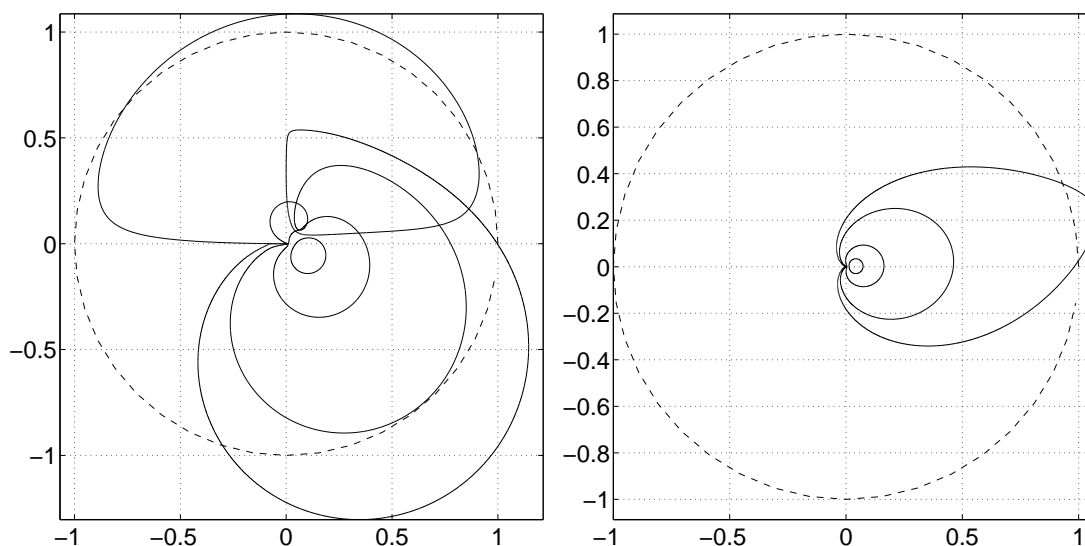


Abbildung 3.2: Werte der Stabilitätsfunktion entlang verschiedener Kreise $|\zeta| = r$. Linkes Bild für $c = 1$, $\Delta x = 1$, $\Delta t = 1$ und $\alpha = 1$ und rechts für $c = 1$, $\Delta x = 1/10$, $\Delta t = 1$ und $\alpha = 0$. Die gestrichelte Linie zeigt den Einheitskreis.

3.2.3 Konvergenz

Ebenfalls wie im kontinuierlichen Fall erhalten wir ein Konvergenzresultat.

3.11 Satz (Konvergenz für die vollständig diskretisierte Schrödingergleichung). *Falls die Lösung der Gleichung (3.27) mit $\alpha = 0$ in t glatt ist, die Ableitungen bezüglich t beschränkt bleiben, die Diskretisierung im Sinne von Satz 3.10 stabil und zusätzlich $c\Delta t/\Delta x^2 \geq 1$ ist, so gilt für den Fehler*

$$\left(\frac{1}{N_t} \sum_{n=0}^{N_t} |v_0(n\Delta t) - v_0^n|^2 \right)^{1/2} \leq \Delta t^2 C \left(\max_{\tau \in [0, \Delta t N_t]} \|\partial_t^2 u_{\Delta x}(\tau)\|_{H_{\Delta x}^1} + \max_{\tau \in [0, \Delta t N_t]} \|\partial_t^3 u_{\Delta x}(\tau)\|_{H_{\Delta x}^1} \right)$$

für eine von Δt und Δx unabhängige Konstante C . Hierbei ist $u_{\Delta x} = (u_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ die Lösung der räumlich diskretisierten Schrödingergleichung (3.26).

3.12 Bemerkung. Verglichen mit der Zeitdiskretisierung der im Raum kontinuierlichen Gleichung, benötigt man für den hier gegebene Beweis zur Konvergenz für die vollständig diskretisierte Gleichung eine zusätzliche Bedingung an das Verhältnis von Δt und Δx^2 , die für implizite Verfahren keine Einschränkung bedeutet.

Beweis des Satzes: siehe den Beweis von Satz 3.7.

Die Kontraktivität der in x diskretisierten Gleichung wurde bereits in Satz 3.10 nachgerechnet. Anstelle von Lemma 3.2 wird nun Lemma 3.9 verwendet.

Der auftretende Faktor

$$\frac{(1 - \zeta)}{\Delta t^2} \tilde{V}(0)$$

lässt sich wieder als *zeta*-Transformierte höherer Zeitableitungen schreiben.

Die Beschränktheit des Faktors

$$\frac{\omega \frac{1 - \chi_+}{\Delta x} - 1}{\left(1 + \omega \frac{1 - \chi_-}{\Delta x}\right) (1 - \zeta)^2}$$

kann man ebenfalls mit Hilfe der modifizierten Poissonschen Summenformel zeigen, wobei für die Laplacetransformierte F des diskreten Faltungskerns die Beschränktheit von

$$\frac{\max_{|\lambda-s| < |s|/2} |F(\lambda)|}{|F(s(1 + \epsilon))|}$$

nachzurechnen ist. Untersuchen wir zuerst den Zähler, wobei wir die Konstanten weglassen und $\eta := 4ic/\Delta x^2$ setzen :

$$\begin{aligned} & \max_{|\lambda-s| < |s|/2} \left| \frac{1}{\sqrt{\lambda}(\sqrt{\lambda} + \sqrt{\lambda - \eta})} \right| \\ &= \max_{|\lambda/|s| - s/|s| < 1/2} \left| \frac{1}{|s|} \frac{1}{\sqrt{\lambda/|s|}(\sqrt{\lambda/|s|} + \sqrt{\lambda/|s| - \eta/|s|})} \right| \end{aligned}$$

Wir führen nun neue Variablen ein: $\tilde{s} = s/|s|$ und $\tilde{\eta} = \eta/|s|$, sodass $|\tilde{s}| = 1$ und für $\rho < 1/4$ nach Voraussetzung $|\tilde{\eta}| \geq 16$ gilt. Damit ist

$$\begin{aligned} & \max_{|\lambda/|s| - s/|s| < 1/2} \left| \frac{1}{\sqrt{\lambda/|s|}(\sqrt{\lambda/|s|} + \sqrt{\lambda/|s| - \eta/|s|})} \right| \\ &= \max_{|\lambda - \tilde{s}| < 1/2} \left| \frac{1}{\sqrt{\lambda}(\sqrt{\lambda} + \sqrt{\lambda - \tilde{\eta}})} \right| \\ &\leq \sqrt{2} \max_{|\lambda - \tilde{s}| < 1/2} \left| \frac{1}{\sqrt{\lambda} + \sqrt{\lambda - \tilde{\eta}}} \right| \leq \sqrt{2} \frac{1}{\sqrt{3/2} + 1/2\sqrt{|\tilde{\eta}|}} \\ &\leq 4\sqrt{2} \frac{1}{1 + 2\sqrt{|\tilde{\eta}|}} \leq 4\sqrt{2} \left| \frac{1}{1 + \sqrt{1 + \tilde{\eta}}} \right| \\ &\leq 12\sqrt{2} \left| \frac{1}{\tilde{s} + \sqrt{\tilde{s} + \tilde{\eta}}} \right| \end{aligned}$$

Somit gilt

$$\max_{|\lambda-s| < |s|/2} |F(\lambda)| \leq 12\sqrt{2}|F(s)|,$$

wodurch wir für genügend kleines ϵ die Beschränktheit von

$$\frac{\max_{|\lambda-s| < |s|/2} |F(\lambda)|}{|F(s(1+\epsilon))|}$$

erhalten. □

3.13 Bemerkung. Für $\Delta x \rightarrow 0$ und festes ζ , $|\zeta| \leq 1$ gilt

$$\frac{\omega^{\frac{1-\chi_+}{\Delta x}} - 1}{1 + \omega^{\frac{1-\chi_-}{\Delta x}}} \rightarrow -\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma},$$

da dann $\Delta x/(1 - \chi_{\pm})$ gegen $\mp 1/\gamma$ geht, siehe hierzu die Bemerkung 1.1 auf Seite 20. Die Konvergenz ist nicht gleichmäßig in ζ .

3.3 Schrödingergleichung: Zwei nichtreflektierende Ränder

Anstelle des Modellproblems auf dem Halbstrahl soll nun das kontinuierliche Problem mit zwei nichtreflektierenden Randbedingungen in $-a$ und b untersucht werden. Wie im Modellproblem wird eine Fehlergleichung hergeleitet. Es zeigt sich, dass darin zusätzlich zu der bereits bekannten Stabilitätsfunktion noch ein weiterer Faktor auftritt.

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \partial_t v(x, t) &= \partial_{xx} v(x, t) - \alpha^2 v(x, t) \\ &\text{für } (x, t) \in [-a, b] \times [0, T] \text{ und } T > 0, \\ v(x, 0) &= v_0(x) \text{ für } x \in [-a, b], \\ v(-a, t) &= \int_0^t f_\alpha(t - \tau) \partial_\nu v(-a, \tau) d\tau \text{ für } t \in [0, T], \\ v(b, t) &= \int_0^t f_\alpha(t - \tau) \partial_\nu v(b, \tau) d\tau \text{ für } t \in [0, T]. \end{aligned}$$

Diskretisiert man obige Gleichung wie das Modellproblem in der Zeit, so erhält man eine Gleichung für $v^n(x)$ und $\tilde{v}^n(x)$, jeweils für $n = 0, \dots, N_t$ und $\Delta t = T/N_t$.

Die Gleichung auf dem Intervall $[-a, b]$ wird mit der Trapezregel in t diskretisiert. Diskretisiert man die Randbedingung mit Hilfe der Faltungsquadratur, wobei die zur Trapezregel gehörenden Faltungsgewichte verwendet werden, so bezeichnen wir die Lösung der so diskretisierten Gleichung mit \tilde{v}^n . Wird die Randbedingung mit dem schnellen Faltungsalgorithmus diskretisiert, so erhält man eine Gleichung für v^n . Setzt man nun wie zuvor $e^n(x) := v^n(x) - \tilde{v}^n(x)$ und führt eine *zeta*-Transformation in t durch mit Variable ζ , $|\zeta| \leq 1$, so ergibt sich mit den selben Bezeichnungen wie im Modellproblem

$$\begin{aligned}\gamma^2 E(x, \zeta) &= \partial_{xx} E(x, \zeta), \\ E(-a, \zeta) &= \omega \partial_\nu E(-a, \zeta) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a, \zeta), \\ E(b, \zeta) &= \omega \partial_\nu E(b, \zeta) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(b, \zeta).\end{aligned}\tag{3.35}$$

Die Lösung der Differentialgleichung (3.35) ist nun

$$E(x) = c_1 e^{-\gamma(x+a)} + c_2 e^{\gamma(x+a)}.$$

Es ist

$$c_1 + c_2 = E(-a) \text{ und } \gamma c_1 - \gamma c_2 = \partial_\nu E(-a)$$

und damit

$$c_1 = \frac{E(-a) + \partial_\nu E(-a)/\gamma}{2} \text{ und } c_2 = \frac{E(-a) - \partial_\nu E(-a)/\gamma}{2}.$$

Setzt man die Randbedingung ein, so erhält man

$$c_1 = \frac{\omega \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a) + \partial_\nu E(-a)/\gamma}{2}$$

und

$$c_2 = \frac{\omega \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a) - \partial_\nu E(-a)/\gamma}{2}.$$

Insgesamt ergibt sich nach Auswertung in b

$$\begin{aligned}E(b) &= \frac{(\omega + 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{-\gamma(b+a)} \\ &\quad + \frac{(\omega - 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{\gamma(b+a)} \\ &= \omega \partial_\nu E(b) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(b) \\ &= \omega \partial_x E(b) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(b),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E(b) &= \omega \left((-\gamma) \frac{(\omega + 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{-\gamma(b+a)} \right. \\
&\quad \left. + \gamma \frac{(\omega - 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{\gamma(b+a)} \right) \\
&\quad + (\omega(\zeta) - \tilde{\omega}(\zeta)) \partial_\nu \tilde{V}(b, \zeta).
\end{aligned}$$

Zieht man beide Gleichungen für $E(b)$ voneinander ab, so erhält man

$$\begin{aligned}
0 &= (1 + \omega\gamma) \frac{(\omega + 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{-\gamma(b+a)} \\
&\quad + (1 - \omega\gamma) \frac{(\omega - 1/\gamma) \partial_\nu E(-a) + (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(-a)}{2} e^{\gamma(b+a)} \\
&\quad - (\omega - \tilde{\omega}) \partial_\nu \tilde{V}(b).
\end{aligned}$$

Es ist dann

$$\begin{aligned}
\partial_\nu E(-a) &= \\
&\quad \frac{\gamma(\omega - \tilde{\omega}) \left((1 + \omega\gamma) \partial_\nu \tilde{V}(-a) e^{-\gamma(b+a)} + (1 - \omega\gamma) \partial_\nu \tilde{V}(-a) e^{\gamma(b+a)} - 2 \partial_\nu \tilde{V}(b) \right)}{(1 - \omega\gamma)^2 e^{\gamma(b+a)} - (1 + \omega\gamma)^2 e^{-\gamma(b+a)}} \\
&= \frac{(1 + \omega\gamma) \left((1 + \omega\gamma) \partial_\nu \tilde{V}(-a) e^{-\gamma(b+a)} + (1 - \omega\gamma) \partial_\nu \tilde{V}(-a) e^{\gamma(b+a)} - 2 \partial_\nu \tilde{V}(b) \right)}{(1 - \omega\gamma)^2 e^{\gamma(b+a)} - (1 + \omega\gamma)^2 e^{-\gamma(b+a)}}.
\end{aligned}$$

Damit $\partial_\nu E(-a)$ beschränkt bleibt, muss wie im Modellproblem

$$\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \tag{3.36}$$

betragsmäßig beschränkt sein. Vertauscht man a und b , so erhält man die selbe Bedingung für die Beschränktheit von $\partial_\nu E(b)$. Die Frage ist nun, ob diese Bedingung hinreichend ist.

