

**Exponentielle Integratoren als
Lange-Zeitschritt-Verfahren
für oszillatorische Differentialgleichungen
zweiter Ordnung**

I n a u g u r a l - D i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung des Doktorgrades der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Volker Grimm

aus Karlsruhe

Juni 2002

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referentin: Prof. Dr. M. Hochbruck

Koreferent: Prof. Dr. Ch. Lubich

Koreferent: Prof. Dr. K. Witsch

Tag der mündlichen Prüfung: 09.07.2002

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Oszillatorische Probleme und deren Zeitintegration	6
1.1 Oszillatorische Differentialgleichungen	6
1.2 Moleküldynamik	8
1.3 Verlet-Schema	9
1.4 Splitting-Verfahren	11
1.5 Exponentielle Integratoren	12
1.6 Nichtlineare Methoden	14
2 Ein einfacher exponentieller Integrator für die nichtautonome, lineare, oszillatorische, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung	15
2.1 Eine Darstellung der Lösung (mit funktionalanalytischen Hilfsmitteln)	15
2.2 Eigenschaften des Integraloperators S	20
2.3 Ein einfacher exponentieller Integrator	29
2.4 Nichtglatte Ordnung ohne Finite-Energie-Bedingung	41
2.5 Numerische Beispiele	58
3 Exponentielle Integratoren für die nichtautonome, lineare, oszillatorische, inhomogene Differentialgleichung zweiter Ordnung	64
3.1 Problemstellung	64
3.2 Einschrittverfahren	65
3.3 Zweischrittverfahren	66
3.4 Beweis der Fehlerschranken für Einschrittverfahren	68

3.5	Beweis der Fehlerschranken für Zweisrittverfahren	81
3.6	Numerische Beispiele	92
4	Verfahren zur Lösung der nichtlinearen oszillatorischen Differentialgleichung	95
4.1	Gautschi-Typ exponentielle Integratoren	95
4.2	Beweis der Fehlerschranken	96
4.3	Numerische Simulationsergebnisse	110

Einleitung

Die Moleküldynamik-Simulation ist ein aktuelles Forschungsgebiet, das in den letzten Jahren ständig an Bedeutung gewonnen hat. Die klassische Moleküldynamik ist momentan die wichtigste Möglichkeit, über das dynamische Verhalten großer Moleküle Erkenntnisse zu gewinnen. Viele Chemiker und Physiker verbringen daher heute mehr und mehr Zeit in einem virtuellen Labor, an einem Computer sitzend. Die Herausforderungen auf diesem Gebiet sind dabei nicht gering. Die Moleküldynamik-Simulationen umfassen mehrere Zeitskalen, die von 1 fs (=1 Femtosekunde= 10^{-15} s) bis zu 10^3 Sekunden bei der Faltung großer Moleküle reichen und in derselben Simulation auftreten. Häufig sind erst Zeitskalen im Bereich von Pikosekunden (10^{-12}) für die Interpretation der Daten interessant, und es würde genügen die Lösung in größeren Abständen zu kennen.

Im mathematischen Modell spiegelt sich dieser Umstand dadurch wieder, dass die Lösung hochfrequente Lösungskomponenten mit kleiner Amplitude besitzt, wobei die Lösung häufig nur auf einem Gitter mit einer Zeitschrittweite h gesucht wird, für die $h\omega \gg 1$ ist, wobei ω die höchste im System auftretende Frequenz bezeichnet. Differentialgleichungen diesen Typs werden oszillatorische Differentialgleichungen genannt. Wegen ihrer Bedeutung nicht nur in der Moleküldynamik sind oszillatorische Differentialgleichungen in den letzten Jahren zunehmend ins Zentrum des Interesses gerückt.

Das Standard-Verfahren zur numerischen Integration dieser Differentialgleichungen ist das Verlet-Schema und seine Varianten (z.B. leap-frog). Dieses Verfahren ist einfach zu implementieren, funktioniert bei kleiner Schrittweite sehr gut, benötigt aber viel zu viele Schritte, um oszillatorische Differentialgleichungen über längere Zeitintervalle numerisch effizient lösen zu können. Das liegt daran, dass die hohen Frequenzen bei der numerischen Integration einer oszillatorischen Differentialgleichung von dem Verlet-Schema vollständig aufgelöst werden müssen, damit das Verfahren eine korrekte Lösung liefert. Dasselbe Verhalten zeigen alle bekannten Verfahren, wie implizite und explizite Runge-Kutta-Verfahren sowie Mehrschrittverfahren. Mit diesen Verfahren können viele Phänomene die auf größeren Zeitskalen ablaufen, obwohl auf diesem Gebiet Rechenzeiten in der Größenordnung von Monaten nicht unüblich sind, nicht beobachtet werden. Wünschenswert sind daher numerische Integrationsverfahren (sog. Integratoren), die der Schrittweiteinschränkung nicht unterliegen und damit weniger rechenaufwändig sind.

In den letzten fünf Jahren wurden Lange-Zeitschritt-Integratoren entwickelt. Damit werden Verfahren bezeichnet, die Fehlerabschätzungen unabhängig von der Glattheit der Lösung zulassen und die die Lösung auf einem Gitter mit Zeitschrittweite h und $h\omega \gg 1$, wobei ω die höchste auftretenden Frequenz bezeichnet, berechnen können. Als einzige Voraussetzung wird dabei gefordert, dass das System beschränkte Energie hat, eine physikalisch plausible Bedingung.

Ähnlich wie bei der Theorie zur numerischen Integration steifer Systeme, erfordert auch die Analyse von Verfahren für oszillatorische Probleme völlig neue mathematische Techniken. Die Ursache hierfür liegt in der nichtglatten exakten Lösung der Differentialgleichung, die die Verwendung von Taylorentwicklung derselben unmöglich macht. Diese neuen Techniken geben gleichzeitig Aufschluss über die Konstruktion neuer Lange-Zeitschritt-Integratoren.

Bisher sind Lange-Zeitschritt-Verfahren nur für Differentialgleichungen bekannt, bei denen die hohen Frequenzen aus einem zeitunabhängigen linearen Anteil resultieren. Diese Integratoren

erfordern die Berechnung des Produkts $\varphi(h\Omega)v$ einer analytischen Funktion φ ausgewertet an einer mit der Zeitschrittweite skalierten, symmetrischen Matrix Ω mit einem Vektor v . Diese können zum Beispiel mit Krylov-Unterraumverfahren approximiert werden (vgl. [7, 8, 14, 24]). Da die auftretenden Funktionen φ mit Hilfe der Exponentialfunktion dargestellt werden können, wird auch von exponentiellen Integratoren gesprochen (vgl. [17]).

Ziel dieser Arbeit ist es, Lange-Zeitschritt-Verfahren für eine allgemeinere Klasse von oszillatorischen Problemen zu konstruieren und zu analysieren, denn in den Problemen aus der Moleküldynamik erweist sich die oben genannte Einschränkung auf zeitunabhängige lineare Anteile als zu strikt. Es soll jedoch weiterhin nur die physikalisch sinnvolle Voraussetzung der beschränkten Energie gefordert werden, so dass die Ergebnisse auch praktisch relevant sind.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert: Im ersten Kapitel wird nach einer Einleitung in oszillatorische Differentialgleichungen die Moleküldynamik als ein großes Anwendungsgebiet, in dem oszillatorische Differentialgleichungen auftreten, vorgestellt. Ferner werden die üblichen Verfahren betrachtet, mit denen oszillatorische Differentialgleichungen numerisch gelöst werden, dabei auch die ersten Lange-Zeitschritt-Integratoren und unter welchen Voraussetzungen die Eigenschaft, ein Lange-Zeitschritt-Integrator zu sein, bewiesen wurde. Das erste Kapitel beinhaltet bekannte Aussagen. Im Gegensatz dazu sind alle vorgestellten Sätze und Beweismethoden der weiteren Kapitel neu. Wenn bereits vorhandene Ergebnisse verwendet werden, werden diese nur zitiert und der Beweis nicht wiedergegeben.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit nichtautonomen, linearen, homogenen, oszillatorischen Differentialgleichungen. Diese Differentialgleichungen stellen für sich ein interessantes aktuelles Forschungsgebiet dar (z.B. [18], [19]). Um einen vorgeschlagenen exponentiellen Integrator zu analysieren, musste ein neuer funktionalanalytischer Ansatz entwickelt werden. Mit den vorgestellten Techniken ist eine weitere Analyse und Ableitung weiterer neuer Verfahren für diese Differentialgleichungen möglich. Dies wird an dieser Stelle aber nicht durchgeführt, sondern nur so weit, wie es für die Theorie in den weiteren Kapiteln nötig ist. Die Beweismethoden leisten einen wichtigen Beitrag zum Verständnis homogener oszillatorischer Differentialgleichungen. Es sind die ersten Sätze, die allgemeine Aussagen über den globalen Fehler einer numerischen Näherungsmethode für homogene, lineare, nichtautonome Systeme treffen. Bisher waren solche Ergebnisse nur für spezielle skalare Gleichungen bekannt (vgl. [18], [19]).

Oszillatorische Differentialgleichungen, bei denen die hohen Frequenzen von einem nichtautonomen, linearen, oszillatorischen Teil der Differentialgleichung erzeugt werden, treten in vielen Anwendungen auf. Die Moleküldynamik oder Semidiskretisierungen von partiellen Differentialgleichungen, die Wellenphänomene beschreiben, sind Beispiele hierfür. Im dritten Kapitel werden exponentielle Einschnitt- und Zweischrittverfahren vorgestellt, die Lange-Zeitschritt-Integratoren sind, und diese Eigenschaft bewiesen. Zum Abschluss werden einige numerische Experimente mit diesen Verfahren vorgestellt.

Für die Praxis sind die Ergebnisse des vierten Kapitels von besonders großer Bedeutung. Von einem bereits für die Moleküldynamik vorgeschlagenen Gautschi-Typ-Verfahren (vgl. [13]) wird unter Verwendung der physikalisch sinnvollen Finite-Energie-Bedingung gezeigt, dass das Verfahren ein Lange-Zeitschritt-Integrator für nichtlineare oszillatorische Differentialgleichungen zweiter Ordnung darstellt. Dieses Verfahren ist das erste, von dem diese Eigenschaft bewiesen werden konnte. In ein Paket zur Simulation in der Moleküldynamik implementiert lässt das Verfahren durch die theoretischen Ergebnisse und die numerischen Tests in Kapitel 4 eine große Rechenzeiteinsparung erwarten.

Ganz herzlich bedanken möchte ich mich bei allen, die zum Fertigstellen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonderer Dank gilt dabei meiner Referentin Prof. Dr. M. Hochbruck, sowie meinen Koreferenten Prof. Dr. Ch. Lubich und Prof. Dr. K. Witsch. Ferner möchte ich mich bei Prof. Dr. R. Scherer für eine erste Anleitung zu wissenschaftlichem Arbeiten bedanken.

Kapitel 1

Oszillatorische Probleme und deren Zeitintegration

1.1 Oszillatorische Differentialgleichungen

In dieser Arbeit wird die numerische Lösung von speziellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung untersucht. Differentialgleichungen dieses Typs treten z.B. bei N -Körper-Problemen oder bei der Semidiskretisierung von partiellen Differentialgleichungen, die nichtlineare Wellenphänomene beschreiben, auf. Besonderes Augenmerk wird auf Differentialgleichungen gelegt, die in der Moleküldynamik auftreten.

Die rechte Seite der Differentialgleichung sei wie angedeutet in zwei Teile aufgespalten,

$$\ddot{y} = -f(y) + g(y), \quad (1.1)$$

die Funktionen f und g seien Gradienten, und ihre Jacobimatrizen damit symmetrisch. Die Differentialgleichung wird als oszillatorisch bezeichnet, wenn f_y symmetrisch positiv-semidefinit ist und in der Spektralnorm $\|f_y\| \gg 1$ gilt, aber $\|g\|$, $\|g_y\|$, $\|g_{yy}\|$ und $\|f_{yy}\|$ mit kleiner Konstante beschränkt sind. Ferner wird angenommen, dass die Differentialgleichung so transformiert ist, dass die Lösung in einer Kugel um Null bleibt. Unter dieser Annahme lässt sich die oszillatorische Differentialgleichung auch in der Form

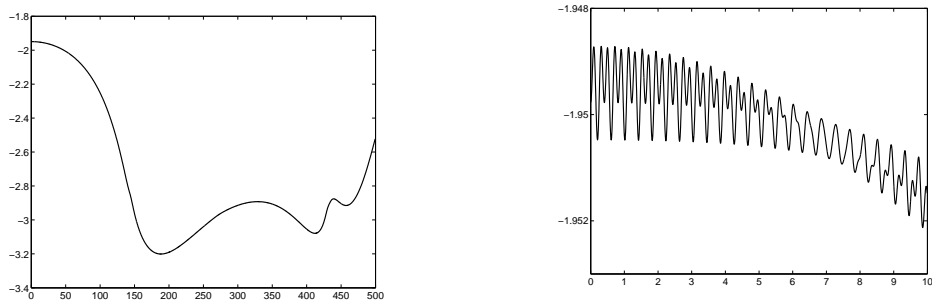
$$\ddot{y} = -f_y(y)y + \tilde{g}(y)$$

schreiben, wobei \tilde{g} dieselben Voraussetzungen erfüllt wie zuvor g . In dieser Schreibweise tritt der für das oszillatorische Verhalten der Differentialgleichung verantwortliche Teil $f_y(y)y$ deutlicher zu Tage. Jetzt kann eine weitere wichtige Voraussetzung formuliert werden. Für das Differentialgleichungssystem (1.1) gelte die Finite-Energie-Bedingung

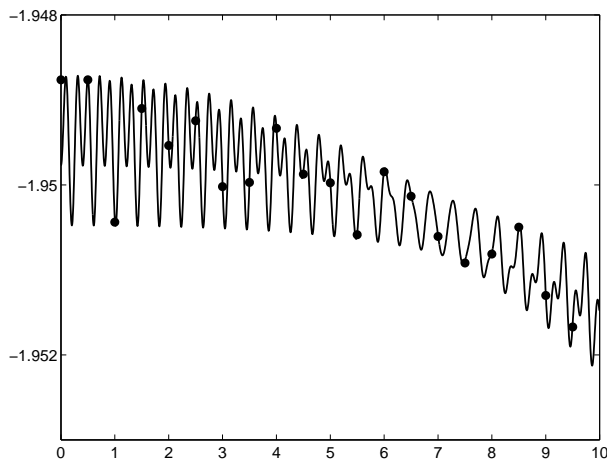
$$H(y, \dot{y}) = \frac{1}{2} \|\dot{y}\|_2^2 + \frac{1}{2} y^T f_y(y)y \leq \frac{1}{2} K^2.$$

Diese Bedingung ist keine beweistechnische Voraussetzung sondern eine physikalisch sinnvolle Voraussetzung. Bei den Systemen aus der Moleküldynamik, die im nächsten Abschnitt vorgestellt werden, hat diese Größe z.B. unter dem Namen harmonische Energie eine anschauliche Bedeutung.

Die Lösungen dergestalter Systeme besitzen schnell oszillierende Komponenten, die durch die großen Eigenwerte von f_y erzeugt werden. In vielen Anwendungen gilt das Interesse aber nicht der hochoszillierenden Lösung an sich, sondern nur einem Mittelwert der oszillatorischen Lösung. Ein Beispiel sind Systeme in der klassischen Moleküldynamik, die Proteinfaltungen simulieren. Der Faltungsprozess und die Endkonformation sind von Interesse, die exakte Auflösung der Bindungsschwingungen aber nicht. Im folgenden Schaubild ist eine Lösung einer oszillatorischen Differentialgleichung und eine Vergrößerung des Anfangs dargestellt.



Interessant ist hier nur die globale Bewegung, die kleinen schnellen Oszillationen nicht. Ein Standardintegrator muss aber alle Oszillationen auflösen, und die wählbare Schrittweite des Integrators ist damit durch die Hälfte der Periode der höchsten auftretenden Frequenz beschränkt. In [9] werden Lange-Zeitschritt-Verfahren als solche Verfahren definiert, die auch bei größeren Schrittweiten noch die richtige Lösung berechnen können, die also in der Lage sind, ganze Perioden zu überspringen und trotzdem auf der richtigen Lösung zu landen. Zum theoretischen Nachweis dieser Eigenschaft muss für die Verfahren eine Fehlerschranke unabhängig von der Jacobimatrix f_y nachgewiesen werden. Im folgenden Schaubild ist noch einmal der Anfang der oszillatorischen Lösung aufgetragen, zusammen mit den Stellen, die mit einer Lange-Zeitschritt-Methode aus Kapitel 4 berechnet wurden.



Alternativ zur Konstruktion von Lange-Zeitschritt-Methoden kann auch versucht werden, die Differentialgleichung zu homogenisieren, d.h. das System so abzuändern, dass es eine gemittelte Lösung ohne hochoszillatorische Komponenten liefert. Dieser Ansatz ist schwierig und in der Regel erfordert er tiefe Einsicht in das spezielle Problem, das gelöst werden soll. Mit jedem neuen System sind meistens auch die Veränderungen, um die korrekte gemittelte Lösung zu erhalten,

neu (vgl. [3]). Die Lange-Zeitschritt-Methoden bieten eine weniger radikale Möglichkeit, solche Systeme trotzdem mit vertretbarem Aufwand zu lösen. Die Konstruktion solcher Verfahren ist nicht einfach, aber ein wichtiger Beitrag zu dem aktuellen Forschungsgebiet hochoszillatorischer Differentialgleichungen (vgl. [2, 5, 9, 11, 12, 16, 19, 22]).

Die in dieser Arbeit betrachteten Differentialgleichungssysteme erfüllen eine weitere Eigenschaft, die bei großen Systemen von oszillatorischen Differentialgleichungen häufig auftritt, besonders für die im nächsten Abschnitt vorgestellten Systeme aus der Moleküldynamik. Die rechte Seite der Differentialgleichung ist derart, dass die numerische Auswertung von f und f_y billig, die von g aber teuer ist.

1.2 Moleküldynamik

Die exakte Beschreibung der atomaren Dynamik eines Moleküls erfordert die Lösung einer zeitabhängigen Schrödingergleichung. Schon bei einem Molekül mit wenigen Atomen ist der Rechenaufwand zur Lösung dieser immens. Da die direkte Lösung der Schrödingergleichung nicht möglich ist, wird die Molekülbewegung in der klassischen Moleküldynamik durch mechanische Modelle simuliert. Das Kraftfeld, das die Bewegung der Atomkerne antreibt, besteht aus chemisch motivierten mechanischen Modellen für lokale Terme, wie Bindungsstreckpotentiale, Bindungswinkelpotentiale, Torsionspotentiale und Kräfte zur Beschreibung von Wasserstoffbrückenbindungen als auch aus nichtlokalen Wechselwirkungen wie den langreichweitigen Coulomb-Kräften zwischen geladenen Atomen und der Van-der-Waals-Anziehung. Dabei werden in den Molekülmodellen üblicherweise nicht die Kräfte direkt angegeben, sondern die Potentiale der Kräfte. Mit ihnen lässt sich die Hamilton-Funktion eines klassisch simulierten Moleküls $H(p, q)$ aufstellen, aus der sich die zu lösende Differentialgleichung durch

$$\begin{aligned}\frac{dp_i}{dt} &= -\frac{dH}{dq_i}, & i = 1, \dots, d \\ \frac{dq_i}{dt} &= \frac{dH}{dp_i}\end{aligned}$$

ergibt. Dabei ist q ein Vektor, der die Ortskoordinaten beschreibt, und p ein Vektor, der die Impulse beschreibt. $2d$ ist die Dimension des Differentialgleichungssystems. Eine typische Hamilton-Funktion eines klassisch simulierten Moleküls hat die Gestalt (vgl. [1], [23]):

$$\begin{aligned}H(p, q) &= \frac{1}{2}p^T M^{-1}p + \sum_{\text{Bindungen}} \frac{1}{2}K_b(b - b_0)^2 + \sum_{\text{Bindungswinkel}} \frac{1}{2}K_\theta(\theta - \theta_0)^2 \\ &+ \sum_{\text{Torsionswinkel}} \frac{1}{2}K_\phi V(\phi) + \sum_{\text{ungebundene Paare}} \kappa \frac{q_i q_j}{r} + \dots\end{aligned}$$

Dabei ist M eine Diagonalmatrix, die die Massen der Atome enthält. Die genauen Werte, wie Moleküle am besten simuliert werden, sind empirisch bestimmt und daher wurde eine Reihe verschiedener Kraftfelder entwickelt (z.B.: [4, 6, 31]). Durch Vergleich von Simulationen mit experimentellen Daten werden diese ständig verfeinert.

Die entstehenden Kräfte lassen sich dabei in schnelle Kräfte, das sind solche, die eine Jacobi-matrix mit großen positiven Eigenwerten erzeugen, und langsame Kräfte unterteilen. Bei der Unterteilung gibt es eine gewisse Willkür. Die Bindungen, Bindungswinkel und Torsionswinkel

werden meistens zu den schnellen Kräften gezählt, die elektrostatischen und Van-der-Waals-Kräfte werden mit Hilfe einer Umschaltfunktion in schnelle und langsame Kräfte unterteilt. Atome, die nahe beieinander sind, erzeugen schnelle Kräfte bei diesen ungebundenen Kräften, weiter entferntere langsamere Kräfte. Grob hat das System die Gestalt:

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T M^{-1} p + U_{\text{schnell}}(q) + U_{\text{langsam}}(q).$$

Da die bindingsabhängigen Kräfte nur zwischen Atomen, die dann auch nahe beieinander sind, wirken, und von den elektrostatischen und Van-der-Waals-Kräften genau die nahe beieinander liegenden Atome die schnellen Kräfte erzeugen, ist für große Moleküle sofort klar, dass die Auswertung der schnellen Kräfte billig ist, die der langsamen aber, da hier jedes Atom mit jedem wechselwirkt, sehr teuer. Auch beim Einsatz von Multipolverfahren bleibt die Auswertung der langsamen Kräfte der dominierende Teil des Arbeitsaufwandes. Für eine große Simulation auf einem Parallelrechner oder einem Cluster kommt hinzu, dass die Auswertung der langsamen Kräfte einen hohen Kommunikationsaufwand erfordert. Dies macht die Auswertung der langsamen Kräfte noch unangenehmer.

Bei Zimmertemperaturen, also nicht bei Hochenergiephysik, gibt es ein nicht unbedingt eindeutig bestimmtes lokales Minimum q^* des Energiepotentials in der Nähe der Lösung. Durch die einfache Koordinatentransformation $\tilde{p} = M^{-1/2} p$ und $\tilde{q} = M^{1/2}(q - q^*)$ und Umbenennung

$$\tilde{U}_{\text{schnell}}(\tilde{q}) = U_{\text{schnell}}(q^* + M^{-1/2}\tilde{q}) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{U}_{\text{langsam}}(\tilde{q}) = U_{\text{langsam}}(q^* + M^{-1/2}\tilde{q})$$

geht dieses System in ein weiteres Hamilton-System über. Wird dieses System mit $y = \tilde{q}$ geschrieben, lautet es

$$\ddot{y} = -\frac{d\tilde{U}_{\text{schnell}}}{dy}(y) - \frac{d\tilde{U}_{\text{langsam}}}{dy}(y),$$

mit der Hamilton-Funktion

$$H(\dot{y}, y) = \frac{1}{2} \|\dot{y}\|_2^2 + \frac{1}{2} \tilde{U}_{\text{schnell}}(y) + \frac{1}{2} \tilde{U}_{\text{langsam}}(y),$$

und hat damit genau die Form einer oszillatorischen Differentialgleichung. Physikalisch sinnvolle Lösungen erfüllen dabei die Finite-Energie-Bedingung

$$H_F(\dot{y}, y) = \frac{1}{2} \|\dot{y}\|_2^2 + \frac{1}{2} y^T \frac{d\tilde{U}_{\text{schnell}}}{dy}(y) y \leq \frac{1}{2} K^2.$$

In diesem Zusammenhang heißt H_F auch reduzierte oder harmonische Energie. Manche Autoren setzen auch eine Finite-Energie-Bedingung mit einer konstanten Matrix A voraus und lösen die hohen Frequenzen die ganze Simulation hindurch mit den Eigenwerten dieser Matrix auf (z.B. [21]). Beim Beweis aller Lange-Zeitschritt-Integratoren, die bis jetzt bekannt sind, wurde für den Nachweis der entscheidenden Ordnungsbedingung, dass das Verfahren tatsächlich ein Lange-Zeitschritt-Integrator ist, diese Voraussetzung gemacht. Im Gegensatz dazu werden in dieser Arbeit Lange-Zeitschritt-Verfahren hergeleitet und ihre Eigenschaften bewiesen, die mit der allgemeineren Finite-Energie-Bedingung auskommen und während der Simulation die Jacobimatrix der schnellen Kräfte an die aktuellen Orte anpassen können.

1.3 Verlet-Schema

Der bekannteste Integrator für eine oszillatorische Differentialgleichung,

$$\ddot{y} = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0,$$

besonders in der Moleküldynamik, ist das Störmer-Verlet-Verfahren (vgl. [30]):

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2 f(y_n),$$

mit Startschritt

$$y_1 = y_0 + h\dot{y}(t_0) + \frac{h^2}{2}f(y_0).$$

Näherungen an die Geschwindigkeiten können durch

$$\dot{y}_n = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}$$

gewonnen werden. Das Störmer-Verlet-Schema erlaubt auch eine Einschritt-Formulierung mit der Näherung $\dot{y}_{n+1/2} = \dot{y}_n + \frac{h}{2}f(y_n)$:

$$\begin{aligned}\dot{y}_{n+1/2} &= \dot{y}_n + \frac{h}{2}f(y_n) \\ y_{n+1} &= y_n + h\dot{y}_{n+1/2} \\ \dot{y}_{n+1} &= \dot{y}_{n+1/2} + \frac{h}{2}f(y_{n+1}).\end{aligned}$$

In der Moleküldynamik werden exakte Lösungen zum Vergleich mit dem Störmer-Verlet-Schema mit kleiner Schrittweite berechnet. Das Verlet-Schema ist leicht zu implementieren und symplektisch.

Symplektizität ist eine geometrische Eigenschaft des Lösungsoperators $\Phi(t, t_0)y$, die jedem Anfangswert y für fest gewählte t, t_0 durch die Lösung der Differentialgleichung einen Punkt im Phasenraum zuordnet. Der Hauptsatz der Hamilton-Theorie lautet: Der Lösungsoperator eines Hamilton-Systems erfüllt für bel. feste t, t_0 die Eigenschaft

$$\frac{d\Phi^T}{dy} J \frac{d\Phi}{dy} = J, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix},$$

d.h. der Fluss des Hamilton-Systems ist symplektisch. Wird der Fluss der numerischen Lösung mit $\phi(t_0 + h, t_0)y$ bezeichnet, so heißt ein numerisches Verfahren symplektisch, falls der numerische Fluss symplektisch ist, also gilt

$$\frac{d\phi^T}{dy} J \frac{d\phi}{dy} = J.$$

Durch die Erhaltung der geometrischen Struktur sind symplektische Verfahren für die Lösung vieler Systeme, besonders wenn es auf das qualitative Verhalten der Lösung ankommt, besser geeignet. Ein guter Einblick in die Bedeutung geometrischer Integration kann z.B. in [12], [25] und [27] gefunden werden. Die geometrische numerische Integration ist ein aktuelles Forschungsgebiet von großer Bedeutung. Dies hat dazu geführt, dass viele Forscher ein Verfahren dann als geeignet für hochoszillatorische Probleme der Moleküldynamik ansehen, wenn es symplektisch ist. Dabei ist die Bedeutung der Eigenschaft der Symplektizität für die hochoszillatorischen Probleme unklar. In [12] wurde eine reversible KAM-Theorie entwickelt, die für symmetrische Verfahren dieselben guten Eigenschaften nachweist wie für symplektische Verfahren. Eines ist aber klar: Weder aus der Symmetrie noch der Symplektizität eines Integrators folgt, dass er ein Lange-Zeitschritt-Integrator ist. Bestes Beispiel hierfür ist das Verlet-Schema selbst. Es ist symplektisch und symmetrisch, aber kein Lange-Zeitschritt-Integrator. Für den Nachweis, dass ein Verfahren ein Lange-Zeitschritt-Integrator ist, muss eine Ordnungsschranke für den globalen

Fehler unabhängig von der Norm von f_y , d.h. unabhängig von den hohen Frequenzen, nachgewiesen werden. Da es nicht leicht ist, solche Verfahren abzuleiten, und bisher keine Anhaltspunkte in der Literatur bekannt sind, warum symplektische Verfahren vorteilhaft sind, werden im Verlauf der Arbeit hauptsächlich symmetrische Verfahren betrachtet, die nicht oder nur für Spezialfälle symplektisch sind. Die Bedeutung der Symmetrie für die hochoszillatorischen Systeme ist nachgewiesen (vgl. [12], Kapitel 13). Daher ist die Beschränkung auf symmetrische Verfahren gerechtfertigt. Symmetrische Lange-Zeitschritt-Methoden sind einfacher abzuleiten als symplektische.

1.4 Splitting-Verfahren

Mit $z = [q, p] = [y, \dot{y}]$ ist das oszillatorische Moleküldynamiksystem in der 1. Ordnung-Formulierung vom Typ

$$\dot{z} = f_1(z) + f_2(z), \quad (1.2)$$

wobei $f_1(z)$ z.B. die schnellen Kräfte und $f_2(z)$ die langsamen Kräfte bezeichnet. Mit $\phi_h^{[1]}$ bzw. $\phi_h^{[2]}$ wird der exakte Fluss des Systems $\dot{z} = f_1(z)$ bzw. $\dot{z} = f_2(z)$ bezeichnet. Ein einfaches Näherungsschema ist dann

$$\phi_h^{[1]} \circ \phi_h^{[2]}.$$

Statt die Differentialgleichung komplett zu lösen, wird der jeweils andere Teil ignoriert und anschließend werden die Lösungen kombiniert. Diese Näherung wird auch als Lie-Trotter-Formel bezeichnet (vgl. [28]). Ein weiteres Splitting ist das Strang-Splitting (vgl. [26]):

$$\phi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \phi_h^{[1]} \circ \phi_{\frac{h}{2}}^{[2]}.$$

Wird ein separables Hamilton-System mit Hamiltonfunktion $H(p, q) = T(p) + V(q)$ in kinetische und potentielle Energie aufgespalten, und die dazugehörigen Systeme mit ϕ^V bzw. ϕ^T bezeichnet, dann ist das Strang-Splitting

$$\phi_{\frac{h}{2}}^V \circ \phi_h^T \circ \phi_{\frac{h}{2}}^V$$

nichts anderes als das Verlet-Schema.

Diese Idee, die Differentialgleichung aufzuspalten, lässt sich iterativ anwenden und es ergeben sich Splittings beliebiger klassischer Ordnung.

Wird die Lösung von $\phi_h^{[1]}$ bzw. $\phi_h^{[2]}$ durch ein numerisches Verfahren berechnet, ergeben sich numerische Splitting-Verfahren. Sind dabei die numerischen Verfahren in einem symmetrischen Splitting, wie dem Strang-Splitting, symmetrisch, so ist auch die Komposition symmetrisch. Sind die Näherungsverfahren symplektisch, so ist auch das kombinierte Verfahren symplektisch. Diese Eigenschaften machen die Splitting-Verfahren in der Moleküldynamik sehr beliebt.

Ist die 1. Ordnung-Formulierung der Differentialgleichung so aufgespalten, dass f_1 die Kräfte aus dem Potential der kinetischen Energie und die schnellen Kräften beinhaltet und f_2 die langsamen Kräfte, dann entsteht aus dem Strang-Splitting, wenn $\phi_h^{[1]}$ mit einem numerischen Verfahren kleiner Schrittweite gelöst wird und $\phi_h^{[2]}$ mit einem expliziten Eulerschritt gelöst wird,

ein einfacher Fall der Impuls-Methode (vgl. [10], [29]). Sie lässt sich auch schreiben als

$$\phi_{\frac{h}{2}}^{[2]} \circ \underbrace{\phi_{\frac{h}{N}}^{[1]} \circ \dots \circ \phi_{\frac{h}{N}}^{[1]}}_{N\text{-mal}} \circ \phi_{\frac{h}{2}}^{[2]}.$$

Dieses Verfahren stellt schon eine deutliche Verbesserung gegenüber dem Verlet-Schema dar. Es wird für größere Schrittweiten nicht sofort instabil. Es ist aber auch keine Lange-Zeitschritt-Methode in dem Sinn, dass von ihm die Eigenschaft einer Ordnungsbedingung unabhängig der Norm der Jacobimatrix von f_1 nachgewiesen werden kann. Es lässt sich zeigen, dass das Verfahren für ein einfaches System bereits eine Ordnungsreduktion von zwei auf eins in den Orten und von zwei auf Null in den Impulsen durchläuft (vgl. [9]). In diesen Bereichen hat die numerische Lösung zumindest in den Impulsen wenig mit der tatsächlichen Lösung des Systems zu tun. In [9] werden aus diesem Verfahren die ersten Lange-Zeitschritt-Verfahren entwickelt. Dabei konnte diese Eigenschaft nur für Systeme mit linearer Funktion $f_1(y) = -Ay$, d.h. für oszillatorische Systeme mit konstanter Matrix, nachgewiesen werden, und nicht unter den allgemeineren Voraussetzungen, die in dieser Arbeit gestellt werden.

1.5 Exponentielle Integratoren

Um die Idee eines exponentiellen Integrators zu vermitteln, wird zunächst der einfachste exponentielle Integrator (vgl. [17]) vorgestellt. Um das 1. Ordnung-Differentialgleichungssystem

$$\dot{y} = Ay + g(y) = f(y) \tag{1.3}$$

zu lösen, wird zunächst die Lösungsdarstellung mit Hilfe der Variation-der-Konstanten-Formel betrachtet:

$$y(t+h) = e^{hA}y(t) + \int_t^{t+h} e^{(t+h-s)A}g(y(s)) ds.$$

Wird $y(s)$ unter dem Integral durch die einzig bekannte Stelle $y(t)$ ersetzt, folgt

$$y(t+h) = e^{hA}y(t) + \int_t^{t+h} e^{(t+h-s)A}g(y(t)) ds + r(h),$$

mit

$$r(h) = \int_t^{t+h} e^{(t+h-s)A}(g(y(s)) - g(y(t))) ds.$$

In erster Näherung ergibt sich also

$$y(t+h) = e^{hA}y(t) + h\phi(hA)g(y(t)) = y(t) + h\phi(hA)f(y(t)),$$

mit

$$\phi(x) = \frac{e^x - 1}{x}.$$

Da hierbei die Exponentialfunktion für die Matrix A ausgewertet werden muss, heißt das Verfahren

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(hA)f(y_n)$$

exponentieller Integrator. Ist $g(y(t))$ glatt, so hat das Verfahren die Ordnung 2, wie sich am Fehlerterm erkennen lässt.