Man hat drei Terme zu untersuchen.

$$\begin{aligned}
&\frac{(1 + \omega\gamma)^2 \partial_\nu \tilde{V}(-a) e^{-\gamma(b+a)}}{(1 - \omega\gamma)^2 e^{\gamma(b+a)} - (1 + \omega\gamma)^2 e^{-\gamma(b+a)}} \\
&= \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \right)^2 \frac{1}{1 - e^{-2\gamma(b+a)} \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \right)^2} e^{-2\gamma(b+a)} \partial_\nu \tilde{V}(-a),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{(1 + \omega\gamma)(1 - \omega\gamma)\partial_\nu \tilde{V}(-a)e^{\gamma(b+a)}}{(1 - \omega\gamma)^2 e^{\gamma(b+a)} - (1 + \omega\gamma)^2 e^{-\gamma(b+a)}} \\
&= \frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma} \frac{1}{1 - e^{-2\gamma(b+a)} \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma}\right)^2} \partial_\nu \tilde{V}(-a) \quad \text{und} \\
& \frac{-2(1 + \omega\gamma)\partial_\nu \tilde{V}(b)}{(1 - \omega\gamma)^2 e^{\gamma(b+a)} - (1 + \omega\gamma)^2 e^{-\gamma(b+a)}} \\
&= -\frac{1 + \omega\gamma}{(1 - \omega\gamma)^2} \frac{1}{1 - e^{-2\gamma(b+a)} \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma}\right)^2} e^{-\gamma(b+a)} \partial_\nu \tilde{V}(b).
\end{aligned}$$

Bis auf den dort jeweils auftretenden Faktor

$$\frac{1}{1 - e^{-2\gamma(b+a)} \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma}\right)^2} \tag{3.37}$$

sind alle anderen wie schon im Modellproblem beschränkt. Damit dieser beschränkt bleibt, muss

$$\left| 1 - e^{-2\gamma(b+a)} \left(\frac{1 + \omega\gamma}{1 - \omega\gamma}\right)^2 \right| > c' > 0$$

für eine Konstante c' sein. Es ist $\operatorname{Re}(\gamma(\zeta)) \geq 0$ für $|\zeta| \leq 1$. Jedoch gilt für $\zeta = \exp(i\phi)$ und $\phi \in [-\pi, 0]$, das heißt, falls ζ auf dem unteren Einheitshalbkreis liegt, dass $\delta(\zeta)$ auf der positiven imaginären Achse liegt. Damit ist für solche Werte $\operatorname{Re}(\gamma(\zeta)) = 0$ und somit $|e^{-2\gamma(b+a)}| = 1$.

Die berechneten Werte der Stabilitätsfunktion für die Trapezregel sind betragsmäßig durch 1 beschränkt, wie schon die Abbildung 3.1 zeigt. Für $\alpha = 0$ sind die Werte der Stabilitätsfunktion betragsmäßig echt kleiner als 1, sodass der Faktor (3.37) beschränkt ist. Für größer werdendes $c\alpha^2 \Delta t$ nähern sich die Werte der Stabilitätsfunktion für ζ auf dem unteren Einheitshalbkreis von innen dem Einheitskreis. Dieses Verhalten der Stabilitätsfunktion zeigt Abbildung 3.3.

Der Wert von (3.37) kann mit wachsendem α , das heißt im Fall der zweidimensionalen Schrödinger-Gleichung bei hohen Fouriermoden, abhängig von $a + b$ betragsmäßig groß werden. Dazu muss

$$\overline{e^{-\gamma(\zeta)(b+a)}} \approx \frac{1 + \omega(\zeta)\gamma(\zeta)}{1 - \omega(\zeta)\gamma(\zeta)}$$

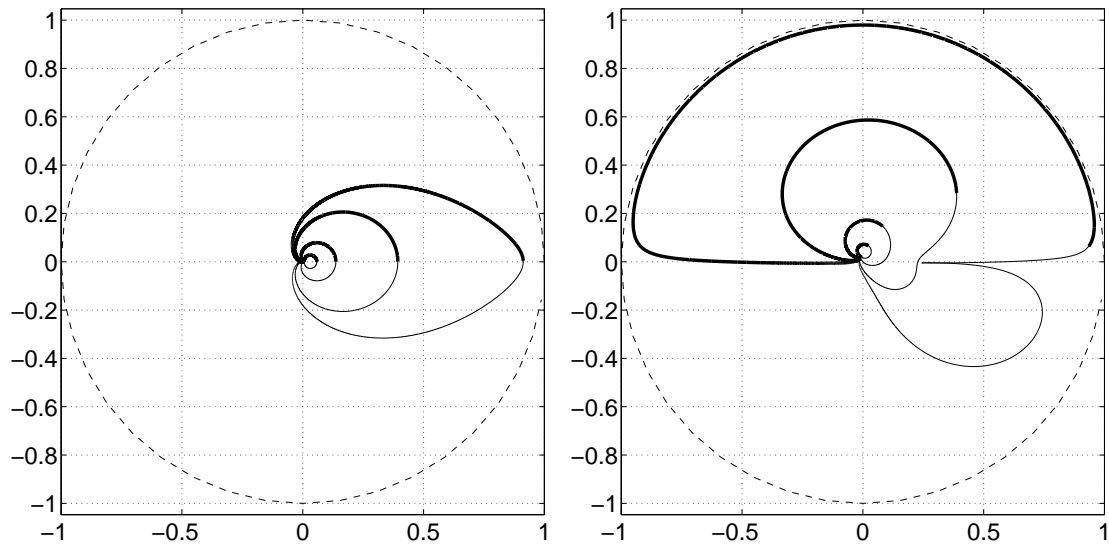


Abbildung 3.3: Werte der Stabilitätsfunktion für $c\alpha^2\Delta t = 0$ (links) und für $c\alpha^2\Delta t = 10$ (rechts) – fett gedruckten Linien gehören zu ζ aus der unteren Einheitshalbkreis-scheibe – und Einheitskreis (gestrichelte Linie).

sein.

Wie beim Modellproblem erhalten wir ein Stabilitätsresultat für eine andere kompliziertere Stabilitätsfunktion, von der jedoch nicht zu erwarten ist, dass sie unabhängig von α und $a + b$ beschränkt ist.

3.4 Wellengleichung und Maxwellgleichung

Da am Rand, für den eine nichtreflektierende Randbedingung gelten soll, in tangentialer Richtung für die diskretisierte Gleichung eine Fouriertransformation durchgeführt wird, reicht es, den eindimensionalen Fall zu untersuchen. Allerdings müssen die Abschätzungen dann gleichmäßig für jeden Fourierkoeffizienten gelten.

Bei einer Zeitdiskretisierung mit einem A-stabilen Verfahren erhalten wir die gleichen Ergebnisse wie für die Schrödingergleichung. Es ist im Fall der Wellen- und Maxwellgleichung aber das Leap-Frog Verfahren von Interesse. Da dieses nicht A-stabil ist, müssen wir von vornherein das in x diskretisierte System untersuchen. Der Vergleich zur mittels Faltungsquadratur erhaltenen Randbedingung, der uns

bei der Schrödingergleichung im homogenen Fall sehr einfach ein Stabilitätskriterium liefert, funktioniert hier nicht mehr. Es kann hier nur gezeigt werden, dass in einer Fülle numerischer Experimente die vorgestellten nichtreflektierenden Randbedingungen nicht zu einer Verschiebung der Stabilitätsschranke des Leap-Frog Verfahrens geführt haben. Abbildung 3.4 zeigt Δt gegen $\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$ für die zwei-

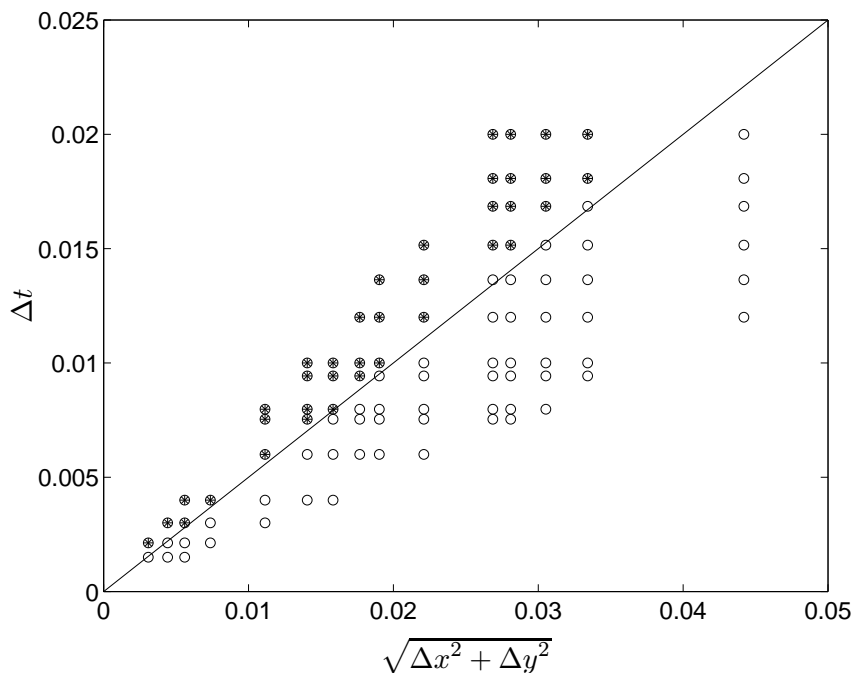


Abbildung 3.4: Stabilität für zweidimensionale Wellengleichung.

mensionale Wellengleichung. Gefüllte Kreise zeigen an, dass das Verfahren für diese Werte instabil wurde, leere Kreise bezeichnen Paare von Δt und $\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$, die zu keiner Explosion der Lösung führten. Hierbei ist $\Delta x \approx \Delta y$, $c = 1$ und $T = 1$.

Kapitel 4

Vollständige Diskretisierung und numerische Beispiele

In diesem Kapitel präsentieren wir numerische Beispiele zur ein- und zweidimensionalen Schrödinger-Gleichung und zur zwei- und dreidimensionalen Wellengleichung. Um die Qualität nichtreflektierender Randbedingungen zu untersuchen reicht es den homogenen Fall, $\beta \equiv 0$, zu betrachten.

4.1 Schrödinger-Gleichung

4.1.1 Eindimensionale Schrödinger-Gleichung – vollständige Diskretisierung

Durch die lineare eindimensionale Schrödinger-Gleichung wird beispielsweise die Ausbreitung einer Lichtwelle in einem Filmwellenleiter näherungsweise beschrieben. Es bezeichnet dann t die Ausbreitungsrichtung der Welle in einem durch β beschriebenen Material. Typischerweise ist die Inhomogenität β von der Form

$$\beta(x, t, u) = n(x, t)u(x, t),$$

wobei sich der Brechungsindex $n(x, t)$ nur langsam in t ändert und wie gefordert kompakten Träger bezüglich x hat. Auch die Voraussetzung, dass der Startwert u_0

kompakten Träger hat, ist näherungsweise erfüllt. Zur Herleitung der Fresnelgleichung aus der Maxwellgleichung wird auf den Abschnitt 2 in [19] verwiesen.

Zur Diskretisierung verwenden wir die Trapezregel in t und finite Differenzen in x . Setzt man

$$v_m^n := v(-a + m\Delta x, n\Delta t) \quad \text{für } m = 0, 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

für die Lösung der diskretisierten Gleichung und

$$\beta_m^n := \beta(-a + m\Delta x, n\Delta t, v_m^n) \quad \text{für } m = 0, 1, \dots, M, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

so erhält man aus (1.5):

$$\begin{aligned} \frac{i}{c} \frac{v_m^{n+1} - v_m^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left(\frac{v_{m+1}^{n+1} - 2v_m^{n+1} + v_{m-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{v_{m+1}^n - 2v_m^n + v_{m-1}^n}{\Delta x^2} \right. \\ &\quad \left. + (\beta_m^{n+1} - \alpha^2)v_m^{n+1} + (\beta_m^n - \alpha^2)v_m^n \right) \end{aligned}$$

für $m = 1, \dots, M-1, n = 0, 1, 2, \dots,$

$$v_m^0 = u_0(-a + m\Delta x) \quad \text{für } m = 0, \dots, M,$$

$$v_0^{n+1} = \int_0^{(n+1)\Delta t} f_\alpha((n+1)\Delta t - \tau)(v_0^\tau - v_1^\tau) d\tau,$$

$$v_M^{n+1} = \int_0^{(n+1)\Delta t} f_\alpha((n+1)\Delta t - \tau)(v_M^\tau - v_{M-1}^\tau) d\tau,$$

wobei v^τ die lineare Interpolation von v in Gitterpunkten $0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$ bezeichnet.

Die Randbedingung wird mit dem in Kapitel 2 vorgestellten Verfahren berechnet.

Sortiert man anschließend nach v^{n+1} , so erhält man

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{n+1} + \left(-2 + \Delta x^2 \left(\beta_m^{n+1} - \alpha^2 - \frac{2ic}{\Delta t} \right) \right) v_m^{n+1} + v_{m-1}^{n+1} \\ = -v_{m+1}^n + \left(2 - \Delta x^2 \left(\beta_m^n - \alpha^2 + \frac{2ic}{\Delta t} \right) \right) v_m^n - v_{m-1}^n \end{aligned} \quad (4.1)$$

für $m = 1, \dots, M-1, n = 0, 1, 2, \dots,$

$$v_m^0 = u_0(-a + m\Delta x) \quad \text{für } m = 0, \dots, M,$$

$$v_{0,M}^{n+1} - \phi_2(\alpha) (v_{0,M}^{n+1} - v_{1,M-1}^{n+1})$$

$$\begin{aligned}
&= (\phi_1(\alpha) - \phi_2(\alpha)) (v_{0,M}^n - v_{1,M-1}^n) \\
&\quad + \underbrace{\int_0^{n\Delta t} f_\alpha((n+1)\Delta t - \tau)(v_{0,M}^\tau - v_{1,M-1}^\tau) d\tau}_{\text{berechnet mit dem Faltungsalgorithmus}}
\end{aligned}$$

mit den in Abschnitt 2.3 in Gleichung (2.10) definierten ϕ_1 und ϕ_2 .

Für den Fall der Dirichlet-nach-Neumann Randbedingungen müssen die naheliegenden Faltungskerne, die man einfach durch Invertierung der Neumann-nach-Dirichletkerne erhält, modifiziert werden. Die Inversen der in der Zusammenstellung zu Beginn von Kapitel 2 gegebenen Faltungskerne erfüllen nicht mehr die Bedingungen, die zur Berechnung der inversen Laplacetransformation mittels Talbotkonturen notwendig sind.

Die Modifikation geschieht durch Hervorheben eines Faktors $i/c\partial_t + \alpha^2$. Dadurch erreicht man für die Schrödingergleichung, dass die modifizierte Laplacetransformierte \tilde{F}_α des kontinuierlichen Dirichlet-nach-Neumannkerns wieder gleichmäßig gegen Null abfällt.

Für den diskreten Kern geht \tilde{F}_α für $|s| \rightarrow \infty$ gegen eine Konstante. Diese Konstante fällt bei der Integration über die Talbotwege weg und beim direkten Schritt des Faltungsalgorithmus wird zur Berechnung von ϕ_1 und ϕ_2 der Kern so abgeändert, dass er für große Argumente gleichmäßig gegen Null geht.

Es ist

$$v_{0,M}^{n+1} - v_{1,M-1}^{n+1} = (i/c\partial_t + \alpha^2) \int_0^{(n+1)\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n+1)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau$$

mit $\tilde{F}_\alpha(s) = 1/(F_\alpha(s)(is/c + \alpha^2))$. Man beachte, dass \tilde{F}_α dieselben Singularitäten wie F_α besitzt.

Die Ableitung bezüglich t wird mit Hilfe eines durch α_i und β_i gegebenen Mehrschrittverfahrens diskretisiert:

$$\begin{aligned}
&\sum_{l=0}^L \alpha_l \left(v_{0,M}^{n+1-l} - v_{1,M-1}^{n+1-l} - \alpha^2 \int_0^{(n+1-l)\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n+1-l)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \\
&= ic \frac{1}{\Delta t} \sum_{l=0}^L \beta_l \int_0^{(n+1-l)\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n+1-l)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau.
\end{aligned}$$

In den numerischen Beispielen wird dazu der implizite Euler, das BDF(2)-Verfahren und die Trapezregel verwendet. Letztere liefert die besten Ergebnisse.

Als Randbedingung erhält man bei Diskretisierung mit dem impliziten Euler Verfahren

$$\begin{aligned} & v_{0,M}^{n+1} - v_{1,M-1}^{n+1} \\ &= \left(\frac{i}{c\Delta t} + \alpha^2 \right) \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^{n+1} + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^n \int_0^{n\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n+1)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \\ &\quad - \frac{i}{c\Delta t} \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^n + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^{n-1} + \int_0^{(n-1)\Delta t} \tilde{f}_\alpha(n\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right), \end{aligned}$$

mit dem BDF(2)-Verfahren

$$\begin{aligned} & v_{0,M}^{n+1} - v_{1,M-1}^{n+1} \\ &= \left(\frac{3i}{2c\Delta t} + \alpha^2 \right) \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^{n+1} + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^n + \int_0^{n\Delta t} \tilde{f}_\alpha((m+1)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \\ &\quad - \frac{2i}{c\Delta t} \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^n + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^{n-1} + \int_0^{(n-1)\Delta t} \tilde{f}_\alpha(n\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \\ &\quad + \frac{i}{2c\Delta t} \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^{n-1} + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^{n-2} + \int_0^{(n-2)\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n-1)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \end{aligned}$$

und mit der Trapezregel

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(v_{0,M}^{n+1} - v_{1,M-1}^{n+1}) + \frac{1}{2}(v_{0,M}^n - v_{1,M-1}^n) \\ &= \left(\frac{i}{c\Delta t} + \frac{1}{2}\alpha^2 \right) \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^{n+1} + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^n + \int_0^{n\Delta t} \tilde{f}_\alpha((n+1)\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right) \\ &\quad + \left(\frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{i}{c\Delta t} \right) \left(\tilde{\phi}_2 v_{0,M}^n + (\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) v_{0,M}^{n-1} + \int_0^{(n-1)\Delta t} \tilde{f}_\alpha(n\Delta t - \tau) v_{0,M}^\tau d\tau \right), \end{aligned}$$

wobei $\tilde{\phi}_1$ und $\tilde{\phi}_2$ die durch (2.10) definierten zu \tilde{F}_α gehörigen Faktoren für den direkten Schritt des schnellen Faltungsalgorithmus sind.

4.1.2 Numerisches Beispiel

Zu den Parametern $c = 1/14$, $a = 2$, $\alpha = 0$ und für $\beta \equiv 0$ berechnen wir die Ausbreitung der in Abbildung 4.1 gezeigten Welle, die unter einem Winkel von 65°

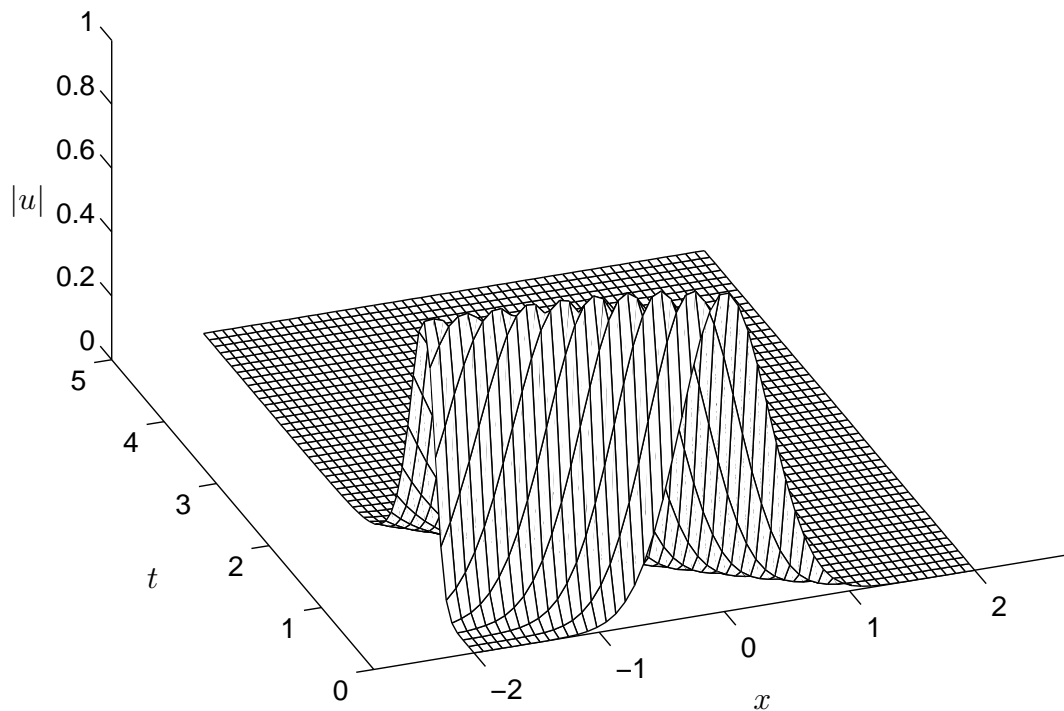


Abbildung 4.1: Ausbreitung einer Gaußschen Wellen. Gezeigt ist $|u|$ der Betrag des Feldes über der (x,t) -Ebene.

Grad nach links läuft, wobei der Anfangswert u_0 durch

$$u_0(x) = \exp\left(-4x^2 - i\frac{\tan(65^\circ)x}{2c}\right) \quad (4.2)$$

gegeben ist.

Als Maß für die Qualität der hier vorgestellten nichtreflektierenden Randbedingungen ist es sinnvoll, den Energieabfall $E(t)/E(0)$ beziehungsweise seine diskrete Variante E^n/E^0 zu verwenden, wobei

$$E(t) := \int_{-a}^a |u(x,t)|^2 dx$$

und

$$E^n := \frac{1}{M} \sum_{m=0}^M |u_m^n|^2$$

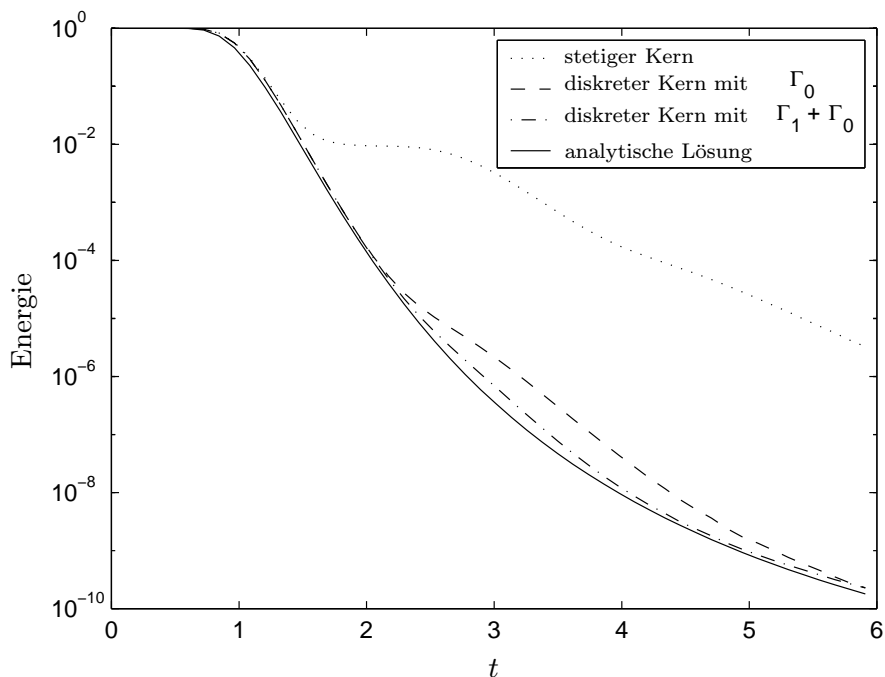


Abbildung 4.2: Energieabfall für verschiedene Faltungskerne.

sind.

Für den kontinuierlichen und den diskreten Faltungskern der Neumann-nach-Dirichlet Abbildung (NtD) ist der Energieabfall in Abbildung 4.2 gezeigt. Beim diskreten Kern sind zusätzlich die beiden Varianten, Berücksichtigen der entfernten Singularität und Nichtberücksichtigen der entfernten Singularität angegeben.

Hierzu werden 160 Gitterpunkte in x - und 400 Gitterpunkte in t -Richtung verwendet. Für den Faltungsalgorithmus wird $N = 10$ und $B = 10$ gewählt. Die Parameter für die Talbotkonturen werden wie in Abschnitt 2.2 auf $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 8$ gesetzt. Abbildung 4.2 zeigt deutlich, dass der diskrete Faltungskern im Vergleich zum kontinuierlichen Kern weit bessere Ergebnisse liefert. Man sieht auch, dass der Beitrag von Γ_1 vernachlässigt werden kann, wie es die Diskussion in Abschnitt 2.2.2 und Satz 2.1 nahelegt.

Für den stetigen Faltungskern erhält man in Abhängigkeit von Δx , M ist die Anzahl der Diskretisierungspunkte für die x -Komponente, den in Abbildung 4.3 gezeigten Energieabfall.

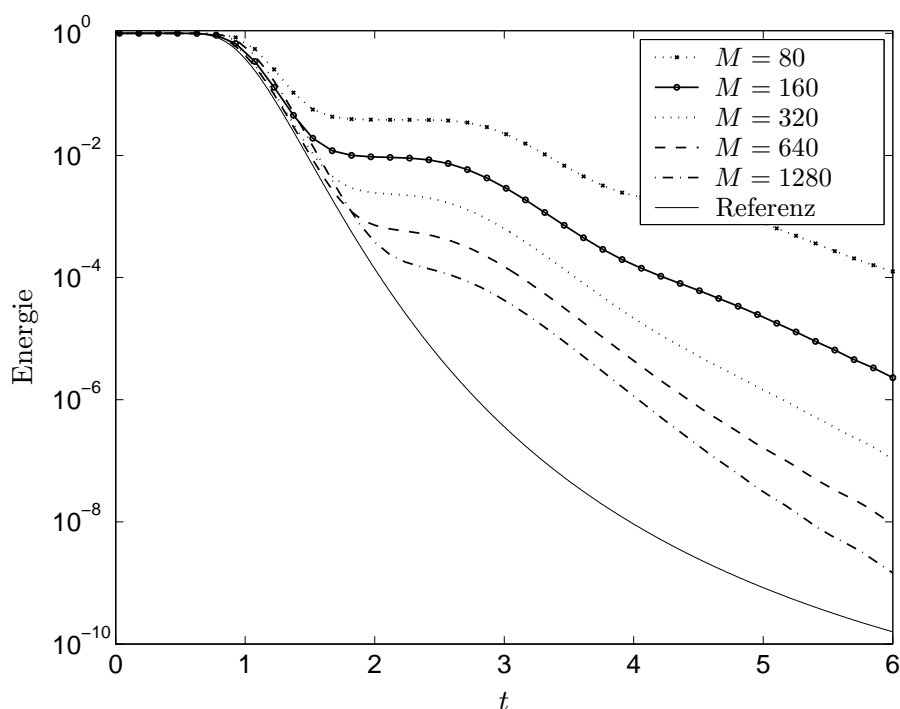


Abbildung 4.3: Energieabfall für den stetigen Kern abhängig von Δx .

Die Beispielrechnung wird mit 400 Zeitschritten, $B = 5$, $N = 25$ und allen anderen Parametern wie oben durchgeführt. Es zeigt sich, dass selbst bei relativ feiner Ortsdiskretisierung bei Verwendung des stetigen Faltungskerns immer noch starke Reflektionen auftreten. Der diskrete Faltungskern liefert dazu im Vergleich sehr viel bessere Ergebnisse und das bei gleichem Aufwand, sofern man Γ_1 vernachlässigt.

Um die Abhängigkeit unserer Randbedingungen von Δt zu untersuchen, verwenden wir den diskreten Faltungskern unter Berücksichtigung seiner beiden Singularitäten. Es werden 160 Punkte zur Diskretisierung in x - und je N_t Schritte in t -Richtung verwendet. Die Parameter für den Faltungsalgorithmus sind $B = 5$, $N = 25$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 8$. Wir verwenden zwei verschiedene α , und wie erwartet sind die Reflektionen für großes α stärker. Man sieht in Abbildung 4.4 zudem deutlich, dass bei zu großen Zeitschrittweiten der Energieabfall zu spät eintritt, was damit zusammenhängt, dass die Wanderungsgeschwindigkeit der berechneten Welle im Vergleich zur Referenz, der analytischen Lösung, zu langsam ist.