Nach dieser Kurzeinführung wird nun zu den Systemen zweiter Ordnung übergegangen. Betrachtet wird eine Differentialgleichung der Form

$$\ddot{y} = -Ay + g(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0$$

bzw. mit $p = \dot{y}, q = y$

$$\begin{bmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ g(y) \end{bmatrix}.$$

Die exakte Lösung lässt sich mit Hilfe der Variaton-der-Konstanten-Formel darstellen als:

$$\begin{bmatrix} y(t) \\ \dot{y}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(t - t_0)\Omega & \Omega^{-1} \sin(t - t_0)\Omega \\ -\Omega \sin(t - t_0)\Omega & \cos(t - t_0)\Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(t_0) \\ \dot{y}(t_0) \end{bmatrix} + \int_{t_0}^t \begin{bmatrix} \Omega^{-1} \sin(t - s)\Omega \\ \cos(t - s)\Omega \end{bmatrix} g(y(s)) ds.$$

Dies legt mit $\Omega = \sqrt{A}$ Verfahren der Form

$$\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \dot{y}_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos h\Omega & \Omega^{-1} \sin h\Omega \\ -\Omega \sin h\Omega & \cos h\Omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_n \\ \dot{y}_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\Psi g_n \\ \frac{1}{2}(\Psi_0 g_n + \Psi_1 g_{n+1}) \end{bmatrix}$$

mit $g_n = g(\Phi y_n)$, $\Phi = \phi(h\Omega)$, $\Psi = \psi(h\Omega)$, $\Psi_0 = \psi_0(h\Omega)$, $\Psi_1 = \psi_1(h\Omega)$ mit Funktionen $\phi, \psi, \psi_0, \psi_1$ nahe, die glatt von x^2 abhängen (vgl. [11]). Für $\phi(0) = \psi(0) = \psi_0(0) = \psi_1(0) = 1$ hat das Verfahren die klassische Ordnung 2. Durch Austausch von $n \leftrightarrow n+1$, $h \leftrightarrow -h$ lässt sich erkennen, dass das Verfahren für

$$\psi(x) = \text{sinc } x \phi_1(x), \quad \psi_0(x) = \cos x \psi_1(x)$$

symmetrisch ist. Das Verfahren ist symplektisch, wenn zusätzlich $\phi(x) = \Psi_1(x)$ gilt. Für die Funktionen

$$\psi(x) = \text{sinc}^2 x, \quad \phi(x) = \text{sinc } x$$

ist das Verfahren in [9] mit der gedämpften Impuls-Methode identisch, für das als erstes bewiesen wurde, dass das Verfahren für Systeme des Typs (1.3) eine Lange-Zeitschritt-Methode darstellt. Der neue Satz für allgemeinere Systeme in Abschnitt 3.2 liefert für eine große Anzahl von Funktionen $\phi, \psi, \psi_0, \psi_1$ Bedingungen, unter denen das Verfahren nicht-glatte Ordnung 2 in den Orten und 1 in den Impulsen besitzt, indem die Ergebnisse auf den vorliegenden Spezialfall angewendet werden. Diese Ergebnisse sind neu.

Da g nicht von \dot{y}_n abhängt, lässt sich das System als Zweischrittverfahren schreiben (vgl. [11]):

$$y_{n+1} - 2 \cos h\Omega y_n + y_{n-1} = h^2 \Psi g_n.$$

Die Impulse können, falls für die Eigenwerte ω von Ω gilt, dass sie nicht in der Nähe von $k\pi$ liegen, durch

$$y_{n+1} - y_{n-1} = 2h \text{sinc } h\Omega \dot{y}_n$$

gewonnen werden. Eine bessere Methode liefert die Rekursion

$$\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} = -2\Omega \sin h\Omega y_n + \frac{1}{2}(\Psi_1 g_{n+1} + 2\Psi_0 g_n + \Psi_1 g_{n-1}).$$

Für das Verfahren

$$\psi(x) = \text{sinc } \frac{x}{2}, \quad \psi_1(x) = 0, \quad \psi_0 = 2 \text{sinc}(x)$$

wird in [16] gezeigt, dass dieses Verfahren für Systeme des Typs (1.3) ebenfalls einen Lange-Zeitschritt-Integrator darstellt.

1.6 Nichtlineare Methoden

Als nichtlineare Integratoren sollen solche bezeichnet werden, die zur numerischen Lösung einer Differentialgleichung die exakte Lösung einer nichtlinearen Differentialgleichung verwenden. Ein Beispiel ist das in [9] angegebene gedämpfte Impuls-Verfahren. Lässt die Differentialgleichung ein Splitting (1.2) zu, kann das gedämpfte Impuls-Verfahren dargestellt werden als:

$$\begin{aligned} p_n^+ &= p_n + \frac{h}{2} A_q(h, q_n)^T f_2(A(h, q_n)q_n) \\ \begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1}^- \end{bmatrix} &= \phi_h^{[1]} \left(\begin{bmatrix} q_n \\ p_n^+ \end{bmatrix} \right) \\ p_{n+1} &= p_{n+1}^- + \frac{h}{2} A_q(h, q_{n+1})^T f_2(A(h, q_{n+1})q_{n+1}). \end{aligned}$$

Die Dämpfung $A(h, q_n)$ ergibt sich mit Hilfe einer Mittelungsfunktion $\psi(t)$ und von

$$\begin{bmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{bmatrix} = \phi_t^{[1]} \left(\begin{bmatrix} q_n \\ 0 \end{bmatrix} \right)$$

zu

$$A(h, q_n) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(\frac{t}{h}\right) \tilde{q}(t) dt.$$

Um die Lösung $\phi_t^{[1]}$ der Differentialgleichung $\dot{z} = f_1(z)$ zu berechnen, wird wieder ein Verfahren mit kleiner Schrittweite verwendet. Zur Berechnung der Jacobimatrix muss die Variationsgleichung entlang der Lösung ebenfalls numerisch berechnet werden. Das ist eine Matrixdifferentialgleichung und der Aufwand ist daher für große Matrixdimensionen sehr groß.

Die Zweischrittverfahren wurden ebenfalls in einer nichtlinearen Variante vorgeschlagen (vgl. [16]). Zur Lösung der Differentialgleichung

$$\ddot{y} = f(y) + g(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0,$$

wird im n -ten Schritt zunächst eine Mittelung \bar{y}_n von y_n berechnet. Das kann z.B. wie bei den Einschrittverfahren erreicht werden. Anschließend werden mit Hilfe der Lösung u von

$$\ddot{u} = f(u) + g(\bar{y}_n), \quad u(0) = y_n, \quad \dot{u}(0) = \dot{y}_n,$$

die neuen Näherungen y_{n+1} und \dot{y}_{n+1} aus

$$\begin{aligned} y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} &= u(h) - 2u(0) + u(-h), \\ \dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} &= \dot{u}(h) - \dot{u}(-h) \end{aligned}$$

berechnet. Der Aufwand bei dieser Methode ist, zumindest wenn eine Mittelung wie bei den Einschrittverfahren vorgeschlagen verwendet wird, ebenfalls groß.

Die nichtlinearen Einschritt- und Zweischrittverfahren werden in dieser Arbeit nicht näher untersucht. Neben des größeren Aufwandes steht die theoretische Analyse vor demselben Problem wie bei vielen nichtlinearen Methoden in der Numerik. Es ist sehr wahrscheinlich möglich mit den Methoden, die in dieser Arbeit vorgestellt werden, und der nichtlinearen Variation-der-Konstanten-Formel zu zeigen, dass die nichtlinearen Varianten unter den gemachten Voraussetzungen dieselben guten Eigenschaften wie die exponentiellen Integratoren besitzen. Dann aber sind die exponentiellen Integratoren zur numerischen Lösung genauso gut geeignet und berechnen die Lösung mit geringerem Rechenaufwand. D.h. die nichtlineare Variante ist numerisch nicht sinnvoll.

Kapitel 2

Ein einfacher exponentieller Integrator für die nichtautonome, lineare, oszillatorische, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung

In Abschnitt 2.1 wird zuerst eine analytische Darstellung der exakten Lösung der nichtautonomen, linearen und homogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung angegeben. Diese ist für die späteren Untersuchungen besonders geeignet.

Ein einfacher exponentieller Integrator wird im Abschnitt 2.3 vorgestellt. Dabei erweist sich die Konvergenzanalyse als mühsam, gibt allerdings das exakte Verhalten des numerischen Verfahrens wieder, wie in Abschnitt 2.5 an einfachen Beispielen gezeigt wird.

2.1 Eine Darstellung der Lösung (mit funktionalanalytischen Hilfsmitteln)

Zunächst wird die exakte Lösung der Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\ddot{y} = -A(t)y, \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0, \quad (2.1)$$

bzw. des äquivalenten Systems erster Ordnung mit $q = y$, $p = \dot{y}$

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p, & q(t_0) &= y_0, \\ \dot{p} &= -A(t)q, & p(t_0) &= \dot{y}_0, \end{aligned} \quad (2.2)$$

untersucht. Dabei sei, im Intervall $I = [t_0, t_0 + T]$, $A(t) \in C^{(1)}(I, \mathbb{R}^{n \times n})$ eine symmetrisch positiv-semidefinite Matrix mit

$$\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1, \quad \forall t \in I,$$

aber beliebig großer Norm $\|A(t)\|_2 \gg 1$. Je nach Bedarf wird zusätzlich $\|\ddot{A}(t)\|_2 \leq N_2$ gefordert.

Mit Hilfe der Variation-der-Konstanten-Formel lässt sich die Lösung mit fest gewähltem $\tau \in I$ und mit der Matrixwurzel

$$\Omega(\tau) = \sqrt{A(\tau)},$$

die für symmetrisch positiv-semidefinite Matrizen existiert, darstellen als:

$$\begin{aligned} y(t) &= \cos(t - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \Omega^{-1}(\tau) \sin(t - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) \\ &\quad + \int_{t_0}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t - s)\Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= -\Omega(\tau) \sin(t - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \cos(t - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) \\ &\quad + \int_{t_0}^t \cos(t - s)\Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dabei wird die Konvention verwendet, dass die erste Matrix nach einer analytischen Funktion mit zum Argument gehört, um ein Klammerpaar zu sparen.

Üblicherweise ist $\tau \in I$, später wird allerdings auch ein $\tau \in J$ mit $I \subset J$, J ein kompaktes Intervall, zugelassen, ohne dass näher darauf hingewiesen wird.

Hat die Matrix Ω den Eigenwert 0, so existiert Ω^{-1} nicht. In diesem Fall wird die Darstellung

$$\Omega^{-1} \sin t\Omega = t \operatorname{sinc}(t\Omega), \quad \text{mit} \quad \operatorname{sinc}(x) = \frac{\sin x}{x},$$

verwendet. Die rechte Seite ist durch Grenzübergang auch für singuläre Ω definiert.

Im Folgenden sei

$$\|y\|_\infty := \max_{t \in [t_0, t_0+T]} \|y(t)\|_2, \quad \text{für alle } y \in C(I, \mathbb{R}^n),$$

bzw.

$$\|Y\|_\infty := \max_{t \in [t_0, t_0+T]} \|Y(t)\|_2, \quad \text{für alle } Y \in C(I, \mathbb{R}^{n \times n}),$$

wobei $\|\cdot\|_2$ die Euklidnorm, bzw. die zur Euklidnorm gehörige Matrixnorm bezeichnet. Die beiden Räume sind Banachräume. Die Normen für Vektor- und Matrixfunktionen haben dasselbe Symbol, aber aus dem Kontext ist immer klar, welche Norm gemeint ist.

Die Idee hinter der folgende Definition von Integraloperatoren ist, eine günstigere Darstellung von (2.3) bzw. (2.4) zu erreichen.

Definition 2.1 Für $y \in C(I, \mathbb{R}^n)$ bzw. $y \in C(I, \mathbb{R}^{n \times n})$ seien die beiden Operatoren

$$(S_\tau y)(t) := \int_{t_0}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t - s)\Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds \quad (2.5)$$

und

$$(\dot{S}_\tau y)(t) := \int_{t_0}^t \cos(t - s)\Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds \quad (2.6)$$

definiert. Wie üblich bezeichnet $(S_\tau^0 y)(t) = y(t)$ die Identität und S_τ^j die j -fache Iteration eines Operators, hier des Operators S_τ .

S_τ, \dot{S}_τ sind stetige Operatoren (lineare Abbildungen) mit

$$S_\tau, \dot{S}_\tau : C(I, X) \rightarrow C^{(1)}(I, X) \subset C(I, X),$$

mit $X = \mathbb{R}^n$ oder $X = \mathbb{R}^{n \times n}$.

Die Stetigkeit ergibt sich durch eine einfache Abschätzung. Für die Normen der Operatoren gilt:

$$\|S_\tau\|_{C(I, X) \rightarrow C(I, X)} \leq \frac{1}{2} T^3 N_1, \quad \text{bzw.} \quad \|\dot{S}_\tau\|_{C(I, X) \rightarrow C(I, X)} \leq T^2 N_1. \quad (2.7)$$

Die Operatornormen werden im Folgenden mit $\|\cdot\|$ bezeichnet, egal ob $X = \mathbb{R}^n$ oder $X = \mathbb{R}^{n \times n}$ gemeint ist. Die Normen können unterschiedlich sein, in den folgenden Beweisen werden die Normen aber stets mit derselben Konstante nach oben abgeschätzt.

Die Bilder der Operatoren sind differenzierbar und die Ableitungen lauten:

$$\frac{d}{dt}(S_\tau y)(t) = (\dot{S}_\tau y)(t), \quad (2.8)$$

bzw.

$$\frac{d}{dt}(\dot{S}_\tau y)(t) = -A(\tau)(S_\tau y)(t) + (A(\tau) - A(t))y(t). \quad (2.9)$$

Die angestrebte Darstellung der exakten Lösung ergibt sich nun durch Auflösen der Fixpunktgleichung

$$y = \cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) + S_\tau y$$

also

$$y = (I - S_\tau)^{-1} \left(\cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) \right).$$

Diese Lösung wird dann in die Variation-der-Konstanten-Formel (2.4) eingesetzt. Die Beweise für die Existenz der Inversen, die aus der Funktionalanalysis bekannt sind, werden teilweise wiederholt, aber nur dann, wenn die Abschätzungen unabhängig von der Norm von $A(t)$ eine Rolle spielen.

Satz 2.1 Die Lösung der Differentialgleichung (2.1) lässt sich im Intervall $I = [t_0, t_0 + T]$ unter der Voraussetzung $\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1$ darstellen als:

$$y = (I - S_\tau)^{-1}(\cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)y(t_0)) + (I - S_\tau)^{-1}(\Omega(\tau)^{-1} \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0)) \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \dot{y} &= -\Omega(\tau) \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \dot{S}_\tau(I - S_\tau)^{-1}(\cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)y(t_0)) \\ &\quad + \cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) + \dot{S}_\tau(I - S_\tau)^{-1}(\Omega(\tau)^{-1} \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0)). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ein Fundamentalsystem von (2.2) hat die Gestalt

$$Y(t, t_0) = \begin{bmatrix} ((I - S_\tau)^{-1}(\cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau)))(t) & ((I - S_\tau)^{-1}(\Omega(\tau)^{-1} \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau)))(t) \\ -\Omega(\tau) \sin(t - t_0)\Omega(\tau) + \cos(t - t_0)\Omega(\tau) + \\ \left(\dot{S}_\tau(I - S_\tau)^{-1}(\cos(\cdot - t_0)\Omega(\tau))\right)(t) & \left(\dot{S}_\tau(I - S_\tau)^{-1}(\Omega(\tau)^{-1} \sin(\cdot - t_0)\Omega(\tau))\right)(t) \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

Dabei gilt weiter: $S^j y \in C^{(j)}(I)$, d.h. die Funktionen werden im Gegensatz zur Taylorentwicklung immer glatter. In der Operatornorm gelten die Abschätzungen:

$$\|(I - S_\tau)^{-1}\| \leq \cosh(T\sqrt{TN_1}), \quad \|\dot{S}_\tau(I - S_\tau)^{-1}\| \leq T^2 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}). \quad (2.13)$$

Beweis: Der Beweis erfolgt in mehreren Schritten. Um die Darstellung übersichtlich zu gestalten, wird S, \dot{S} anstatt S_τ, \dot{S}_τ geschrieben und die Abhängigkeit von τ auf diese Weise unterdrückt. Zuerst wird gezeigt, dass die Reihe

$$(I - S)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} S^{(j)}$$

(in der Norm also) gleichmäßig konvergiert. Wir zeigen zunächst

$$\|(S^j y)(t)\|_2 \leq \frac{1}{(2j)!} (t - t_0)^{2j} T^j N_1^j \|y\|_\infty, \quad \forall t \in [t_0, t_0 + T], \quad (2.14)$$

also auch

$$\|S^j y\|_\infty \leq \frac{1}{(2j)!} T^{2j} (\sqrt{TN_1})^{2j} \|y\|_\infty,$$

und damit

$$\|S^j\| \leq \frac{1}{(2j)!} (T\sqrt{TN_1})^{2j}.$$

Die Behauptung (2.14) wird durch vollständige Induktion nach j bewiesen. Für $j = 0$ ist die Aussage klar. Der Schritt von $j - 1 \rightarrow j$ ergibt sich durch

$$\begin{aligned} \|(S^j y)(t)\|_2 &= \left\| \int_{t_0}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) (S^{j-1} y)(s) ds \right\|_2 \\ &\leq \int_{t_0}^t (t-s) \|((t-s)\Omega(\tau))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau)\|_2 TN_1 \|(S^{j-1} y)(s)\|_2 ds \\ &\stackrel{I.V.}{\leq} \int_{t_0}^t (t-s) \frac{1}{(2(j-1))!} (s-t_0)^{2j-2} ds T^j N_1^j \|y\|_\infty \\ &= \frac{1}{(2j)!} (t-t_0)^{2j} T^j N_1^j \|y\|_\infty. \end{aligned}$$

Damit folgen weiter die Abschätzungen:

$$\left\| \sum_{j=0}^{\infty} S^j y \right\|_\infty \leq \sum_{j=0}^{\infty} \|S^j y\|_\infty \leq \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(2j)!} T^{2j} (\sqrt{TN_1})^{2j} \|y\|_\infty = \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|y\|_\infty,$$

bzw. wegen (2.7)

$$\|\dot{S} \sum_{j=0}^{\infty} S^j y\|_\infty \leq \|\dot{S}\| \sum_{j=0}^{\infty} \|S^j y\|_\infty \leq T^2 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|y\|_\infty.$$

Damit wurde eine konvergente Majorante gefunden. Es existieren die Grenzwerte der unendlichen Reihen gleichmäßig und die erhaltenen Funktionen sind stetig. Da $y \in C$ beliebig war, folgt (2.13).

Wird im Raum der $C(I, \mathbb{R}^{n \times n})$ mit der obigen Matrixnorm gearbeitet, folgt die Existenz der angegebenen Reihen auch für die Matrixfunktionen.

Jetzt wird noch nachgerechnet, dass die angegebenen Funktionen tatsächlich das Anfangswertproblem lösen. Es ist klar, dass die Funktionen die richtigen Anfangswerte annehmen. Die zunächst formale gliedweise Differentiation von (2.10) ergibt (2.11), wobei

$$\frac{d}{dt} (S^j y)(t) = \frac{d}{dt} (S(S^{j-1} y))(t) \stackrel{(2.8)}{=} (\dot{S}(S^{j-1} y))(t) = (\dot{S} S^{j-1} y)(t)$$

für $j \geq 1$ verwendet wird. Da diese Reihe gleichmäßig konvergiert, ist y differenzierbar und (2.11) die Ableitung. Unter Beachtung von

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\dot{S}S^j y)(t) &= \frac{d}{dt}(\dot{S}(S^j y))(t) \stackrel{(2.9)}{=} -A(\tau)(S(S^j y))(t) + (A(\tau) - A(t))(S^j y)(t) \\ &= -A(\tau)(S^{j+1} y)(t) + (A(\tau) - A(t))(S^j y)(t)\end{aligned}$$

ergibt die zunächst wieder formale gliedweise Differentiation von (2.11):

$$\begin{aligned}\ddot{y}(t) &= -A(\tau) \cos(t - t_0) \Omega(\tau) y(t_0) \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} \left[-A(\tau)(S^{j+1}(\cos(\cdot - t_0) \Omega(\tau) y(t_0)))(t) \right. \\ &\quad \left. + (A(\tau) - A(t))(S^j(\cos(\cdot - t_0) \Omega(\tau) y(t_0)))(t) \right] \\ &- \Omega(\tau) \sin(t - t_0) \Omega(\tau) \dot{y}(t_0) \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} \left[-A(\tau)(S^{j+1}(\Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0) \Omega(\tau) \dot{y}(t_0)))(t) \right. \\ &\quad \left. + (A(\tau) - A(t))(S^j(\Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0) \Omega(\tau) \dot{y}(t_0)))(t) \right].\end{aligned}$$

Da diese Reihen wieder gleichmäßig konvergieren, ist $\dot{y}(t)$ differenzierbar und Zusammenfassen der Reihen ergibt:

$$\begin{aligned}\ddot{y}(t) &= -A(t) \left(\sum_{j=0}^{\infty} S^j(\cos(\cdot - t_0) \Omega(\tau) y(t_0))(t) + \sum_{j=0}^{\infty} S^j(\Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0) \Omega(\tau) \dot{y}(t_0))(t) \right) \\ &= -A(t) y(t).\end{aligned}$$

Bei der obigen Rechnung wurde nie $y \in C(I, \mathbb{R}^n)$ benutzt. Dieselbe Rechnung gilt also auch für Matrixfunktionen. Die Tatsache, dass

$$\sum_{j=0}^{\infty} S^j(\cos(\cdot - t_0) \Omega(\tau) y(t_0))(t) = \left(\sum_{j=0}^{\infty} S^j(\cos(\cdot - t_0) \Omega(\tau))(t) \right) y(t_0),$$

gilt, bzw. die äquivalente Vertauschung bei den anderen Termen, zeigt die behauptete Darstellung der Fundamentalmatrix (2.12). \square

Um später Integratoren abzuleiten, die unabhängig von $\|A(t)\|_2$ gute Ergebnisse liefern, ist es wichtig zu wissen, an welchen Stellen $\|A(t)\|_2$ in die exakte Lösung der Differentialgleichung (2.1) eingeht. Mit den Abschätzungen (2.13) und wegen

$$\|\Omega^{-1}(\tau) \sin(\cdot - t_0) \Omega(\tau) \dot{y}(t_0)\|_{\infty} \leq T \|\dot{y}(t_0)\|_2$$

folgt sofort

$$\|y\|_{\infty} \leq \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|y(t_0)\|_2 + T \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|\dot{y}(t_0)\|_2. \quad (2.15)$$

$\|y\|_{\infty}$ hängt auf dem Lösungsintervall also nur von den Anfangswerten, T und N_1 , also der Ableitung von $A(t)$, aber nicht von $\|A(t)\|_2$ ab. Für die Impulse folgt dagegen:

$$\begin{aligned}\|\dot{y}\|_{\infty} &\leq \|\Omega(\tau)\|_2 \|y(t_0)\|_2 + T^2 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|y(t_0)\|_2 \\ &\quad + \|\dot{y}(t_0)\|_2 + T^3 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}) \|\dot{y}(t_0)\|_2.\end{aligned}$$

$\|\dot{y}\|_\infty$ hängt also von $\|\Omega(\tau)\|_2$ ab. In der Regel kann dieser Term bei großer Norm von $\Omega(\tau)$ nicht umgangen werden. \square

Für die Normen der Teilmatrizen der Fundamentalmatrix ergeben sich die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \|Y_{11}(t, t_0)\|_2 &\leq \cosh(T\sqrt{TN_1}), & \|Y_{12}(t, t_0)\|_2 &\leq T \cosh(T\sqrt{TN_1}), \\ \|Y_{22}(t, t_0)\|_2 &\leq 1 + T^3 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

aber

$$\|Y_{21}(t, t_0)\|_2 \leq \|\Omega(\tau)\|_2 + T^2 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1}).$$

D.h. die Norm der linken unteren Teilmatrix der Fundamentalmatrix ist als einzige nicht unabhängig von $\|\Omega(\tau)\|_2$ bzw. $\|A(\tau)\|_2$ beschränkt.

2.2 Eigenschaften des Integraloperators S

Später werden noch weitere Eigenschaften der Fundamentalmatrix benötigt. Um diese einsehen zu können, muss der Integraloperator S ausführlicher untersucht werden.

Im Intervall $I = [t_0, t_0 + T]$ werde der folgende Operator betrachtet:

$$(S_{\tau, \nu} y)(t) := \int_{\nu}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds.$$

Es werden wieder dieselben Räume wie oben betrachtet. Für den Operator gilt ebenfalls

$$S_{\tau, \nu} : C(I, X) \rightarrow C^{(1)}(I, X) \subset C(I, X).$$

Die Räume $X = \mathbb{R}^n$ bzw. $X = \mathbb{R}^{n \times n}$ seien dabei wieder mit denselben Normen versehen wie zuvor. Der Operator S_τ aus Satz 2.1 ist gerade der Operator S_{τ, t_0} .

Satz 2.2 $\forall \tau, \nu \in I$ ist $S_{\tau, \nu}$ beschränkt, also stetig,

$$(I - S_{\tau, \nu})^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} S_{\tau, \nu}^l$$

existiert und es gilt die Abschätzung

$$\|(I - S_{\tau, \nu})^{-1}\| \leq \cosh(T\sqrt{TN_1}).$$

Beweis: Durch vollständige Induktion wird zunächst bewiesen:

$$\|(S_{\tau, \nu}^l y)(t)\|_2 \leq \frac{1}{(2l)!} (t - \nu)^{2l} N_1^l T^l \|y\|_\infty, \quad \forall t \in I.$$

Der Induktionsanfang ist klar. Der Induktionsschritt lautet:

$$\begin{aligned}
l-1 &\rightarrow l: \\
\|(S_{\tau,\nu}^l y)(t)\|_2 &= \left\| \int_{\nu}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) (S_{\tau,\nu}^{l-1} y)(s) ds \right\|_2 \\
\|(S_{\tau,\nu}^l y)(t)\|_2 &\leq \int_{\nu}^t |t-s| \|((t-s)\Omega(\tau))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau)\|_2 N_1 T \| (S_{\tau,\nu}^{l-1} y)(s) \|_2 ds \\
&\leq \int_{\nu}^t |t-s| \|((t-s)\Omega(\tau))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau)\|_2 \\
&\quad \frac{1}{(2(l-1))!} (s-\nu)^{2(l-1)} N_1^l T^l ds \|y\|_{\infty} \\
&\leq \int_{\nu}^t |t-s| \frac{1}{(2l-2)!} (s-\nu)^{2l-2} ds N_1^l T^l \|y\|_{\infty} \\
&= \frac{1}{(2l)!} (t-\nu)^{2l} N_1^l T^l \|y\|_{\infty}.
\end{aligned}$$

Damit folgt sofort

$$\|S_{\tau,\nu}^l y\|_{\infty} = \max_{t \in [t_0, t_0+T]} \|(S_{\tau,\nu}^l y)(t)\|_2 \leq \frac{1}{(2l)!} T^{2l} N_1^l T^l \|y\|_{\infty}.$$

Da y beliebig war, folgt also:

$$\|S_{\tau,\nu}^l\| \leq \frac{1}{(2l)!} (T\sqrt{N_1 T})^{2l},$$

also

$$\left\| \sum_{l=0}^{\infty} S_{\tau,\nu}^l \right\| \leq \cosh(T\sqrt{N_1 T}).$$

Damit existiert der Operator

$$(I - S_{\tau,\nu})^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} S_{\tau,\nu}^l.$$

□

Lemma 2.3 Für den Operator $(I - S_{\tau,\nu})^{-1}$ gilt $\forall \tau_1, \tau_2, \nu_1, \nu_2 \in I$

$$\|(I - S_{\tau_1,\nu_1})^{-1} - (I - S_{\tau_2,\nu_2})^{-1}\| \leq \|S_{\tau_1,\nu_1} - S_{\tau_2,\nu_2}\| \cosh(2T\sqrt{TN_1}).$$

Beweis: Es gilt:

$$\left\| \sum_{l=0}^{\infty} S_{\tau_1,\nu_1}^l - \sum_{l=0}^{\infty} S_{\tau_2,\nu_2}^l \right\| = \left\| \sum_{l=0}^{\infty} (S_{\tau_1,\nu_1}^l - S_{\tau_2,\nu_2}^l) \right\| \leq \sum_{l=0}^{\infty} \|S_{\tau_1,\nu_1}^l - S_{\tau_2,\nu_2}^l\|.$$

Dabei gilt für alle $l \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
\|S_{\tau_1, \nu_1}^l - S_{\tau_2, \nu_2}^l\| &= \left\| \sum_{k=0}^{l-1} S_{\tau_1, \nu_1}^{l-1-k} (S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}) S_{\tau_2, \nu_2}^k \right\| \\
&\leq \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \sum_{k=0}^{l-1} \|S_{\tau_1, \nu_1}^{l-1-k}\| \|S_{\tau_2, \nu_2}^k\| \\
&\leq \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \sum_{k=0}^{l-1} \frac{1}{(2(l-1-k))!} (T\sqrt{TN_1})^{2(l-1-k)} \frac{1}{(2k)!} (T\sqrt{TN_1})^{2k} \\
&= \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \sum_{k=0}^{l-1} \frac{1}{(2k)!} \frac{1}{(2(l-1-k))!} (2(l-1))! \frac{(T\sqrt{TN_1})^{2(l-1)}}{(2(l-1))!} \\
&\leq \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \underbrace{\sum_{k=0}^{2l-2} \frac{1}{k!} \frac{1}{(2(l-1)-k)!} (2(l-1))!}_{(1+1)^{(2l-2)} = 2^{2l-2}} \frac{(T\sqrt{TN_1})^{2(l-1)}}{(2(l-1))!} \\
&\leq \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| (2T\sqrt{TN_1})^{2l-2} \frac{1}{(2l-2)!}.
\end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
\left\| \sum_{l=0}^{\infty} (S_{\tau_1, \nu_1}^l - S_{\tau_2, \nu_2}^l) \right\| &\leq \sum_{l=1}^{\infty} \|S_{\tau_1, \nu_1}^l - S_{\tau_2, \nu_2}^l\| \leq \sum_{l=1}^{\infty} \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \frac{(2T\sqrt{TN_1})^{2l-2}}{(2l-2)!} \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \frac{(2T\sqrt{TN_1})^{2l}}{(2l)!} \\
&= \|S_{\tau_1, \nu_1} - S_{\tau_2, \nu_2}\| \cosh(2T\sqrt{TN_1}).
\end{aligned}$$

□

Lemma 2.4 Für den Operator $(I - S_{\tau, \nu})^{-1}$ gilt $\forall \nu_1, \nu_2, \tau \in I$

$$\|(I - S_{\tau, \nu_1})^{-1} - (I - S_{\tau, \nu_2})^{-1}\| \leq \frac{|\nu_1 - \nu_2|}{2} N_1 T^2 \cosh(2T\sqrt{TN_1}).$$

Beweis: Wegen Lemma 2.3 bleibt nur $\|S_{\tau, \nu_1} - S_{\tau, \nu_2}\|$ abzuschätzen. Es folgt weiter für beliebiges y und $t \in I$:

$$\begin{aligned}
\|((S_{\tau, \nu_1} - S_{\tau, \nu_2})y)(t)\|_2 &= \left\| \int_{\nu_1}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds \right. \\
&\quad \left. - \int_{\nu_2}^t \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds \right\|_2 \\
&= \left\| \int_{\nu_1}^{\nu_2} \Omega^{-1}(\tau) \sin(t-s) \Omega(\tau) (A(\tau) - A(s)) y(s) ds \right\|_2 \\
&\leq \left| \int_{\nu_1}^{\nu_2} |t-s| ds N_1 T \|y\|_{\infty} \right| \\
&\leq \frac{|\nu_2 - \nu_1|}{2} N_1 T^2 \|y\|_{\infty}
\end{aligned}$$

Da y, t beliebig, gilt:

$$\|S_{\tau, \nu_1} - S_{\tau, \nu_2}\| \leq \frac{|\nu_2 - \nu_1|}{2} N_1 T^2.$$

□

Wichtigstes Ergebnis für die späteren Untersuchungen sind Abschätzungen, wie sich die Teilmatrizen der Fundamentalmatrix gegenüber Störungen in t verhalten. Zum Beispiel gilt der folgende Satz:

Satz 2.5 Für die Teilmatrix Y_{12} der Fundamentalmatrix gilt mit $t_j = t_0 + jh \in I$, $h \in \mathbb{R}^+$

$$\|Y_{12}(t_n, t_{j+1}) - Y_{12}(t_n, t_j)\| \leq h(\cosh(T\sqrt{TN_1}) + \frac{T^3 N_1}{2} \cosh(2T\sqrt{TN_1})).$$

Beweis: Zunächst wird Satz 2.1 mit $\tau = t = t_n$ und $t_0 = t_{j+1}$ bzw. $t_0 = t_j$ angewendet. Damit folgt

$$\begin{aligned} & \|Y_{12}(t_n, t_{j+1}) - Y_{12}(t_n, t_j)\|_2 \\ &= \left\| \left((I - S_{t_n, t_{j+1}})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n)) \right) (t_n) \right\|_2 \\ &\leq \left\| (I - S_{t_n, t_{j+1}})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n)) \right\|_\infty \\ &\leq \left\| (I - S_{t_n, t_{j+1}})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) \right. \\ & \quad \left. - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) \right\|_\infty \\ & \quad + \left\| (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n)) \right\|_\infty \\ &= \left\| \left((I - S_{t_n, t_{j+1}})^{-1} - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} \right) (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) \right\|_\infty \\ & \quad + \left\| (I - S_{t_n, t_j})^{-1} (\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n)) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n) \right\|_\infty \\ &\leq \left\| (I - S_{t_n, t_{j+1}})^{-1} - (I - S_{t_n, t_j})^{-1} \right\| \left\| \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n) \right\|_\infty \\ & \quad + \left\| (I - S_{t_n, t_j})^{-1} \right\| \left\| \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n) \right\|_\infty \\ &\stackrel{\text{Lemma 2.4}}{\leq} h \frac{N_1 T^3}{2} \cosh(2T\sqrt{TN_1}) \\ & \quad + \cosh(T\sqrt{TN_1}) \left\| \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega(t_n) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j) \Omega(t_n) \right\|_\infty. \end{aligned}$$

Weiter gilt mit Transformation der Matrix $\Omega(t_n)$ auf Diagonalgestalt $\Lambda(t_n) = \text{diag}(\lambda_j)$ für ein beliebiges $t \in I$:

$$\begin{aligned} & \left\| \Omega^{-1}(t_n) \sin(t - t_{j+1}) \Omega(t_n) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(t - t_j) \Omega(t_n) \right\|_2 = \\ & \quad \left\| \Lambda^{-1}(t_n) \sin(t - t_{j+1}) \Lambda(t_n) - \Lambda^{-1}(t_n) \sin(t - t_j) \Lambda(t_n) \right\|_2 \end{aligned}$$

Wegen

$$\frac{1}{\lambda_i} \sin(t - t_{j+1})\lambda_i - \frac{1}{\lambda_i} \sin(t - t_j)\lambda_i = -(t_{j+1} - t_j) \cos(t - \xi)\lambda_i,$$

für ein $\xi \in [t_j, t_{j+1}]$ folgt schließlich

$$\|\Omega^{-1}(t_n) \sin(t - t_{j+1})\Omega(t_n) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(t - t_j)\Omega(t_n)\|_2 \leq h.$$

Da $t \in I$ beliebig war, folgt also

$$\|\Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_{j+1})\Omega(t_n) - \Omega^{-1}(t_n) \sin(\cdot - t_j)\Omega(t_n)\|_\infty \leq h.$$

□

Lemma 2.6 Für den Operator $(I - S_{\tau,\nu})^{-1}$ gilt

$$\|(I - S_{\tau_1,\nu})^{-1} - (I - S_{\tau_2,\nu})^{-1}\| \leq \frac{|\tau_1 - \tau_2|}{2} T^2 N_1 \left(1 + 2TM + \frac{TD}{2}\right) \cosh(2T\sqrt{TN_1})$$

$\forall \tau_1, \tau_2, \nu \in I$ unter der zusätzlichen Annahme, dass $\Omega(t)$ die Eigenwertzerlegung

$$\Omega(t) = Q(t)\Lambda(t)Q^T(t),$$

besitzt, wobei $\Lambda(t)$ eine Diagonalmatrix und $\|\dot{Q}\| \leq M$ und $\|\dot{\Lambda}\| \leq D$ ist.