Die Abhängigkeit von der Anzahl der Punkte N auf einer Talbotkontur und von

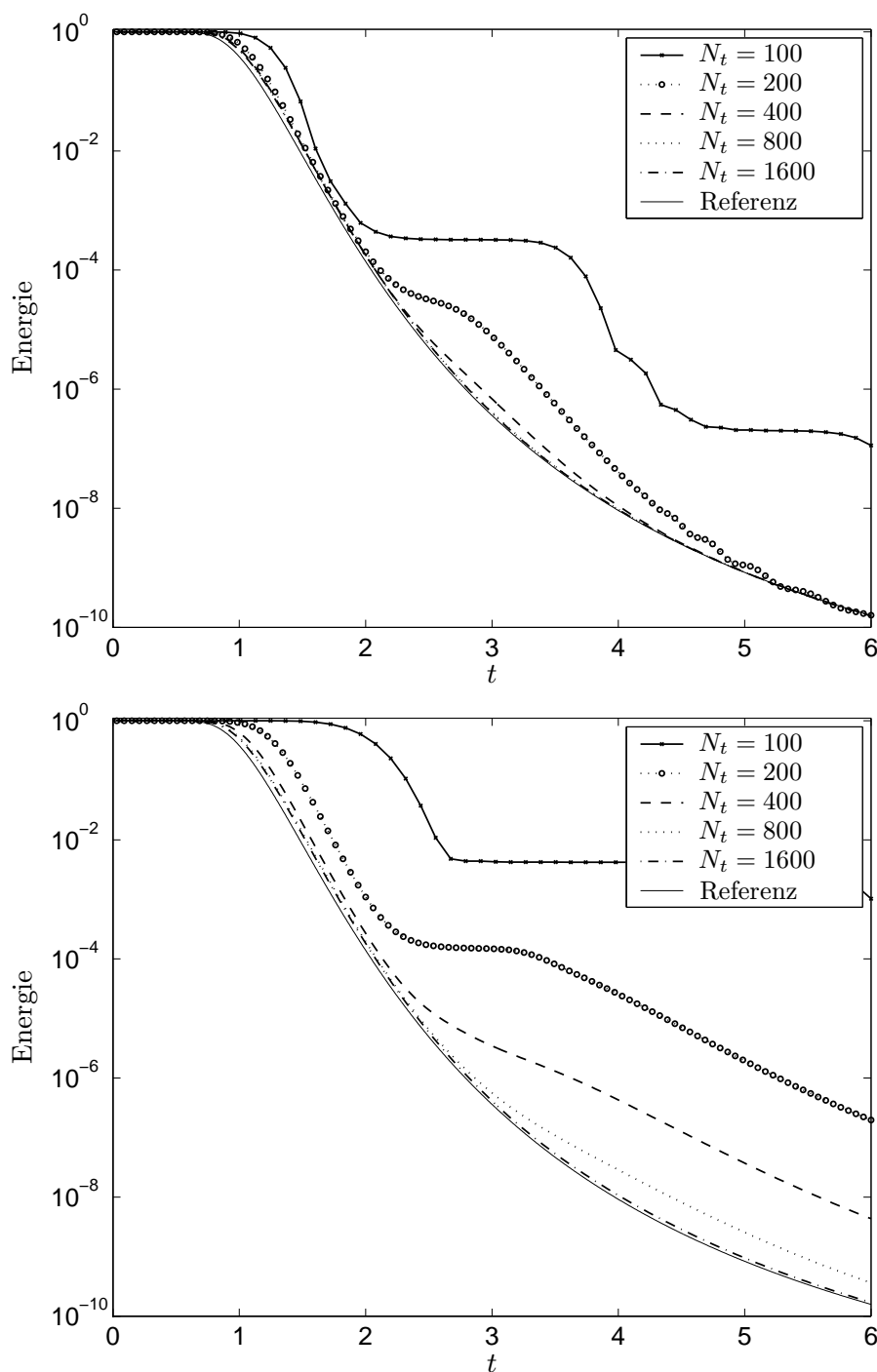
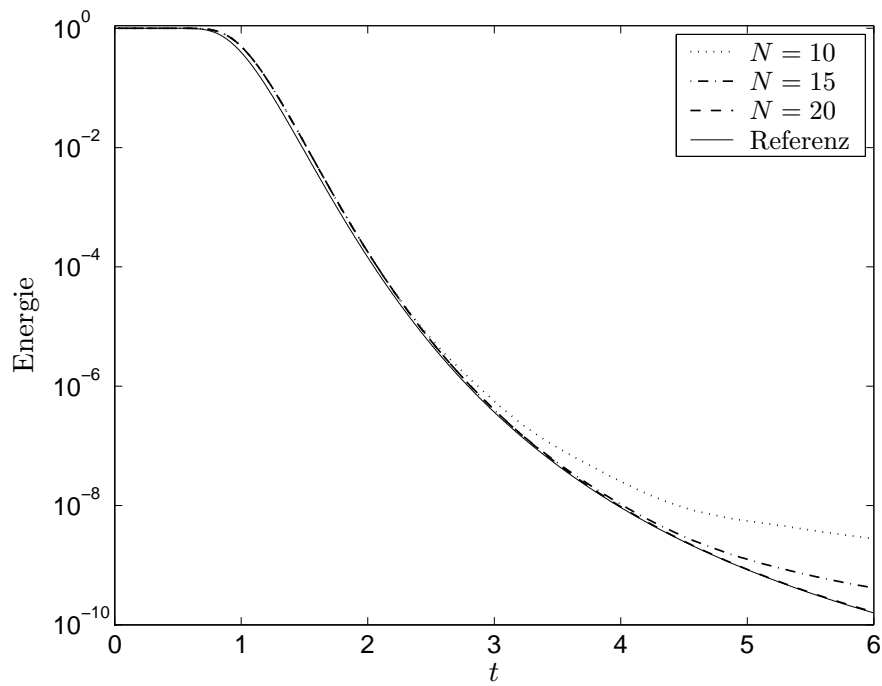
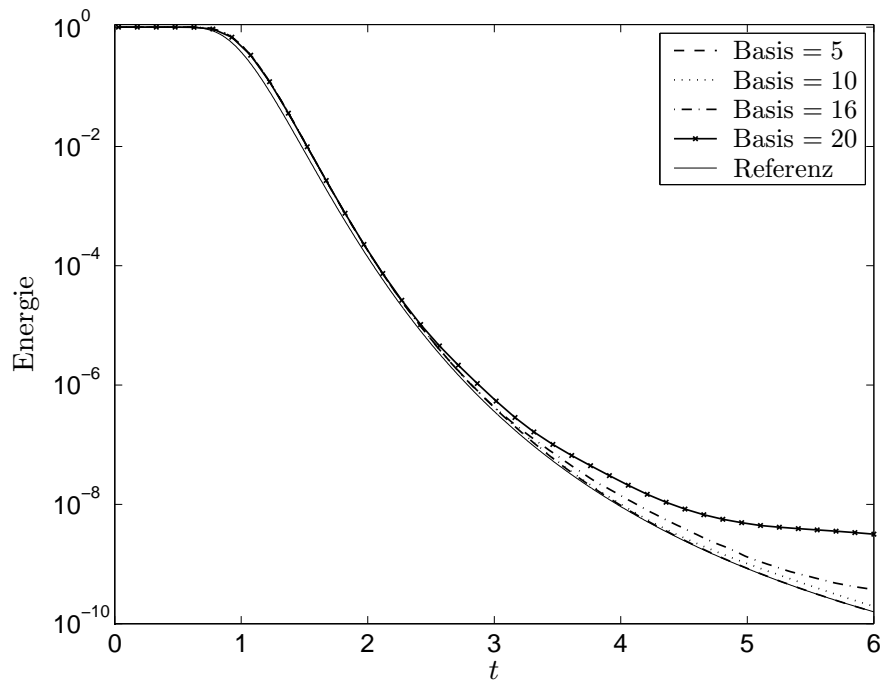


Abbildung 4.4: Energieabfall in Abhängigkeit von Δt , unten für großes α^2 , oben für $\alpha = 0$.

Abbildung 4.5: Energieabfall für verschiedene N .Abbildung 4.6: Energieabfall für verschiedene B .

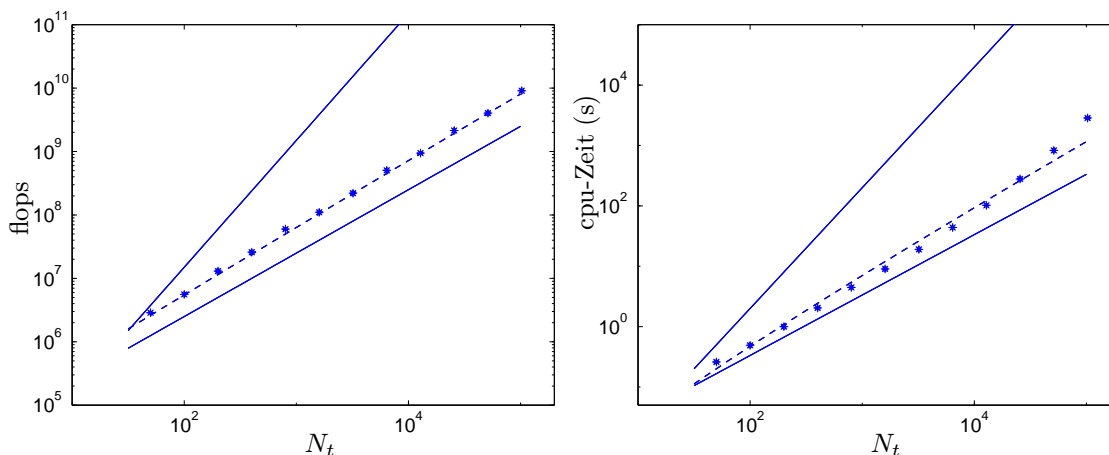


Abbildung 4.7: Flops gegen N_t . (Erläuterung im Text.)

Abbildung 4.8: Rechenzeit in Sekunden gegen N_t . (Erläuterung im Text.)

der Basis B ist in den Abbildungen 4.5 und 4.6 gezeigt. In dieser Rechnung wird eine Diskretisierung mit 160 Gitterpunkten in x -Richtung und 800 Zeitschritten verwendet. Der Parameter μ_0 wurde jeweils auf 8 und ν_0 auf 0.6 gesetzt.

Abbildung 4.5 gibt den Energieabfall für $B = 20$ und verschiedene N wieder.

In Abbildung 4.6 ist für $N = 10$ und verschiedene Werte B der Energieabfall gezeigt.

Der Aufwand für den Algorithmus ist nach Konstruktion $\mathcal{O}(N_t \log(N_t))$. Um das zu zeigen ist in Abbildung 4.8 die Rechenzeit gegen die Anzahl der Zeitdiskretisierungsschritte N_t und in Abbildung 4.7 die Anzahl der flops als Funktion von N_t jeweils durch Sterne gekennzeichnet aufgetragen.

Dabei wird beide Male $N = 10$ und $B = 10$ gewählt. Die beiden durchgezogenen Linien sind Geraden mit Steigung 1 und 2 und gehören damit zu Verfahren mit Aufwand $\mathcal{O}(N_t)$ und $\mathcal{O}(N_t^2)$. Die gestrichelte Linie ist die Funktion $C_1 N_t + C_2 N_t \log(N_t)$, wobei C_1 und C_2 Konstanten sind. Die Implementierung ist in MATLAB und die Rechenzeiten wurden auf einem Athlon 1600 gemessen.

Die Ergebnisse für die Dirichlet-nach-Neumann Formulierung der nichtreflektierenden Randbedingung sind, was die Abhängigkeit des Energieabfalls von Δt , Δx , N , B und den verwendeten Faltungskernen betrifft, denjenigen für die NtD Formulierung sehr ähnlich und sollen deshalb nicht extra aufgeführt werden.

Bei der Diskretisierung der Zeitableitung vor dem Faltungsintegral gibt es mehrere Möglichkeiten. Die Diskretisierung mit der Trapezregel liefert die besten Ergebnisse, siehe Abbildung 4.9. Hierbei wurden 200 Zeitschritte und für die Ortsdiskretisie-

160 Punkte verwendet. Bei einer feineren Zeitdiskretisierung gleichen sich die Kurven für das BDF(2)-Verfahren und die Trapezregel sehr stark aneinander an, da beide Verfahren Ordnung 2 haben. Die Parameter des Faltungsalgorithmus werden $N = 25$, $B = 5$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 8$ gewählt.

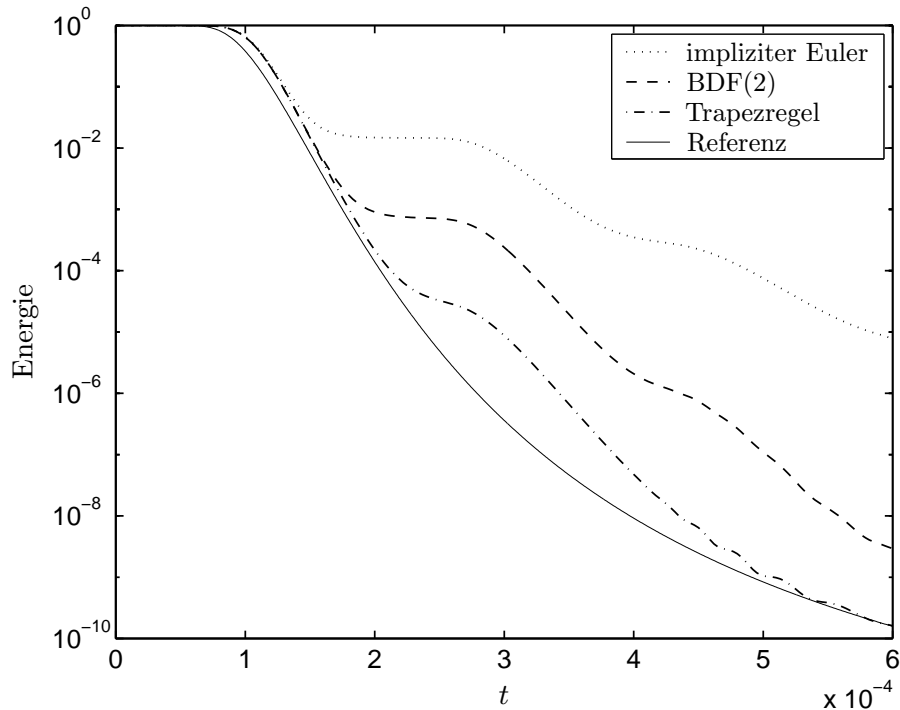


Abbildung 4.9: Energieabfall für die DtN Formulierung der Randbedingung in Abhängigkeit von der verwendeten Diskretisierung der Ableitung vor dem Faltungsintegral.