Beweis: Nach Lemma 2.3 bleibt $\|S_{\tau_1,\nu} - S_{\tau_2,\nu}\|$ abzuschätzen. Es gilt:

$$\begin{aligned} \|(S_{\tau_1,\nu} - S_{\tau_2,\nu})y\|_\infty &= \max_{t \in I} \left\| \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_1) \sin(t-s)\Omega(\tau_1)(A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right. \\ &\quad \left. - \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_2) - A(s))y(s) ds \right\|_2. \end{aligned}$$

Für $t \in I$ beliebig gilt für den Ausdruck unter der Norm:

$$\begin{aligned} \|((S_{\tau_1,\nu} - S_{\tau_2,\nu})y)(t)\|_2 &\leq \left\| \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_1) \sin(t-s)\Omega(\tau_1)(A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right. \\ &\quad \left. - \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right\|_2 \\ &+ \left\| \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right. \\ &\quad \left. - \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_2) - A(s))y(s) ds \right\|_2. \end{aligned}$$

Der zweite Term ist:

$$\begin{aligned} &\left\| \int_\nu^t \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_1) - A(\tau_2))y(s) ds \right\|_2 \\ &= \left\| \int_\nu^t (t-s) \left((t-s)\Omega(\tau_2) \right)^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_2)(A(\tau_1) - A(\tau_2))y(s) ds \right\|_2 \\ &\leq \frac{1}{2} T^2 \|A(\tau_1) - A(\tau_2)\|_2 \|y\|_\infty \leq \frac{1}{2} T^2 N_1 |\tau_2 - \tau_1| \|y\|_\infty. \end{aligned}$$

Für den ersten Term gilt

$$\begin{aligned}
& \left\| \int_{\nu}^t (\Omega^{-1}(\tau_1) \sin(t-s)\Omega(\tau_1) - \Omega^{-1}(\tau_2) \sin(t-s)\Omega(\tau_2)) (A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right\|_2 \\
& \leq \left\| \int_{\nu}^t (t-s) \left(((t-s)\Omega(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_1) - ((t-s)\Omega(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_2) \right) \right. \\
& \quad \left. (A(\tau_1) - A(s))y(s) ds \right\|_2 \\
& \leq \frac{1}{2} T^2 \max_{t \in I} \left\| ((t-s)\Omega(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_1) - ((t-s)\Omega(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_2) \right\|_2 T N_1 \|y\|_{\infty}.
\end{aligned}$$

Für $t \in I$ gilt:

$$\begin{aligned}
& \left\| ((t-s)\Omega(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_1) - ((t-s)\Omega(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_2) \right\|_2 \\
& = \left\| Q(\tau_1) ((t-s)\Lambda(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_1) Q^T(\tau_1) \right. \\
& \quad \left. - Q(\tau_2) ((t-s)\Lambda(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_2) Q^T(\tau_2) \right\|_2 \\
& \leq \left\| (Q(\tau_1) - Q(\tau_2)) ((t-s)\Lambda(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_1) Q^T(\tau_1) \right\|_2 \\
& \quad + \left\| Q(\tau_2) ((t-s)\Lambda(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_1) (Q^T(\tau_1) - Q^T(\tau_2)) \right\|_2 \\
& \quad + \left\| Q(\tau_2) \left[((t-s)\Lambda(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_1) \right. \right. \\
& \quad \quad \left. \left. - ((t-s)\Lambda(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_2) \right] Q^T(\tau_2) \right\|_2 \\
& \leq 2 \|\dot{Q}\| |\tau_1 - \tau_2| + \left\| ((t-s)\Lambda(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_1) - \right. \\
& \quad \left. ((t-s)\Lambda(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Lambda(\tau_2) \right\|_2.
\end{aligned}$$

Schließlich folgt mit

$$\frac{\sin(t-s)\lambda_i(\tau_1)}{(t-s)\lambda_i(\tau_1)} - \frac{\sin(t-s)\lambda_i(\tau_2)}{(t-s)\lambda_i(\tau_2)} = \int_{(t-s)\lambda_i(\tau_2)}^{(t-s)\lambda_i(\tau_1)} \frac{s \cos s - \sin s}{s^2} ds, \quad \forall i,$$

dass der letzte Term durch

$$\max_{s \in \mathbb{R}} \left| \frac{s \cos s - \sin s}{s^2} \right| T \|\dot{\Lambda}\|_{\infty} |\tau_2 - \tau_1| \leq \frac{1}{2} T \|\dot{\Lambda}\|_{\infty} |\tau_2 - \tau_1|$$

beschränkt ist. □

Die Voraussetzung in Lemma 2.6, dass eine Eigenwertzerlegung der Matrix $\Omega(t)$ existiert, ist nicht nötig. Um das zu beweisen, wird das folgende Lemma benötigt.

Lemma 2.7 Sind A, \tilde{A} symmetrisch positiv-semidefinite reelle Matrizen mit $\Omega = \sqrt{A}$ und $\tilde{\Omega} = \sqrt{\tilde{A}}$. Weiter sei $h > 0$. Dann gelten die Relationen

$$\begin{aligned}\cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega} &= \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos s\Omega \, ds \\ &= \int_0^h \cos(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \Omega^{-1} \sin s\Omega \, ds, \\ \Omega^{-1} \sin h\Omega - \tilde{\Omega}^{-1} \sin h\tilde{\Omega} &= \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \Omega^{-1} \sin s\Omega \, ds, \\ -\Omega \sin h\Omega + \tilde{\Omega} \sin h\tilde{\Omega} &= \int_0^h \cos(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos s\Omega \, ds.\end{aligned}$$

Beweis: Die Differenz

$$\begin{bmatrix} \cos h\Omega & \Omega^{-1} \sin h\Omega \\ -\Omega \sin h\Omega & \cos h\Omega \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \cos h\tilde{\Omega} & \tilde{\Omega}^{-1} \sin h\tilde{\Omega} \\ -\tilde{\Omega} \sin h\tilde{\Omega} & \cos h\tilde{\Omega} \end{bmatrix}$$

wird auf andere Weise aufgeschrieben. Die erste Matrix ist auch Lösung der Differentialgleichung

$$\ddot{Y} = -AY, \quad Y(0) = I, \quad \dot{Y}(0) = I.$$

bzw.

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= P, & Q(0) &= I \\ \dot{P} &= -AQ, & P(0) &= I,\end{aligned}$$

an der Stelle h .

Analog ist die zweite Matrix Lösung der Differentialgleichung

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{Q}} &= \tilde{P}, & \tilde{Q}(0) &= I \\ \dot{\tilde{P}} &= -\tilde{A}\tilde{Q}, & \tilde{P}(0) &= I,\end{aligned}$$

an der Stelle h .

Die erste Matrix ist auch Lösung von

$$\begin{aligned}\dot{Q} &= P, & Q(0) &= I, \\ \dot{P} &= -\tilde{A}Q + (\tilde{A} - A)Q, & P(0) &= I,\end{aligned}$$

an der Stelle h , oder

$$\begin{bmatrix} \dot{Q} \\ \dot{P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\tilde{A} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ P \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \tilde{A} - A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ P \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} Q(0) &= I, \\ P(0) &= I. \end{aligned}$$

Anwenden der Variation-der-Konstanten-Formel ergibt:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} Q(h) \\ P(h) \end{bmatrix} &= \exp\left(h \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\tilde{A} & 0 \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} Q \\ P \end{bmatrix} \\ &+ \int_0^h \exp\left((h-s) \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\tilde{A} & 0 \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \tilde{A} - A & 0 \end{bmatrix} \exp\left(s \begin{bmatrix} 0 & I \\ -A & 0 \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} Q \\ P \end{bmatrix} ds\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} \cos h\Omega & \Omega^{-1} \sin h\Omega \\ -\Omega \sin h\Omega & \cos h\Omega \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \cos h\tilde{\Omega} & \tilde{\Omega}^{-1} \sin h\tilde{\Omega} \\ -\tilde{\Omega} \sin h\tilde{\Omega} & \cos h\tilde{\Omega} \end{bmatrix} \\
&= \int_0^h \begin{bmatrix} \cos(h-s)\tilde{\Omega} & \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} \\ -\tilde{\Omega} \sin(h-s)\tilde{\Omega} & \cos(h-s)\tilde{\Omega} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \tilde{A} - A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos s\Omega & \Omega^{-1} \sin s\Omega \\ -\Omega \sin s\Omega & \cos s\Omega \end{bmatrix} ds \\
&= \int_0^h \begin{bmatrix} -\tilde{\Omega} \sin(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos s\Omega & \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \Omega^{-1} \sin s\Omega \\ \cos(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos s\Omega & \cos(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \Omega^{-1} \sin s\Omega \end{bmatrix} ds.
\end{aligned}$$

Vergleich der Untermatrizen ergibt die Behauptung des Lemmas. \square

Diese Relationen lassen sich auch einzeln nachrechnen. (Zum Beispiel)

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos s\Omega ds \\
&= \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} \tilde{A} \cos s\Omega ds - \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} A \cos s\Omega ds \\
&= \int_0^h \tilde{\Omega} \sin(h-s)\tilde{\Omega} \cos s\Omega ds \\
&\quad - \left[\tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega} A \Omega^{-1} \sin s\Omega \Big|_0^h + \int_0^h \cos(h-s)\tilde{\Omega} \Omega \sin s\Omega ds \right] \\
&= \cos(h-s)\tilde{\Omega} \cos s\Omega \Big|_0^h + \int_0^h \cos(h-s)\tilde{\Omega} \Omega \sin s\Omega ds - \int_0^h \cos(h-s)\tilde{\Omega} \Omega \sin s\Omega ds \\
&= \cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega}.
\end{aligned}$$

Mit Lemma 2.7 ergeben sich weitere nützliche Aussagen, so gelten die folgenden Darstellungen und Abschätzungen:

Korollar 2.8 Sind A, \tilde{A} symmetrisch positive-semidefinite reelle Matrizen mit $\Omega = \sqrt{A}$ und $\tilde{\Omega} = \sqrt{\tilde{A}}$, so gilt mit $h > 0$ die Darstellung

$$\frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \frac{\sin h\tilde{\Omega}}{h\tilde{\Omega}} = h^2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\tilde{\Omega})^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) s (hs\Omega)^{-1} \sin hs\Omega ds \quad (2.17)$$

und damit die Abschätzung

$$\left\| \frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \frac{\sin h\tilde{\Omega}}{h\tilde{\Omega}} \right\|_2 \leq \frac{h^2}{6} \left\| \tilde{A} - A \right\|_2,$$

sowie die Darstellung

$$\cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega} = h^2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\tilde{\Omega})^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega} (\tilde{A} - A) \cos hs\Omega ds \quad (2.18)$$

und damit die Abschätzung

$$\left\| \cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega} \right\|_2 \leq \frac{h^2}{2} \left\| \tilde{A} - A \right\|_2.$$

Beweis: Es handelt sich um leichte Folgerungen aus Lemma 2.7.

$$\begin{aligned}
\frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \frac{\sin h\tilde{\Omega}}{h\tilde{\Omega}} &\stackrel{\text{Lemma 2.7}}{=} \frac{1}{h} \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A)\Omega^{-1} \sin s\Omega \, ds \\
&= \int_0^1 \tilde{\Omega}^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A)\Omega^{-1} \sin hs\Omega \, ds \\
&= h^2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\tilde{\Omega})^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A)s(hs\Omega)^{-1} \sin hs\Omega \, ds,
\end{aligned}$$

also

$$\left\| \frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \frac{\sin h\tilde{\Omega}}{h\tilde{\Omega}} \right\|_2 \leq h^2 \|\tilde{A}-A\|_2 \int_0^1 (1-s)s \, ds = \frac{h^2}{6} \|\tilde{A}-A\|_2.$$

Ebenso folgt

$$\begin{aligned}
\cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega} &= \int_0^h \tilde{\Omega}^{-1} \sin(h-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A) \cos s\Omega \, ds \\
&= h \int_0^1 \tilde{\Omega}^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A) \cos hs\Omega \, ds \\
&= h^2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\tilde{\Omega})^{-1} \sin h(1-s)\tilde{\Omega}(\tilde{A}-A) \cos hs\Omega \, ds,
\end{aligned}$$

also

$$\left\| \cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega} \right\|_2 \leq h^2 \|\tilde{A}-A\|_2 \int_0^1 (1-s) \, ds = \frac{h^2}{2} \|\tilde{A}-A\|_2.$$

□

Lemma 2.9 Für den Operator $(I - S_{\tau,\nu})^{-1}$ gilt $\forall \tau_1, \tau_2, \nu \in I$:

$$\|(I - S_{\tau_1,\nu})^{-1} - (I - S_{\tau_2,\nu})^{-1}\| \leq \frac{|\tau_1 - \tau_2|}{2} T^2 N_1 \left(1 + \frac{T^3 N_1}{6} \right) \cosh(2T\sqrt{TN_1}).$$

Beweis: Der Beweis verläuft wie der Beweis von Lemma 2.6, nur dass jetzt mit Hilfe von Korollar 2.8 die Abschätzung

$$\begin{aligned}
\max_{t \in I} \left\| ((t-s)\Omega(\tau_1))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_1) - ((t-s)\Omega(\tau_2))^{-1} \sin(t-s)\Omega(\tau_2) \right\|_2 \\
\leq \frac{T^2}{6} \|A(\tau_1) - A(\tau_2)\|_2 \leq \frac{N_1 T^2}{6} |\tau_1 - \tau_2|
\end{aligned}$$

verwendet wird. □

Die meisten Ergebnisse dieses Abschnitts kann man auch über eine Darstellung mit der Variation-der-Konstanten-Formel mit weniger Funktionalanalysis erreichen. Wenn die Funktionalanalysis allerdings zur Verfügung steht, ist diese Art der Ableitung der Ergebnisse aufschlussreicher. So kann man mit der Variation-der-Konstanten-Formel alleine nicht auf einfache Weise sehen, dass die exakte Lösung der Differentialgleichung (2.1) unabhängig von der Norm von $A(t)$ beschränkt bleibt.

2.3 Ein einfacher exponentieller Integrator

Die Variation-der-Konstanten-Formel ergibt für beliebiges τ :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y(t) \\ \dot{y}(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(t-t_0)\Omega(\tau) & \Omega(\tau)^{-1}\sin(t-t_0)\Omega(\tau) \\ -\Omega(\tau)\sin(t-t_0)\Omega(\tau) & \cos(t-t_0)\Omega(\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(t_0) \\ \dot{y}(t_0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_{t_0}^t \begin{bmatrix} \Omega(\tau)^{-1}\sin(t-s)\Omega(\tau) \\ \cos(t-s)\Omega(\tau) \end{bmatrix} (A(\tau) - A(s))y(s) ds. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Dabei wird unter dem Integral eine vereinfachte Schreibweise verwendet. Wird die Variation-der-Konstanten-Formel mit dem Startwert t_n statt t_0 und $\tau = t_n + \frac{h}{2}$ angewendet, legt dies das folgende einfache Näherungsschema nahe:

$$\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \dot{y}_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_n \\ \dot{y}_n \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

mit der Schreibweise $\Omega(t_n + \frac{h}{2}) = \Omega_{n+1/2}$. Das Verfahren ist symmetrisch.

Um das Fehlerverhalten im „nicht-glatten“ Fall zu untersuchen, wird ein Rückwärts-Fehleranalyse-Argument benutzt. Die Ursprünge dieser Technik liegen in der numerischen linearen Algebra (vgl. [32]). Ihre Bedeutung für die Analyse von Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen wurde erst später entdeckt. Eine Einführung und viele Referenzen auf Originalarbeiten lassen sich z.B. in [12] und [27] finden.

Im Folgenden wird streng genommen ein leicht verallgemeinerter Lösungsbegriff einer Differentialgleichung verwendet. Es werden solche Lösungen noch zugelassen, die stetig und bis auf eine endliche Menge an Punkten differenzierbar sind und überall, wo sie differenzierbar sind, die Differentialgleichung erfüllen.

Satz 2.10 *Die numerische Lösung definiert durch Schema (2.20) erfüllt $y_n = \tilde{y}(t_n)$, $\dot{y}_n = \dot{\tilde{y}}(t_n)$, wobei \tilde{y} die exakte Lösung der Differentialgleichung 2. Ordnung*

$$\ddot{\tilde{y}} = - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(t) A_{j+1/2} \tilde{y}, \quad \tilde{y}(t_0) = y_0, \quad \dot{\tilde{y}}(t_0) = \dot{y}_0, \quad (2.21)$$

bzw. des Systems ($\tilde{q} = \tilde{y}$, $\dot{\tilde{y}} = \tilde{p}$)

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{q}} &= \tilde{p}, & \tilde{q}(t_0) &= y_0, \\ \dot{\tilde{p}} &= - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(t) A_{j+1/2} \tilde{q}, & \tilde{p}(t_0) &= \dot{y}_0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

ist.

Beweis: Die rechte Seite von System (2.22) erfüllt eine Lipschitz-Bedingung. Der Beweis des Satzes von Picard-Lindelöf kann auf Systeme dieses Typs übertragen werden, um zu zeigen, dass dieses System eine stetige, bis auf die Stellen t_j differenzierbare, eindeutige Lösung besitzt. Für $t \in [t_0, t_1)$ lautet das System (2.22)

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{q}} &= \tilde{p}, & \tilde{q}(t_0) &= y_0, \\ \dot{\tilde{p}} &= -A_{1/2} \tilde{q}, & \tilde{p}(t_0) &= \dot{y}_0 \end{aligned}$$

mit der exakten Lösung

$$\begin{bmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(t-t_0)\Omega_{1/2} & \Omega_{1/2}^{-1} \sin(t-t_0)\Omega_{1/2} \\ -\Omega_{1/2} \sin(t-t_0)\Omega_{1/2} & \cos(t-t_0)\Omega_{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_0 \\ \dot{y}_0 \end{bmatrix}.$$

Stetigkeit der Lösung an der Stelle t_1 ergibt schließlich

$$\begin{bmatrix} \tilde{q}(t_1) \\ \tilde{p}(t_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{1/2} & \Omega_{1/2}^{-1} \sin h\Omega_{1/2} \\ -\Omega_{1/2} \sin h\Omega_{1/2} & \cos h\Omega_{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_0 \\ \dot{y}_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \dot{y}_1 \end{bmatrix}.$$

Wiederholung dieses Argumentes ergibt die Behauptung des Satzes. \square

Sofort lässt sich erkennen: Wird die rechte Seite von (2.22) mit $f_h(z)$, $z = (q, p)^T$ und die rechte Seite des ursprünglichen Differentialgleichungssystems mit $f(z)$ bezeichnet, so folgt für die rechten Seiten bereits die angenehme Eigenschaft $\|f_h(z) - f(z)\| = \mathcal{O}(h)$ unabhängig von $\|A(t)\|_2$.

Der Trick der Rückwärtsfehleranalyse besteht nun darin, die exakten Lösungen der Differentialgleichungen (2.22) und (2.2) zu vergleichen und so diese Eigenschaft auf den globalen Fehler des numerischen Verfahrens zu übertragen. Auf diese Weise folgt der Satz:

Satz 2.11 *Für die Differenz der Lösungen von (2.22) und (2.2) bei exakten Startwerten gilt mit*

$$\tilde{z}(t) = \begin{bmatrix} \tilde{y} \\ \tilde{y} \end{bmatrix}, \quad z(t) = \begin{bmatrix} y \\ \dot{y} \end{bmatrix}, \quad \text{mit } \tilde{z} \text{ Lösung von (2.22) bzw. } z \text{ Lösung von (2.2):}$$

$$\|\tilde{z}(t) - z(t)\|_2 = \mathcal{O}(h) \quad \text{unabhängig von } \|A(t)\|_2 \quad \forall t \in [t_0, t_0 + T].$$

Beweis: Für die Lösung von (2.22) gilt auch

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{q}} &= \tilde{p}, & \tilde{q}(t_0) &= y_0, \\ \dot{\tilde{p}} &= -A(t)\tilde{q} + (A(t) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(t)A_{j+1/2})\tilde{q}, & \tilde{p}(t_0) &= \dot{y}_0. \end{aligned}$$

Es existiert eine eindeutige stetige Lösung \tilde{q}, \tilde{p} dieser Differentialgleichung. Hierfür wird die Variation-der-Konstanten-Formel angewendet, die ebenfalls für stückweise stetig-differenzierbare Funktionen gilt. Damit folgt:

$$\begin{bmatrix} \tilde{q}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{bmatrix} = Y(t, t_0) \begin{bmatrix} \tilde{q}_0 \\ \tilde{p}_0 \end{bmatrix} + \int_{t_0}^t Y(t, s) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (A(s) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(s)A_{j+1/2}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{q}(s) \\ \tilde{p}(s) \end{bmatrix} ds,$$

wobei $Y(t, s)$ die Fundamentallösung (2.12) bezeichnet. Genau wie in Abschnitt 2.1 wird jetzt ein Operator

$$(Lz)(t) := \int_{t_0}^t Y(t, s) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (A(s) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(s)A_{j+1/2}) & 0 \end{bmatrix} z(s) ds$$

eingeführt (z bezeichnet hier wieder (q, p)). Für den Kern

$$K(t, s) := Y(t, s) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (A(s) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(s)A_{j+1/2}) & 0 \end{bmatrix}$$

gilt $\|K(t, s)\|_2 \leq Ch$, da

$$K(t, s) = \begin{bmatrix} K_{11}(t, s) & 0 \\ K_{21}(t, s) & 0 \end{bmatrix},$$

mit

$$K_{11}(t, s) = Y_{12}(s, t) \left(A(s) - \sum_{l=-\infty}^{\infty} 1_{[t_l, t_{l+1})}(s) A_{l+1/2} \right)$$

und

$$K_{21}(t, s) = Y_{22}(s, t) \left(A(s) - \sum_{l=-\infty}^{\infty} 1_{[t_l, t_{l+1})}(s) A_{l+1/2} \right).$$

Für die Norm folgt also mit (2.16) und wegen

$$\|A(s) - \sum_{l=-\infty}^{\infty} 1_{[t_l, t_{l+1})}(s) A_{l+1/2}\|_2 \leq N_1 h$$

die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|K(t, s)\|_2 &\leq \max \{ \|K_{11}(t, s)\|_2, \|K_{21}(t, s)\|_2 \} \\ &\leq \max \{ \cosh(T\sqrt{TN_1}) N_1 h, (1 + T^3 N_1 \cosh(T\sqrt{TN_1})) N_1 h \} \\ &\leq Ch. \end{aligned} \tag{2.23}$$

Insgesamt gilt für den Operator

$$(Lz)(t) = \int_{t_0}^t K(t, s) z(s) ds, \quad \text{mit } \|K(t, s)\|_2 \leq Ch, \quad C \text{ unabh. von } \|\Omega(t)\|_2.$$

Wir zeigen jetzt durch Induktion

$$\|(L^j z)(t)\|_2 \leq \frac{1}{j!} C^j h^j (t - t_0)^j \|z\|_\infty.$$

$j = 1$:

$$\|(Lz)(t)\|_2 \leq (t - t_0) Ch \|z\|_\infty$$

$(j - 1) \rightarrow j$:

$$\begin{aligned} \|(L^j z)(t)\|_2 &= \left\| \int_{t_0}^t K(t, s) (L^{j-1} z)(s) ds \right\| \leq Ch \int_{t_0}^t \frac{1}{(j-1)!} (s - t_0)^{j-1} C^{j-1} h^{j-1} ds \|z\|_\infty \\ &= \frac{1}{j!} C^j h^j (t - t_0)^j \|z\|_\infty. \end{aligned}$$

Damit folgt für den Operator

$$\left\| \sum_{j=0}^{\infty} L^j z \right\|_\infty \leq \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} C^j h^j (t - t_0)^j \|z\|_\infty \leq e^{ChT} \|z\|_\infty,$$

und für die Lösung

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= (I - L)^{-1} Y(\cdot, t_0) z(t_0) \\ \tilde{z}(t) &= \sum_{j=0}^{\infty} L^{(j)} (Y(\cdot, t_0) z(t_0))(t) = Y(t, t_0) z(t_0) + \sum_{j=1}^{\infty} L^j (Y(\cdot, t_0) z(t_0))(t). \end{aligned}$$

Aus

$$\sum_{j=1}^{\infty} L^j(Y(\cdot, t_0)z(t_0))(t) = \sum_{j=0}^{\infty} L^j(L(Y(\cdot, t_0)z(t_0)))(t)$$

folgt

$$\left\| \sum_{j=1}^{\infty} L^j(Y(\cdot, t_0)z(t_0)) \right\|_{\infty} \leq e^{ChT} \|L(Y(\cdot, t_0)z(t_0))\|_{\infty}.$$

Die Norm von z kann beliebig groß sein, sie hängt von $\|A(t)\|_2$ ab. Die wichtige Frage ist, ob sich die Differenz der exakten Lösung und der Lösung des gestörten Systems trotzdem unabhängig von $\|A(t)\|_2$ abschätzen lässt, also ob sich

$$\|\tilde{z}(t) - z(t)\|_2 = \|\tilde{z}(t) - Y(t, t_0)z(t_0)\|_2$$

gutartig verhält. Die Aufsummierung der potenzierten Lösungsoperatoren verhält sich gutartig. Bleibt $\forall t \in [t_0, t_0 + T]$

$$\left\| \int_{t_0}^t Y(t, s) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (A(s) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(s)A_{j+1/2}) & 0 \end{bmatrix} Y(s, t_0)z(t_0) ds \right\|_2 \leq hTC \|z(t_0)\|_2 \quad (2.24)$$

zu zeigen. Glücklicherweise fällt die Matrix Y_{21} in der Fundamentalmatrix, die sich nicht unabhängig von $\|\Omega(t)\|_2$ abschätzen lässt, heraus! Berechnen der Matrix unter dem Integral ergibt

$$Y(t, s) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (A(s) - \sum_{j=-\infty}^{\infty} 1_{[t_j, t_{j+1})}(s)A_{j+1/2}) & 0 \end{bmatrix} Y(s, t_0) = \begin{bmatrix} K_{11}(t, s)Y_{11}(s, t_0) & K_{11}(t, s)Y_{12}(s, t_0) \\ K_{21}(t, s)Y_{11}(s, t_0) & K_{21}(t, s)Y_{12}(s, t_0) \end{bmatrix}.$$

Mit denselben Abschätzungen wie in (2.23) folgt wegen

$$\left\| \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & B \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ C & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \right\|_2 \leq \|A\|_2 + \|B\|_2 + \|C\|_2 + \|D\|_2$$

die Behauptung (2.24).

Aus Satz 2.11 ergibt sich sofort ein Satz über die Ordnung des einfachen exponentiellen Integrators.

Satz 2.12 *Ist $A(t)$ in (2.2) mit $\|\dot{A}\|_{\infty} \leq N_1$ in $[t_0, t_0 + T]$, dann gilt für das Schema (2.20) mit $z_n = (q_n, p_n)^T$:*

$$\|z(t_n) - z_n\|_2 = \mathcal{O}(h), \quad \forall n \quad \text{mit} \quad t_0 \leq t_n \leq t_0 + T,$$

wobei der \mathcal{O} -Term nur vom Anfangswert, T und N_1 , aber nicht von $\|A(t)\|_2$ abhängt.

Beweis: Da $z_n = \tilde{z}(t_n)$, also gerade die Lösung von System (2.22) ist, gilt

$$\|z(t_n) - z_n\|_2 = \|z(t_n) - \tilde{z}(t_n)\|_2 = \mathcal{O}(h)$$

nach Satz 2.11. □

Bei numerischen Experimenten scheint dieses einfache Verfahren häufig mehr als Ordnung 1 zu besitzen. Im Folgenden werden zwei Fälle identifiziert, unter denen das Verfahren mehr als

Ordnung $\mathcal{O}(h)$ besitzt. Dazu wird jetzt der klassische Ansatz zur Bestimmung der Ordnung eines Verfahrens verfolgt, d.h. erst Untersuchung des lokalen Fehlers und anschließend Betrachten der Fehlerrekursion, also der Fehlerfortpflanzung.

Der lokale Defekt an der Stelle t_n

$$\begin{bmatrix} d_n \\ \dot{d}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(t_n + h) \\ \dot{y}(t_n + h) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(t_n) \\ \dot{y}(t_n) \end{bmatrix}$$

wird durch Einsetzen der exakten Lösung $y(t)$ in das numerische Lösungsverfahren erhalten.

Vor dem nächsten Lemma sei noch einmal an die Vereinbarung erinnert, dass die erste Matrix nach einer analytischen Funktion (hier: \cos und \sin) mit zum Argument der Funktion gehört.

Lemma 2.13 *Der lokale Fehler des Verfahrens (2.20) zur Lösung von (2.1) im Intervall $I = [t_0, t_0 + T]$ unter der Voraussetzung $\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1$, $\|\ddot{A}(t)\|_2 \leq N_2$ in den Orten lautet für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$:*

$$d_n = h^3 l_n + h^4 z_n$$

mit

$$l_n = \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_{n+1/2})^{-1} \sin h(1-s)\Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s)y(t_n + hs) ds$$

und

$$\begin{aligned} \|l_n\|_2 &\leq \frac{1}{8}N_1\|y\|_\infty \leq \frac{1}{8}N_1(\cosh(T\sqrt{TN_1})\|y(t_0)\|_2 + T \cosh(T\sqrt{TN_1})\|\dot{y}(t_0)\|_2), \\ \|z_n\|_2 &\leq \frac{1}{48}N_2\|y\|_\infty \leq \frac{1}{48}N_2(\cosh(T\sqrt{TN_1})\|y(t_0)\|_2 + T \cosh(T\sqrt{TN_1})\|\dot{y}(t_0)\|_2). \end{aligned}$$

Und der Fehler in den Impulsen

$$\dot{d}_n = h^2 i_n + h^3 z_n$$

mit

$$i_n = \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s)y(t_n + hs) ds$$

und

$$\begin{aligned} \|i_n\|_2 &\leq \frac{1}{4}N_1\|y\|_\infty \leq \frac{1}{4}N_1(\cosh(T\sqrt{TN_1})\|y(t_0)\|_2 + T \cosh(T\sqrt{TN_1})\|\dot{y}(t_0)\|_2), \\ \|\dot{z}_n\|_2 &\leq \frac{1}{24}N_2\|y\|_\infty \leq \frac{1}{24}N_2(\cosh(T\sqrt{TN_1})\|y(t_0)\|_2 + T \cosh(T\sqrt{TN_1})\|\dot{y}(t_0)\|_2). \end{aligned}$$

Beweis: Aus der Variation-der-Konstanten-Formel (2.19) mit $\tau = t_n + \frac{h}{2}$ ergibt sich für den lokalen Fehler des Verfahrens in der y - bzw. \dot{y} -Komponente zunächst:

$$\begin{aligned} d_n &= \int_{t_n}^{t_n+h} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(t_n + h - s)\Omega_{n+1/2} (A_{n+1/2} - A(s))y(s) ds, & \text{lok. Fehler in } y \\ \dot{d}_n &= \int_{t_n}^{t_n+h} \cos(t_n + h - s)\Omega_{n+1/2} (A_{n+1/2} - A(s))y(s) ds, & \text{lok. Fehler in } \dot{y}. \end{aligned}$$

Für den lokalen Fehler in den Orten ergibt sich damit:

$$\begin{aligned}
d_n &= h^2 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_{n+1/2})^{-1} \sin h(1-s)\Omega_{n+1/2} (A_{n+1/2} - A(t_n + hs))y(t_n + hs) ds \\
&= h^2 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_{n+1/2})^{-1} \sin h(1-s)\Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} h(\frac{1}{2} - s)y(t_n + hs) ds \\
&\quad - h^2 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_{n+1/2})^{-1} \sin h(1-s)\Omega_{n+1/2} \int_0^1 (1-u)\ddot{A}(t_n + \frac{h}{2} + uh(s - \frac{1}{2})) du \\
&\quad \quad h^2(\frac{1}{2} - s)^2 y(t_n + hs) ds \\
&= h^3 l_n + h^4 z_n.
\end{aligned}$$

Dabei gilt mit der Eigenwertzerlegung von $\Omega_{n+1/2}$ und $\max_{t \in \mathbb{R}} |\frac{\sin x}{x}| \leq 1$:

$$\begin{aligned}
\|l_n\|_2 &\leq \int_0^1 (1-s)|\frac{1}{2} - s| ds N_1 \|y\|_\infty = \frac{1}{8} N_1 \|y\|_\infty, \\
\|z_n\|_2 &\leq \int_0^1 (1-s)(\frac{1}{2} - s)^2 ds \int_0^1 (1-u) du N_2 \|y\|_\infty = \frac{1}{48} N_2 \|y\|_\infty.
\end{aligned}$$

Die weitere Abschätzung von $\|y\|_\infty$ ist wegen (2.15) klar. Für den lokalen Fehler in den Impulsen folgt nun:

$$\begin{aligned}
\dot{d}_n &= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2} - s)y(t_n + hs) ds \\
&\quad - h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} \int_0^1 (1-u)\ddot{A}(t_n + \frac{h}{2} + uh(s - \frac{1}{2})) du h^2(s - \frac{1}{2})^2 y(t_n + hs) ds \\
&= h^2 \dot{l}_n + h^3 \dot{z}_n,
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\|\dot{l}_n\|_2 &\leq \int_0^1 |\frac{1}{2} - s| ds N_1 \|y\|_\infty = \frac{1}{4} N_1 \|y\|_\infty, \\
\|\dot{z}_n\|_2 &\leq \int_0^1 (\frac{1}{2} - s)^2 ds \int_0^1 (1-u) du N_2 \|y\|_\infty = \frac{1}{24} N_2 \|y\|_\infty.
\end{aligned}$$

□

Als nächstes wird untersucht, wie sich der lokale Fehler fortpflanzt. Dies führt zur Bestimmung des globalen Fehlers auf die Rekursion:

$$\begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix}}_{:= \tilde{R}(t_n + \frac{h}{2})} \begin{bmatrix} e_n \\ \dot{e}_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_n \\ \dot{d}_n \end{bmatrix},$$

mit $e_n = y(t_n) - y_n$, $\dot{e}_n = \dot{y}(t_n) - \dot{y}_n$. Weiter sei

$$\begin{aligned}
R(t_j, t_j) &:= I, \\
R(t_{n+1}, t_{n-j}) &:= \tilde{R}(t_n + \frac{h}{2}) \cdots \tilde{R}(t_{n-j} + \frac{h}{2}).
\end{aligned}$$

Auflösen der Rekursion ergibt:

$$\begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} = R(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} + \sum_{j=0}^n R(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix}.$$

Nach Satz 2.11 gilt $Y(t_n, t_0) = R(t_n, t_0) + \mathcal{O}(h)$ unabh. von $\|\Omega(t)\|_2$. Also gilt weiter:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} &= Y(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} + \sum_{j=0}^n Y(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} + \underbrace{(R(t_{n+1}, t_0) - Y(t_{n+1}, t_0))}_{=\mathcal{O}(h)} \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} \\ &+ \sum_{j=0}^n \underbrace{(R(t_{n+1}, t_{j+1}) - Y(t_{n+1}, t_{j+1}))}_{=\mathcal{O}(h)} \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis wird in dem folgenden Lemma festgehalten:

Lemma 2.14 *Mit der Fundamentallösung Y der exakten Differentialgleichung lässt sich die Fehlerrekursion schreiben als:*

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} &= Y(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} + \sum_{j=0}^n Y(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} + h M(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} \\ &+ h \sum_{j=0}^n M(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

wobei $M(t_n, t_j) := \frac{1}{h}(R(t_n, t_j) - Y(t_n, t_j))$ und $\|M\|_\infty \leq C$ unabhängig von $\|A\|_\infty$.

Um den Fehler auf diese Weise aufzuschreiben, wurde bereits Satz 2.11 verwendet. Es gibt auch die Möglichkeit, dieses Ergebnis elementar herzuleiten, aber das ist wesentlich rechenaufwändiger.

Satz 2.15 *Als zusätzliche Annahmen neben $\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1$ und $\|\ddot{A}(t)\|_2 \leq N_2$ gelte für $0 \leq \alpha \leq 1$ und für alle $t \in I = [t_0, t_0 + T]$:*

$$\frac{1}{2}\|\dot{y}(t)\|_2^2 + \frac{1}{2}\|\Omega(t)^\alpha y(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2}C_\alpha^2 \quad (2.25)$$

für die exakte Lösung y . Dann gilt für den Fehler in den Orten

$$\|y(t_n) - y_n\|_2 \leq C h^{1+\alpha},$$

für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$, wobei C nur von C_α, T, N_1, N_2 und $\|y(t_0)\|_2$ abhängt. Gilt weiter

$$\|\Omega(t)^\alpha \dot{A}(t)y(t)\|_2 \leq C_\alpha \quad (2.26)$$

für die exakte Lösung y , so folgt die Ordnung auch für die Impulse

$$\|\dot{y}(t_n) - \dot{y}_n\|_2 \leq C h^{1+\alpha},$$

für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$, wobei C nur von C_α, T, N_1, N_2 und $\|y(t_0)\|_2$ abhängt.

Für die erste Aussage wird $A(t)$ zweimal stetig differenzierbar nicht benötigt. Es gilt auch der Satz

Satz 2.16 Als zusätzliche Annahme neben $\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1$ gelte für $0 \leq \alpha \leq 1$ und für alle $t \in I = [t_0, t_0 + T]$:

$$\frac{1}{2}\|\dot{y}(t)\|_2^2 + \frac{1}{2}\|\Omega(t)^\alpha y(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2}C_\alpha^2 \quad (2.27)$$

für die exakte Lösung y . Dann gilt für den Fehler in den Orten

$$\|y(t_n) - y_n\|_2 \leq C h^{1+\alpha},$$

für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$, wobei C nur von C_α , T , N_1 und $\|y(t_0)\|_2$ abhängt.

Der Beweis dieses Satzes wird nicht aufgeführt, da er im Wesentlichen wie der folgende Beweis von Satz 2.15 verläuft, aber eine Darstellung des lokalen Fehlers mit einer Entwicklung von $A(t)$ bis zum 0-ten Glied und Integralrestglied verwendet. Alle anderen Vorgehensweisen bleiben gleich.

Um Satz 2.15 zu beweisen, wird zunächst ein Lemma bewiesen, das klärt, wie sich der lokale Fehler der Impulse unter der Bedingung (2.27) bzw. (2.26) ändert.

Lemma 2.17 Gilt Bedingung (2.27), so hat der lokale Fehler die Gestalt:

$$\dot{d}_n = h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s) ds y(t_n + \frac{h}{2}) + \mathcal{O}(h^{2+\alpha}),$$

gilt zusätzlich Bedingung (2.26), so hat der Fehler in den Impulsen die Gestalt:

$$\dot{d}_n = \mathcal{O}(h^{2+\alpha}).$$

Beweis: Wir starten mit der Darstellung für die lokalen Fehler aus Lemma 2.13, wobei $\|y\|_\infty$ in Lemma 2.13 jetzt wegen (2.27) auch mit

$$\|y(t)\|_2 \leq \|y(t_0)\|_2 + \left\| \int_0^t \dot{y}(s) ds \right\|_2 \leq \|y(t_0)\|_2 + TC_\alpha$$

abgeschätzt werden kann. Weiter gilt

$$\begin{aligned} \dot{d}_n &= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s) y(\underbrace{t_n + hs}_{t_n + \frac{h}{2} + h(s-\frac{1}{2})}) ds + \mathcal{O}(h^3) \\ &= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s) \left[\cos h(s - \frac{1}{2}) \Omega_{n+1/2} y(t_n + \frac{h}{2}) \right. \\ &\quad + \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h(s - \frac{1}{2}) \Omega_{n+1/2} \dot{y}(t_n + \frac{h}{2}) \\ &\quad \left. + \int_{t_n + \frac{h}{2}}^{h(s-\frac{1}{2})+t_n+\frac{h}{2}} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(h(s - \frac{1}{2}) + t_n + \frac{h}{2} - u) \Omega_{n+1/2} (A_{n+1/2} - A(u)) y(u) du \right] ds \\ &\quad + \mathcal{O}(h^3) \\ &= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos h(s - \frac{1}{2}) \Omega_{n+1/2} y(t_n + \frac{h}{2}) ds \\ &\quad + h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2}(\frac{1}{2}-s) \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h(s - \frac{1}{2}) \Omega_{n+1/2} ds \dot{y}(t_n + \frac{h}{2}) \\ &\quad + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Hier kann man bereits erkennen, wie die Voraussetzung gewinnbringend eingesetzt werden kann.

Zuerst wird der zweite Term behandelt. Es folgt

$$\begin{aligned}
& h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2} ds \dot{y}\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \\
&= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) h\left(s-\frac{1}{2}\right) \left(h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2}\right)^{-1} \\
&\quad \sin h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2} ds \dot{y}\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \\
&= -h^3 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(s-\frac{1}{2}\right)^2 \left(h\left(s-\frac{h}{2}\right) \Omega_{n+1/2}\right)^{-1} \\
&\quad \sin h\left(s-\frac{h}{2}\right) \Omega_{n+1/2} ds \dot{y}\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \\
&= \mathcal{O}(h^3),
\end{aligned}$$

mit dem Sinus-Trick, und da $\|\dot{y}\|_\infty \leq C_\alpha$ wegen (2.27) für die exakte Lösung gilt.

Nun zum ersten Term:

$$\begin{aligned}
& h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2} ds y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \\
&= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) ds y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \\
&\quad + h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \left(\cos h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2} - I\right) y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) ds.
\end{aligned}$$

Im Folgenden wird die Inverse einer Matrix auch als Bruch geschrieben, wenn Zähler und Nenner kommutieren. Wegen

$$\left| \frac{\cos(x) - 1}{x^\alpha} \right| \leq C \quad \text{für } \alpha \in [0, 1] \quad \text{und } x \in \mathbb{R}$$

und damit

$$\left\| h^\alpha \left(s-\frac{1}{2}\right)^\alpha \frac{\cos h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2} - I}{\left(h\left(s-\frac{1}{2}\right) \Omega_{n+1/2}\right)^\alpha} \Omega_{n+1/2}^\alpha y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) \right\|_2 \leq h^\alpha \left|s-\frac{1}{2}\right|^\alpha C \|\Omega_{n+1/2}^\alpha y\left(t_n+\frac{h}{2}\right)\|_2$$

gilt

$$\dot{d}_n = h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) ds + \mathcal{O}(h^{2+\alpha}).$$

Damit ist die erste Aussage des Lemmas bewiesen. Steht auch die zweite Bedingung (2.26) zur Verfügung, folgt weiter

$$\begin{aligned}
\dot{d}_n &= \underbrace{h^2 \int_0^1 \left(\frac{1}{2}-s\right) ds \dot{A}_{n+1/2} y\left(t_n+\frac{h}{2}\right)}_{=0} \\
&\quad + h^2 \int_0^1 \left(\cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} - I\right) \dot{A}_{n+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) ds + \mathcal{O}(h^{2+\alpha}) \\
&= \mathcal{O}(h^{2+\alpha}) + h^2 \int_0^1 \left(\frac{1}{2}-s\right) \left(\cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} - I\right) \dot{A}_{n+1/2} y\left(t_n+\frac{h}{2}\right) ds.
\end{aligned}$$

Wegen

$$\left\| h^\alpha \left(s - \frac{1}{2} \right)^\alpha \frac{\cos h \left(s - \frac{1}{2} \right) \Omega_{n+1/2}^{-I}}{\left(h \left(s - \frac{1}{2} \right) \Omega_{n+1/2} \right)^\alpha} \Omega_{n+1/2}^\alpha \dot{A}_{n+1/2} \right\|_2 \leq h^\alpha \left| s - \frac{1}{2} \right|^\alpha C \left\| \Omega_{n+1/2}^\alpha \dot{A}_{n+1/2} \right\|_2$$

gilt schließlich

$$\dot{d}_n = \mathcal{O}(h^{2+\alpha}).$$

□

Beweis von Satz 2.15: Für den Fehler in den Orten ergibt sich mit Lemma 2.14 und Lemma 2.17

$$e_{n+1} = Y_{11}(t_{n+1}, t_0)e_0 + Y_{12}(t_{n+1}, t_0)\dot{e}_0 + \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j + \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\dot{d}_j + f_n + g_n,$$

mit

$$\|f_n\| \leq h C \left\| \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} \right\|_2, \quad \|g_n\| \leq C \left\| \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} \right\|_2.$$

Lässt man die Fehler in der Anfangsbedingung (d.h. Datenfehler) weg, setzt also $e_0 = 0$ und $\dot{e}_0 = 0$, so ergibt sich die Darstellung

$$e_n = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{11}(t_n, t_{j+1})d_j + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1})\dot{d}_j + g_n, \quad \|\dot{d}_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2), \quad \|d_n\|_2 = \mathcal{O}(h^3),$$

also $\|g_n\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$. Für die erste Summe folgt sofort

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{11}(t_n, t_{j+1})d_j \right\|_2 \leq C \sum_{j=0}^{n-1} \|d_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2).$$

Für die zweite Summe gilt

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1})\dot{d}_j &= \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1})h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2}\dot{A}_{j+1/2}\left(\frac{1}{2}-s\right) ds y\left(t_j + \frac{h}{2}\right) \\ &+ \underbrace{\sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1})\mathcal{O}(h^{2+\alpha})}_{\mathcal{O}(h^{1+\alpha})} = (*). \end{aligned}$$

Mit dem simplen Trick

$$\begin{aligned} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) &= \left((I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\Omega_{j+1/2}^{-1} \sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) \right) (t_n) \\ &= \underbrace{\left((I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) \right) (t_n)}_{\text{beschränkt}} \Omega_{j+1/2}^{-1} \end{aligned}$$

folgt weiter

$$\begin{aligned}
(*) &= h^2 \sum_{j=0}^{n-1} \left((I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) (t_n) \right. \\
&\quad \left[\Omega_{j+1/2}^{-1} \int_0^1 (\cos h(1-s) \Omega_{j+1/2} - I) \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) ds y(t_j + \frac{h}{2}) \right. \\
&\quad \left. \left. + \underbrace{\Omega_{j+1/2}^{-1} \int_0^1 (-1) \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) ds}_{=0} y(t_j + \frac{h}{2}) \right] + \mathcal{O}(h^{1+\alpha}) \right) \\
&= \mathcal{O}(h^{1+\alpha}) + h^2 \sum_{j=0}^{n-1} \left((I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\sin(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) (t_n) \right) \cdot \\
&\quad h \int_0^1 (1-s) (h(1-s) \Omega_{j+1/2})^{-1} (\cos h(1-s) \Omega_{j+1/2} - I) \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) ds y(t_j + \frac{h}{2}) \\
&= \mathcal{O}(h^{1+\alpha}) + \mathcal{O}(h^2) \\
&= \mathcal{O}(h^{1+\alpha}).
\end{aligned}$$

Falls auch Bedingung (2.26) gilt, so folgt sofort

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j \right\|_2 \leq C \sum_{j=0}^{n-1} \|\dot{d}_j\|_2 = \mathcal{O}(h^{1+\alpha}),$$

und die ganze Mühe bisher wäre unnötig gewesen.

Damit gilt $e_n = \mathcal{O}(h^{1+\alpha})$, der globale Fehler in den Orten ist also $\mathcal{O}(h^{1+\alpha})$.

Für den Fehler in den Impulsen ergibt sich:

$$\dot{e}_n = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j + g_n, \quad \|g_n\|_2 \leq C \left\| \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} \right\|_2.$$

Die Bedingung (2.26) sei ab hier immer erfüllt. Nach Lemma 2.17 gilt $\dot{d}_n = \mathcal{O}(h^{2+\alpha})$. Dann folgt $g_n = \mathcal{O}(h^{2+\alpha})$ und

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j \right\|_2 \leq C \sum_{j=0}^{n-1} \|\dot{d}_j\|_2 = \mathcal{O}(h^{1+\alpha}).$$

Nach Satz 2.1 gilt:

$$\begin{aligned}
Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j &= -\Omega_{j+1/2} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} d_j \\
&\quad + \left(\dot{S}_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}} (I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\cos(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) \right) (t_n) d_j
\end{aligned}$$

und folglich

$$\sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j = \sum_{j=0}^{n-1} -\Omega_{j+1/2} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} d_j + \mathcal{O}(h^2),$$

da

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} \left(\dot{S}_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}} (I - S_{t_j + \frac{h}{2}, t_{j+1}})^{-1} (\cos(\cdot - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}) \right) (t_n) d_j \right\|_2 \stackrel{\text{Satz 2.1}}{\leq} C \sum_{j=0}^{n-1} \|d_j\|_2 \leq h^2 C.$$

Nach Lemma 2.13 gilt:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} -\Omega_{j+1/2} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} h^2 \cdot \\ & \quad \int_0^1 \Omega_{j+1/2}^{-1} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) y(t_n + hs) ds \\ & \quad + \sum_{j=0}^{n-1} -\Omega_{j+1/2} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} h^4 z_j. \end{aligned}$$

Genaueres Betrachten des Fehlerterms z_n zeigt, dass $\|h\Omega_{j+1/2}\| \leq C$ gilt, wobei C unabhängig von der Norm von Ω ist. Damit folgt

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{j=0}^{n-1} -\Omega_{j+1/2} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} h^4 z_j \right\|_2 &\leq h^3 \sum_{j=0}^{n-1} \|\sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2}\|_2 \|h\Omega_{j+1/2} z_j\|_2 \\ &\leq h^2 C. \end{aligned}$$

Der führende Fehlerterm lässt sich jetzt schreiben als

$$\begin{aligned} & -h^2 \sum_{j=0}^n \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} \cdot \\ & \quad \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) y(t_n + hs) ds + \mathcal{O}(h^2) \\ &= -h^2 \sum_{j=0}^n \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} h^\alpha \cdot \\ & \quad \int_0^1 (1-s)^\alpha (h(1-s) \Omega_{j+1/2})^{-\alpha} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \Omega_{j+1/2}^\alpha \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) y(t_n + hs) ds \\ &= -h^{2+\alpha} \sum_{j=0}^n \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega_{j+1/2} \cdot \\ & \quad \int_0^1 (1-s)^\alpha (h(1-s) \Omega_{j+1/2})^{-\alpha} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \Omega_{j+1/2}^\alpha \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) y(t_n + hs) ds \\ &= \mathcal{O}(h^{1+\alpha}). \end{aligned}$$

Damit gilt auch für den Impulsfehler

$$\dot{e}_n = \mathcal{O}(h^{1+\alpha}).$$

□

2.4 Nichtglatte Ordnung ohne Finite-Energie-Bedingung

Der folgende Satz ist interessant, da er eine Aussage über die Ordnung des einfachen exponentiellen Integrators ohne zusätzliche Bedingungen macht. Er zeigt, dass der exponentielle Integrator bis auf wenige Resonanzstellen ohnehin die Ordnung 2 besitzt. Analoge Resultate lassen sich mit denselben Techniken auch bei nichthomogenen oszillatorischen Differentialgleichungen hinschreiben. Der technische Aufwand ist aber sehr groß. Das ist schon beim Beweis des folgenden Satzes zu sehen. Bei einem ersten Lesen der Arbeit kann der Beweis ohne Schaden für das Verständnis der weiteren Kapitel übergangen werden.

Satz 2.18 *Gelte $\|\dot{A}(t)\|_2 \leq N_1$ und $\|\ddot{A}(t)\|_2 \leq N_2$. Für $\Omega := \Omega(t_0)$ sei $\Omega = Q\Lambda Q^T$ mit $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$ die Eigenwertzerlegung. Dann gilt unter der Nichtresonanzbedingung*

$$|h\kappa - 2k\pi| \geq c > 0 \quad (2.28)$$

mit einer Konstanten c , für alle ganzen Zahlen $k \neq 0$ und $\kappa \in \sigma(\Lambda)$,

$$\|y(t_n) - y_n\|_2 \leq Ch^2,$$

für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$, wobei C nur von N_1, N_2, T, c und der Norm der Anfangswerte abhängt.

Gelten zusätzlich zur Nichtresonanzbedingung (2.28) die weiteren Nichtresonanzbedingungen

$$\begin{aligned} |h\kappa_1 - h\kappa_2 - 2\pi k| &\geq c > 0 \\ |h\kappa_1 + h\kappa_2 - 2\pi k| &\geq c > 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit einer Konstanten c , für alle ganzen Zahlen $k \neq 0$ und $\kappa_1, \kappa_2 \in \sigma(\Lambda)$, so gilt

$$\|\dot{y}(t_n) - \dot{y}_n\| \leq Ch^2,$$

für $t_0 \leq t_n \leq t_0 + T$, wobei C nur von N_1, N_2, T, c und den Anfangswerten abhängt.

$\sigma(\Lambda)$ bezeichnet dabei das Spektrum der Matrix Λ .

Beweis: Wir starten wieder bei der Gleichung für die Ortsfehler:

$$e_n = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{11}(t_n, t_{j+1})d_j + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1})d'_j + g_n, \quad \|\dot{d}_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2), \quad \|d_n\|_2 = \mathcal{O}(h^3),$$

also $\|g_n\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$. Für die erste Summe folgt mit Lemma 2.13 und (2.16) sofort

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{11}(t_n, t_{j+1})d_j \right\|_2 \leq C \sum_{j=0}^{n-1} \|d_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2).$$

Wegen Lemma 2.13, Korollar 2.8 und nach Anwenden der Vartiation-der-Konstanten-Formel bleibt für den Ortsfehler zu untersuchen:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j = \mathcal{O}(h^2) \\ & + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos hs\Omega ds y(t_j) \\ & + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \dot{y}(t_j). \end{aligned}$$

Nach Lemma 2.19 ist die zweite Summe unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) $\mathcal{O}(h^2)$. Die erste Summe ist unter der Nichtresonanzbedingung ebenfalls $\mathcal{O}(h^2)$, wie Lemma 2.20 zeigt. Damit folgt die Behauptung für die Orte.

Für die Impulse gilt die Rekursion

$$\dot{e}_n = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) d'_j + g_n$$

mit $\|g_n\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$. Mit Lemma 2.21 und Lemma 2.22 folgt, dass für den Impulsfehler unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) gilt:

$$\begin{aligned} \dot{e}_n &= \mathcal{O}(h^2) - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1})\Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ & + \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ & - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0). \end{aligned}$$

Lemma 2.23 zeigt, dass sich diese Summen unter den Nichtresonanzbedingungen (2.29) wie $\mathcal{O}(h^2)$ verhalten, und damit ist die Behauptung für die Impulse bewiesen. \square

Lemma 2.19 *Unter den Voraussetzungen von Satz 2.18 und falls (2.28) erfüllt ist, gilt*

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2}-s\right) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \dot{y}(t_j) \right\|_2 \leq Ch^2,$$

dabei hängt C nicht von $\|A\|_\infty$ ab.

Beweis: Die Schwierigkeit ist hier, dass $\|\dot{y}(t)\|_2 \leq C$ nicht mehr vorausgesetzt wurde. Es steht nur noch $\|y(t_0)\|_2$, $\|\dot{y}(t_0)\|_2$ beschränkt zur Verfügung. Einmal mehr die Variation-der-Konstanten-Formel ergibt

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \cdot \\ \left(-\Omega \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) + \cos(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) + \right. \\ \left. \int_{t_0}^{t_j} \cos(t_j - s)\Omega (A_0 - A(s))y(s) ds \right) \end{aligned}$$

für den abzuschätzenden Term. Auf diese Weise wird die Abschätzung auf die Anfangswerte zurückgespielt.

Zunächst gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \cdot \\ \left(\cos(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t_j} \cos(t_j - s)\Omega (A_0 - A(s))y(s) ds \right) = \mathcal{O}(h^2), \end{aligned}$$

da $\|y(s)\|_2$ nach (2.15) und Y_{12} nach (2.16) unabhängig von $\|A(t)\|_2$ beschränkt ist und mit dem Sinus

$$\Omega^{-1} \sin hs\Omega = hs(hs\Omega)^{-1} \sin hs\Omega$$

eine h -Potenz gewonnen wird, die mit der Summe gerade wieder verschwindet.

Bleibt der erste Term zu untersuchen:

$$\begin{aligned} - \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \Omega \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(s - \tfrac{1}{2}) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0). \end{aligned}$$

Diese Summe lässt sich auch schreiben als

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \dot{A}_{j+1/2} \int_0^1 (s - \tfrac{1}{2}) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 (\cos h(1-s)\Omega - I) \dot{A}_{j+1/2}(s - \tfrac{1}{2}) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0). \end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) &= ((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1} (\Omega^{-1} \sin(\cdot - t_{j+1})\Omega))(t_n) \\ &= \underbrace{((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1} (\sin(\cdot - t_{j+1})\Omega))(t_n)}_{\text{beschränkt}} \Omega^{-1} \end{aligned}$$

folgt $\mathcal{O}(h^2)$ für die zweite Summe. Bleibt die erste Summe zu untersuchen. Übergang auf die Eigenwertzerlegung ergibt

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \dot{A}_{j+1/2} \int_0^1 (s - \frac{1}{2}) \sin hs \Omega ds \sin(t_j - t_0) \Omega y(t_0) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) \underbrace{\dot{A}_{j+1/2} Q}_{:= G(t_{j+1/2})} h^2 \cdot \\ & \quad \int_0^1 (s - \frac{1}{2}) \sin hs \Lambda ds \sin(t_j - t_0) \Lambda Q^T y(t_0). \end{aligned}$$

Weiter wird definiert:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \underbrace{Y_{12}(t_n, t_{j+1}) G(t_{j+1/2})}_{:= W(t_n, t_{j+1})} \cdot \\ & \quad h^2 \underbrace{\int_0^1 (s - \frac{1}{2}) \sin hs \Lambda ds \sin(t_j - t_0) \Lambda Q^T y(t_0)}_{:= E(t_j)}. \end{aligned}$$

$E(t)$ ist dabei eine Diagonalmatrix und die W -Matrix erfüllt:

$$\|W(t_n, t_{j+1}) - W(t_n, t_j)\|_2 \leq Ch, \quad \forall j = 0, \dots, n-1, \quad (2.30)$$

wobei C nicht von $\|A(t)\|_2$ abhängt. Dies folgt aus Satz 2.5.

Bleibt

$$h^2 \sum_{j=0}^{n-1} W(t_n, t_{j+1}) E(t_j) Q^T y(t_0)$$

zu untersuchen. Der Trick, diese Summe abzuschätzen, ohne ein h zu verlieren, besteht darin, dass die $E(t_j)$ aufsummiert werden können und dabei beschränkt bleiben. Anschließend hilft partielle Summation.

Der k -te Diagonaleintrag der Matrix

$$SE_{n-1} = \sum_{j=0}^{n-1} E(t_j)$$

lautet

$$\sum_{j=0}^{n-1} E_{kk}(t_j) = \sum_{j=0}^{n-1} \sin j \underbrace{h\lambda_k}_x \int_0^1 (s - \frac{1}{2}) \sin s \underbrace{h\lambda_k}_x ds.$$

Ob die Diagonaleinträge beschränkt bleiben, hängt damit nur von der Funktion

$$\epsilon_{n-1}(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \sin jx \int_0^1 (s - \frac{1}{2}) \sin sx ds$$

ab. Die Summe lautet:

$$\sum_{j=0}^{n-1} \sin jx = \frac{-1}{2 \sin \frac{x}{2}} \left(\cos \left((n-1)x + \frac{x}{2} \right) - \cos \frac{x}{2} \right),$$

und das Integral

$$\int_0^1 \left(s - \frac{1}{2} \right) \sin sx \, ds = -\frac{1}{2} \frac{x \cos x - 2 \sin x + x}{x^2}.$$

Unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) ist $\epsilon_{n-1}(x)$ für $x \geq 0$ beschränkt. Es folgt also

$$\begin{aligned} h^2 \sum_{j=0}^{n-1} W(t_n, t_{j+1}) E(t_j) Q^T y(t_0) \\ &= h^2 W(t_n, t_n) S E_{n-1} Q^T y(t_0) \\ &\quad + h^2 \sum_{j=0}^{n-2} (W(t_n, t_{j+1}) - W(t_n, t_{j+2})) S E_j Q^T y(t_0). \end{aligned}$$

Da

$$\|S E_n\|_2 \leq C_0, \quad C_0 = \sup_{j,x} |\epsilon_j(x)|$$

folgt mit (2.30) und der Beschränktheit der W -Matrizen, dass die Summe $\mathcal{O}(h^2)$ ist. \square

Lemma 2.20 *Unter den Voraussetzungen von Satz 2.18 gilt*

$$\left\| \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs\Omega \, ds y(t_j) \right\|_2 \leq Ch^2,$$

dabei hängt C nicht von $\|A\|_\infty$ ab.

Beweis: Die Summe wird für den Cosinus-Trick wieder aufgebläht:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 (\cos h(1-s)\Omega - I) \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs\Omega \, ds y(t_j) \\ + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs\Omega \, ds y(t_j). \end{aligned}$$

Da sich aus $Y_{12}(t_n, t_{j+1})$ wieder ein Ω^{-1} herausziehen lässt, mit dem trotzdem beschränkter Rest, ist der erste Term mit dem Cosinus-Trick wieder $\mathcal{O}(h^2)$. Bleibt der letzte Term zu untersuchen.

Er lautet:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cdot \\
& \quad \left(\cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) + \Omega^{-1} \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) + \right. \\
& \quad \quad \left. \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s)\Omega (A(t_0) - A(s))y(s) ds \right) \\
& = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\
& + \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cdot \\
& \quad \left(\Omega^{-1} \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) + \right. \\
& \quad \quad \left. \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s)\Omega (A(t_0) - A(s))y(s) ds \right).
\end{aligned}$$

Die zweite Summe ergibt mit dem Cosinus-Trick und, da der Rest nach dem Cosinus-Trick wegen

$$\int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) ds = 0$$

ist, wieder ein $\mathcal{O}(h^2)$ Term. Bleibt als endgültig letzter Term

$$\sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0)$$

zu untersuchen. Übergang auf die Eigenwertzerlegung ergibt

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) h^2 \dot{A}_{j+1/2} \int_0^1 (\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\
& = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{12}(t_n, t_{j+1}) \underbrace{\dot{A}_{j+1/2} Q}_{:= G(t_{j+1/2})} h^2 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Lambda ds \cos(t_j - t_0)\Lambda Q^T y(t_0).
\end{aligned}$$

Weiter wird definiert:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} \underbrace{Y_{12}(t_n, t_{j+1}) G(t_{j+1/2})}_{:= W(t_n, t_{j+1})} \cdot \\
& \quad \underbrace{h^2 \int_0^1 (\tfrac{1}{2} - s) \cos hs\Lambda ds \cos(t_j - t_0)\Lambda Q^T y(t_0)}_{:= E(t_j)}.
\end{aligned}$$

$E(t)$ ist wie in Lemma 2.19 wieder eine Diagonalmatrix und (2.30) ist ebenfalls für die neue Matrix erfüllt.