4.1.3 Zweidimensionale Schrödingergleichung – vollständige Diskretisierung

Für die Zeitdiskretisierung verwenden wir wieder die Trapezregel und zur Diskretisierung des Laplaceoperators den Standard-Fünfpunktstern. Setzt man

$$v_{m,l}^n := v(-a + m\Delta x, l\Delta y, n\Delta t)$$

für $m = 0, \dots, M$, $l = 0, 1, \dots, (L-1), L$, $n = 0, 1, 2, \dots$

und

$$\beta_{m,l}^n := \beta(-a + m\Delta x, l\Delta y, n\Delta t, v_{m,l}^n)$$

für $m = 0, \dots, M$, $l = 0, 1, \dots, (L-1), L$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

wobei $\Delta x = 2a/M$ und $\Delta y = p/L$ ist, so erhält man aus (1.13)

$$i c \frac{v_{m,l}^{n+1} - v_{m,l}^n}{\Delta t}$$

$$= \frac{1}{2}(\delta_{xx} v_{m,l}^{n+1} + \delta_{yy} v_{m,l}^{n+1} + \delta_{xx} v_{m,l}^n + \delta_{yy} v_{m,l}^n + \beta_{m,l}^{n+1} + \beta_{m,l}^n - \alpha^2(v_{m,l}^n + v_{m,l}^{n+1}))$$

für $m = 0, \dots, M$, $l = 0, 1, \dots, (L-1), L$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

$$v_{m,l}^0 = u_0(-a + m\Delta x, l\Delta y),$$

mit $v_{m,0}^n = v_{m,L}^n$ und $v_{m,L+1}^n = v_{m,1}^n$, da v als p periodisch in y angenommen wird. Mit δ_{xx} und δ_{yy} werden die zweiten finiten Differenzen wie in Kapitel 1 bezeichnet. Um die Diskretisierung der Randbedingung anzugeben führen wir die folgende Abkürzungen ein. Mit \mathbf{v}_m^n bezeichnet man den aus $v_{m,l}^n$ bestehenden Vektor.

$$\mathbf{v}_m^n := \begin{bmatrix} v_{m,1}^n \\ \vdots \\ v_{m,L}^n \end{bmatrix}$$

Die diskrete Fouriertransformation \mathcal{F} und ihre Inverse \mathcal{F}^{-1} wird auf einem Vektor wie folgt erklärt

$$\mathcal{F}(\mathbf{v}) := \hat{\mathbf{v}} \quad \text{mit} \quad \hat{v}_k := \sum_{l=1}^L \exp\left(-i2\pi \frac{(k-1)(l-1)}{L}\right) v_l \quad \text{für } k = 1, \dots, L,$$

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathbf{v}})_l := \mathbf{v} \quad \text{mit} \quad v_l := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \exp\left(i2\pi \frac{(l-1)(k-1)}{L}\right) \hat{v}_k \quad \text{für } l = 1, \dots, L.$$

Diese Definition ist die von MATLAB für die dort implementierte schnelle Fouriertransformation verwendete. Weiter sei

$$\mathbf{E} := \text{diag} \left((-1)^{l-1} \right)_{l=1}^L$$

eine Diagonalmatrix aus 1 und -1 . Damit erhält man als Randbedingung

$$\mathbf{v}_{0,M}^{n+1} - \mathbf{E} \mathcal{F}^{-1}(\Phi_2 \mathcal{F}(\mathbf{E}(\mathbf{v}_{0,M}^{n+1} - \mathbf{v}_{1,M-1}^{n+1})))$$

$$= \mathbf{E} \mathcal{F}^{-1} \left((\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F}(\mathbf{E}(\mathbf{v}_{0,M}^n - \mathbf{v}_{1,M-1}^n)) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right)$$

oder äquivalent

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}\mathbf{v}_{0,M}^{n+1} - \mathcal{F}^{-1}(\Phi_2 \mathcal{F}(\mathbb{E}(\mathbf{v}_{0,M}^{n+1} - \mathbf{v}_{1,M-1}^{n+1}))) \\ &= \mathcal{F}^{-1} \left((\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F}(\mathbb{E}(\mathbf{v}_{0,M}^n - \mathbf{v}_{1,M-1}^n)) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right), \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} \Phi_2 &:= \text{diag} \left(\frac{1}{\Delta t} \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{F_k(\cdot)}{(\cdot)^2} \right) (\Delta t) \right)_{k=1}^L \\ \Phi_1 &:= \text{diag} \left(\mathcal{L}^{-1} \left(\frac{F_k(\cdot)}{(\cdot)} \right) (\Delta t) \right)_{k=1}^L \end{aligned}$$

und hierfür die inverse Laplacetransformation an der Stelle $t = \Delta t$ mit Hilfe des Verfahrens von Talbot berechnet wird. Der Vektor $\mathbf{q}_m^n(j)$ wird mit dem schnellen Faltungsalgorithmus berechnet und ist wie folgt definiert

$$\mathbf{q}_{0,M}^n(j) := \begin{bmatrix} q_1^n(j)_{0,M} \\ \vdots \\ q_L^n(j)_{0,M} \end{bmatrix},$$

mit

$$\begin{aligned} q_k^n(j)_{0,M} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{k,j}} e^{s\Delta t(1+\sum_{l=1}^{j-1} b_l B^{l-1})} \\ & y_{k,(\sum_{l=j+1}^K b_l B^{l-1})\Delta t}^{0,M} \left(\left(\sum_{l=j}^K b_l B^{l-1} \right) \Delta t \right) (F_{\alpha_k}(\cdot)) ds. \end{aligned}$$

Hierbei sind die b_l natürliche Zahlen zwischen 1 und B , sodass man die zur Basis B gehörige Parkettierung erhält, und $y_{k,a}^{0,M}$ ist die mit dem in Abschnitt 2.3 in Gleichung (2.9) angegebenen Verfahren mit Schrittweite Δt berechnete Lösung der Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{y}(\tau) &= S_k y(\tau) + \mathcal{F} \left(E \left(\frac{\mathbf{v}_{0,N}^\tau - \mathbf{v}_{1,N-1}^\tau}{\Delta x} \right) \right) (k) \\ y(a) &= 0, \end{aligned}$$

wobei die Fouriertransformierte der äußeren Normalenableitung linear interpoliert wird.

Führt man die Zeitdiskretisierung der Zeitableitung des Faltungsintegrals bei der DtN Randbedingung mit einem der Trapezregel ähnlichem Verfahren durch, so

erhält man

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\Delta x} (\mathbf{v}_{0,M}^{n+1} - \mathbf{v}_{1,M-1}^{n+1}) - \mathbf{E}\mathcal{F}^{-1} \left(\left(\frac{ic}{\Delta t} + \frac{1}{2}\mathbf{K}^2 \right) \tilde{\Phi}_2 \mathcal{F}(\mathbf{E}\mathbf{v}_{0,M}^{n+1}) \right) \\
&= -\frac{1}{2} (\mathbf{v}_{0,M}^n - \mathbf{v}_{1,M-1}^n) \\
&+ \mathbf{E}\mathcal{F}^{-1} \left(\left(\frac{ic}{\Delta t} + \frac{1}{2}\mathbf{K}^2 \right) \left((\tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2) \mathcal{F}(\mathbf{E}\mathbf{v}_{0,M}^n) + \sum_{j=1}^K \tilde{\mathbf{q}}_{0,M}^{n+1}(j) \right) \right) \\
&- \left(\frac{ic}{\Delta t} - \frac{1}{2}\mathbf{K}^2 \right) \left(\tilde{\Phi}_2 \mathcal{F}(\mathbf{E}\mathbf{v}_{0,M}^n) + (\tilde{\Phi}_1 - \tilde{\Phi}_2) \mathcal{F}(\mathbf{E}\mathbf{v}_{0,M}^{n-1}) + \sum_{j=1}^K \tilde{\mathbf{q}}_{0,M}^n(j) \right),
\end{aligned}$$

wobei \mathbf{K}^2 die Diagonalmatrix ist, die man durch Diagonalisierung mittels Fouriertransformation aus der zweiten Ableitung, beziehungsweise aus den finiten Differenzen in y -Richtung erhält.

$$\mathbf{K}^2 = \text{diag} \left(\left(\frac{2 \sin \left(k \frac{\pi}{L} \right)}{\Delta y} \right)^2 + \alpha^2 \right)_{k=1}^L$$

Außerdem müssen jeweils die modifizierten Faltungkerne \tilde{F}_α angedeutet durch $\tilde{\Phi}$ und \tilde{q} verwendet werden. Wie bei der eindimensionalen Schrödingergleichung ist es selbstverständlich auch hier möglich, die Ableitung nach t vor dem Faltungsintegral auf andere Weise zu diskretisieren. Allerdings liefert auch hier die Trapezregel, verglichen mit dem impliziten Euler und dem BDF(2)-Verfahren, die besten Ergebnisse.

4.1.4 Numerisches Beispiel

Zu den Parametern $c = 1/15$, $a = 0.5$, $p = 1.5$, $\alpha = 0$ und für $\beta \equiv 0$ berechnen wir die Ausbreitung einer Gaußschen Welle, die unter einem Winkel von 65° Grad nach links läuft, wobei der Anfangswert u_0 durch

$$u_0(x, y) = \exp \left(-4(x^2 + (y - p/2)^2) - i \frac{\tan(65^\circ)x}{2c} \right) \quad (4.3)$$

gegeben ist. Die Parameter sind so gewählt, dass sich das Maximum der zweidimensionalen Gaußverteilung in der Mitte des Berechnungsfensters $[-a, a] \times [0, p]$ befindet.

Wir betrachten wieder den Energieabfall $E(t)/E(0)$, wobei

$$E(t) := \int_{-b}^b \int_{-a}^a |u(x, y, t)|^2 dx dy$$

ist, der durch E^n/E^0 approximiert wird, mit der diskreten Energie

$$E^n := \frac{1}{ML} \sum_{m=0}^M \sum_{l=0}^L |u_{m,l}^n|^2.$$

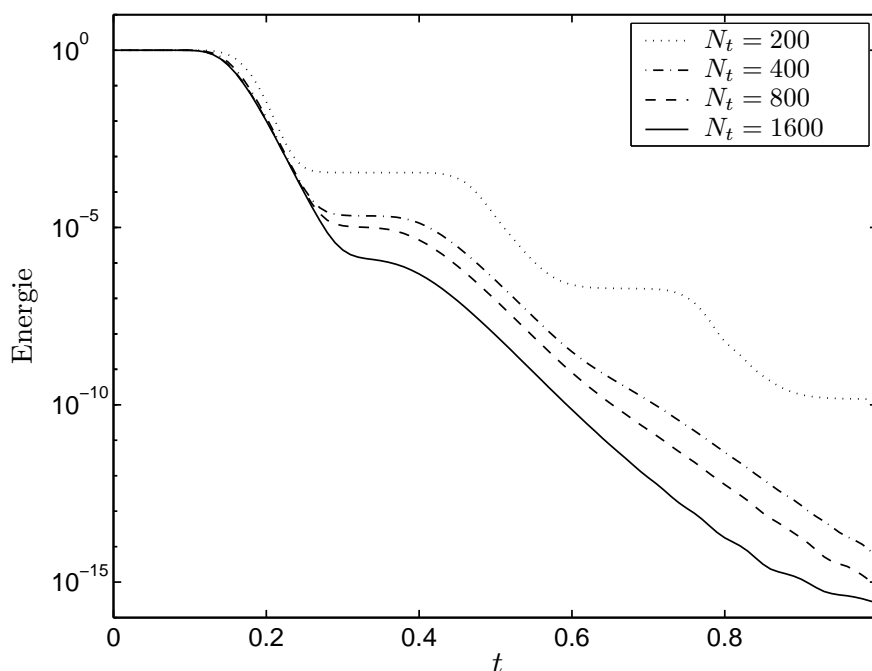
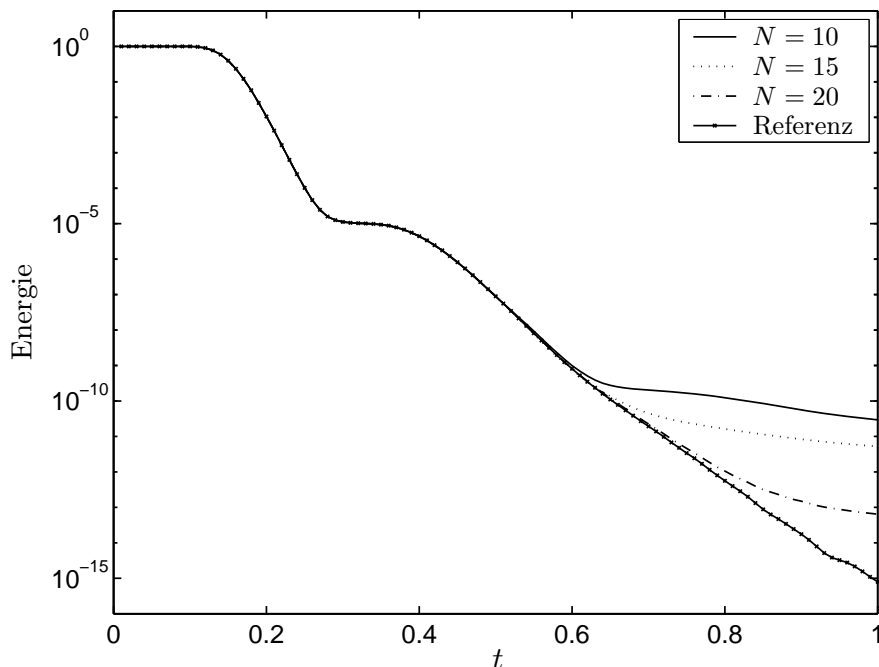


Abbildung 4.10: Energieabfall abhängig von Δt .