Bleibt

$$h^2 \sum_{j=0}^{n-1} W(t_n, t_{j+1}) E(t_j) Q^T y(t_0)$$

zu untersuchen. Dieses Mal lautet der k -te Diagonaleintrag der Matrix SE_{n-1} :

$$\sum_{j=0}^{n-1} E_{kk}(t_j) = \sum_{j=0}^{n-1} \cos j \underbrace{h\lambda_k}_x \int_0^1 \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos s \underbrace{h\lambda_k}_x ds.$$

Ob die Diagonaleinträge beschränkt bleiben, hängt damit nur von der Funktion

$$\epsilon_{n-1}(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \cos jx \int_0^1 \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos sx ds$$

ab. Die Summe lautet:

$$\sum_{j=0}^{n-1} \cos jx = \frac{-1}{2 \sin \frac{x}{2}} \left(\sin\left((n-1)x + \frac{x}{2}\right) + \sin \frac{x}{2} \right),$$

und das Integral

$$\int_0^1 \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos sx ds = \frac{1}{2} \frac{\sin x}{x} + \frac{\cos x - 1}{x^2}.$$

Unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) ist $|\epsilon_{n-1}(x)|$ für $x \geq 0$ beschränkt. Wie in Lemma 2.19 folgt jetzt die Behauptung des Lemmas. \square

Lemma 2.21 *Unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) gilt:*

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j \\ &= \mathcal{O}(h^2) - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2} \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos hs \Omega ds \cos(t_j - t_0) \Omega y(t_0). \end{aligned}$$

Beweis: Zunächst gilt nach Satz 2.1:

$$Y_{21}(t_n, t_{j+1}) = -\Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega + \underbrace{\left(\dot{S}_{t_0, t_{j+1}} (I - S_{t_0, t_{j+1}}) (\cos(\cdot - t_{j+1}) \Omega) \right)}_{\text{beschränkt}}(t_n)$$

und mit Lemma 2.13 folgt

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j \\
&= \mathcal{O}(h^2) - \sum_{j=0}^{n-1} \Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega d_j \\
&= - \sum_{j=0}^{n-1} \Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega (h^3 l_j + h^4 z_j) + \mathcal{O}(h^2) \\
&= -h^3 \sum_{j=0}^{n-1} \Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega l_j - h^3 \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega (h \Omega z_j) + \mathcal{O}(h^2).
\end{aligned}$$

Nach Lemma 2.13 gilt

$$\begin{aligned}
h \Omega z_j &= -\Omega \int_0^1 (\Omega_{j+1/2})^{-1} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \cdot \\
&\quad \underbrace{\int_0^1 (1-u) \ddot{A}(t_j + \frac{h}{2} + uh(s - \frac{1}{2})) du (\frac{1}{2} - s)^2 y(t_j + hs) ds}_{=: G(j, h, s), \quad \|G\| \leq C} \\
&= -\Omega \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega G(j, h, s) ds \\
&\quad - \Omega \int_0^1 \left(\Omega_{j+1/2}^{-1} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} - \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \right) G(j, h, s) ds.
\end{aligned}$$

Mit Lemma 2.7 folgt die Darstellung

$$\begin{aligned}
& - \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega G(j, h, s) ds \\
& - \Omega \int_0^1 \int_0^{h(1-s)} \Omega^{-1} \sin(h(1-s) - u) \Omega (A(t_0) - A(t_j + \frac{h}{2})) \Omega_{j+1/2}^{-1} \sin u \Omega_{j+1/2} du G(j, h, s) ds \\
&= - \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega G(j, h, s) ds \\
& - \int_0^1 h(1-s) \\
&\quad \int_0^1 \sin(h(1-s)(1-u) \Omega) (A(t_0) - A(t_j + \frac{h}{2})) \Omega_{j+1/2}^{-1} \sin(hu(1-s)) \Omega_{j+1/2} du \\
&\quad G(j, h, s) ds.
\end{aligned}$$

Also ist $\|h \Omega z_j\| \leq C$ und damit

$$\left\| -h^3 \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega h \Omega z_j \right\|_2 \leq h^2 TC.$$

Insgesamt wurde bis jetzt gezeigt:

$$\sum_{j=0}^{n-1} Y_{21}(t_n, t_{j+1}) d_j = \mathcal{O}(h^2) - h^3 \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega l_j.$$

Der zweite Term lautet

$$-h^2 \sum_{j=0}^{n-1} \Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \int_0^1 \Omega_{j+1/2}^{-1} \sin h(1-s) \Omega_{j+1/2} \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) y(t_j + hs) ds.$$

Mit Lemma 2.7 folgt wie eben für den zweiten Term bis auf $\mathcal{O}(h^2)$ die Darstellung

$$\begin{aligned} & -h^2 \sum_{j=0}^{n-1} \Omega \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) y(t_j + hs) ds \\ & = -h^2 \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) y(t_j + hs) ds. \end{aligned}$$

Mit der Variation-der-Konstanten-Formel folgt weiter:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) y(t_j + hs) ds \\ & = \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs \Omega y(t_j) \\ & \quad + \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cdot \\ & \quad \left(\Omega^{-1} \sin hs \Omega \dot{y}(t_0) + \int_{t_j}^{t_j+hs} \Omega^{-1} \sin(t_j + hs + \tilde{s}) (A_0 - A_{j+1/2}) (\frac{1}{2}-s) y(\tilde{s}) \right) ds \\ & = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs \Omega y(t_j) \\ & = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\ & \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2}-s) \cos hs \Omega ds \cdot \\ & \quad + \left(\cos(t_j - t_0) \Omega y(t_0) + \Omega^{-1} \sin(t_j - t_0) \Omega \dot{y}(t_0) \right. \\ & \quad \left. + \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s) \Omega (A(t_0) - A(s)) y(s) ds \right). \end{aligned}$$

Hiervon wird zuerst wieder der zweite Term betrachtet. Mit aus den vorherigen Lemmata geübtem Auge lässt sich erkennen, dass mit dem Cosinus-Trick wieder folgt

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
& \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs \Omega ds \cdot \\
& \quad \left(\Omega^{-1} \sin(t_j - t_0) \Omega \dot{y}(t_0) \right. \\
& \quad \quad \left. + \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s) \Omega (A(t_0) - A(s)) y(s) ds \right) \\
& = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
& \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega (\tfrac{1}{2}-s) ds \dot{A}_{j+1/2} \cdot \\
& \quad \left(\Omega^{-1} \sin(t_j - t_0) \Omega \dot{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s) \Omega (A(t_0) - A(s)) y(s) ds \right) \\
& = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega (\tfrac{1}{2}-s) ds \dot{A}_{j+1/2} w(t_j).
\end{aligned}$$

Der Vektor $w(t_j)$ erfüllt:

$$\|w_{j+1} - w_j\|_2 \leq Ch.$$

Übergang zur EW-Zerlegung ergibt für das Integral

$$\begin{aligned}
& h^2 \sum_{j=0}^{n-1} Q \sin(t_n - t_{j+1}) \Lambda \cdot \\
& \quad \int_0^1 \sin h(1-s) \Lambda (\tfrac{1}{2}-s) ds \underbrace{Q^T \dot{A}_{j+1/2}}_{G(t_{j+\frac{1}{2}})} w(t_j).
\end{aligned}$$

Mit demselben Argument wie früher folgt, dass diese Teilsumme unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) $\mathcal{O}(h^2)$ ist. \square

Lemma 2.22 *Unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) gilt:*

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j \\
&= \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
&\quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs \Omega ds \cos(t_j - t_0) \Omega y(t_0) \\
&\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
&\quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \sin hs \Omega ds \sin(t_j - t_0) \Omega y(t_0).
\end{aligned}$$

Beweis: Mit Lemma 2.13, Lemma 2.7 und der Variation-der-Konstanten-Formel folgt

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{d}_j = \mathcal{O}(h^2) \\
&+ \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \cos hs \Omega ds y(t_j) \\
&+ \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \Omega^{-1} \sin hs \Omega ds \dot{y}(t_j).
\end{aligned}$$

Zuerst wird der zweite Term mit der Variation-der-Konstanten-Formel zu

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \Omega^{-1} \sin hs \Omega ds \cdot \\
&\quad \left(-\Omega \sin(t_j - t_0) \Omega y(t_0) + \cos(t_j - t_0) \Omega \dot{y}(t_0) \right. \\
&\quad \left. + \int_{t_0}^{t_j} \cos(t_j - s) \Omega (A_0 - A(s)) y(s) ds \right)
\end{aligned}$$

umgeformt, wobei

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2} - s) \Omega^{-1} \sin hs \Omega ds \\
&\quad \left(\cos(t_j - t_0) \Omega \dot{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t_j} \cos(t_j - s) \Omega (A_0 - A(s)) y(s) ds \right) = \mathcal{O}(h^2)
\end{aligned}$$

gilt.

Bleibt der erste Term

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \Omega^{-1} \sin hs\Omega ds \\ & \qquad \qquad \qquad \Omega \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ & = \sum_{j=0}^{n-1} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \end{aligned}$$

zu untersuchen. Durch Aufspalten mit

$$\begin{aligned} Y_{22}(t_n, t_{j+1}) & = \underbrace{(\dot{S}_{t_0, t_{j+1}}(I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1})(\Omega^{-1} \sin(\cdot - t_{j+1})\Omega)(t_n)}_{:=\tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1})} \\ & \quad + \cos(t_n - t_{j+1})\Omega, \end{aligned}$$

ergibt sich einmal die Summe, die in der Aussage des Lemmas auftritt, und die Summe

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0) \\ & = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{A}_{j+1/2} h^2 \int_0^1 (\tfrac{1}{2}-s) \sin hs\Omega ds \sin(t_j - t_0)\Omega y(t_0). \end{aligned}$$

Nach der Überprüfung, dass

$$\|\tilde{Y}(t_n, t_{j+1}) - \tilde{Y}(t_n, t_j)\|_2 \leq Ch, \quad \forall j = 0, \dots, n-1$$

gilt, kann wie zuvor geschlossen werden, und unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) ist diese Summe $\mathcal{O}(h^2)$.

Dieselbe Aufspaltung beim ersten Term ergibt die zwei Summen

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs\Omega ds y(t_j) \\ & + \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs\Omega ds y(t_j). \end{aligned}$$

Diese beiden Terme werden wiederum nacheinander untersucht. Wir starten mit dem zweiten Term.

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs\Omega ds y(t_j) \\ & = \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{A}_{j+1/2} h^2 \int_0^1 (\tfrac{1}{2}-s) \cos hs\Omega ds y(t_j). \end{aligned}$$

Nach Verwendung der Variation-der-Konstante-Formel ergibt sich:

$$= \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{Y}_{22}(t_n, t_{j+1}) \dot{A}_{j+1/2} h^2 \int_0^1 (\frac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0).$$

Durch Aufsummieren des Cosinus folgt, dass die Summe unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) durch h^2C beschränkt ist.

Für die erste Summe folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds y(t_j) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cdot \\ & \quad \left(\cos(t_j - t_0)\Omega y(t_0) + \Omega^{-1} \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) \right. \\ & \quad \left. + \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s)\Omega (A_0 - A(s))y(s) ds \right). \end{aligned}$$

Damit erhält man zum einen den zweiten Term, der in der Aussage des Lemmas auftritt, und zum anderen

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds \cdot \\ & \quad \left(\Omega^{-1} \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) \right. \\ & \quad \left. + \int_{t_0}^{t_j} \Omega^{-1} \sin(t_j - s)\Omega (A_0 - A(s))y(s) ds \right) \\ &=: \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega \dot{A}_{j+1/2}(\frac{1}{2} - s) \cos hs\Omega ds w(t_j) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1})\Omega h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega (\frac{1}{2} - s) ds \dot{A}_{j+1/2} w(t_j). \end{aligned}$$

Durch Aufsummieren des Cosinus folgt, dass dieser Term unter der Nichtresonanzbedingung (2.28) durch h^2C beschränkt bleibt. \square

Lemma 2.23 *Unter der Nichtresonanzbedingung (2.29) gilt:*

$$\begin{aligned}
& \left\| - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \right. \\
& \quad \left. h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs \Omega ds \cos(t_j - t_0) \Omega y(t_0) \right. \\
& + \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
& \quad \left. h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs \Omega ds \cos(t_j - t_0) \Omega y(t_0) \right. \\
& - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(t_n - t_{j+1}) \Omega \cdot \\
& \quad \left. h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega \dot{A}_{j+1/2}(\tfrac{1}{2}-s) \sin hs \Omega ds \sin(t_j - t_0) \Omega y(t_0) \right\|_2 \leq Ch^2.
\end{aligned}$$

Beweis: Übergang auf die Eigenwertzerlegung ergibt zunächst:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{j=0}^{n-1} Q \sin(t_n - t_{j+1}) \Lambda \cdot \\
& \quad h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Lambda \underbrace{Q^T \dot{A}_{j+1/2} Q}_{:=G(t_{j+\frac{1}{2}})}(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs \Lambda ds \cdot \\
& \quad \cos(t_j - t_0) \Lambda Q^T y(t_0) \\
& + \sum_{j=0}^{n-1} Q \cos(t_n - t_{j+1}) \Lambda \cdot \\
& \quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Lambda G(t_{j+\frac{1}{2}})(\tfrac{1}{2}-s) \cos hs \Lambda ds \cos(t_j - t_0) \Lambda Q^T y(t_0) \\
& - \sum_{j=0}^{n-1} Q \cos(t_n - t_{j+1}) \Lambda \cdot \\
& \quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Lambda G(t_{j+\frac{1}{2}})(\tfrac{1}{2}-s) \sin hs \Lambda ds \sin(t_j - t_0) \Lambda Q^T y(t_0).
\end{aligned}$$

Zusammenfassen der Terme ergibt:

$$\sum_{j=0}^{n-1} Q \cdot \left[\underbrace{-\sin(t_n - t_{j+1}) \Lambda h^2 \int_0^1 \sin h(1-s) \Lambda G(t_{j+\frac{1}{2}}) \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos hs \Lambda ds \cos(t_j - t_0) \Lambda}_{:=h^2 B^1(t_{j+\frac{1}{2}})} \right. \\ \left. + \underbrace{\cos(t_n - t_{j+1}) \Lambda h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Lambda G(t_{j+\frac{1}{2}}) \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos hs \Lambda ds \cos(t_j - t_0) \Lambda}_{:=h^2 B^2(t_{j+\frac{1}{2}})} \right. \\ \left. - \underbrace{\cos(t_n - t_{j+1}) \Lambda h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Lambda G(t_{j+\frac{1}{2}}) \left(\frac{1}{2} - s\right) \sin hs \Lambda ds \sin(t_j - t_0) \Lambda}_{:=h^2 B^3(t_{j+\frac{1}{2}})} \right] \cdot Q^T y(t_0).$$

Die Matrixeinträge der B -Matrizen lauten:

$$b_{kl}^1(t_{j+\frac{1}{2}}) = \underbrace{-\sin(t_n - t_{j+1}) \lambda_k \cos(t_j - t_0) \lambda_j \int_0^1 \sin h(1-s) \lambda_k \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos hs \lambda_k ds}_{:=E_{kl}^1(t_{j+\frac{1}{2}})} g_{kl}(t_{j+\frac{1}{2}}) \\ b_{kl}^2(t_{j+\frac{1}{2}}) = \underbrace{\cos(t_n - t_{j+1}) \lambda_k \cos(t_j - t_0) \lambda_j \int_0^1 \cos h(1-s) \lambda_k \left(\frac{1}{2} - s\right) \cos hs \lambda_k ds}_{:=E_{kl}^2(t_{j+\frac{1}{2}})} g_{kl}(t_{j+\frac{1}{2}}) \\ b_{kl}^3(t_{j+\frac{1}{2}}) = \underbrace{-\cos(t_n - t_{j+1}) \lambda_k \sin(t_j - t_0) \lambda_j \int_0^1 \cos h(1-s) \lambda_k \left(\frac{1}{2} - s\right) \sin hs \lambda_k ds}_{:=E_{kl}^3(t_{j+\frac{1}{2}})} g_{kl}(t_{j+\frac{1}{2}}).$$

Mit den Matrizen $E^k(t)$, $k = 1, \dots, 3$ lassen sich die $B^k(t)$ auch schreiben als

$$B^k(t) = E^k(t) \bullet G(t),$$

wobei \bullet das punktweise Matrixprodukt bezeichnet.

Die Summe nimmt damit die folgende Gestalt an:

$$h^2 \sum_{j=0}^{n-1} Q \left(E^1(t_{j+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) + E^2(t_{j+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) + E^3(t_{j+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) \right) \cdot Q^T y(t_0) \\ = h^2 \sum_{j=0}^{n-1} Q \left(\underbrace{E^1(t_{j+\frac{1}{2}}) + E^2(t_{j+\frac{1}{2}}) + E^3(t_{j+\frac{1}{2}})}_{:=E(t_{j+\frac{1}{2}})} \right) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) Q^T y(t_0).$$

Bleibt

$$h^2 \sum_{j=0}^{n-1} Q \left(E(t_{j+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) \right) Q^T y(t_0)$$

zu untersuchen.

Der Trick, diese Summe abzuschätzen, ohne ein h zu verlieren, besteht darin, dass sich $E(t_{j+\frac{1}{2}})$ unter den Nichtresonanzbedingungen (2.29) aufsummieren lassen und die Summe dabei beschränkt bleibt. Anschließend hilft dann partielle Summation. Die Entdeckung, dass es darauf ankommt, wie die Frequenzen λ_i von A im lokalen Fehler gemischt werden, und die Vorgehensweise sind nicht neu. Das wurde bereits bei nichtlinearen oszillatorischen Differentialgleichungen mit konstantem A (vgl. [16]) und bei der homogenen Schroedinger-Gleichung mit zeitabhängigem $A(t)$ (vgl. [15]) festgestellt.

Zunächst wird

$$SE_{n-1} := \sum_{j=0}^{n-1} E(t_{j+\frac{1}{2}})$$

betrachtet. Der (k, l) -te Matrixeintrag hat die Gestalt:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} E_{kl}(t_{j+\frac{1}{2}}) &= \sum_{j=0}^{n-1} \left(E_{kl}^1(t_{j+\frac{1}{2}}) + E_{kl}^2(t_{j+\frac{1}{2}}) + E_{kl}^3(t_{j+\frac{1}{2}}) \right) \\ &= - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(n-j-1) \underbrace{h\lambda_k}_x \cos j \underbrace{h\lambda_l}_y \int_0^1 \sin(1-s) \underbrace{h\lambda_k}_x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos s \underbrace{h\lambda_l}_y ds \\ &\quad + \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1) \underbrace{h\lambda_k}_x \cos j \underbrace{h\lambda_l}_y \int_0^1 \cos(1-s) \underbrace{h\lambda_k}_x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos s \underbrace{h\lambda_l}_y ds \\ &\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1) \underbrace{h\lambda_k}_x \sin j \underbrace{h\lambda_l}_y \int_0^1 \cos(1-s) \underbrace{h\lambda_k}_x \left(\frac{1}{2}-s\right) \sin s \underbrace{h\lambda_l}_y ds. \end{aligned}$$

Ob die Matrixeinträge der Matrix SE_{n-1} beschränkt bleiben, hängt damit nur von der Funktion

$$\begin{aligned} \epsilon_{n-1}(x, y) &= - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(n-j-1)x \cos jy \int_0^1 \sin(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos sy ds \\ &\quad + \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1)x \cos jy \int_0^1 \cos(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos sy ds \\ &\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1)x \sin jy \int_0^1 \cos(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \sin sy ds \end{aligned}$$

ab.

Für die Terme

$$\begin{aligned} \epsilon_{1,n-1}(x, y) + \epsilon_{3,n-1}(x, y) &= - \sum_{j=0}^{n-1} \sin(n-j-1)x \cos jy \int_0^1 \sin(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos sy ds \\ &\quad - \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1)x \sin jy \int_0^1 \cos(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \sin sy ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4 \sin\left(\frac{y-x}{2}\right)} \left(\cos\left((n-1)y + \frac{y-x}{2}\right) - \cos\left((n-1)x + \frac{x-y}{2}\right) \right) \cdot \\
&\quad \left[\frac{\cos y + \cos x}{2(y-x)} + \frac{\sin x - \sin y}{(y-x)^2} \right] \\
&+ \frac{1}{4 \sin\left(\frac{y+x}{2}\right)} \left(\cos\left((n-1)y + \frac{y+x}{2}\right) - \cos\left((n-1)x + \frac{y+x}{2}\right) \right) \cdot \\
&\quad \left[\frac{\cos y + \cos x}{2(y+x)} - \frac{\sin x + \sin y}{(x+y)^2} \right],
\end{aligned}$$

ergibt sich mit der Substitution

$$u = \frac{y-x}{2}, \quad v = \frac{y+x}{2}, \quad \text{also} \quad x = v-u, \quad y = u+v, \quad (2.31)$$

die Darstellung

$$\begin{aligned}
&\frac{u \cos v}{8 \sin u} \left(\cos\left((n-1)(u+v)+u\right) - \cos\left((n-1)(v-u)-u\right) \right) \cdot \left[\frac{u \cos u - \sin u}{u^3} \right] \\
&+ \frac{v \cos v}{8 \sin(v)} \left(\cos\left((n-1)(u+v)+v\right) - \cos\left((n-1)(v-u)+v\right) \right) \cdot \left[\frac{v \cos v - \sin v}{v^3} \right].
\end{aligned}$$

Unter den Nichtresonanzbedingungen ist dieser Term gleichmäßig beschränkt.

Für den Term

$$\begin{aligned}
\epsilon_{2,n-1}(x, y) &= \sum_{j=0}^{n-1} \cos(n-j-1)x \cos jy \int_0^1 \cos(1-s)x \left(\frac{1}{2}-s\right) \cos sy \, ds \\
&= \left[\frac{1}{4 \sin \frac{y-x}{2}} \left(\sin\left((n-1)y + \frac{y-x}{2}\right) - \sin\left((n-1)x + \frac{x-y}{2}\right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4 \sin \frac{x+y}{2}} \left(\sin\left((n-1)y + \frac{y+x}{2}\right) + \sin\left((n-1)x + \frac{y+x}{2}\right) \right) \right] \cdot \\
&\quad \left[\frac{-1}{4(y-x)} (\sin x + \sin y) + \frac{1}{4(x+y)} (\sin x - \sin y) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2(x-y)^2} (\cos x - \cos y) - \frac{1}{2(x+y)^2} (\cos x - \cos y) \right]
\end{aligned}$$

ergibt sich mit Substitution (2.31) die Darstellung

$$\begin{aligned} & \frac{uv}{16 \sin u} \left(\sin \left((n-1)(u+v) + u \right) - \sin \left((n-1)(v-u) - u \right) \right) \cdot \\ & \quad \left(\frac{\sin v \sin u - u \cos u}{v u^3} + \frac{\sin u \sin v - v \cos v}{u v^3} \right) \\ & + \frac{uv}{16 \sin v} \left(\sin \left((n-1)(u+v) + v \right) + \sin \left((n-1)(v-u) + v \right) \right) \cdot \\ & \quad \left(\frac{\sin v \sin u - u \cos u}{v u^3} + \frac{\sin u \sin v - v \cos v}{u v^3} \right). \end{aligned}$$

In dieser Darstellung erkennt man, dass der gesamte Term unter der Nichtresonanzbedingung gleichmäßig in x, y, n beschränkt ist.

Mit

$$SE_l = \sum_{j=0}^l E(t_{j+\frac{1}{2}})$$

folgt

$$\begin{aligned} & h^2 \sum_{j=0}^{n-1} Q \left(E(t_{j+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{j+\frac{1}{2}}) \right) Q^T y(t_0) \\ & = h^2 \sum_{j=1}^{n-2} Q \left(SE_j \bullet (G(t_{j+\frac{1}{2}}) - G(t_{j+\frac{3}{2}})) \right) Q^T y(t_0) \\ & \quad - h^2 Q \left(SE_{n-1} \bullet G(t_{n-\frac{1}{2}}) \right) Q^T y(t_0) \\ & \quad + h^2 Q \left(E(t_{0+\frac{1}{2}}) \bullet G(t_{0+\frac{1}{2}}) \right) Q^T y(t_0). \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Abschätzung (vgl. Lemma 5, [16])

$$\|SE_n \bullet G\|_2 \leq C_0 \|G\|_2 \leq C_0 \sqrt{N} \|G\|_2, \quad \text{mit } C_0 = \sup_{x, y \geq 0, j} |\epsilon_j(x, y)|$$

und N der Dimension des Lösungsvektors y von (2.1) folgt für die obige Summe insgesamt

$$\left(\mathcal{O}(h^3) \sum_{j=1}^{n-2} \|\cdot\|_2 \right) + 2h^2 \|\cdot\|_2 = \mathcal{O}(h^2),$$

unter der Nichtresonanzbedingung. Damit ist das Lemma bewiesen. □

2.5 Numerische Beispiele

In diesem Abschnitt wird der exponentielle Integrator an einfachen Systemen getestet. Das erste Testsystem ist die Airy-Differentialgleichung (vgl [19]):

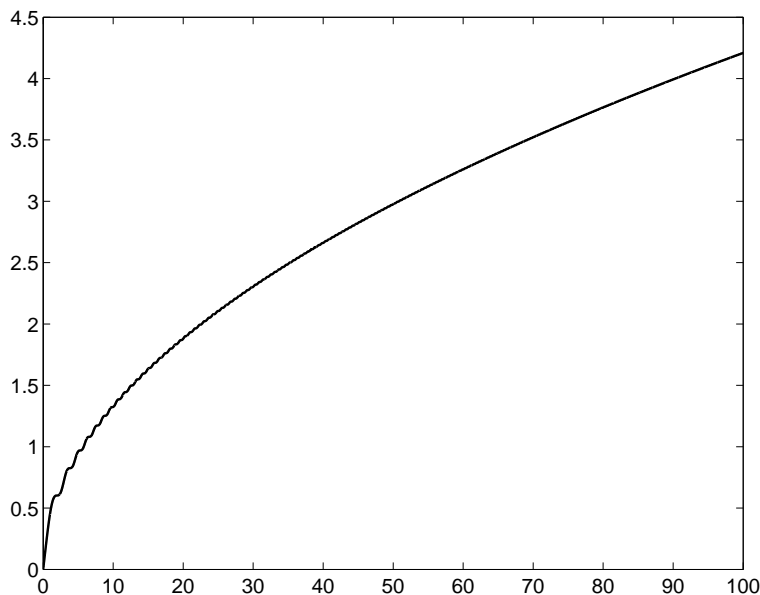
$$\ddot{y} = -ty, \quad y(0) = 1, \quad \dot{y}(0) = 0.$$

Die Hamilton-Funktion zur Airy-Gleichung lautet:

$$H(\dot{y}, y) = \frac{1}{2}\dot{y}^2 + \frac{t}{2}y^2.$$

Die exakte Lösung der Differentialgleichung erfüllt im Intervall $[0, 100]$ eine Finite-Energie-Bedingung $H(p, q) \leq 4.5$, wie sich in Abbildung 2.1 erkennen lässt. Nach Satz 2.15 mit $\alpha = 1$ hat der einfache exponentielle Integrator die Ordnung 2, unabhängig von den hohen Frequenzen der Lösung, die in Abbildung 2.2 dargestellt ist. In Abbildung 2.3 ist der Fehler aufgetragen, und die Ordnung 2 des Verfahrens lässt sich numerisch bestätigen. Gemessen wurde der globale Fehler dabei zur Zeit $t = 100$.

Abbildung 2.1: Hamilton-Funktion entlang der Lösung ausgewertet



Jetzt wird der einfache exponentielle Integrator an dem folgenden Testsystem ausprobiert:

$$\ddot{y} = -A(t)y, \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0,$$

mit $A(t) = Q(t)\Lambda(t)Q^T(t)$,

$$Q(t) = \begin{bmatrix} \cos(2\pi\kappa t + \beta) & \sin(2\pi\kappa t + \beta) \\ -\sin(2\pi\kappa t + \beta) & \cos(2\pi\kappa t + \beta) \end{bmatrix}$$

und

$$\Lambda(t) = \begin{bmatrix} \lambda_1(t) & 0 \\ 0 & \lambda_2(t) \end{bmatrix}.$$

Dabei ist $\lambda_i(t) \geq 0$.

Zuerst werden $\lambda_1(t) = 10000\pi$ und $\lambda_2(t) = \pi$ gesetzt. Die Matrix $\Lambda(t)$ ist konstant, und die Zeitabhängigkeit kommt nur durch eine sehr langsame Drehung von $Q(t)$ zustande. Das einfache exponentielle Verfahren ist sehr gut, wie sich in Abbildung 2.4 erkennen lässt. Die Resonanzen, die bei exakter Rechnung nur in den Impulsen auftreten, sind numerisch auch in der Lösung y zu

erkennen. Mit Hilfe von Abbildung 2.6 lässt sich erkennen, dass die Spitzen des globalen Fehlers genau mit den Resonanzstellen aus der Bedingung für die Impulse übereinstimmen. Unter beiden Nichtresonanzbedingungen hat das Verfahren Ordnung zwei, wie sich in Abbildung 2.7 erkennen lässt. Die Spitzen können nicht beliebig groß werden, da das Verfahren nach Satz 2.12 mindestens Ordnung 1 in Impulsen und Orten hat.

Abbildung 2.2: Exakte Lösung der Airy-Differentialgleichung

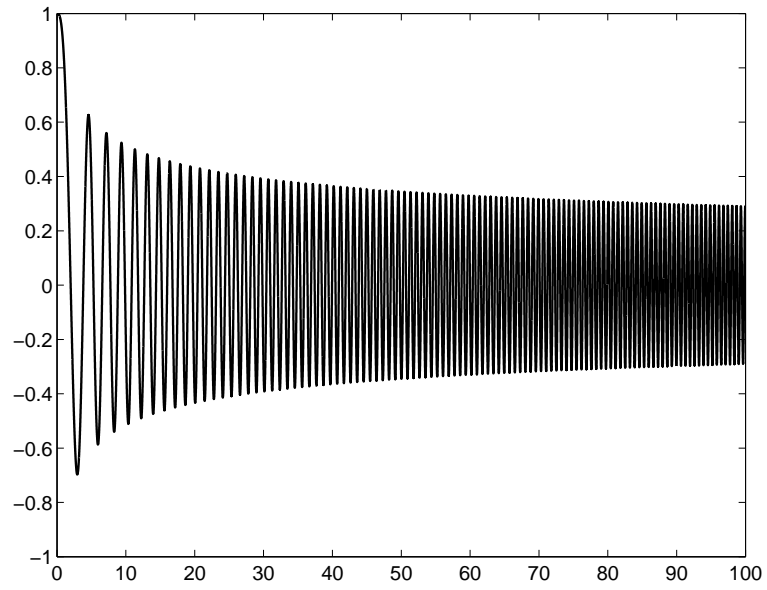


Abbildung 2.3: Fehler beim Lösen der Airy-Differentialgleichung

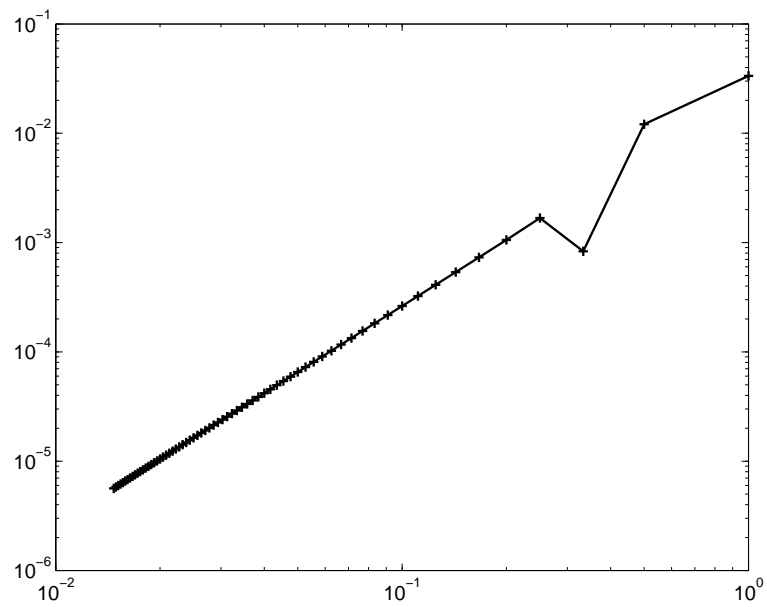


Abbildung 2.4: Globaler Fehler in den Orten mit $\lambda_1(t) = 10000\pi$, $\lambda_2(t) = \pi$

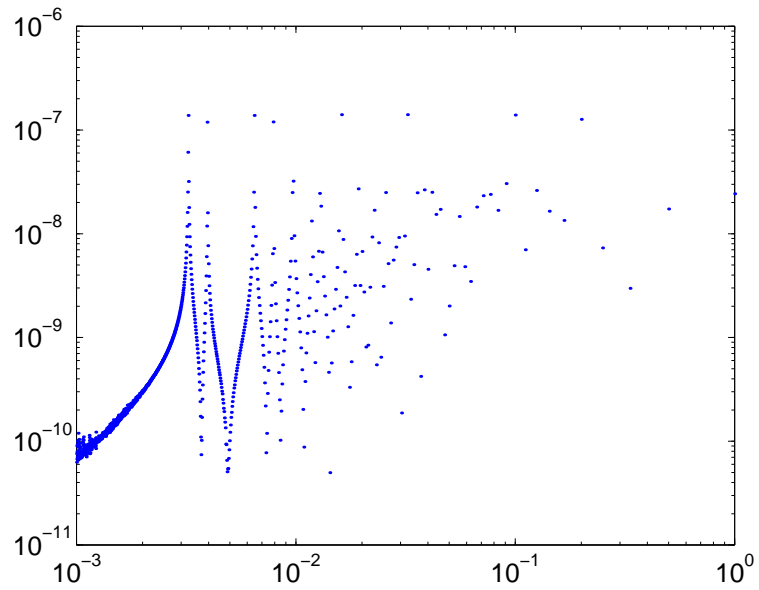


Abbildung 2.5: Resonanzstellen

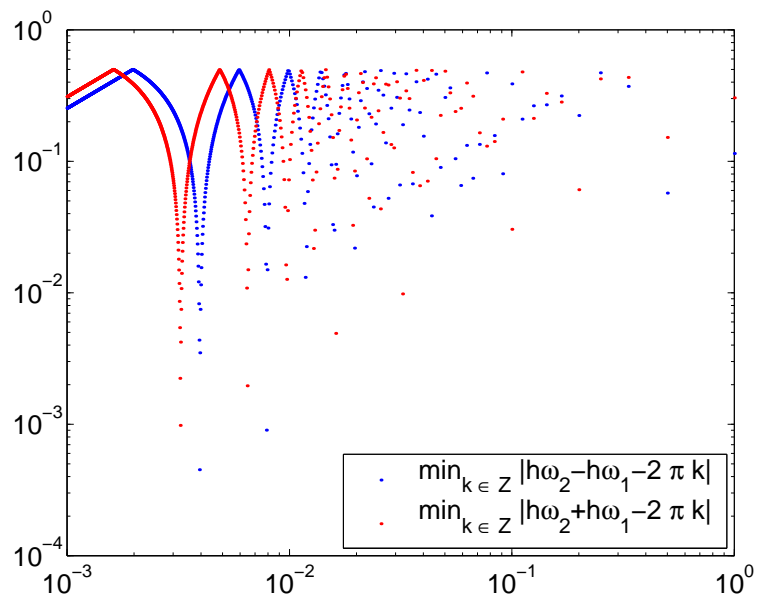


Abbildung 2.6: Globaler Fehler und Resonanzstellen

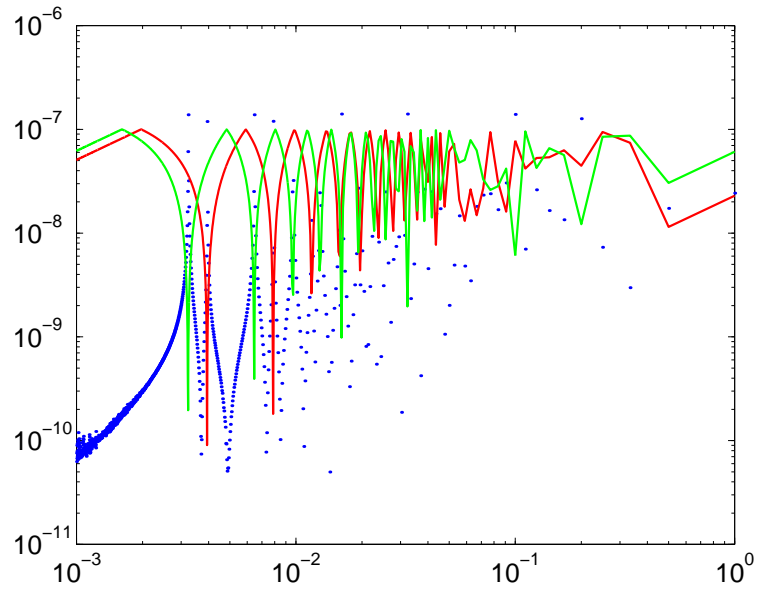
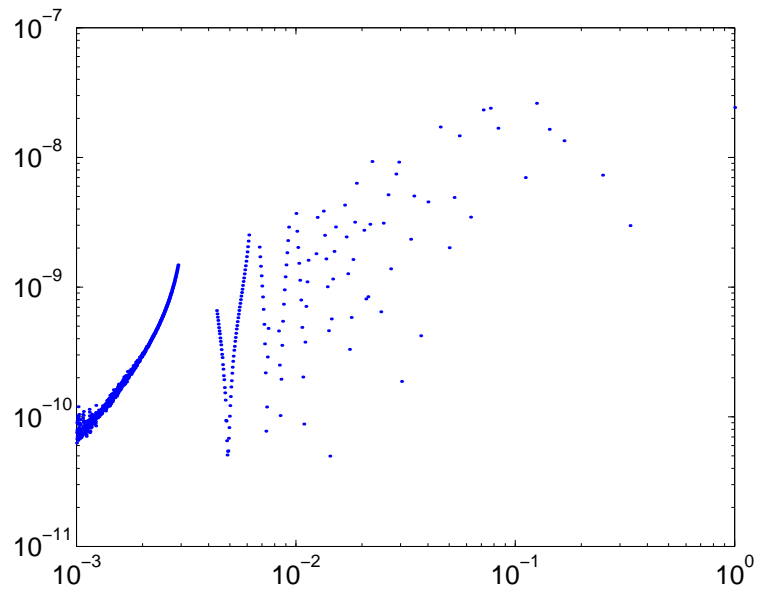


Abbildung 2.7: Globaler Fehler unter Nichtresonanzbedingung



Kapitel 3

Exponentielle Integratoren für die nichtautonome, lineare, oszillatorische, inhomogene Differentialgleichung zweiter Ordnung

Oszillatorische Differentialgleichungen, bei denen das oszillatorische Verhalten von einem zeitabhängigen linearen Anteil erzeugt wird, werden in diesem Kapitel betrachtet. Nach einer Darstellung der Differentialgleichungen werden Ein- und Zweischrittverfahren angegeben, die Langzeitschrittintegratoren sind. Nach dem Beweis werden die Verfahren numerisch getestet.