Abbildung 4.10 zeigt den Energieabfall abhängig von Δt . Es ist $\Delta t = 1/N_t$. Man sieht, dass bei kleinen Schrittweiten nur noch wenig Energie am Rand reflektiert wird. Zu große Schrittweiten führen wie im eindimensionalen Fall dazu, dass die Wanderungsgeschwindigkeit der berechneten Welle zu langsam ist. Eine genauere Betrachtung des Feldes würde ergeben, dass die Reflektionen Anteile der Welle zu höheren Fouriermoden sind. Für das in 4.10 gezeigte Beispiel werden 129 Punkte in x -Richtung und 160 Punkte in y -Richtung verwendet. Die Parameter des Faltungsalgorithmus sind $B = 5$, $N = 25$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 8$.

Abbildung 4.11: Energieabfall abhängig von N .

Der Energieabfall abhängig von N , der Anzahl der Punkte auf einer Talbotkontur, ist in Abbildung 4.11 gezeigt. Die Ortsdiskretisierung ist hierbei wie im obigen Beispiel gewählt und die Anzahl der Zeitschritte beträgt 800. Für den schnellen Faltungsalgorithmus wird $B = 10$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 8$ gesetzt.

Die Reflektion etwa zur Zeit $t = 0.3$ ist auf die Zeitdiskretisierung zurückzuführen, wie die mit $B = 5$ und $N = 25$ berechnete Referenz zeigt

4.2 Wellengleichung

4.2.1 Zweidimensionale Wellengleichung – vollständige Diskretisierung

Bei der zweidimensionalen Wellengleichung verwendet man zur Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung das Leap-Frog Verfahren

$$\frac{1}{c^2} \delta_{tt} v_{m,l}^n = \delta_{xx} v_{m,l}^n + \delta_{yy} v_{m,l}^n + \beta_{m,l}^n.$$

Wie bei der zweidimensionalen Schrödingergleichung bezeichnen v_{ml}^n und β_{ml}^n Approximationen an v und β in Gitterpunkten.

$$v_{m,l}^n := v(-a + m\Delta x, l\Delta y, n\Delta t)$$

für $m = 0, \dots, M$, $l = 0, 1, \dots, (L-1), L$, $n = 0, 1, 2, \dots$

und

$$\beta_{m,l}^n := \beta(-a + m\Delta x, l\Delta y, n\Delta t, v_{m,l}^n)$$

für $m = 0, \dots, M$, $l = 0, 1, \dots, (L-1), L$, $n = 0, 1, 2, \dots$,

wobei $\Delta x = 2a/M$ und $\Delta y = p/L$ ist. Wie oben definieren wir

$$\delta_{xx}v(x) := \frac{v(x - \Delta x) - 2v(x) + v(x + \Delta x)}{\Delta x^2}.$$

und ebenso δ_{yy} und δ_{tt} . Zur Formulierung der Randbedingung verwenden wir wieder den Vektor \mathbf{v} , sowie die diskrete Fouriertransformation, ihre Inverse und die Matrizen E , Φ_1 , Φ_2 und K^2 . Die Neumann nach Dirichlet Randbedingung wird dann zu

$$\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} = E\mathcal{F}^{-1}\left(\Phi_2\mathcal{F}\left(E\left(\mathbf{v}_{(1,M-1)}^{n+1} - \mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1}\right)\right) + (\Phi_1 - \Phi_2)\mathcal{F}\left(E\left(\mathbf{v}_{(1,M-1)}^n - \mathbf{v}_{(0,M)}^n\right)\right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j)\right).$$

Da im Inneren des Rechengebietes ein explizites Verfahren verwendet wird, sollte auch die Randbedingung explizit sein. Dazu extrapoliert man Differenzen der Randwerte \mathbf{v} konstant oder linear. Damit erhält man

$$\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} = E\mathcal{F}^{-1}\left(\Phi_1\mathcal{F}\left(E\left(\mathbf{v}_{(1,M-1)}^n - \mathbf{v}_{(0,M)}^n\right)\right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j)\right),$$

beziehungsweise bei linearer Extrapolation

$$\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} = E\mathcal{F}^{-1}\left((\Phi_1 + \Phi_2)\mathcal{F}\left(E\left(\mathbf{v}_{(1,M-1)}^n - \mathbf{v}_{(0,M)}^n\right)\right) - \Phi_2\mathcal{F}\left(E\left(\mathbf{v}_{(1,M-1)}^{n-1} - \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1}\right)\right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j)\right).$$

Die Dirichlet-nach-Neumann Randbedingung lässt sich, falls man die zweite Zeitableitung vor dem Faltungsintegral mit einem Leap-Frog-artigem Verfahren diskretisiert, wie folgt formulieren:

$$\mathbf{v}_{(0,M)}^n - \mathbf{v}_{(1,M-1)}^n =$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{E}\mathcal{F}^{-1} \left(\left(\frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left(\Phi_2 \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right) \right. \\ & + \left(\mathbf{K}^2 - 2 \frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left(\Phi_2 \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^n(j) \right) \\ & \left. + \left(\frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left(\Phi_2 \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-2} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n-1}(j) \right) \right). \end{aligned}$$

Diese Randbedingung ist explizit. Löst man nach $\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1}$ auf, so erhält man

$$\begin{aligned} & \mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} \\ & = \mathbf{E}\mathcal{F}^{-1} \left[\left(\left(\frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \Phi_2 \right)^{-1} \left\{ \mathcal{F} \left(\mathbf{E} \left(\mathbf{v}_{(0,M)}^n - \mathbf{v}_{(1,M-1)}^n \right) \right) \right. \right. \\ & - \left(\frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left((\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right) \\ & - \left(\mathbf{K}^2 - 2 \frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left(\Phi_2 \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^n(j) \right) \\ & \left. \left. - \left(\frac{c^2}{\Delta t^2} \right) \left(\Phi_2 \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} \left(\mathbf{E}\mathbf{v}_{(0,M)}^{n-2} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n-1}(j) \right) \right\} \right]. \end{aligned}$$

Man beachte, dass Φ_2 als Diagonalmatrix leicht invertiert werden kann. Durch andere Diskretisierungen des Operators $\mathbf{K}^2 + \partial_{tt}$ lassen sich weitere explizite Randbedingungen herleiten. Man könnte etwa die Approximation

$$(\mathbf{K}^2 + \partial_{tt})v \approx \left(\frac{\mathbf{K}^2}{4} + \frac{1}{\Delta t^2} \right) v^{n-1} + \left(\frac{\mathbf{K}^2}{2} - \frac{2}{\Delta t^2} \right) v^n + \left(\frac{\mathbf{K}^2}{4} + \frac{1}{\Delta t^2} \right) v^{n+1}$$

verwenden.

4.2.2 Numerisches Beispiel

In unseren Beispielen setzen wir die Ausbreitungsgeschwindigkeit $c = 1$, die Periode in y -Richtung $p = 1.5$ und $a = 1/2$. Für die Anfangsauslenkung u_0 wird

$$u_0 = \begin{cases} \exp \left(- \frac{(\sqrt{x^2+y^2}-q_1)^2}{\sqrt{x^2+y^2}-q_2} \right) & a < \sqrt{x^2+y^2} < b \\ 0 & \sqrt{x^2+y^2} \geq b \\ 1 & \sqrt{x^2+y^2} \leq a \end{cases}$$

gewählt, wobei $q_1 \geq 0$ relativ klein und $q_2 \approx a/4$ ist. Man erhält folgenden in Abbildung 4.12 gezeigten Film.

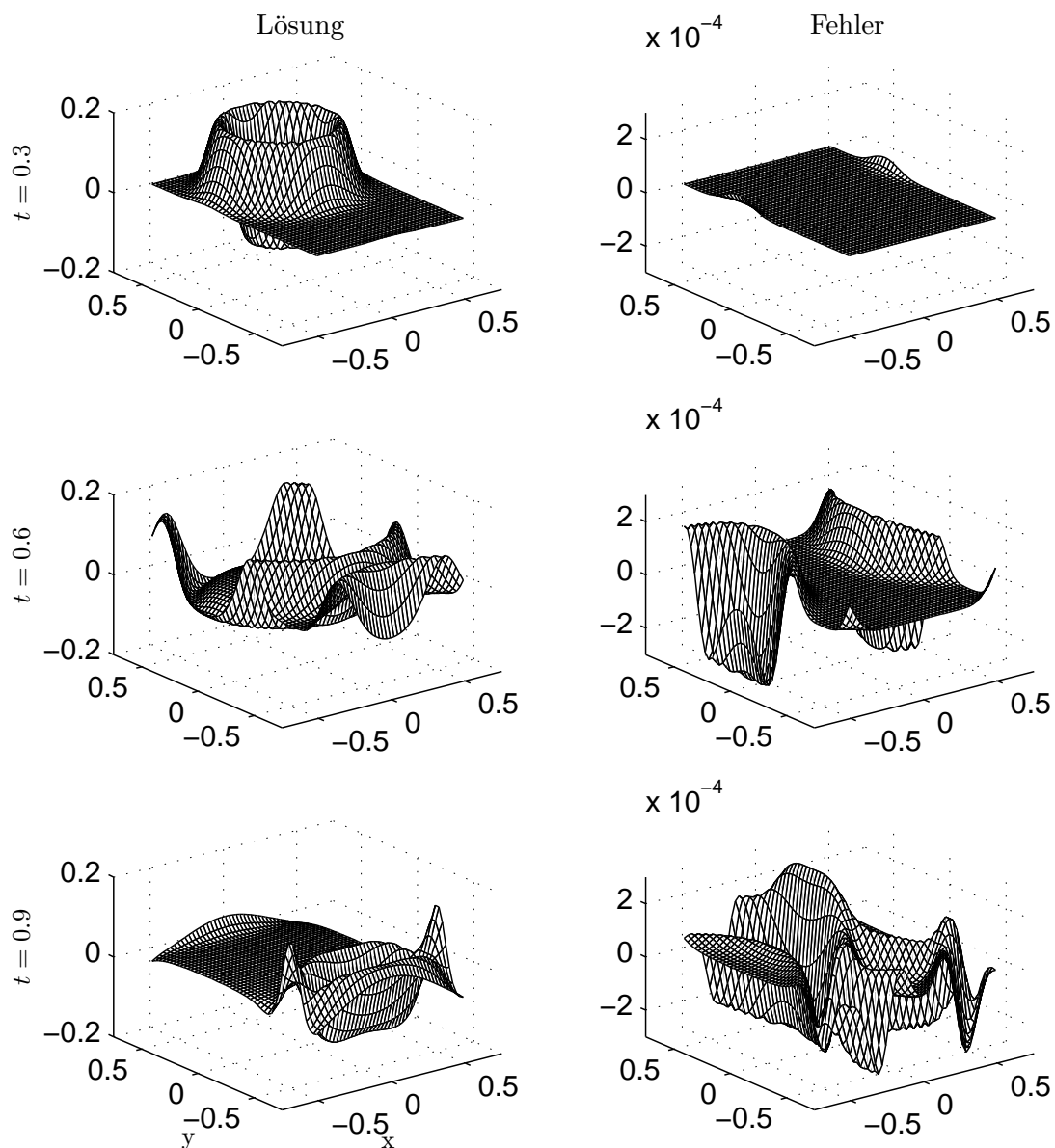


Abbildung 4.12: Lösung (links) und Fehler (rechts).

Zur Berechnung des Fehlers wurde eine Referenzlösung auf einem in x -Richtung doppelt so großem Gitter mit den selben Δx , Δy und Δt berechnet. Zudem verwenden wir sowohl Γ_0 als auch Γ_1 , sodass die alleinigen Fehlerquellen Reflektionen am

künstlichen Rand sind, die einmal aufgrund der unterschiedlichen Zeitdiskretisierungen im Inneren und am Rand des Gebietes und zum anderen durch die Approximation der Wegintegrale auftreten. In obigem Beispiel wurde $\Delta x = 1/81$, $\Delta y = 1/64$, $\Delta t = 1/200$ und die Parameter im Faltungsalgorithmus mit $B = 5$, $N = 10$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 7$ gewählt. Es wurde die NtD Formulierung der Randbedingung verwendet mit linearer Extrapolation der Randdaten. Fast das gleiche Bild entsteht, falls man $N = 15$ und $B = 5$ oder $B = 10$ setzt. Vernachlässigt man die Beiträge der gestrichelten Konturen Γ_1 in den Abbildungen 2.5 und 2.6, so erhält man einen etwa fünfmal so großen Fehler und das Verfahren wird gegenüber der Parameterwahl im Faltungsalgorithmus empfindlicher.

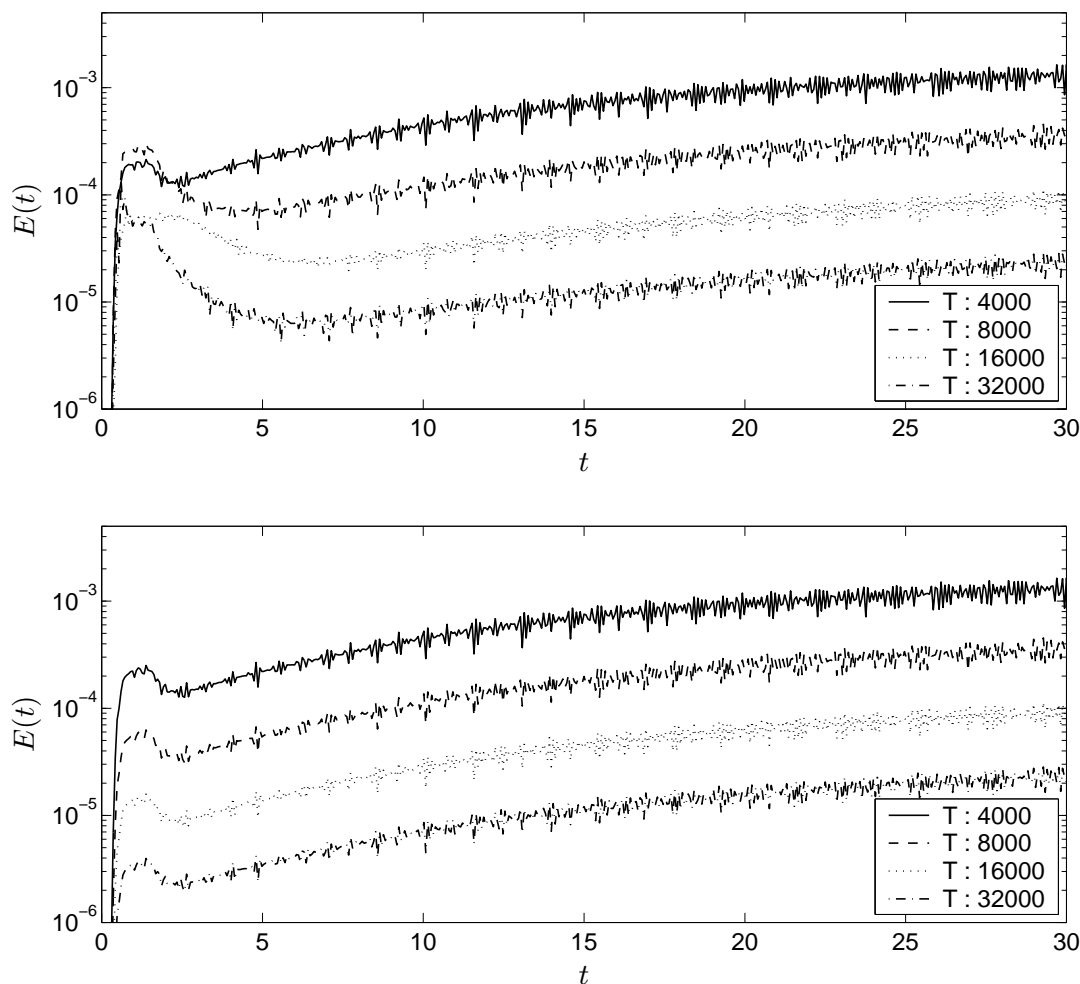


Abbildung 4.13: Zeitliche Entwicklung des Fehlers.

In Abbildung 4.13 ist die zeitliche Entwicklung des Fehlers

$$E(t) = \left(\frac{1}{LM} \sum_{i,j=1}^{LM} (u_{i,j}(t) - u_{i,j}^{ref}(t))^2 \right)^{1/2}$$

über ein langes Zeitintervall $0 \leq t \leq 30$ zu sehen. Für die Diskretisierung wurde $\Delta x = 1/97$ und $\Delta y = 1/85$ abhängig von der Anzahl der Diskretisierungsschritte T ($\Delta t = 30/T$) zu sehen.

Dazu muss die Referenzlösung auf einem in x -Richtung entsprechend großem Gebiet berechnet werden. Die Parameter des Faltungsalgorithmus sind hierbei $B = 5$, $N = 15$, $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 7$. Im oberen Bild wurde nur Γ_0 verwendet und im unteren sowohl Γ_0 als auch Γ_1 .

Das Vernachlässigen der Kontur Γ_1 führt nur zu Beginn zu einem sichtbaren Fehlerbeitrag. Auch für dieses Beispiel wurde die NtD Formulierung der nichtreflektierenden Randbedingungen verwendet bei linearer Extrapolation der Randdaten.

Die Wahl von $B = 10$ und $N = 10$ führt auch noch zu recht guten Ergebnissen. In diesem Fall kann es allerdings dazu kommen, dass Instabilitäten auftreten, falls man μ_0 größer als 10 wählt.

Die zeitliche Entwicklung des Fehler ist für die DtN Randbedingung sehr ähnlich. Die Wahl der Diskretisierung der zweiten Zeitableitung vor dem Faltungsintegral hat dabei kaum Auswirkungen auf den Fehler.

4.2.3 Dreidimensionale Wellengleichung – vollständige Diskretisierung

Zur Diskretisierung im Inneren des Gebietes verwenden wir wieder das Leap-Frog Verfahren. Wir setzen

$$v_{k,l,m}^n := v(-a + m\Delta x, l\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) \\ \text{für } n = 0, 1, \dots, \quad m = 0, 1, \dots, M, \quad l = 1, \dots, L, \quad k = 1, \dots, K$$

für die Lösung der diskretisierten Gleichung und

$$\beta_{k,l,m}^n := \beta(-a + m\Delta x, l\Delta y, kp\Delta z, n\Delta t, v_{k,l,m}^n) \\ \text{für } n = 0, 1, \dots, \quad m = 0, 1, \dots, M, \quad l = 1, \dots, L, \quad k = 1, \dots, K,$$

wobei

$$\Delta x = \frac{2a}{M} \quad \Delta y = \frac{p_y}{L} \quad \Delta z = \frac{p_z}{K}$$

und p_y und p_z die Längen der Perioden in y - beziehungsweise z - Richtung sind.

Setzen wir nun die Matrix \mathbf{v}

$$\mathbf{v}_n^m := \begin{bmatrix} v_{1,1,n}^m & \cdots & v_{1,K,n}^m \\ \vdots & & \vdots \\ v_{L,1,n}^m & \cdots & v_{L,K,n}^m \end{bmatrix}$$

und definieren die Wirkung der zweidimensionalen diskreten Fouriertransformation \mathcal{F} und ihrer Inversen \mathcal{F}^{-1} auf einer Matrix durch

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{v}) &:= \hat{\mathbf{v}} \\ \hat{v}_{r,s} &:= \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^L \exp\left(-i2\pi \frac{(r-1)(l-1)}{L}\right) \exp\left(-i2\pi \frac{(s-1)(k-1)}{K}\right) v_{l,k} \\ &\text{für } r = 1, \dots, L, \quad s = 1, \dots, K \quad \text{und} \\ \mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathbf{v}}) &:= \mathbf{v} \\ v_{l,k} &:= \frac{1}{KL} \sum_{r=1}^L \sum_{s=1}^K \exp\left(i2\pi \frac{(l-1)(r-1)}{L}\right) \exp\left(i2\pi \frac{(k-1)(s-1)}{K}\right) \hat{v}_{r,s} \\ &\text{für } l = 1, \dots, L, \quad k = 1, \dots, K, \end{aligned}$$

so erhalten wir als DtN Randbedingung

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Delta x} (\mathbf{v}_{(0,M)}^n - \mathbf{v}_{(1,M-1)}^n) \\ &= \mathbf{E} * \mathcal{F}^{-1} \left(\Phi_2 * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right. \\ &\quad \left. - 2 \left[\Phi_2 * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^n \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^n(j) \right] \right. \\ &\quad \left. + \Phi_2 * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1} \right) + (\Phi_1 - \Phi_2) * \mathcal{F} \left(\mathbf{E} * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-2} \right) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n-1}(j) \right). \end{aligned}$$

* bezeichnet die eintragsweise Multiplikation zweier Matrizen und die Matrizen E , Φ_1 und Φ_2 sind wie folgt definiert

$$\mathbf{E} := \left((-1)^{l+k-2} \right)_{l=1, k=1}^{L, K},$$

$$\Phi_2 := \left(\frac{1}{\Delta t} \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{F_{l,k}(\cdot)}{(\cdot)^2} \right) (\Delta t) \right)_{l=1 \ k=1}^{L \ K},$$

$$\Phi_1 := \left(\mathcal{L}^{-1} \left(\frac{F_{l,k}(\cdot)}{(\cdot)} \right) (\Delta t) \right)_{l=1 \ k=1}^{L \ K},$$

wobei $F_{l,k}$ die zu $\alpha_{k,l}^2 = (2 \sin(\pi l/L)/\Delta y)^2 + (2 \sin(\pi k/K)/\Delta z)^2$ gehörige Laplace-transformierte des Faltungskerns ist und die inverse Laplacetransformation mittels Talbotkonturen berechnet wird.

Die Matrizen \mathbf{q} sind wie folgt gegeben

$$\mathbf{q}_{(0,M)}^m(j) := \begin{bmatrix} q_{1,1,(0,M)}^n(j) & \cdots & q_{1,K,(0,M)}^n(j) \\ \vdots & & \vdots \\ q_{L,1,(0,M)}^n(j) & \cdots & q_{L,K,(0,M)}^n(j) \end{bmatrix}$$

mit $q_{l,k,(0,M)}^{1+\sum_{q=1}^Q b_q B^{q-1}}(j) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_{l,k,j}} e^{s\Delta t(1+\sum_{q=1}^{j-1} b_q B^{q-1})} y_{l,k,(\sum_{q=j+1}^Q b_q B^{q-1})\Delta t} \left(\left(\sum_{q=j}^Q b_q B^{q-1} \right) \Delta t \right) (F(\alpha_{k,l}, \cdot)) ds.$

$y_{l,k,a}(\tau)$ ist die Lösung der Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{y}(\tau) &= S_{l,k} y(\tau) + \frac{1}{\Delta x} \mathcal{F} \left(E * (\mathbf{v}_{(0,M)}^\tau - \mathbf{v}_{(1,M-1)}^\tau) \right) (l, k), \\ y(a) &= 0, \end{aligned}$$

die mit dem in Abschnitt 2.3 erklärten Verfahren mit Schrittweite Δt und linearer Interpolation der Fouriertransformierten der Randwerte berechnet wird.

Sortiert man nun nach $\mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1}$, so erhält man

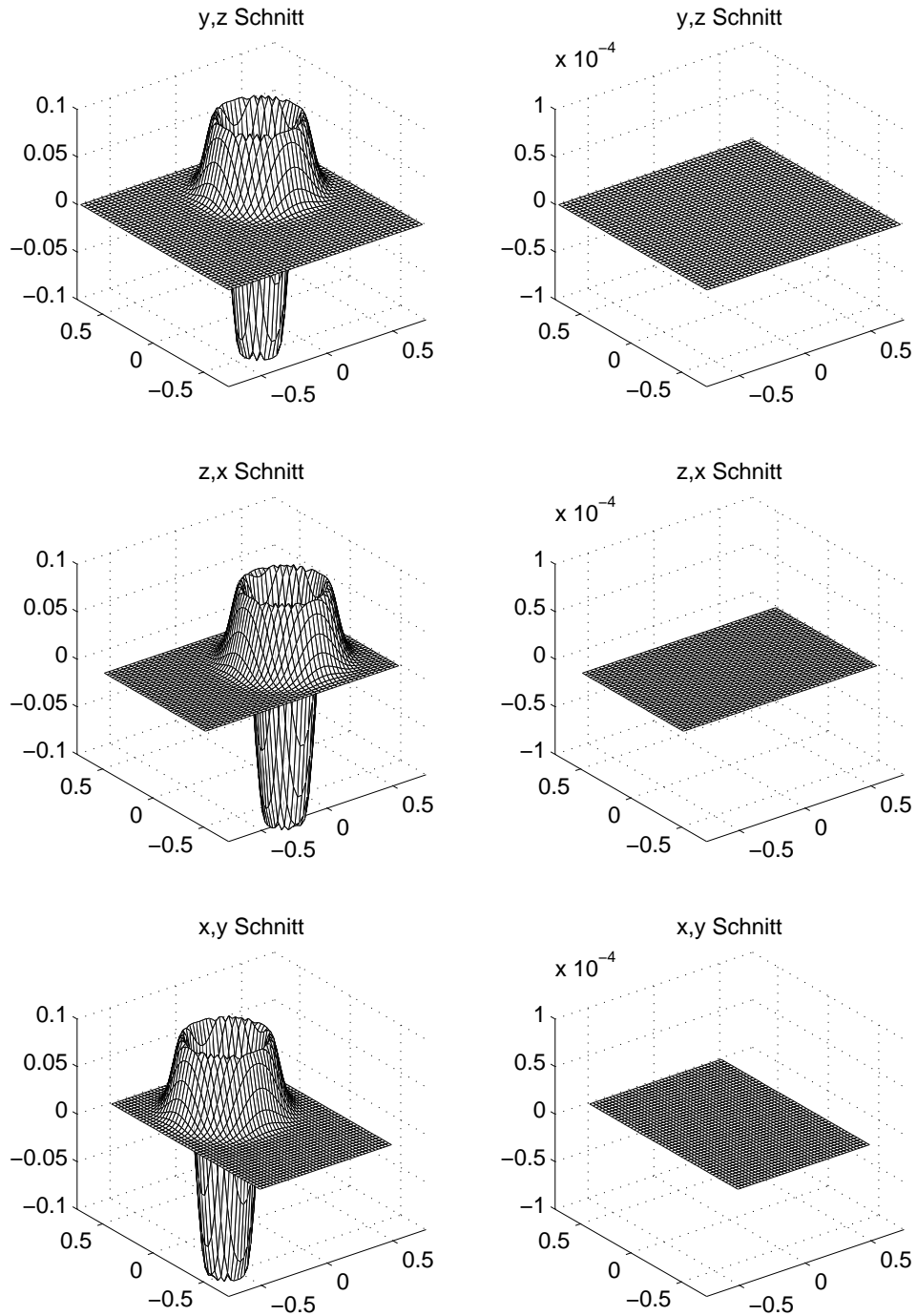
$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{(0,M)}^{n+1} &= E * \mathcal{F}^{-1} \left((\Phi_2)^{-1} * \left[\mathcal{F} \left(E * \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{v}_{(0,M)}^n - \mathbf{v}_{(1,M-1)}^n) \right) \right. \right. \\ &\quad - \left((\Phi_1 - \Phi_2) * \mathcal{F} (E * \mathbf{v}_{(0,M)}^n) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n+1}(j) \right. \\ &\quad \left. \left. - 2 \left[\Phi_2 * \mathcal{F} (E * \mathbf{v}_{(0,M)}^n) + (\Phi_1 - \Phi_2) * \mathcal{F} (E * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1}) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^n(j) \right] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \Phi_2 * \mathcal{F} (E * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-1}) + (\Phi_1 - \Phi_2) \mathcal{F} (E * \mathbf{v}_{(0,M)}^{n-2}) + \sum_{j=1}^K \mathbf{q}_{0,M}^{n-1}(j) \right) \right] \right), \end{aligned}$$