3.1 Problemstellung

Die oszillatorische Differentialgleichung, die im Intervall $I = [t_0, t_0 + T]$ gelöst werden soll, lautet:

$$\ddot{y}(t) = -A(t)y(t) + g(y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0, \quad (3.1)$$

mit $A(t) \in C^2(I, \mathbb{R}^{N \times N})$ eine symmetrisch positiv-semidefinite Matrix. Dabei sei für alle t

$$\|\dot{A}(t)\|_2 \leq \|\dot{A}\|_\infty = N_1 \quad \text{und} \quad \|\ddot{A}(t)\|_2 \leq \|\ddot{A}\|_\infty = N_2$$

beschränkt, aber

$$\|A(t)\|_2 \gg 1.$$

$g \in C^2$ und g, g_y, g_{yy} seien in der Euklidnorm bzw. den von der Euklidnorm induzierten Normen beschränkt.

Die große Norm von $A(t)$ bedeutet, dass die Schrittweite von Standardintegratoren ungefähr durch $\|\sqrt{A}\|_\infty^{-1}$ beschränkt ist. Differentialgleichungen dieses Typs treten in vielen technischen und naturwissenschaftlichen Anwendungen auf.

Weiter gelte in dem ganzen Abschnitt für die exakte Lösung die Finite-Energie-Bedingung

$$\frac{1}{2}\|\dot{y}(t)\|_2^2 + \frac{1}{2}\|\Omega(t)y(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2}K^2. \quad (3.2)$$

Für $\tau \in I = [t_0, t_0 + T]$ beliebig lässt sich System (3.1) auch schreiben als

$$\ddot{y}(t) = -A(\tau)y + (A(\tau) - A(t))y(t) + g(y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0.$$

Mit der Variation-der-Konstanten-Formel lässt sich die Lösung dann darstellen als:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y(t) \\ \dot{y}(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(t-t_0)\Omega(\tau) & \Omega(\tau)^{-1}\sin(t-t_0)\Omega(\tau) \\ -\Omega(\tau)\sin(t-t_0)\Omega(\tau) & \cos(t-t_0)\Omega(\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(t_0) \\ \dot{y}(t_0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_{t_0}^t \begin{bmatrix} \Omega(\tau)^{-1}\sin(t-s)\Omega(\tau) \\ \cos(t-s)\Omega(\tau) \end{bmatrix} \left((A(\tau) - A(s))y(s) + g(y(s)) \right) ds. \end{aligned} \quad (3.3)$$

3.2 Einschrittverfahren

Die Variation-der-Konstanten-Formel (3.3) legt das folgende Näherungsschema nahe, wobei $\Omega_{n+1/2} := \Omega(t_n + \frac{h}{2})$:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \dot{y}_{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1}\sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2}\sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_n \\ \dot{y}_n \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\psi(h\Omega_{n+1/2})g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_n) \\ \frac{1}{2}h(\psi_0(h\Omega_{n+1/2})g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_n) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2})g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_{n+1})) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Dabei werden nur Funktionen ψ , ψ_0 , ψ_1 und ϕ betrachtet, die auf der nicht-negativen reellen Achse beschränkt sind und glatt von x^2 abhängen. Weiter gelte für die Funktion ψ :

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{\sin \frac{x}{2}} \left(\frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{(\frac{x}{2})^2} - \psi(x) \right) \right| \leq C. \quad (3.5)$$

Für die Funktionen $\chi = \phi$, ψ_0 , ψ_1 gelte:

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{x \sin \frac{x}{2}} \left(\frac{\sin x}{x} - \chi(x) \right) \right| \leq C, \quad (3.6)$$

und für jede der Funktionen $\chi = \phi$, ψ , ψ_0 , ψ_1 wird eine Bedingung der Form

$$\|\chi(\sqrt{B}) - \chi(\sqrt{\tilde{B}})\|_2 \leq C_\Phi \|B - \tilde{B}\|_2, \quad (3.7)$$

für beliebige symmetrisch positiv-semidefinite Matrizen $B, \tilde{B} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ gefordert.

Lemma 3.1 *Seien $A, \tilde{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ symmetrisch positiv-semidefinite Matrizen. Wird weiter definiert $\Omega := \sqrt{A}$ und $\tilde{\Omega} := \sqrt{\tilde{A}}$ und sei $\phi(x)$ eine in x^2 glatte Funktion und $\tilde{\phi}(x) := \phi(\sqrt{x})$. Dann gilt mit $h > 0$:*

$$\|\phi(h\Omega) - \phi(h\tilde{\Omega})\|_2 \leq \max_{x \geq 0} |\tilde{\phi}'(x)| \sqrt{N} h^2 \|A - \tilde{A}\|_2.$$

Nach Lemma 3.1 ist zum Nachweis der Eigenschaft (3.7) $\max_{x \geq 0} |\phi'(\sqrt{x})|$ beschränkt hinreichend. Da die Konstanten C_Φ , C_Ψ , C_{Ψ_0} und C_{Ψ_1} in die Konstante C des folgenden Satzes eingehen, sind möglichst kleine Konstanten wünschenswert. Wird Lemma 3.1 bei einer Funktion verwendet, wachsen die Konstanten wie \sqrt{N} . Für viele Funktionen kann jedoch mit Hilfe von Lemma 2.7 gezeigt werden, dass sie die Bedingung (3.7) mit einer kleinen Konstante ohne \sqrt{N} erfüllen. Dies gilt zum Beispiel für alle Funktionen, die in [9] und [16] als Filterfunktionen vorgeschlagen werden.

Die bisher genannten Voraussetzungen sind nötig, um im folgenden Satz die Aussage über die Ortsfehler zu beweisen. Für die Aussage über die Impulsfehler sind noch die folgenden Voraussetzungen nötig. Für die Funktion ψ gelte zusätzlich

$$\max_{x \geq 0} |x \psi(x)| \leq C \quad (3.8)$$

und für die Funktionen ψ_i , $i = 0, 1$

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{\sin \frac{x}{2}} \left(\frac{\sin x}{x} - \psi_i(x) \right) \right| \leq C. \quad (3.9)$$

Im Folgenden werden nur Verfahren betrachtet, die alle genannten Voraussetzungen an die analytischen Funktionen erfüllen.

Satz 3.2 *Sei in (3.1) $A \in C^2(I, \mathbb{R}^{N \times N})$, $I = [t_0, t_0 + T]$, eine beliebige symmetrisch positiv-semidefinite Matrix, und \dot{A} , \ddot{A} , g , g_y und g_{yy} seien in der Euklidnorm bzw. in den von der Euklidnorm induzierten Normen beschränkt. Es gelte die Finite-Energie-Bedingung (3.2). Dann erfüllt der globale Fehler von Verfahren (3.4)*

$$\begin{aligned} \|y(t_n) - y_n\|_2 &\leq h^2 C, \\ \|\dot{y}(t_n) - \dot{y}_n\|_2 &\leq h C, \end{aligned}$$

für alle $0 \leq nh \leq T$. Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|, \phi, \psi, \psi_0$ und ψ_1 .

3.3 Zweischrittverfahren

Nachdem im letzten Abschnitt Einschrittverfahren betrachtet wurden, werden jetzt Zweischrittverfahren untersucht. In der Moleküldynamik erwartet man in der Regel von symplektischen oder symmetrischen Verfahren Vorteile. Daher beschränken wir uns gleich auf symmetrische Zweischrittverfahren.

Mit der Variation-der-Konstanten-Formel lässt sich die Lösung als

$$\begin{aligned}
y(t) &= \cos(t - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \Omega(\tau)^{-1}\sin(t - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) \\
&\quad + \int_{t_0}^t \Omega(\tau)^{-1}\sin(t - s)\Omega(\tau)(A(\tau) - A(s))y(s) ds \\
&\quad + \int_{t_0}^t \Omega(\tau)^{-1}\sin(t - s)\Omega(\tau)g(y(s)) ds \\
\dot{y}(t) &= -\Omega(\tau)\sin(t - t_0)\Omega(\tau)y(t_0) + \cos(t - t_0)\Omega(\tau)\dot{y}(t_0) \\
&\quad + \int_{t_0}^t \cos(t - s)\Omega(\tau)(A(\tau) - A(s))y(s) ds + \int_{t_0}^t \cos(t - s)\Omega(\tau)g(y(s)) ds
\end{aligned}$$

darstellen.

Ein Vergleich mit der exakten Lösung legt die folgenden Verfahren nahe:

$$y_{n+1} - 2\cos h\Omega(t_n)y_n + y_{n-1} = h^2\Psi_n g(\Phi_n y_n)$$

bzw.

$$\begin{aligned}
\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} &= -2\Omega(t_n)\sin h\Omega(t_n)y_n \\
&\quad + \frac{1}{2}h\left(\Psi_{n+1,1}g(\Phi_{n+1}y_{n+1}) + 2\Psi_{n,0}g(\Phi_n y_n) + \Psi_{n-1,1}g(\Phi_{n-1}y_{n-1})\right),
\end{aligned}$$

mit $\Phi_n = \phi(h\Omega(t_n))$, $\Psi_n = \psi(h\Omega(t_n))$, $\Psi_{n,1} = \psi_1(h\Omega(t_n))$ und $\Psi_{n,0} = \psi_0(h\Omega(t_n))$, wobei $\phi(x)$, $\psi(x)$, $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, glatt von x^2 abhängen. Wie zuvor ist $\Omega(t) = \sqrt{A(t)}$.

Im Falle einer konstanten Matrix A wurden Verfahren dieses Typs in [11] unter Anderem auf ihr Langzeitverhalten bezüglich der Energieerhaltung untersucht.

Statt die Verfahren mit beliebigen Funktionen $\phi(x)$, $\psi(x)$, $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ zu untersuchen und Bedingungen anzugeben, unter denen die Verfahren Ordnungsschranken unabhängig von der Norm von A besitzen, wie bei den Einschrittverfahren, werden spezielle Verfahren dieses Typs mit

$$\phi(x) = \frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2}, \quad \psi_1(x) = 0, \quad \psi_0(x) = 2\frac{\sin x}{x},$$

und beliebigem $\phi(x)$ untersucht. Hierfür gibt es gleich mehrere Gründe. So sind die Ordnungen des Verfahrens bei konstanter Matrix A in [16] gründlich untersucht worden, und diese Ergebnisse können für den Fall mit zeitabhängigem $A(t)$ verwendet werden. Außerdem ist von diesem Verfahren eine lineare Stabilitätsanalyse bekannt. Beim Lösen großer Systeme mit Krylov-Verfahren bedeutet $\psi_1(x) \neq 0$ den Aufbau zweier zusätzlicher Krylovräume, was zu einem höheren Rechenaufwand führt.

Mit denselben Techniken wie bei den Einschrittverfahren im vorigen Abschnitt lässt sich erkennen, dass, von diesem Verfahren ausgehend, leicht andere Funktionen ϕ , ψ , ψ_0 , ψ_1 gewonnen werden können, für die das resultierende Verfahren nicht der Schrittweitereinschränkung unterliegt. So erlaubt z.B. auch jedes Verfahren mit einer Funktion ψ , für die

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{\sin \frac{x}{2} \sin(x)} \left(\psi(x) - \frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2} \right) \right| \leq C$$

gilt, eine Fehlerschranke für das Verfahren, die nicht von der Norm von A abhängt. Für ψ_0 und ψ_1 können ähnliche Bedingungen angegeben werden.

Interessant ist auch, dass sich Verfahren finden lassen, die nur für die richtige Wahl des ersten Schrittes als Zweischrittverfahren eine Ordnungsschranke unabhängig von Norm A zulassen. Verfahren dieses Typs sind die Verfahren in [9] in der Zweischrittformulierung. Wird als Startschritt der Startschritt der zugehörigen Einschrittformulierung gewählt, erhält man ebenfalls Ordnungsschranken unabhängig von der Norm von A .

Die Zweischrittverfahren, für die die Fehlerschranken streng bewiesen werden, lauten ausführlicher aufgeschrieben:

$$y_{n+1} - 2 \cos h\Omega_n y_n + y_{n-1} = h^2 \operatorname{sinc}^2 \frac{h}{2} \Omega_n g(\phi(h\Omega_n) y_n) \quad (3.10)$$

und

$$\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} = -2\Omega_n \sin h\Omega_n y_n + 2h \operatorname{sinc} h\Omega_n g(\phi(h\Omega_n) y_n),$$

mit $\Omega_n = \Omega(t_n)$.

Für die Filterfunktion ϕ gelte

$$\max_{x \geq 0} |\phi(x)| \leq C, \quad \phi(0) = 1 \quad \phi(k\pi) = 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

Diese Eigenschaften der Filterfunktion werden bereits im Fall einer konstanten Matrix A benötigt. Hier wird zusätzlich

$$\|\phi(\sqrt{B}) - \phi(\sqrt{\tilde{B}})\|_2 \leq C_\Phi \|B - \tilde{B}\|_2 \quad (3.11)$$

für beliebige symmetrisch positiv-semidefinite Matrizen $B, \tilde{B} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ gefordert.

Für die Konstante C_Φ gelten dieselben Bemerkungen wie bei den Einschrittverfahren.

Satz 3.3 *Sei in (3.1) $A \in C^2(I, \mathbb{R}^{N \times N})$, $I = [t_0, t_0 + T]$, eine beliebige symmetrisch positiv-semidefinite Matrix, und \dot{A} , \ddot{A} , g , g_y und g_{yy} seien in der Euklidnorm bzw. in den von der Euklidnorm induzierten Normen beschränkt. Es gelte die Finite-Energie-Bedingung (3.2). Dann erfüllt der globale Fehler von Verfahren (3.10)*

$$\begin{aligned} \|y(t_n) - y_n\|_2 &\leq h^2 C, \\ \|\dot{y}(t_n) - \dot{y}_n\|_2 &\leq h C, \end{aligned}$$

für alle $0 \leq nh \leq T$. Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|, \min\{\log(n+1), \log(N+1), \sqrt{N}\}$ und ϕ .

3.4 Beweis der Fehlerschranken für Einschrittverfahren

Um Satz 3.2 zu beweisen, werden wieder Aussagen über die Defekte benötigt. Die Defekte lauten:

$$\begin{aligned} d_n &= y(t_n + h) - \cos h\Omega_{n+1/2} y(t_n) - \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \dot{y}(t_n) \\ &\quad - \frac{1}{2} h^2 \psi(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) \\ \dot{d}_n &= \dot{y}(t_n + h) + \Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} y(t_n) - \cos h\Omega_{n+1/2} \dot{y}(t_n) \\ &\quad - \frac{1}{2} h \left(\psi_0(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_{n+1})) \right). \end{aligned}$$

Lemma 3.4 Für die Defekte in den Orten gilt:

$$d_n = \frac{1}{2}h^2 \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_{n+1/2}}{\left(\frac{h}{2}\Omega_{n+1/2}\right)^2} - \psi(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) + h^3 z_n,$$

und in den Impulsen

$$\begin{aligned} \dot{d}_n &= \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{n+1/2}}{h\Omega_{n+1/2}} - \psi_0(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) \\ &+ \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{n+1/2}}{h\Omega_{n+1/2}} - \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n + h)) \\ &+ \frac{1}{2}h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} g_y(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) \cdot \\ &\quad \left[\left(\cos hs\Omega_n - \phi(h\Omega_n) \right) y(t_n) + \Omega_n^{-1} \sin hs\Omega_n \dot{y}(t_n) \right] ds \\ &+ \frac{1}{2}h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} g_y(\phi(h\Omega_{n+1})y(t_{n+1})) \cdot \\ &\quad \left[\left(\cos h(s-1)\Omega_{n+1} - \phi(h\Omega_{n+1}) \right) y(t_n + h) \right. \\ &\quad \left. + \Omega_{n+1}^{-1} \sin h(s-1)\Omega_{n+1} \dot{y}(t_n + h) \right] ds \\ &+ h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{n+1/2} \dot{A}(t_n + \frac{h}{2}) \left(\frac{1}{2} - s \right) y(t_n + \frac{h}{2}) ds + h^3 \dot{z}_n, \end{aligned}$$

mit

$$\|z_n\|_2 \leq C \quad \text{und} \quad \|\dot{z}_n\|_2 \leq C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Für die exakte Lösung ergibt sich mit den Defekten:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y(t_{n+1}) \\ \dot{y}(t_{n+1}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y(t_n) \\ \dot{y}(t_n) \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2 \psi(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) \\ \frac{1}{2}h \left(\psi_0(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_{n+1})) \right) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_n \\ \dot{d}_n \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Das Näherungschema lautet:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} y_{n+1} \\ \dot{y}_{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_n \\ \dot{y}_n \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2 \psi(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_n) \\ \frac{1}{2}h \left(\psi_0(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_n) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y_{n+1}) \right) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Für die Fehler $e_n = y(t_n) - y_n$ und $\dot{e}_n = \dot{y}(t_n) - \dot{y}_n$ ergibt sich die Rekursion

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} &= \underbrace{\begin{bmatrix} \cos h\Omega_{n+1/2} & \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2} \\ -\Omega_{n+1/2} \sin h\Omega_{n+1/2} & \cos h\Omega_{n+1/2} \end{bmatrix}}_{:= \tilde{R}(t_n + \frac{h}{2})} \begin{bmatrix} e_n \\ \dot{e}_n \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\psi(h\Omega_{n+1/2})F_n e_n \\ \frac{1}{2}h\psi_0(h\Omega_{n+1/2})F_n e_n + \frac{1}{2}h\psi_1(h\Omega_{n+1/2})H_{n+1}e_{n+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_n \\ \dot{d}_n \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

mit

$$F_n = \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega_{n+1/2})(y(t_n) - ue_n)) du \phi(h\Omega_{n+1/2}), \quad \|F_n\|_2 \leq \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)|$$

und

$$H_{n+1} = \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega_{n+1/2})(y(t_{n+1}) - ue_{n+1})) du \phi(h\Omega_{n+1/2}), \quad \|H_n\|_2 \leq \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)|.$$

Mit

$$\begin{aligned} R(t_j, t_j) &:= I, \\ R(t_{n+1}, t_{j-1}) &:= \tilde{R}(t_n + \frac{h}{2}) \cdots \tilde{R}(t_{j-1} + \frac{h}{2}) \end{aligned}$$

und

$$\Psi_j = \psi(h\Omega_{j+1/2}), \quad \Psi_{0,j} = \psi_0(h\Omega_{j+1/2}) \quad \text{und} \quad \Psi_{0,j+1} = \psi_1(h\Omega_{j+1/2})$$

lässt sich die Rekursion auch als

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} &= R(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} + \sum_{j=0}^n R(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\Psi_j F_j e_j \\ \frac{1}{2}h\Psi_{0,j} F_j e_j + \frac{1}{2}h\Psi_{1,j+1} H_{j+1} e_{j+1} \end{bmatrix} \\ &+ \sum_{j=0}^n R(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} \end{aligned}$$

schreiben.

Lemma 3.5 *Mit der Fundamentallösung Y von (2.2) lässt sich die Fehlerrekursion schreiben als:*

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e_{n+1} \\ \dot{e}_{n+1} \end{bmatrix} &= Y(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} + \sum_{j=0}^n Y(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\Psi_j F_j e_j \\ \frac{1}{2}h\Psi_{0,j} F_j e_j + \frac{1}{2}h\Psi_{1,j+1} H_{j+1} e_{j+1} \end{bmatrix} \\ &+ \sum_{j=0}^n Y(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix} + hM(t_{n+1}, t_0) \begin{bmatrix} e_0 \\ \dot{e}_0 \end{bmatrix} \\ &+ h \sum_{j=0}^n M(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} \frac{1}{2}h^2\Psi_j F_j e_j \\ \frac{1}{2}h\Psi_{0,j} F_j e_j + \frac{1}{2}h\Psi_{1,j+1} H_{j+1} e_{j+1} \end{bmatrix} \\ &+ h \sum_{j=0}^n M(t_{n+1}, t_{j+1}) \begin{bmatrix} d_j \\ \dot{d}_j \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

wobei $M(t_n, t_j) = \frac{1}{h}(R(t_n, t_j) - Y(t_n, t_j))$ und $\|M\|_\infty \leq C$.

Komponentenweise lautet diese Rekursion für die Fehler in den Orten:

$$e_{n+1} = c_{0,n+1}e_0 + c_{1,n+1}\dot{e}_0 + \frac{h}{2} \sum_{j=0}^n L_j e_j + D_j,$$

mit

$$\begin{aligned} c_{0,n+1} &= Y_{11}(t_{n+1}, t_0) + hM_{11}(t_{n+1}, t_0), \\ c_{1,n+1} &= Y_{12}(t_{n+1}, t_0) + hM_{12}(t_{n+1}, t_0), \\ L_j &= Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\Psi_{0,j}F_j + 1_{j \geq 1}(j)Y_{12}(t_{n+1}, t_j)\Psi_{1,j}H_j + hY_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})\Psi_jF_j \\ &\quad + h^2M_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})\Psi_jF_j + hM_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\Psi_{0,j}F_j + h1_{j \geq 1}(j)M_{12}(t_{n+1}, t_j)\Psi_{1,j}H_j, \\ D_j &= h \sum_{j=0}^n M_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j + h \sum_{j=0}^n M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\dot{d}_j \\ &\quad + \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j + \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\dot{d}_j. \end{aligned}$$

Auf dem festen Intervall sind L_j , $c_{0,n+1}$ und $c_{1,n+1}$ beschränkt.

Beweis von Satz 3.2: Nach den gerade gemachten Bemerkungen folgt mit einem einfachen Gronwall-Lemma die Behauptung für die Orte, wenn $\|D_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$ gezeigt ist. Es gilt:

$$\begin{aligned} \|D_j\|_2 &\leq \left\| h \sum_{j=0}^n M_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j \right\|_2 + \left\| h \sum_{j=0}^n M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\dot{d}_j \right\|_2 \\ &\quad + \left\| \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j \right\|_2 + \left\| \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})\dot{d}_j \right\|_2. \end{aligned}$$

Mit M ist auch M_{11} beschränkt, und mit Lemma 3.4 folgt sofort

$$\left\| h \sum_{j=0}^n M_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j \right\|_2 \leq h^2 C.$$

Die drei anderen Summen machen mehr Mühe. Daher ist jeder ein eigenes Lemma gewidmet. Mit Lemma 3.6, 3.7 und 3.8 folgt schließlich $\|D_j\|_2 \leq Ch^2$ und damit die Behauptung für die Orte. Für die Fehler in den Impulsen ergibt sich die Gleichung:

$$\dot{e}_{n+1} = \dot{c}_{0,n+1}e_0 + \dot{c}_{1,n+1}\dot{e}_0 + \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n+1} \dot{L}_j e_j + \dot{D}_j.$$

In \dot{L}_j tritt einmal der Term

$$Y_{21}(t_{n+1}, t_{j+1})h^2\Psi_jF_j$$

auf. Y_{21} ist nicht unabhängig von der Norm von Ω beschränkt. Gilt jedoch Bedingung (3.8), so folgt mit

$$Y_{21}(t_{n+1}, t_{j+1})h\Psi_jF_j = \check{Y}_{21}(t_{n+1}, t_{j+1})\left(h\Omega_{j+1/2}\right)\Psi(h\Omega_{j+1/2})F_j$$

und \check{Y}_{21} beschränkt

$$\|Y_{21}(t_{n+1}, t_{j+1})h\Psi_jF_j\| \leq C,$$

unabhängig von der Norm von Ω . Ist (3.8) erfüllt, so ist

$$\left\| \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n+1} \dot{L}_j e_j \right\|_2 \leq Ch$$

und der Fehler in den Orten durch

$$\begin{aligned} \dot{D}_j &= \sum_{j=0}^n Y_{21}(t_{n+1}, t_{j+1}) d_j + \sum_{j=0}^n Y_{22}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j \\ &\quad + h \sum_{j=0}^n M_{21}(t_{n+1}, t_{j+1}) d_j + h \sum_{j=0}^n M_{22}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j \end{aligned}$$

bestimmt. Die erste, dritte und vierte Summe ist $\mathcal{O}(h)$. Die zweite Summe ebenfalls, was wieder durch partielle Summation unter Beachtung von (3.9) gezeigt wird. \square

Lemma 3.6 *Unter den obigen Voraussetzungen gilt*

$$\left\| h \sum_{j=0}^n M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j \right\|_2 \leq Ch^2.$$

Beweis von Lemma 3.6: Mit Lemma 3.4 und wegen der Beschränktheit der Untermatrizen von M folgt zunächst

$$h \sum_{j=0}^n M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j = \mathcal{O}(h^2) + h^2 \sum_{j=0}^n M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \underbrace{(l_{0,j} + l_{1,j})}_{:=l_j},$$

mit

$$\begin{aligned} l_{0,j} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_0(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j)), \\ l_{1,j} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_1(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j + h)). \end{aligned}$$

Es gilt

$$\|M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j\|_2 \leq \left\| \begin{bmatrix} M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j \\ M_{22}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \frac{1}{h} (R(t_{n+1}, t_{j+1}) - Y(t_{n+1}, t_{j+1})) \begin{bmatrix} 0 \\ l_j \end{bmatrix} \right\|_2.$$

$R(t_{n+1}, t_{j+1})$ ist Lösung des Systems (2.22) mit Anfangswerten $\tilde{q}(t_{j+1}) = 0$ und $\tilde{p}(t_{j+1}) = l_j$. Wiederholen der Abschätzungen ergibt:

$$\begin{aligned} \|M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j\|_2 &\leq \frac{1}{h} e^{ChT} \left\| \int_{t_{j+1}}^{t_{n+1}} \begin{bmatrix} K_{11}(t_{n+1}, s)Y_{12}(s, t_{j+1})l_j \\ K_{21}(t_{n+1}, s)Y_{12}(s, t_{j+1})l_j \end{bmatrix} ds \right\|_2 \\ &\leq \frac{1}{h} e^{ChT} |t_{n+1} - t_{j+1}| \max\{\|K_{11}(t_{n+1}, s)Y_{12}(s, t_{j+1})l_j\|_\infty, \|K_{21}(t_{n+1}, s)Y_{12}(s, t_{j+1})l_j\|_\infty\}. \end{aligned}$$

Wegen

$$\|K_{11}(t, s)\|_\infty \leq hC, \quad \|K_{21}(t, s)\|_\infty \leq hC$$

gilt

$$\|M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j\|_2 \leq TCe^{ChT} \|Y_{12}(s, t_{j+1})l_j\|_\infty.$$

Durch die Voraussetzungen

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{x} \left(\frac{\sin x}{x} - \psi_0(x) \right) \right| \quad \text{und} \quad \max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{x} \left(\frac{\sin x}{x} - \psi_1(x) \right) \right|$$

beschränkt gilt

$$\|Y_{12}(s, t_{j+1})l_j\|_\infty = h \|\tilde{Y}_{12}(s, t_{j+1})(h\Omega_{j+1/2})^{-1}l_j\|_\infty$$

und damit schließlich

$$\|M_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})l_j\|_2 \leq hC,$$

was die Behauptung zeigt. □

Lemma 3.7 *Unter den obigen Voraussetzungen gilt*

$$\left\| \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j \right\|_2 \leq Ch^2.$$

Beweis von Lemma 3.7: Mit Lemma 3.4 folgt zunächst

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1})d_j &= \mathcal{O}(h^2) + \\ &\frac{1}{2}h^2 \sum_{j=0}^n Y_{11}(t_{n+1}, t_{j+1}) \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_{j+1/2}}{(\frac{h}{2}\Omega_{j+1/2})^2} - \psi(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j)). \end{aligned}$$

Mit Lemma (2.7) und Voraussetzung (3.7) folgt

$$\left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_{j+1/2}}{(\frac{h}{2}\Omega_{j+1/2})^2} - \psi(h\Omega_{j+1/2}) \right) = \mathcal{O}(h^2) + \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega}{(\frac{h}{2}\Omega)^2} - \psi(h\Omega) \right)$$

mit $\Omega = \Omega(t_0)$. Weiter gilt

$$Y_{11}(t_n, t_{j+1}) = W_1(t_n, t_{j+1}) \cos(t_n - t_{j+1})\Omega - W_2(t_n, t_{j+1}) \sin(t_n - t_{j+1})\Omega,$$

wobei

$$\begin{aligned} W_1(t_n, t_{j+1}) &= ((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1}(\cos(\cdot - t_n)\Omega)) (t_n) \\ W_2(t_n, t_{j+1}) &= ((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1}(\sin(\cdot - t_n)\Omega)) (t_n). \end{aligned}$$

Dabei gilt für beide W -Matrizen und alle j mit $0 \leq jh \leq T$:

$$\|W(t_n, t_{j+1}) - W(t_n, t_j)\|_2 \leq Ch.$$

Damit bleiben nur noch die beiden Summen

$$\frac{1}{2}h^2 \sum_{j=0}^n W_1(t_{n+1}, t_{j+1}) \cos(t_{n+1} - t_{j+1})\Omega \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega}{\left(\frac{h}{2}\Omega\right)^2} - \psi(h\Omega) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j))$$

und

$$\frac{1}{2}h^2 \sum_{j=0}^n W_2(t_{n+1}, t_{j+1}) \sin(t_{n+1} - t_{j+1})\Omega \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega}{\left(\frac{h}{2}\Omega\right)^2} - \psi(h\Omega) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j))$$

zu beschränken. Wegen Bedingung (3.5) sind die Funktionen

$$\sum_{j=0}^n \cos(n-j)x \left(\frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2} - \psi(x) \right) = \frac{-1}{2 \sin \frac{x}{2}} \left(\sin(nx + \frac{x}{2}) + \sin \frac{x}{2} \right) \left(\frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2} - \psi(x) \right)$$

und

$$\sum_{j=0}^n \sin(n-j)x \left(\frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2} - \psi(x) \right) = \frac{-1}{2 \sin \frac{x}{2}} \left(\cos(nx + \frac{x}{2}) - \cos \frac{x}{2} \right) \left(\frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2} - \psi(x) \right)$$

beschränkt, und mit partieller Summation folgt, dass beide Summen $\mathcal{O}(h^2)$ sind. \square

Lemma 3.8 *Unter den obigen Voraussetzungen gilt*

$$\left\| \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j \right\|_2 \leq Ch^2.$$

Beweis von Lemma 3.8: Mit Lemma 3.4 folgt zunächst

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \dot{d}_j &= \mathcal{O}(h^2) + \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \cdot \left\{ \right. \\ &\quad \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_0(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j)) \\ &\quad + \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_1(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j + h)) \\ &\quad + \frac{1}{2}h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} g_y(\phi(h\Omega_j)y(t_j)) \cdot \\ &\quad \quad \quad \left[\left(\cos hs\Omega_j - \phi(h\Omega_j) \right) y(t_j) + \Omega_j^{-1} \sin hs\Omega_j \dot{y}(t_j) \right] ds \\ &\quad + \frac{1}{2}h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} g_y(\phi(h\Omega_{j+1})y(t_{j+1})) \cdot \\ &\quad \quad \quad \left[\left(\cos h(s-1)\Omega_{j+1} - \phi(h\Omega_{j+1}) \right) y(t_j + h) \right. \\ &\quad \quad \quad \left. + \Omega_{j+1}^{-1} \sin h(s-1)\Omega_{j+1} \dot{y}(t_j + h) \right] ds \\ &\quad \left. + h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} \dot{A}(t_j + \frac{h}{2}) \left(\frac{1}{2} - s \right) y(t_j + \frac{h}{2}) ds \right\}. \end{aligned}$$

Es bleibt nichts anderes übrig, als diese Summen nacheinander abzuschätzen. Dabei wird von der letzten zur ersten Summe vorgegangen. Wegen

$$Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) = \underbrace{\tilde{Y}_{12}(t_{n+1}, t_{j+1})}_{\text{beschränkt}} (\Omega_{j+1/2})^{-1},$$

dem Cosinus-Trick und mit

$$\int_0^1 (\frac{1}{2} - s) ds = 0$$

folgt sofort

$$\left\| h^2 \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} \dot{A}(t_j + \frac{h}{2}) (\frac{1}{2} - s) y(t_j + \frac{h}{2}) ds \right\|_2 \leq h^2 C.$$

Auf dieselbe Weise folgt

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \cdot \left\{ \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} g_y(\phi(h\Omega_j)y(t_j)) \cdot \right. \\ & \quad \left[\left(\cos hs\Omega_j - \phi(h\Omega_j) \right) y(t_j) + \Omega_j^{-1} \sin hs\Omega_j \dot{y}(t_j) \right] ds \\ & + \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_{j+1/2} g_y(\phi(h\Omega_{j+1})y(t_{j+1})) \cdot \\ & \quad \left[\left(\cos h(s-1)\Omega_{j+1} - \phi(h\Omega_{j+1}) \right) y(t_j + h) \right. \\ & \quad \left. \left. + \Omega_{j+1}^{-1} \sin h(s-1)\Omega_{j+1} \dot{y}(t_j + h) \right] ds \right\}. \\ & = \mathcal{O}(h^2) \\ & + \frac{1}{2} h \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) g_y(\phi(h\Omega_j)y(t_j)) \cdot \\ & \quad \int_0^1 \left[\left(\cos hs\Omega_j - \phi(h\Omega_j) \right) y(t_j) + \Omega_j^{-1} \sin hs\Omega_j \dot{y}(t_j) \right] ds \\ & + \frac{1}{2} h \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) g_y(\phi(h\Omega_{j+1})y(t_{j+1})) \cdot \\ & \quad \int_0^1 \left[\left(\cos h(s-1)\Omega_{j+1} - \phi(h\Omega_{j+1}) \right) y(t_j + h) \right. \\ & \quad \left. \left. + \Omega_{j+1}^{-1} \sin h(s-1)\Omega_{j+1} \dot{y}(t_j + h) \right] ds \right\}. \end{aligned}$$

Nach Integration folgt für die beiden Summen mit $G_j = g_y(\phi(h\Omega_j)y(t_j))$ die Darstellung

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}h \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j \left[\left(\frac{\sin h\Omega_j}{h\Omega_j} - \phi(h\Omega_j) \right) y(t_j) + \frac{h \sin^2 \frac{h}{2}\Omega_j}{2 \left(\frac{h}{2}\Omega_j \right)^2} \dot{y}(t_j) \right] \\ & + \frac{1}{2}h \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_{j+1} \left[\left(\frac{\sin h\Omega_{j+1}}{h\Omega_{j+1}} - \phi(h\Omega_{j+1}) \right) y(t_{j+1}) - \frac{h \sin^2 \frac{h}{2}\Omega_{j+1}}{2 \left(\frac{h}{2}\Omega_{j+1} \right)^2} \dot{y}(t_{j+1}) \right]. \end{aligned}$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} & \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j \frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_j}{\left(\frac{h}{2}\Omega_j \right)^2} \dot{y}(t_j) - \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_{j+1} \frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_{j+1}}{\left(\frac{h}{2}\Omega_{j+1} \right)^2} \dot{y}(t_{j+1}) \\ & = \frac{h^2}{4} Y_{12}(t_{n+1}, t_1) G_0 \frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_0}{\left(\frac{h}{2}\Omega_0 \right)^2} \dot{y}(t_0) \\ & \quad + \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^n (Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) - Y_{12}(t_{n+1}, t_j)) G_j \frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_j}{\left(\frac{h}{2}\Omega_j \right)^2} \dot{y}(t_j) \\ & \quad - \frac{h^2}{4} Y_{12}(t_{n+1}, t_n) G_n \frac{\sin^2 \frac{h}{2}\Omega_n}{\left(\frac{h}{2}\Omega_n \right)^2} \dot{y}(t_n) \\ & = \mathcal{O}(h^2), \end{aligned}$$

dabei wurde Satz 2.5 verwendet. Mit Korollar 2.8 und Voraussetzung (3.7) folgt

$$\begin{aligned} & \frac{h}{2} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j \left(\frac{\sin h\Omega_j}{h\Omega_j} - \phi(h\Omega_j) \right) y(t_j) \\ & = \mathcal{O}(h^2) + \frac{h^2}{2} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j \left(\frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \phi(h\Omega) \right) \frac{1}{h\Omega} \Omega y(t_j). \end{aligned}$$

Nach Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel ergibt sich für diese Summe die Darstellung

$$\begin{aligned} & \frac{h^2}{2} \sum_{j=0}^n \underbrace{Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j}_{:=W_j} \left(\frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \phi(h\Omega) \right) \frac{1}{h\Omega} \cos(t_j - t_0)\Omega \cdot \\ & \quad \underbrace{\left[\Omega y(t_0) + \int_{t_0}^{t_j} \sin(t_j - s)\Omega((A(t_0) - A(s))y(s) + g(y(s))) ds \right]}_{:=v_j^1} \\ & + \frac{h^2}{2} \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) G_j \left(\frac{\sin h\Omega}{h\Omega} - \phi(h\Omega) \right) \frac{1}{h\Omega} \sin(t_j - t_0)\Omega \cdot \\ & \quad \underbrace{\left[\dot{y}(t_0) + \int_{t_0}^{t_j} \cos(t_j - s)\Omega((A(t_0) - A(s))y(s) + g(y(s))) ds \right]}_{:=v_j^2}. \end{aligned}$$

Da wieder

$$\|W_{j+1} - W_j\|_2 \leq hC \quad \text{und} \quad \|v_{j+1}^{1,2} - v_j^{1,2}\|_2 \leq hC$$

gilt, können die beiden Summen

$$\sum_{j=0}^n \left(\frac{\sin x}{x} - \phi(x) \right) \frac{1}{x} \cos jx \quad \text{und} \quad \sum_{j=0}^n \left(\frac{\sin x}{x} - \phi(x) \right) \frac{1}{x} \sin jx,$$

die nach Voraussetzung (3.6) beschränkt sind, zur partielle Summation verwendet werden und die Summe kann mit $\mathcal{O}(h^2)$ abgeschätzt werden. Die zweite Summe wird ebenso behandelt.