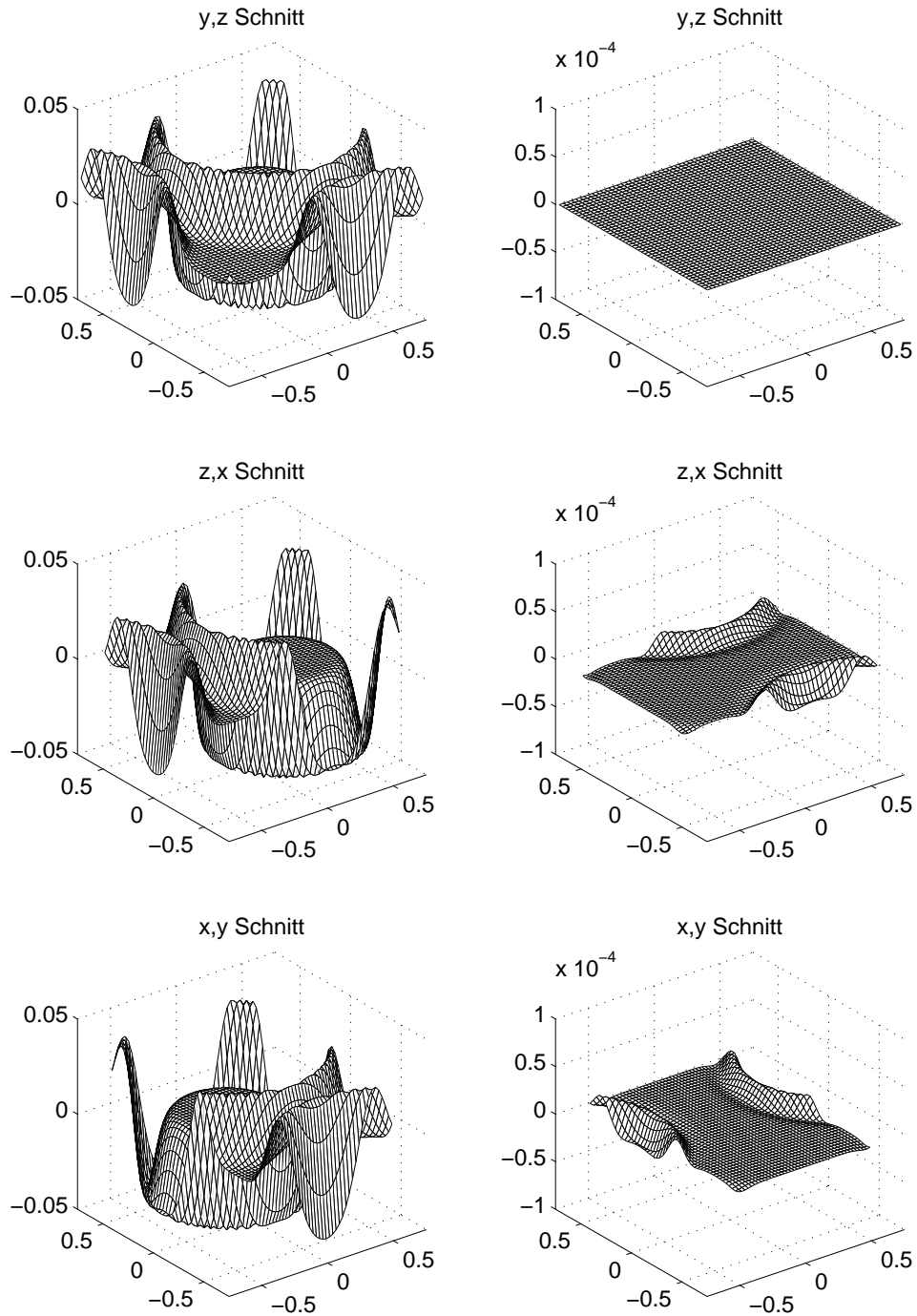
wobei $(\Phi_2)^{-1}$ eintragsweise definiert ist.

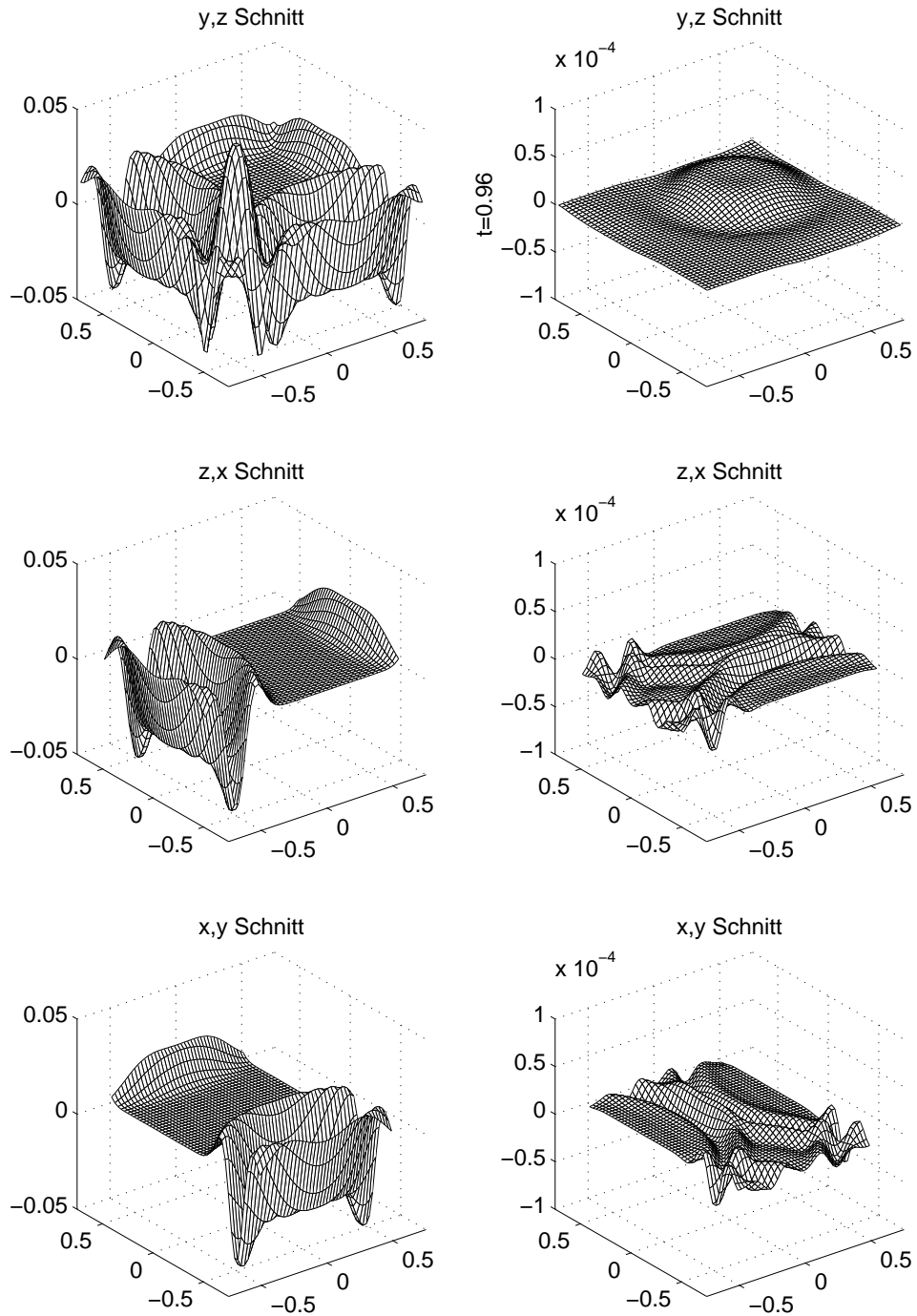
4.2.4 Numerisches Beispiel

In unseren Beispielen setzen wir wieder die Ausbreitungsgeschwindigkeit $c = 1$, die Periode in y -Richtung $p_y = 1.5$, die Periode in z -Richtung $p_z = 1.5$ und $a = 1/2$. Für die Anfangsauslenkung u_0 verwenden wir eine Gaußsche Glockenkurve, deren Parameter so gewählt werden, dass u_0 am Rand des Würfels $[-a, a] \times [-p_y/2, p_y/2] \times [p_z/2, p_z/2]$ sehr klein ist. Zur Ortsdiskretisierung wurden 81 Punkte in x und je 96 Punkte in y und z Richtung bei einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 1/250$ verwendet. Für den Faltungsalgorithmus wurden $B = 10$, $N = 15$ $\nu_0 = 0.6$ und $\mu_0 = 7$ gesetzt.

Wir erhalten folgendes in den Abbildungen 4.14 bis 4.16 wiedergegebenen Daumenkino für die Lösung und den Fehler. Gezeigt sind jeweils Schnitte, die durch die Mitte des Rechengebietes gehen und parallel zu den (x, y) -, (y, z) - und (x, z) -Ebenen sind. Der Fehler wird hierbei wieder gegen eine auf einem in x -Richtung vergrößerten Gebiet berechnete Referenzlösung gemessen. Die zeitliche Entwicklung des Fehlers ist der im zweidimensionalen Fall sehr ähnlich, kann jedoch wegen der beschränkten Speicherkapazität nicht bis zu $T = 30$ berechnet werden.

Abbildung 4.14: Lösung (links) und Fehler (rechts) zur Zeit $t = 0.21$.

Abbildung 4.15: Lösung (links) und Fehler (rechts) zur Zeit $t = 0.57$.

Abbildung 4.16: Lösung (links) und Fehler (rechts) zur Zeit $t = 0.96$.

Literaturverzeichnis

- [1] B. Alpert, L. Greengard, und T. Hagstrom. An integral evolution formula for the wave equation. *J. Comput. Phys.*, 162(2):536–543, 2000.
- [2] B. Alpert, L. Greengard, und T. Hagstrom. Rapid evaluation of nonreflecting boundary kernels for time-domain wave propagation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(4):1138–1164, 2000.
- [3] A. Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI Design*, 1-4(6):313–319, 1998.
- [4] A. Arnold. Mathematical concepts of open quantum boundary conditions. *Transp. Theory Stat. Phys.*, 30(4-6):561–584, 2001.
- [5] H. Bateman. A. Erdélyi (ed.). *Higher transcendental functions*, volume 1-3. McGraw-Hill, 1953.
- [6] J.-P. Bérenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.*, 114(2):185–200, 1994.
- [7] A. Dedner et. al. Transparent boundary conditions for MHD simulations on stratified atmospheres. *J. Comput. Phys.*, 171(2):448–478, 2001.
- [8] L. C. Evans. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 1998.
- [9] D. Givoli. Non-reflecting boundary conditions. *J. Comput. Phys.*, 94(1):1–29, 1991.
- [10] D. Givoli. *Numerical methods for mechanics problems in infinite domains*. Elsevier, Amsterdam, 1992.

-
- [11] D. Givoli und I. Patlashenko. Optimal local non-reflecting boundary conditions. *Appl. Numer. Math.*, 27:367–384, 1998.
- [12] D. Givoli, I. Patlashenko, und J. B. Keller. Discrete Dirichlet-to-Neumann maps for unbounded domains. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 164:173–185, 1998.
- [13] M. J. Grote und J. B. Keller. Exact nonreflecting boundary conditions for the time dependent wave equation. *SIAM J. Appl. Math.*, 55(2):280–297, 1995.
- [14] M. J. Grote und J. B. Keller. On non-reflecting boundary conditions. *J. Comput. Phys.*, 122(2):231–243, 1995.
- [15] M. J. Grote und J. B. Keller. Nonreflecting boundary conditions for Maxwell’s equation. Unpublished, 1997.
- [16] T. Hagstrom. Radiation boundary conditions for numerical simulation of waves. *Acta Numerica*, 8:47–106, 1999.
- [17] E. Hairer, Ch. Lubich, und M. Schlichte. Fast numerical solution of nonlinear Volterra convolution equations. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 6(3):532–541, July 1985.
- [18] E. Hairer und G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations II*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
- [19] Weiping Huang, Chenglin Xu, Sai-Tak Chu, und Sujeet K. Chaudhuri. The finite-difference vector beam propagation method: Analysis and assessment. *J. Lightwave Technology*, 10(3):295–304, March 1992.
- [20] Y. Katznelson. *An Introduction to Harmonic Analysis*. Dover Publications, New York, 2 edition, 1968.
- [21] Ch. Lubich. Convolution quadrature and discretized operational calculus I. *Numer. Math.*, 52:129–145 and 413–425, 1988.
- [22] Ch. Lubich. Convolution quadrature and discretized operational calculus II. *Numer. Math.*, 52:413–425, 1988.

-
- [23] Ch. Lubich. On the multistep time discretization of linear initial boundary value problems and their boundary integral equations. *Numer. Math.*, 67:365–389, 1994.
- [24] Ch. Lubich und A. Schädle. Fast convolution for non-reflecting boundary conditions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24:161–182, 2002.
- [25] A. Murlı und M. Rizzardi. Algorithm 682 Talbot’s method for the Laplace inversion problem. *ACM Trans. Math. Software*, 16(2):158–168, June 1990.
- [26] M. Rizzardi. A modification of Talbot’s method for the simultaneous approximation of several values of the inverse Laplace transform. *ACM Trans. Math. Software*, 21(4):347–371, 1995.
- [27] V.S. Ryaben’kii, S.V. Tsynkov, und V.I. Turchaninov. Global discrete artificial boundary conditions for time-dependent wave propagation. *J. Comput. Phys.*, 174:712–758, 2001.
- [28] F. Schmidt und D. Yevick. Discrete boundary conditions for Schrödinger-type equations. *J. Comput. Phys.*, 134:96–107, 1997.
- [29] I. L. Sofronov. Non-reflecting inflow and outflow in a wind tunnel for transonic time-accurate simulation. *J. Math. Anal. Appl.*, 1998.
- [30] A. Talbot. The accurate numerical inversion of Laplace transforms. *J. Inst. Math. Appl.*, 23:97–120, 1979.
- [31] S. Tsynkov. Numerical solution of problems on unbounded domains. A review. *Appl. Numer. Math.*, 27:465–532, 1998.
- [32] T. Weiland. Time domain electromagnetic field computation with finite difference methods. *Int. J. Numer. Modelling*, 9(4):295–319, 1996.

Lebenslauf

Achim Schädle

30.10.1972 geboren in Memmingen

1979 - 1992 Grundschule und Gymnasium in Memmingen

6/1992 Abitur

10/1992 - 10/1993 Zivildienst

WS 1993/94 - SS 1999 Studium der Mathematik mit Nebenfach Biologie
an der Eberhard-Karls Universität in Tübingen

04/1999 Diplomprüfung in Mathematik

seit 05/1999 Doktorand und wissenschaftlicher Angestellter
an der Universität Tübingen

10/1995 - 3/1996 University of Sussex, England