Schließlich folgt mit

$$Y_{12}(t_n, t_{j+1}) = W_1(t_n, t_{j+1}) \cos(t_n - t_{j+1})\Omega \Omega^{-1} + W_2(t_n, t_{j+1}) \sin(t_n - t_{j+1})\Omega \Omega^{-1},$$

wobei

$$\begin{aligned} W_1(t_n, t_{j+1}) &= ((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1} (\sin(\cdot - t_n)\Omega)) (t_n) \\ W_2(t_n, t_{j+1}) &= ((I - S_{t_0, t_{j+1}})^{-1} (\cos(\cdot - t_n)\Omega)) (t_n), \end{aligned}$$

und

$$\|W(t_n, t_{j+1}) - W(t_n, t_j)\|_2 \leq Ch$$

für beide W -Matrizen und alle j mit $0 \leq jh \leq T$, Voraussetzung (3.6) und partieller Summation auch noch:

$$\begin{aligned} &\left\| \sum_{j=0}^n Y_{12}(t_{n+1}, t_{j+1}) \cdot \left\{ \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_0(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2}h \left(\frac{\sin h\Omega_{j+1/2}}{h\Omega_{j+1/2}} - \psi_1(h\Omega_{j+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{j+1/2})y(t_j + h)) \right\} \right\|_2 \leq h^2 C. \end{aligned}$$

□

Beweis von Lemma 3.1: Es gilt

$$\phi(h\Omega) - \phi(h\tilde{\Omega}) = \tilde{\phi}(h^2 A) - \tilde{\phi}(h^2 \tilde{A}) = \int_0^1 \frac{d\tilde{\phi}}{d\Omega} (h^2 \tilde{A} + sh^2(A - \tilde{A})) [h^2 A - h^2 \tilde{A}] ds.$$

Wegen

$$x^T (h^2 \tilde{A} + sh^2(A - \tilde{A}))x = sh^2 x^T A x + (1-s)h^2 x^T \tilde{A} x \geq 0$$

für alle $x \in \mathbb{R}^N$ ist das folgende Lemma anwendbar und es folgt

$$\|\phi(h\Omega) - \phi(h\tilde{\Omega})\|_2 \leq \int_0^1 \left\| \frac{d\tilde{\phi}}{d\Omega} (h^2 \tilde{A} + sh^2(A - \tilde{A})) [h^2 A - h^2 \tilde{A}] \right\|_2 ds \leq \max_{x \geq 0} |\tilde{\phi}'(x)| \sqrt{N} h^2 \|A - \tilde{A}\|_2.$$

□

Bemerkung: Die Abschätzungen aus diesem Lemma sind im Allgemeinen nicht optimal. Für $\phi(x) = \cos(x)$ folgt z.B.

$$\|\cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega}\|_2 \leq \frac{1}{2} \sqrt{N} \|A - \tilde{A}\|_2 h^2,$$

wegen

$$\cos(\sqrt{x})' = -\frac{\sin \sqrt{x}}{2\sqrt{x}}, \quad \max_{x \geq 0} |\cos(\sqrt{x})| \leq \frac{1}{2}.$$

Aus Korollar 2.8 wissen wir aber bereits, dass

$$\|\cos h\Omega - \cos h\tilde{\Omega}\|_2 \leq \frac{1}{2} \|A - \tilde{A}\|_2 h^2,$$

ohne den Term \sqrt{N} gilt.

Lemma 3.9 *Ist $A_0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ symmetrisch und ϕ eine analytische Funktion, so gilt:*

$$\left\| \frac{d\phi}{dA}(A_0)[H] \right\|_2 \leq \sqrt{N} \|H\|_2 \max_{x \in [\min \sigma(A_0), \max \sigma(A_0)]} |\phi'(x)|.$$

Beweis: Ist

$$\phi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

die Potenzreihe von ϕ . Dann gilt:

$$\frac{d\phi}{dA}(A_0)[H] = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} A_0^l H A_0^{k-1-l}.$$

Da A_0 symmetrisch ist, existiert die Eigenwertzerlegung $A_0 = QDQ^T$ mit einer orthogonalen Matrix Q . Dann gilt:

$$\frac{d\phi}{dA}(A_0)[H] = Q \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} D^l \underbrace{Q^T H Q}_{=: \tilde{H}} D^{k-1-l} Q^T.$$

Der (m, n) -Matrizeintrag von

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} D^l \tilde{H} D^{k-1-l} \quad \text{lautet} \quad \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} \lambda_m^l \lambda_n^{k-l-1}}_{=: \epsilon(\lambda_m, \lambda_n)} \tilde{h}_{mn}.$$

Mit der Matrix $E := \{\epsilon(\lambda_m, \lambda_n)\}$ lässt sich der weiter zu untersuchende Term darstellen als

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} D^l \tilde{H} D^{k-1-l} = E \bullet \tilde{H}.$$

Wegen Stetigkeit und Grenzübergang gilt die folgenden Formel auch im Fall $\lambda_m = \lambda_n$,

$$\sum_{l=0}^{k-1} \lambda_m^l \lambda_n^{k-l-1} = \frac{\lambda_m^k - \lambda_n^k}{\lambda_m - \lambda_n}$$

und damit

$$\sum_{k=1}^{\infty} a_k \sum_{l=0}^{k-1} \lambda_m^l \lambda_n^{k-l-1} = \frac{1}{\lambda_m - \lambda_n} \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda_m^k - \sum_{k=0}^{\infty} a_k \lambda_n^k \right) = \frac{\phi(\lambda_m) - \phi(\lambda_n)}{\lambda_m - \lambda_n} = \phi'(\xi),$$

mit ξ zwischen $\min\{\lambda_m, \lambda_n\}$ und $\max\{\lambda_m, \lambda_n\}$. Damit folgt nun

$$\|E \bullet \tilde{H}\|_2 \leq \sqrt{N} \|\tilde{H}\|_2 \max_{x \in [\min \sigma(A_0), \max \sigma(A_0)]} |\phi'(x)|,$$

und damit die Behauptung, da $\|G\|_2 \leq \| |G| \|_2 \leq \sqrt{N} \|G\|_2$ gilt. \square

Beweis von Lemma 3.4: Für die Defekte in den Orten gilt nach Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel:

$$\begin{aligned}
d_n &= y(t_n + h) - \cos h\Omega_{n+1/2}y(t_n) - \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin h\Omega_{n+1/2}\dot{y}(t_n) \\
&\quad - \frac{1}{2}h^2\psi(h\Omega_{n+1/2})g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) \\
&= \int_{t_n}^{t_n+h} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(t_n + h - s)\Omega_{n+1/2}(A(t_n + \frac{1}{2}) - A(s))y(s) ds \\
&\quad + \int_{t_n}^{t_n+h} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(t_n + h - s)\Omega_{n+1/2}g(y(s)) ds \\
&\quad - \frac{1}{2}h^2\psi(h\Omega_{n+1/2})g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)).
\end{aligned}$$

Der erste Term ergibt

$$\begin{aligned}
&\int_{t_n}^{t_n+h} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(t_n + h - s)\Omega_{n+1/2}(A(t_n + \frac{1}{2}) - A(s))y(s) ds \\
&= h^3 \int_0^1 (1-s)(h(1-2)\Omega_{n+1/2})^{-1} \sin h(1-s)\Omega_{n+1/2} \cdot \\
&\quad \int_0^1 \dot{A}(t_n + hs + uh(\frac{1}{2} - s)) du (\frac{1}{2} - s) y(t_n + hs) ds \\
&=: h^3 z_{n,A}
\end{aligned}$$

mit

$$\|z_{n,A}\|_2 \leq h^3 \int_0^1 |(1-s)(\frac{1}{2} - s)| ds \|\dot{A}\|_\infty \|y\|_\infty \leq h^3 \frac{1}{8} \|\dot{A}\|_\infty \|y\|_\infty.$$

Da wegen der Finiten-Energie-Bedingung mindestens

$$\|y\|_\infty \leq \|y(t_0)\|_2 + KT$$

gilt, ist also

$$\|z_{n,A}\|_2 \leq h^3 \frac{1}{12} \|\dot{A}\|_\infty (\|y(t_0)\|_2 + KT).$$

Durch Taylorentwicklung mit Integralrestglied und die Variation-der-Konstanten-Formel folgt

$$\begin{aligned}
& \int_{t_n}^{t_n+h} \Omega_{n+1/2}^{-1} \sin(t_n + h - s) \Omega_{n+1/2} g(y(s)) ds \\
& \quad - \frac{1}{2} h^2 \psi(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) \\
= & \frac{1}{2} h^2 \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2} \Omega_{n+1/2}}{\left(\frac{h}{2} \Omega_{n+1/2}\right)^2} - \psi(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) \\
& + h^3 \int_0^1 (1-s) \left(h(1-s) \Omega_{n+1/2} \right)^{-1} \sin h(1-s) \Omega_{n+1/2} \cdot \left(\right. \\
& \quad \int_0^1 g_y(y(t_n) + u(y(t_n + hs) - y(t_n))) du \left[s \int_0^1 \dot{y}(t_n + hsv) dv \right] \\
& \quad - \int_0^1 g_y(y(t_n) + u(\phi(h\Omega_{n+1/2}) - I)y(t_n)) du \left[\frac{\phi(h\Omega_{n+1/2}) - I}{h\Omega_{n+1/2}} \Omega_{n+1/2} y(t_n + \frac{h}{2}) \right] \\
& \quad \left. + \int_0^1 g_y(y(t_n) + u(\phi(h\Omega_{n+1/2}) - I)y(t_n)) du \cdot \right. \\
& \quad \quad \left. \left[\frac{1}{2} \left(\phi(h\Omega_{n+1/2}) - I \right) \int_0^1 \dot{y}(t_n + \frac{h}{2}v) dv \right] \right) ds. \\
= & \frac{1}{2} h^2 \left(\frac{\sin^2 \frac{h}{2} \Omega_{n+1/2}}{\left(\frac{h}{2} \Omega_{n+1/2}\right)^2} - \psi(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) + h^3 z_{n,g}
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\|z_n\|_2 \leq & \frac{1}{6} \|g_y\| \|\dot{y}\|_\infty + \frac{1}{2} \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \|g_y\| \|\Omega_{n+1/2} y(t_n + \frac{h}{2})\|_2 \\
& + \frac{1}{4} (1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|) \|g_y\| \|\dot{y}\|_\infty.
\end{aligned}$$

Mit der Finiten-Energie-Bedingung ergibt sich schließlich

$$\|z_n\|_2 \leq C_\phi \|g_y\| K.$$

Damit ist die Aussage für die Ortsdefekte bewiesen. Bei der folgenden Untersuchung der Impulse werden die Konstanten in den Resttermen nicht mehr bis ins Detail angegeben. Wichtig ist nur, dass stets klar ist, dass die \mathcal{O} -Terme nur von den im Satz angegebenen Größen abhängen. Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel ergibt für den Defekt in den Impulsen zunächst:

$$\begin{aligned}
\dot{d}_n = & \int_0^h \cos(h-s) \Omega_{n+1/2} \left((A(t_n + \frac{h}{2}) - A(t_n + s)) y(t_n + s) + g(y(t_n + s)) \right) ds \\
& - \frac{1}{2} h \left(\psi_0(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_n)) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2}) y(t_{n+1})) \right).
\end{aligned}$$

Durch Taylorentwicklung mit Integralrestglied und die Variation-der-Konstanten-Formel gilt zunächst

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \cos(h-s) \Omega_{n+1/2} (A(t_n + \frac{h}{2}) - A(t_n + s)) y(t_n + s) ds \\
= & h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}(t_n + \frac{h}{2}) \left(\frac{1}{2} - s \right) \cos h s \Omega_{n+1/2} y(t_n + \frac{h}{2}) ds + \mathcal{O}(h^3).
\end{aligned}$$

Mit dem Cosinus-Trick folgt, dass das Integral bis auf $\mathcal{O}(h^3)$ -Terme gleich dem Integral

$$h^2 \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} \dot{A}(t_n + \frac{h}{2}) (\frac{1}{2} - s) y(t_n + \frac{h}{2}) ds$$

ist. Durch Splitten des Integrals ergibt sich zunächst

$$\begin{aligned} & \int_0^h \cos(h-s) \Omega_{n+1/2} g(y(t_n + s)) ds \\ & \quad - \frac{1}{2} h \left(\psi_0(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) + \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_{n+1})) \right) \\ = & \frac{1}{2} h \left(\frac{\sin h\Omega_{n+1/2}}{h\Omega_{n+1/2}} - \psi_0(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n)) \\ & + \frac{1}{2} h \left(\frac{\sin h\Omega_{n+1/2}}{h\Omega_{n+1/2}} - \psi_1(h\Omega_{n+1/2}) \right) g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n + h)) \\ & + \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} (g(y(t_n + hs)) - g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n))) ds \\ & + \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} (g(y(t_n + hs)) - g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n + h))) ds. \end{aligned}$$

Die beiden Integrale werden noch weiter vereinfacht. Aus der einfachen Ergänzung

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} (g(y(t_n + hs)) - g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n))) ds \\ & \quad = \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} (g(y(t_n + hs)) - g(\phi(h\Omega_n)y(t_n))) ds \\ & \quad + \frac{1}{2} h \int_0^1 \cos h(1-s) \Omega_{n+1/2} (g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) - g(\phi(h\Omega_{n+1/2})y(t_n))) ds \end{aligned}$$

folgt wegen

$$\|\phi(h\Omega_n) - \phi(h\Omega_{n+1/2})\|_2 \leq C_{\Phi} h^2 \|A(t_n) - A(t_n + \frac{h}{2})\|_2 \leq C_{\Phi} \frac{h^3}{2} \|\dot{A}\|_{\infty},$$

mit Taylorentwicklung mit Integralrestglied und wieder der Variation-der-Konstanten-Formel die im Lemma behauptete Darstellung. Das zweite Integral wird analog behandelt. \square

3.5 Beweis der Fehlerschranken für Zweischnittverfahren

Für den Beweis der Ordnungsschranken wird eine anderer Beweistechnik verwendet als bei den Einschnittverfahren. Statt die exakte Lösung des homogenen Systems zum Fehlerforttransport zu verwenden, wird bei den Zweischnittverfahren alles auf den Fall mit einer konstanten Matrix A zurückgespielt.

Um Satz 3.3 zu beweisen, werden zunächst einige Lemmata benötigt. Wegen Lemma 3.16 kann zunächst angenommen werden, dass eine Finite-Energie-Bedingung der Form

$$\frac{1}{2} \|\dot{y}(t)\|_2^2 + \frac{1}{2} \|\Omega(\tau)y(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2} K^2,$$

für alle $\tau \in I$ mit einer festen Konstante K gilt.

Dem bekannten Programm folgend, werden jetzt die Defekte

$$\begin{aligned} d_n &= y(t_{n+1}) - 2 \cos h\Omega_n y(t_n) + y(t_{n-1}) - h^2 \frac{\sin^2 \frac{h\Omega_n}{2}}{(\frac{h\Omega_n}{2})^2} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)), \\ \dot{d}_n &= \dot{y}(t_{n+1}) - \dot{y}(t_{n-1}) + 2\Omega_n \sin h\Omega_n y(t_n) - 2h \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) \end{aligned}$$

näher untersucht.

Lemma 3.10 *Für die Defekte in den Orten gilt:*

$$d_n = h^3 \tilde{L}_n \Omega_n y(t_n) + h^4 l_n,$$

mit

$$\|\tilde{L}_n\|_2 \leq C, \quad \text{und} \quad \|l_n\| \leq C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Um die Ergebnisse im Fall einer konstanten Matrix A aus [16] nutzen zu können, darf im dominierenden Fehlerterm nur eine konstante Matrix Ω auftreten. Glücklicherweise gilt das folgenden Lemma:

Lemma 3.11 *Für die Defekte in den Orten gilt mit $\Omega := \Omega(t_0)$:*

$$d_n = h^3 L_n \Omega y(t_n) + h^4 z_n,$$

mit

$$\|L_n\|_2 \leq C, \quad \text{und} \quad \|z_n\|_2 \leq C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Durch Subtraktion der numerischen Lösung von der exakten Lösung ergibt sich das Lemma:

Lemma 3.12 *Für die Fehler $e_n = y(t_n) - y_n$ gilt die Rekursion*

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega e_n + e_{n-1} = h^2 F_n e_n + d_n,$$

mit

$$\|F_n\|_2 \leq \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)| + T \|\dot{A}\|_\infty.$$

Wortwörtlich wie in [16] wird das folgende Lemma bewiesen.

Lemma 3.13 *Die Fehler $e_n = y(t_n) - y_n$ erfüllen*

$$e_{n+1} = -W_{n-1} e_0 + W_n e_1 + \sum_{j=1}^n W_{n-j} (h^2 F_j e_j + d_j),$$

mit $W_n = \frac{\sin(n+1)h\Omega}{\sin h\Omega}$, und F_n beschränkt durch $\|F_n\|_2 \leq \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)| + T \|\dot{A}\|_\infty$.

Um ein Gronwall-Lemma anwenden zu können, muss noch der Ausdruck

$$\sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j$$

abgeschätzt werden.

Lemma 3.14 *Es gilt*

$$\left\| \sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j \right\|_2 \leq h^2 C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|\ddot{A}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Beweis von Satz 3.3: Die Behauptung für die Orte folgt jetzt sofort mit Hilfe eines Gronwall-Lemmas. Bei den Impulsen muss noch nachgedacht werden.

Für die exakte Lösung gilt mit Lemma 3.15:

$$\dot{y}(t_n + h) - \dot{y}(t_n - h) = -2\Omega_n \sin h\Omega_n y(t_n) + 2h \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) + \dot{d}_n$$

und für die Näherungen

$$\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} = -2\Omega_n \sin h\Omega_n y_n + 2h \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} g(\phi(h\Omega_n)y_n).$$

Mit $\dot{e}_n = \dot{y}(t_n) - y_n$ gilt die Rekursion

$$\dot{e}_{n+1} - \dot{e}_{n-1} = -2\Omega_n \sin h\Omega_n e_n + hH_n e_n + \dot{d}_n,$$

mit

$$H_n = 2 \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega_n)(y_n + ue_n)) du \phi(h\Omega_n)$$

und

$$\|H_n\|_2 \leq 2\|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)|.$$

Damit ist sofort klar, dass für die Impulsfehler gilt

$$\dot{e}_{n+1} - \dot{e}_{n-1} = -2\Omega_n \sin h\Omega_n e_n + \mathcal{O}(h^2),$$

wobei der \mathcal{O} -Term nur von den gewünschten Konstanten abhängt.

Mit $\Omega := \Omega_0$ und Lemma 2.7 gilt weiter

$$\begin{aligned} -2\Omega_n \sin h\Omega_n e_{n+1} &= \\ &= -2\Omega \sin h\Omega e_{n+1} + 2 \int_0^h \cos(h-s)\Omega (A(t_0) - A(t_n)) \cos s\Omega_n ds e_{n+1} \\ &= -2\Omega \sin h\Omega e_{n+1} + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Einsetzen des bekannten Fehlers für e_{n+1} ergibt

$$\begin{aligned} -2\Omega \sin h\Omega e_{n+1} &= 2 \sin nh\Omega \Omega e_0 - 2 \sin(n+1)h\Omega \Omega e_1 \\ &- 2 \sum_{j=1}^n \Omega \sin h\Omega W_{n-j} h^2 F_j e_j - 2\Omega \sin h\Omega \sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j. \end{aligned}$$

Die Anfangswerte müssen $\|\Omega e_0\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$ bzw. $\|\Omega e_1\|_2 = \mathcal{O}(h^2)$ erfüllen.

Wegen $\|\sin h\Omega W_{n-j}\|_2 \leq 1$ und $\|h^2\Omega F_j\| \leq hC$ gilt

$$\left\| -2 \sum_{j=1}^n \Omega \sin h\Omega W_{n-j} h^2 F_j e_j \right\|_2 \leq 2 \sum_{j=1}^n hC \|e_j\|_2 = \mathcal{O}(h^2).$$

Bleibt als letzter Term

$$-2\Omega \sin h\Omega \sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j = -2\Omega \sin h\Omega h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_j \Omega y(t_j) - 2\Omega \sin h\Omega h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} z_j.$$

Für den zweiten Term gilt

$$-2\Omega \sin h\Omega h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} z_j = -2h^3 \sum_{j=1}^n \sin h\Omega W_{n-j} h\Omega z_j.$$

Jeder Term, der in z_j auftaucht hat die Gestalt

$$\begin{aligned} & h^p \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega_n G(s) ds, \quad \text{oder} \\ & h^p \int_0^1 (1-s) \int_0^1 (1-u) \operatorname{sinc} (h(1-u)(1-s)\Omega) (A(t_0) - A(t_n)) G_1(u, s) du ds, \\ & h^p \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega G(s) ds. \end{aligned}$$

Multipliziert man diese Ausdrücke von links mit $h\Omega$, so sieht man, dass die entstehenden Ausdrücke Abschätzungen mit denselben Konstanten wie zuvor zulassen. Beim ersten Integral muss man zuvor noch einmal Korollar 2.8 bemühen. Insgesamt gilt also

$$\|h\Omega z_j\|_2 \leq C$$

und damit

$$\left\| -2h^3 \sum_{j=1}^n \sin h\Omega W_{n-j} h\Omega z_j \right\|_2 \leq 2h^3 \sum_{j=1}^n C \leq 2Ch^2.$$

Bleibt als letzter Term

$$-2\Omega \sin h\Omega h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_j \Omega y(t_j) = -2\Omega \sin h\Omega h^2 (a_n + b_n)$$

übrig. Dieser Term wird jetzt analog den Orten behandelt (vgl. [16]). Er ist bis auf eine kleine Änderung in b_n derselbe wie im Fall einer konstanten Matrix und kann exakt genauso behandelt werden. \square

Lemma 3.15 *Für die Defekte in den Impulsen gilt:*

$$\dot{d}_n = h^2 w_n,$$

mit

$$\|w_n\|_2 \leq C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|\dot{A}\|_\infty, \|g_y\|$ und ϕ .

Beweis: Nach Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel lautet der Defekt in den Impulsen

$$\begin{aligned} \dot{d}_n &= \int_0^h \cos(h-s)\Omega_n(A(t_n) - A(t_n+s))y(t_n+s) ds + \int_0^h \cos(h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds \\ &\quad - \int_0^{-h} \cos(-h-s)\Omega_n(A(t_n) - A(t_n+s))y(t_n+s) ds \\ &\quad - \int_0^{-h} \cos(-h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds - 2h \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)). \end{aligned}$$

Für die A -Terme ergibt Taylorentwicklung und Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel die Darstellung

$$\begin{aligned} &\int_0^h \cos(h-s)\Omega_n(A(t_n) - A(t_n+s))y(t_n+s) ds - \\ &\quad \int_0^{-h} \cos(-h-s)\Omega_n(A(t_n) - A(t_n+s))y(t_n+s) ds \\ &= -h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_n s \int_0^1 \dot{A}(t_n+hsu) du y(t_n+hs) ds \\ &\quad + h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_n s \int_0^1 \dot{A}(t_n-hsu) du y(t_n-hs) ds. \end{aligned}$$

Für die g -Terme gilt

$$\begin{aligned} &\int_0^h \cos(h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds + \int_0^{-h} \cos(-h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds \\ &\quad - 2h \frac{\sin h\Omega_n}{h\Omega_n} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) \\ &= h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_n G_n^+(h, s) \left(s \int_0^1 \dot{y}(t_n+uhs) du + \frac{I - \phi(h\Omega_n)}{h\Omega_n} \Omega_n y(t_n) \right) ds \\ &\quad h^2 \int_0^1 \cos h(1-s)\Omega_n G_n^-(h, s) \left(-s \int_0^1 \dot{y}(t_n-uhs) du + \frac{I - \phi(h\Omega_n)}{h\Omega_n} \Omega_n y(t_n) \right) ds \end{aligned}$$

mit

$$G_n^\pm(h, s) = \int_0^1 g_y \left(\phi(h\Omega_n)y(t_n) + u(y(t_n \pm hs) - \phi(h\Omega_n)y(t_n)) \right) du.$$

□

Lemma 3.16 *Unter den gemachten Voraussetzungen gilt die Finite-Energie-Bedingung (3.2) genau dann, wenn für alle $\tau \in I$ eine Finite-Energie-Bedingung*

$$\frac{1}{2} \|\dot{y}(t)\|_2^2 + \frac{1}{2} \|\Omega(\tau)y(t)\|_2^2 \leq \frac{1}{2} \tilde{K}^2 \quad (3.12)$$

gilt. Dabei hängt die Konstante \tilde{K} nicht von der Norm von Ω ab.

Beweis von Lemma 3.16: Gezeigt wird nur die nichttriviale Richtung. Gelte also (3.2). Mit der Variation-der-Konstanten-Formel folgt für ein fest gewähltes $\tau \in I$

$$\begin{aligned} \Omega(\tau)y(t) &= \cos(t-\tau)\Omega(\tau)\Omega(\tau)y(\tau) + \sin(t-\tau)\Omega(\tau)\dot{y}(\tau) \\ &\quad + \int_\tau^t \sin(t-s)\Omega(\tau) \left((A(\tau) - A(s))y(s) + g(y(s)) \right) ds \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} \|\Omega(\tau)y(t)\|_2 &\leq \|\Omega(\tau)y(\tau)\|_2 + \|\dot{y}(\tau)\|_2 + \int_{\tau}^t \|A(\tau) - A(s)\|_2 \|y(s)\|_2 + \|g(y(s))\|_2 ds \\ &\leq 2K + \frac{1}{2}T^2\|\dot{A}\|_{\infty}\|y\|_{\infty} + T\|g\|. \end{aligned}$$

$\|g\|$ ist nach Voraussetzung beschränkt und für die exakte Lösung gilt mindestens

$$\|y(t)\|_2 \leq \|y(t_0)\|_2 + \left\| \int_{t_0}^t \dot{y}(s) ds \right\|_2 \leq \|y(t_0)\|_2 + TK,$$

also

$$\|y\|_{\infty} \leq \|y(t_0)\|_2 + TK. \quad (3.13)$$

□

Beweis von Lemma 3.10: Für den Defekt in den Orten gilt nach Einsetzen der Variation-der-Konstanten-Formel

$$\begin{aligned} d_n &= \int_0^h \Omega_n^{-1} \sin(h-s) \Omega_n (A(t_n) - A(t_n+s)) y(t_n+s) ds \\ &\quad + \int_0^{-h} \Omega_n^{-1} \sin(-h-s) \Omega_n (A(t_n) - A(t_n+s)) y(t_n+s) ds \\ &\quad + \int_0^h \Omega_n^{-1} \sin(h-s) \Omega_n g(y(t_n+s)) ds \\ &\quad + \int_0^{-h} \Omega_n^{-1} \sin(-h-s) \Omega_n g(y(t_n+s)) ds \\ &\quad - h^2 \frac{\sin^2 \frac{h\Omega_n}{2}}{\left(\frac{h\Omega_n}{2}\right)^2} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)). \end{aligned}$$

Durch Taylorentwicklung mit Integralrestglied und Einsetzen der Variation-der-Konstanten-

Formel folgt die Darstellung

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega_n^{-1} \sin(h-s)\Omega_n (A(t_n) - A(t_n+s)) y(t_n+s) ds \\
& + \int_0^{-h} \Omega_n^{-1} \sin(-h-s)\Omega_n (A(t_n) - A(t_n+s)) y(t_n+s) ds \\
& = -2h^4 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n \dot{A}(t_n) s^2 (hs\Omega_n)^{-1} \sin hs\Omega_n ds \dot{y}(t_n) \\
& - h^4 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n \cdot \\
& \quad \left\{ \int_0^1 (1-u)\ddot{A}(t_n+uhs) du s^2 y(t_n+hs) ds + \int_0^1 (1-u)\ddot{A}(t_n-uhs) du s^2 y(t_n-hs) ds \right\} \\
& - h^5 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n \dot{A}(t_n) s^3 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u)(hs(1-u)\Omega_n)^{-1} \sin hs(1-u)\Omega_n (g(y(t_n+uhs)) - g(y(t_n-uhs))) du ds \\
& + h^6 \int_0^1 (1-s)((1-s)h\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n \dot{A}(t_n) s^4 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u)(hs(1-u)\Omega_n)^{-1} \sin hs(1-u)\Omega_n \cdot \\
& \quad \left\{ u \int_0^1 \dot{A}(t_n+shuv) dv y(t_n+uhs) + u \int_0^1 \dot{A}(t_n-shuv) dv y(t_n-uhs) \right\} du ds \\
& =: h^4 l_{n,A},
\end{aligned}$$

mit

$$\|l_{n,A}\|_2 \leq \frac{1}{6} \|\dot{A}\|_\infty \|\dot{y}\|_\infty + \frac{1}{12} \|\ddot{A}\|_\infty \|y\|_\infty + \frac{h}{20} \|\dot{A}\|_\infty \|g\| + \frac{h^2}{60} \|\dot{A}\|_\infty^2 \|y\|_\infty.$$

Mit der Finiten-Energie-Bedingung und (3.13) folgt

$$\|l_{n,A}\|_2 \leq \frac{1}{6} \|\dot{A}\|_\infty K + \frac{1}{12} \|\ddot{A}\|_\infty (\|y(t_0)\|_2 + KT) + \frac{h}{20} \|\dot{A}\|_\infty \|g\| + \frac{h^2}{60} \|\dot{A}\|_\infty^2 (\|y(t_0)\|_2 + KT).$$

Bleibt noch zu untersuchen

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega_n^{-1} \sin(h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds + \int_0^{-h} \Omega_n^{-1} \sin(-h-s)\Omega_n g(y(t_n+s)) ds \\
& \quad - h^2 \frac{\sin^2 \frac{h\Omega_n}{2}}{(\frac{h\Omega_n}{2})^2} g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) \\
& = \int_0^h \Omega_n^{-1} \sin(h-s)\Omega_n (g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega_n)y(t_n)) + g(y(t_n-s))) ds.
\end{aligned}$$

Durch Taylorentwicklung mit Integralrestglied und die Variation-der-Konstanten-Formel folgt

für diesen Term die Darstellung

$$\begin{aligned}
& 2h^3 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n g_y(y(t_n)) \left(\frac{\cos hs\Omega_n - \phi(h\Omega_n)}{h\Omega_n} \right) ds \Omega_n y(t_n) \\
& + h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n g_y(y(t_n)) s^2 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u)(hs(1-u)\Omega_n)^{-1} \sin hs(1-u)\Omega_n [g(y(t_n+hsu)) + g(y(t_n-hsu))] du ds \\
& + h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n s^2 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u) g_{yy}(y(t_n) + u(y(t_n+hs) - y(t_n))) du \left[\int_0^1 \dot{y}(t_n+hsu) dv \right]^2 ds \\
& + h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n s^2 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u) g_{yy}(y(t_n) + u(y(t_n-hs) - y(t_n))) du \left[\int_0^1 \dot{y}(t_n-hsu) dv \right]^2 ds \\
& - 2h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u) g_{yy}(y(t_n) + u(\phi(h\Omega_n) - I)y(t_n)) du \left[\frac{\phi(h\Omega_n) - I}{h\Omega_n} \Omega_n y(t_n) \right]^2 ds \\
& + h^5 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n g_y(y(t_n)) s^2 \cdot \\
& \quad \int_0^1 (1-u)(hs(1-u)\Omega_n)^{-1} \sin hs(1-u)\Omega_n \cdot \\
& \quad \left[-su \int_0^1 \dot{A}(t_n+hsuv) dv y(t_n+hsu) + su \int_0^1 \dot{A}(t_n-hsuv) dv y(t_n-hsu) \right] du ds \\
& =: h^3 \tilde{L}_n \Omega_n y(t_n) + h^4 l_{n,g},
\end{aligned}$$

mit

$$\tilde{L}_n = 2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin h(1-s)\Omega_n g_y(y(t_n)) s (\cos(hs\Omega_n) - \phi(h\Omega_n)) (hs\Omega_n)^{-1} ds$$

und

$$\begin{aligned}
\|l_{n,g}\|_2 & \leq \frac{1}{12} \|g_y\| \|g\| + \frac{1}{12} \|g_{yy}\| \|\dot{y}\|_\infty^2 + \frac{1}{2} \|g_{yy}\| \left(\max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right)^2 \|\Omega_n y(t_n)\|_2^2 \\
& \quad + \frac{h}{60} \|\dot{A}\|_\infty \|y\|_\infty.
\end{aligned}$$

Mit der Finiten-Energie-Bedingung und wegen (3.13) folgt

$$\|l_{n,g}\|_2 \leq \frac{1}{12} \|g_y\| \|g\| + \frac{1}{12} \|g_{yy}\| K^2 + \frac{1}{2} \|g_{yy}\| C_\alpha K^2 + \frac{h}{60} \|\dot{A}\|_\infty (\|y(t_0)\|_2 + KT).$$

□

Beweis von Lemma 3.11: Mit Hilfe von Korollar 2.8 folgt für den dominierenden Fehlerterm

$$\begin{aligned}
h^3 \tilde{L}_n \Omega_n y(t_n) &= \\
& 2h^3 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega g_y(y(t_n)) s \left(\frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{hs\Omega} \right) ds \Omega y(t_n) \\
& + 2h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega g_y(y(t_n)) \frac{\phi(h\Omega) - \phi(h\Omega_n)}{h^2} ds y(t_n) \\
& + 2h^4 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega g_y(y(t_n)) \cdot \\
& \quad \left(\int_0^1 (1-u)(h(1-u)s\Omega)^{-1} \sin h(1-u)s\Omega s^2 (A - A(t_n)) \cos hus\Omega_n du \right) ds y(t_n) \\
& + 2h^5 \int_0^1 (1-s) \left(\int_0^1 (1-u)(h(1-u)(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-u)(1-s)\Omega \cdot \right. \\
& \quad \left. (1-s)^2 (A - A(t_n)) u (hu(1-s)\Omega_n)^{-1} \sin hu(1-s)\Omega_n du \right) \cdot \\
& \quad g_y(y(t_n)) s \frac{\cos hs\Omega_n - \phi(h\Omega_n)}{hs\Omega_n} ds \Omega_n y(t_n), \\
& =: h^3 L_n \Omega y(t_n) + h^4 l_{A,A(t_n)},
\end{aligned}$$

mit

$$L_n = 2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega g_y(y(t_n)) s (\cos(hs\Omega) - \phi(h\Omega)) (hs\Omega)^{-1} ds$$

und

$$\begin{aligned}
\|l_{A,A(t_n)}\|_2 &\leq \frac{1}{h^2} \|\phi(h\Omega) - \phi(h\Omega_n)\|_2 \|g_y\| \|y\|_\infty + \frac{1}{12} T \|g_y\| \|\dot{A}\|_\infty \|y\|_\infty \\
&\quad + \frac{h}{60} T \|\dot{A}\|_\infty \|g_y\| \max_{x \geq 0} \left| \frac{\cos x - \phi(x)}{x} \right| \|\Omega_n y(t_n)\|_2.
\end{aligned}$$

Mit Lemma 2.7 oder Lemma 3.1 folgt für die Filterfunktion

$$\frac{1}{h^2} \|\phi(h\Omega) - \phi(h\Omega_n)\|_2 \leq C_\Phi \|A(t_0) - A(t_n)\|_2 \leq C_\Phi T \|\dot{A}\|_\infty.$$

Hiermit, der Finiten-Energie-Bedingung und (3.13) folgt

$$\|l_{A,A(t_n)}\|_2 \leq (C_\Phi + \frac{1}{12}) T \|\dot{A}\|_\infty \|g_y\| (\|y(t_0)\|_2 + TK) + \frac{h}{60} T \|\dot{A}\|_\infty \|g_y\| C_\Phi K.$$

□

Beweis von Lemma 3.12: Für die exakte Lösung gilt mit

$$\psi(x) = \frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{\left(\frac{x}{2}\right)^2}$$

$$y(t_{n+1}) - 2 \cos h\Omega_n y(t_n) + y(t_{n-1}) = h^2 \psi(h\Omega_n) g(\phi(h\Omega_n) y(t_n)) + d_n,$$

und für das Näherungsverfahren

$$y_{n+1} - 2 \cos h\Omega_n y_n + y_{n-1} = h^2 \psi(h\Omega_n) g(\phi(h\Omega_n) y_n).$$

Für die Fehler $e_n = y(t_n) - y_n$ gilt damit die Rekursionsgleichung

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega_n e_n + e_{n-1} = h^2 F_{n,1} e_n + d_n$$

mit

$$F_{n,1} = \psi(h\Omega_n) \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega_n)(y(t_n) + ue_n)) du \phi(h\Omega_n).$$

Die Rekursion lässt sich mit $\Omega := \Omega(t_0)$ auch schreiben als:

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega e_n + e_{n-1} = h^2 F_{n,1} e_n + 2(\cos h\Omega_n - \cos h\Omega) e_n + d_n.$$

Mit Korollar 2.8 gilt

$$2(\cos h\Omega_n - \cos h\Omega) = h^2 \underbrace{2 \int_0^1 (1-s)(h(1-s)\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega \left(\int_{t_n}^{t_0} \dot{A}(u) du \right) \cos hs\Omega_n ds}_{:= F_{n,2}},$$

mit

$$\|F_{n,2}\|_2 \leq T \|\dot{A}\|_\infty.$$

Mit $F_n := F_{n,1} + F_{n,2}$ gilt also die Rekursion

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega e_n + e_{n-1} = h^2 F_n e_n + d_n,$$

mit

$$\|F_n\|_2 \leq \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)| + T \|\dot{A}\|_\infty.$$

□

Beweis von Lemma 3.14: Mit Lemma 3.11 gilt:

$$\sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j = h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_j \Omega y(t_j) + h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} z_j.$$

Unmittelbar folgt wegen $\|W_n\|_2 \leq n + 1$:

$$\left\| h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} z_j \right\|_2 \leq h^2 T^2 C.$$

Um die erste Summe zu beschränken, wird analog wie in [16] vorgegangen. Mit der Variation-Konstanten-Formel lässt sich die erste Summe auch darstellen als:

$$h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_n \Omega y(t_n) = h^2 (a_n + b_n)$$

mit

$$a_n := 2h \sum_{j=1}^n W_{n-j} \int_0^1 \frac{\sin h(1-s)\Omega}{h\Omega} g_y(y(t_j)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \cdot \left(\cos(t_j - t_0)\Omega \Omega y(t_0) + \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) \right)$$

und

$$b_n := 2h \sum_{j=1}^n W_{n-j} \int_0^1 \frac{\sin h(1-s)\Omega}{h\Omega} g_y(y(t_j)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \cdot \int_{t_0}^{t_j} \sin(t_j - s)\Omega \left((A(t_0) - A(s))y(s) + g(y(s)) \right) ds.$$

Wie in [16] folgt

$$\|a_n\|_2 \leq (t_n - t_0) Cl(n, N) \left(\|g_y\| + (t_n - t_0)\|g_{yy}\|K \right) 2K,$$

mit $l(n, N) = \min\{\log(n+1) \log(N+1), \sqrt{N}\}$, und

$$\|b_n\|_2 \leq (t_n - t_0)^2 Cl(n, N) \left(4\|g_{yy}\| K^2 + \|g_y\|\|g\| + (t_n - t_0)\|g_y\|\|\dot{A}\|_\infty\|y\|_\infty \right).$$

□

3.6 Numerische Beispiele

Das Fermi-Pasta-Ulam-Problem beschreibt eine Schwingerkette, die aus steifen Federn und nicht-linearen schwachen Federn besteht. Die numerische Lösung desselben ist wegen der verschiedenen Zeitskalen in nur wenigen Dimensionen ein geeignetes Testproblem für hochoszillatorische Differentialgleichungen. (vgl. [11]).

Dieses Problem wird leicht verallgemeinert und die hohe Frequenz ω wird mit der Zeit variiert. Die Differentialgleichung ergibt sich aus der Hamilton-Funktion:

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T p + \frac{\omega(t)^2}{2} \sum_{i=1}^3 q_{3+i}^2 + \frac{1}{4} (q_1 - q_4)^4 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^2 (q_{i+1} - q_{i+4} - q_i - q_{3+i})^4 + \frac{1}{4} (q_3 - q_6)^4,$$

mit $\omega(t) = \omega + \frac{1}{\omega} \sin(2\pi 10t)$, $\omega = 1000$ und Anfangswert $(p, q) = (1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, \frac{1}{\omega}, 0, 0)$. Abbildung 3.2 zeigt den Fehler des symmetrischen Einschrittverfahrens mit Filterfunktion

$$\phi(x) = \operatorname{sinc} x$$

und den Funktionen

$$\psi_1(x) = \operatorname{sinc} x, \quad \psi_0(x) = \cos x \psi_1(x), \quad \text{und} \quad \psi(x) = \operatorname{sinc}^2 x.$$

Da dieses Einschrittverfahren die Voraussetzungen von Satz 3.2 erfüllt, hat es die Ordnung 2 in den Orten. Ebenso wie das Zweischrittverfahren mit der Filterfunktion

$$\phi(x) = \operatorname{sinc} x \left(1 + \frac{1}{6}(1 - \cos x)\right) \tag{3.14}$$

nach Satz 3.3, dessen Fehler in Abbildung 3.3 aufgetragen ist.

Die Filterfunktion $\phi(x)$ war beim Beweis der Ordnung der Einschritt- und Zweischrittverfahren nötig. Auch numerisch kann die Notwendigkeit der Filterfunktion ϕ nachgewiesen werden. In Abbildung 3.4 ist der Fehler des Einschrittverfahrens mit Filterfunktion

$$\phi(x) = 1$$

zu sehen. Die Voraussetzungen des Satzes 3.2 sind nicht erfüllt, da die Bedingung (3.6)

$$\max_{x \geq 0} \left| \frac{1}{x \sin \frac{x}{2}} \left(\frac{\sin x}{x} - \phi(x) \right) \right| \leq C$$

nicht erfüllt ist. An den Stellen $2k\pi$ mit natürlichen Zahlen $k > 1$ ist die Funktion unbeschränkt.

Damit verhalten sich die Verfahren für dieses einfache Testproblem exakt wie es die Sätze 3.2 und 3.3 erwarten lassen.

Abbildung 3.1: Schwingerkette

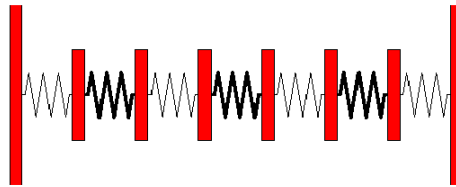


Abbildung 3.2: Fehler Einschrittverfahren in den Orten

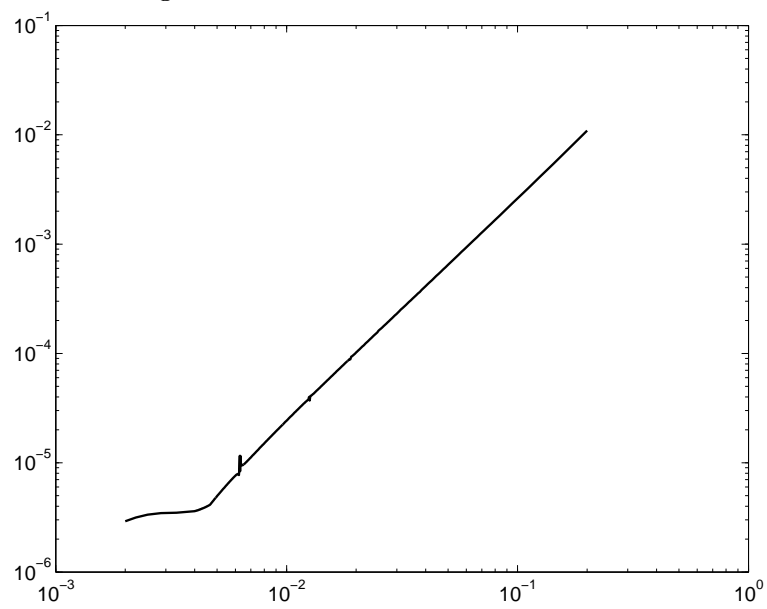


Abbildung 3.3: Fehler Zweischrittverfahren in den Orten

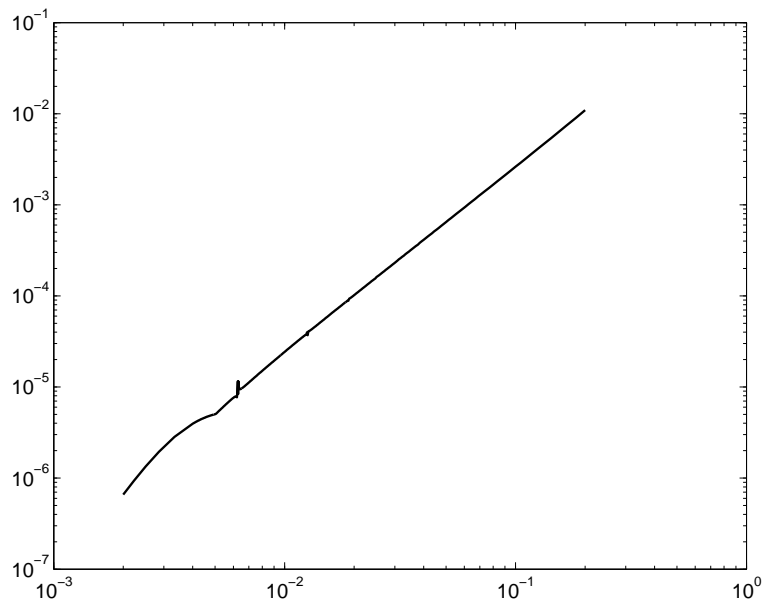
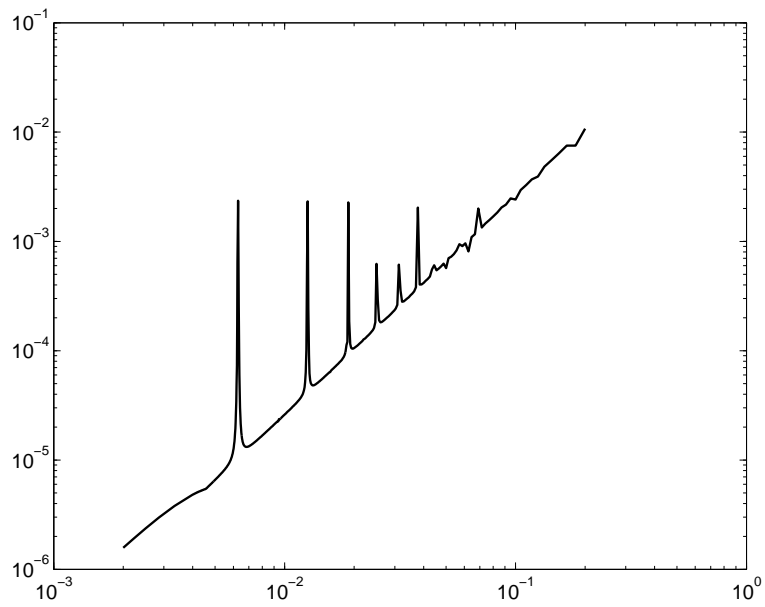


Abbildung 3.4: Fehler Einschrittverfahren ohne Filterfunktion ϕ



Kapitel 4

Verfahren zur Lösung der nichtlinearen oszillatorischen Differentialgleichung

Da unter den bisherigen Verfahren die Zweischrittverfahren als numerisch effizienteste Verfahren implementiert werden können, ist Abschnitt 4.1 Zweischrittverfahren für oszillatorische Systeme gewidmet, bei denen die hohen Frequenzen von einer lösungsabhängigen symmetrisch positiv-semidefiniten Matrix erzeugt werden. In Abschnitt 4.2 wird bewiesen, dass die Verfahren Lange-Zeitschritt-Integratoren sind. Numerisch werden die Verfahren in Abschnitt 4.3 an zwei Simulationen aus der Moleküldynamik getestet.

4.1 Gautschi-Typ exponentielle Integratoren

Ein nichtlineares oszillatorisches System wie es häufig in der Moleküldynamik auftritt hat die Gestalt:

$$\ddot{y} = -f(y) + \tilde{g}(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0 \quad (4.1)$$

mit $\|f_{yy}\|$, $\|f_{yyy}\|$, $\|\tilde{g}\|$, $\|\tilde{g}_y\|$ und $\|\tilde{g}_{yy}\|$ beschränkt. Es wird angenommen, dass das System bereits in die Nähe eines lokalen Minimums der Potentiale zu den schnellen Kräften transformiert wurde. Dabei bleibt die Lösung über große Zeitintervalle in der Nähe dieses Minimums. Numerische Rechnungen deuten darauf hin, dass die harmonische Approximation zumindest in der Moleküldynamik für viele Systeme über mehrere hundert Pikosekunden (piko = 10^{-12}) gültig bleibt, bei einer üblichen Simulationsschrittweite von einer Femtosekunde (femto = 10^{-15}) für das Verlet-Schema. Mathematisch genauer werden die folgenden Annahmen gemacht:

Annahme 4.1 $y_0 \in B_R(0) = \{y \mid \|y\| \leq R\}$, $y(t) \in B_R(0)$, $t \in I = [t_0, t_0 + T]$, $\|f(0)\| < C$.

Die exakte Lösung y von (4.1) erfülle mit $A(y) = f_y(y)$ die Finite-Energie-Bedingung

$$H(y, \dot{y}) = \frac{1}{2} \|\dot{y}\|_2^2 + \frac{1}{2} y^T A(y) y \leq \frac{1}{2} K^2.$$

$A(y)$ sei symmetrisch positiv-semidefinit.

Unter diesen Voraussetzungen lässt sich das System mit $A(y) = f_y(y)$ in der Form

$$\ddot{y} = -A(y)y + g(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0,$$

schreiben. Werden hierauf die Zweischrittverfahren aus Abschnitt 3.3 des vorigen Kapitels angewendet, ergeben sich mit $\Omega_n = \sqrt{A(\phi(h\Omega(y_n))y_n)}$ direkt Verfahren für das oszillatorische System. Dieses Verfahren wurde in [13] bereits für die Moleküldynamik vorgeschlagen. Satz 4.2 zeigt, dass diese einfache Idee funktioniert und das Verfahren einen Lange-Zeitschritt-Integrator für diese Systeme darstellt. Wird statt $\Omega_n = \sqrt{A(\phi(h\Omega(y_n))y_n)}$ $\Omega_n = \sqrt{A(y_n)}$ gewählt, erhält man ein ähnliches Verfahren. Es kann mit denselben Techniken, die in diesem Kapitel vorgestellt werden, analysiert werden. Allerdings muss für dieses einfachere Verfahren zusätzliche Glattheit der Lösung vorausgesetzt werden, wohingegen das obige Verfahren nur mit der Finite-Energie-Bedingung auskommt.

Das Verfahren ergibt sich mit $\Omega_n = \sqrt{A(\phi(h\Omega(y_n))y_n)}$, $A(y) = f_y(y)$ und

$$g(y) = \tilde{g}(y) - f(y) + f_y(y)y$$

zu

$$y_{n+1} - 2 \cos h\Omega_n y_n + y_{n-1} = h^2 \operatorname{sinc}^2 \frac{h}{2} \Omega_n g(\phi(h\Omega_n)y_n) \quad (4.2)$$

und

$$\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_{n-1} = -2\Omega_n \sin h\Omega_n y_n + 2h \operatorname{sinc} h\Omega_n g(\phi(h\Omega_n)y_n).$$

Die Filterfunktion ϕ erfülle dabei dieselben Voraussetzungen wie in Abschnitt 3.3.

Für diese Verfahren gilt der folgende Satz, der zeigt, dass die Verfahren Lange-Zeitschritt-Integratoren sind.

Satz 4.2 *Unter der Annahmen 4.1 gibt es ein h_0 so, dass für alle $0 < h < h_0$ für das Verfahren (4.2) bei Anwendung auf das nichtlineare oszillatorische System (4.1) für alle $0 \leq nh \leq T$ gilt:*

$$\begin{aligned} \|y(t_n) - y_n\|_2 &\leq h^2 C, \\ \|\dot{y}(t_n) - \dot{y}_n\|_2 &\leq h C. \end{aligned}$$

Dabei hängen C und h_0 ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|, \|A_y\|, \|A_{yy}\|, \min\{\log(n+1), \log(N+1), \sqrt{N}\}$ und ϕ .

4.2 Beweis der Fehlerschranken

Der Beweis der Fehlerschranken wird wieder mit Hilfe einiger Lemmata geführt.

Lemma 4.3 *Unter den Voraussetzungen 4.1 lässt sich das System (4.1) mit $A(y) = f_y(y)$ schreiben als*

$$\ddot{y} = -A(y)y + g(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0, \quad (4.3)$$

wobei $\|A_y\|, \|A_{yy}\|, \|g\|, \|g_y\|$ und $\|g_{yy}\|$ beschränkt sind.

Lemma 4.4 Für die Defekte in den Orten gilt mit $\Omega = \Omega(y(t_0))$:

$$d_n = h^3 L_n \Omega y(t_n) + h^4 l_n,$$

mit

$$\|L_n\|_2 \leq C, \quad \text{und} \quad \|l_n\| \leq C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|A_y\|, \|A_{yy}\|, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Zusatz:

$$\|h\Omega L_n\| \leq C, \quad \text{und} \quad \|h\Omega l_n\| \leq C,$$

wobei C von denselben Konstanten abhängt.

Mit Lemma 4.4 folgt, dass die exakte Lösung von (4.3) mit $\bar{y}_h(t_n) = \phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n)$ erfüllt:

$$y(t_n + h) - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n) + y(t_n - h) = h^2 \text{sinc}^2\left(\frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n))\right)g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))))y(t_n) + d_n.$$

Das Näherungsschema liefert mit $\bar{y}_n = \phi(h\Omega(y_n))y_n$:

$$y_{n+1} - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_n)y_n + y_{n-1} = h^2 \text{sinc}^2\left(\frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_n)\right)g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n)))y_n.$$

Durch Differenzbildung ergibt sich das folgende Lemma.

Lemma 4.5 Es gilt für die Fehler $e_n = y(t_n) - y_n$ die Rekursion

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))e_n + e_{n-1} = h^2 H_n^1[e_n] + h^4 H_n^2[e_n] + h^2 H_n^3[e_n, e_n] + d_n,$$

wobei

$$\|H^1\|, \|H^2\|, \|H^3\| \leq C.$$

Dabei hängt C ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|g\|, \|g_y\|, \|A_y\|, \|A_{yy}\|$ und ϕ .

Zusatz:

$$\|h\Omega H^i\| \leq C, \quad i = 1, 2, 3,$$

mit $\Omega = \Omega(y(t_0))$, wobei C von denselben Konstanten abhängt.

Lemma 4.6 Mit $\Omega := \Omega(y(t_0))$ ergibt sich für die Fehler die Rekursion

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega e_n + e_{n-1} = h^2 H_n^1[e_n] + h^4 H_n^2[e_n] + h^2 H_n^3[e_n, e_n] + d_n,$$

mit $\|H_n^1\|, \|H_n^2\|, \|H_n^3\| < C$. Dabei hängt C von denselben Konstanten ab wie im vorigen Lemma.

Zusatz:

$$\|h\Omega H^i\| \leq C, \quad i = 1, 2, 3.$$

Wortwörtlich wie in [16] wird das folgende Lemma bewiesen:

Lemma 4.7 Die Fehler erfüllen

$$e_{n+1} = -W_{n-1}e_0 + W_n e_1 + h^2 \sum_{j=1}^n W_{n-j} (H_n^1[e_n] + h^2 H_n^2[e_n] + H_n^3[e_n, e_n]) + h^2 \sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j,$$

mit $W_n = \text{sinc}(n+1)h\Omega$.

Lemma 4.8 *Es gilt*

$$\left\| \sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j \right\|_2 \leq h^2 C.$$

Dabei hängt C nur ab von $\|y(t_0)\|_2, T, K, \|A_y\|, \|A_{yy}\|_\infty, \|g\|, \|g_y\|, \|g_{yy}\|$ und ϕ .

Beweis von Satz 4.2: Zur Vereinfachung gelte $e_0 = \mathcal{O}(h^3)$ und $e_1 = \mathcal{O}(h^3)$. Für das feste Intervall I gilt nach Lemma 4.8 und wegen $\|W_{n-1}e_0\| \leq h^2TC$ und $\|W_{n-1}\dot{e}_1\| \leq h^2TC$ die Rekursionsungleichung:

$$\|e_{n+1}\| \leq h^2C \sum_{j=1}^n (n-j+1)(\|e_j\| + h^2\|e_j\| + \|e_j\|^2) + h^2D.$$

Für $0 \leq nh \leq T$ ergibt sich wegen $h(n-j+1) \leq T, h^2 \leq T^2$ grob abgeschätzt die Ungleichung

$$\|e_{n+1}\| \leq hC \sum_{j=1}^n (\|e_j\| + \|e_j\|^2) + h^2D, \quad n = 0, 1, \dots$$

Mit Lemma 4.9 folgt die Behauptung für die Orte. Beim Beweis der Behauptung für die Impulse wird analog vorgegangen. Hier wird der Zusatz benötigt. \square

Lemma 4.9 *Gegeben sei die Differenzenungleichung*

$$e_{n+1} \leq hC \sum_{j=1}^n (e_j + e_j^2) + h^2D, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

mit positiven Zahlen C und D . Dann gibt es für ein beliebiges $T > 0$ ein h_0 so, dass für alle $0 \leq h < h_0$ und eine beliebige nichtnegative Lösungsfolge $\{e_j\}_{j=1}^\infty$ der Differenzenungleichung gilt:

$$e_j \leq Mh^2, \quad \text{für} \quad 0 \leq hj \leq T.$$

Beweis: Der Beweis wird durch vollständige Induktion geführt. $h_0 > 0$ sei so gewählt, dass $h_0^2 e^{2TC} D = 1$ gilt. Sei jetzt $0 < h < h_0$ beliebig gewählt und $\{e_j\}_{j=1}^\infty$ eine beliebige Lösungsfolge. Mit vollständiger Induktion wird jetzt gezeigt:

$$e_j \leq h^2 e^{2TC} D < 1, \quad \text{für} \quad 1 \leq jh \leq T.$$

Die vollständige Induktion wird über die Aussage

$$A(m): \quad e_j \leq h^2 e^{2TC} D < 1, \quad 1 \leq j \leq m$$

geführt. Der Induktionsanfang folgt mit

$$A(1): \quad e_1 \leq h^2 D \leq h^2 e^{2TC} D < h_0^2 e^{2TC} D = 1.$$

Induktionsschritt von m nach $m+1$:

Nach der Differenzenungleichung gilt:

$$e_{n+1} \leq hC \sum_{j=1}^n (e_j + e_j^2) + h^2D \stackrel{\text{i.V.}}{\leq} 2hC \sum_{j=1}^n e_j + h^2D, \quad 1 \leq n \leq m.$$

Bei der zweiten Ungleichung wurde die Induktionsvoraussetzung benötigt. Für $1 \leq n \leq m$ gilt also die Differenzengleichung

$$e_{n+1} \leq 2hC \sum_{j=1}^n e_j + h^2 D, \quad 1 \leq n \leq m.$$

Für die Lösung der Differenzgleichung

$$\bar{e}_{j+1} = 2hC \sum_{j=1}^n \bar{e}_j + h^2 D, \quad 0 \leq n \leq m,$$

also $\bar{e}_1 = h^2 D$, gilt

$$e_n \leq \bar{e}_n, \quad 1 \leq n \leq m+1.$$

(da $e_1 \leq h^2 D = \bar{e}_1$, $e_{n+1} \leq 2hC \sum_{j=1}^n e_j + h^2 D \leq 2hC \sum_{j=1}^n \bar{e}_j + h^2 D = \bar{e}_{n+1}$).

Diese Differenzgleichung lässt sich leicht behandeln:

$$\bar{e}_{n+1} - \bar{e}_n = 2hC \bar{e}_n, \quad 1 \leq n \leq m$$

oder

$$\bar{e}_{n+1} = (1 + 2hC) \bar{e}_n \leq (1 + 2hC)^n \bar{e}_1 \leq e^{2hnC} \bar{e}_1 = e^{2TC} h^2 D, \quad 1 \leq n \leq m.$$

Damit folgt

$$e_{n+1} \leq \bar{e}_{n+1} \leq h^2 e^{2TC} D, \quad 1 \leq n \leq m,$$

insbesondere

$$e_{m+1} \leq h^2 e^{2TC} D < h_0^2 e^{2TC} D = 1.$$

□

Beweis von Lemma 4.3: Zunächst wird

$$g(y) = \tilde{g}(y) - f(y) + f_y(y)y$$

gesetzt. Wegen

$$\begin{aligned} -f(y) + f_y(y)y &= -f(0) + f(0) - f(y) - f_y(y)(-y) \\ &= -f(0) + \int_0^1 (1-u) f_{yy}((1-u)y) [y, y] du \end{aligned}$$

ist

$$\|f(y) - f_y(y)y\| \leq C + \frac{1}{2} \|f_{yy}\| R^2,$$

also beschränkt, und damit gilt auch

$$\|g(y)\| \leq C, \quad \text{für } y \in B_R(0).$$

Aus

$$\frac{dg}{dy}(y) = \tilde{g}_y(y) - f_y(y) + f_y(y) + f_{yy}(y)[y, \cdot] = \tilde{g}_y(y) + f_{yy}(y)[y, \cdot]$$

folgt die Beschränktheit der ersten Ableitung von g und durch weiteres Ableiten schließlich Beschränktheit von g_{yy} . Die Aussagen A_y und A_{yy} beschränkt folgen sofort aus f_{yy} und f_{yyy} beschränkt. □

Beweis von Lemma 4.4: Mit $\bar{y}_h(t_n) = \phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n)$ gilt für die exakte Lösung:

$$\begin{aligned}
& y(t_n + h) - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n) + y(t_n - h) = h^2 \operatorname{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n)) g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) \\
& \quad + \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \cdot \\
& \quad \quad \quad \left(g(y(t_n + s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n - s)) \right) ds \\
& \quad + \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n + s)) \right) y(t_n + s) ds \\
& \quad + \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n - s)) \right) y(t_n - s) ds.
\end{aligned}$$

Zuerst werden die letzten beiden Terme behandelt. Es gilt mit $\Omega = \Omega(y(t_0))$:

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n + s)) \right) y(t_n + s) ds \\
& \quad = -h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n + hs) ds \\
& \quad \quad - h \int_0^1 \left(\Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) - \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega \right) \cdot \\
& \quad \quad \quad \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n + hs) ds.
\end{aligned}$$

Mit Korollar 2.8 lässt sich der letzte Term darstellen als:

$$\begin{aligned}
& h^5 \int_0^1 (1-s)^3 \int_0^1 u(1-u) \operatorname{sinc} h(1-u)(1-s)\Omega \left(A(y(t_n)) - A(y(t_0)) \right) \cdot \\
& \quad \quad \quad \operatorname{sinc} hu(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) du \frac{1}{h} \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n + hs) ds \\
& := h^5 r_{n,A}.
\end{aligned}$$

Wegen

$$A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_0)) = \int_0^1 A_y(y(t_0) + u(\bar{y}_h(t_n) - y(t_0))) du [\bar{y}_h(t_n) - y(t_0)]$$

gilt mit der Finiten-Energie-Bedingung

$$\|A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_0))\| \leq \|A_y\| \|\phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n) - y(t_0)\| \leq \|A_y\| \left(\max_{x \geq 0} |\phi(x)| + 1 \right) K.$$

Weiter gilt wegen

$$\frac{1}{h} \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) = \int_0^1 A_y(\bar{y}_h(t_n) + u(y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n))) du \left[\frac{1}{h} (y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n)) \right]$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{1}{h} (y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n)) &= \frac{1}{h} \left(y(t_n + hs) - y(t_n) + y(t_n) - \phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n) \right) \quad (4.4) \\
&= s \int_0^1 \dot{y}(t_n + hsu) du - \frac{\phi(h\Omega(y(t_n))) - I}{h\Omega(y(t_n))} \Omega(y(t_n))y(t_n)
\end{aligned}$$

schließlich

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{h} \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) \right\| &\leq \|A_y\| \left(s + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right) K \\ &\leq \|A_y\| \left(1 + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right) K, \quad \text{für } s \in [0, 1]. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich sofort die grobe Abschätzung

$$\|r_{n,A}\|_2 \leq \|A_y\|^2 \left(1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)| \right) \left(1 + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right) K^3.$$

Mit

$$\begin{aligned} h\Omega r_{n,A} &= \int_0^1 (1-s)^2 \int_0^1 u \operatorname{sinc} h(1-u)(1-s)\Omega \left(A(y(t_n)) - A(y(t_0)) \right) \cdot \\ &\quad \operatorname{sinc} hu(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) du \cdot \\ &\quad \frac{1}{h} \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n + hs) ds, \end{aligned}$$

folgt sofort auch

$$\|h\Omega r_{n,A}\|_2 \leq \|A_y\|^2 \left(1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)| \right) \left(1 + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right) K^3.$$

Der führende Fehlerterm lässt sich weiter aufspalten in

$$\begin{aligned} &-h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n + hs) ds \\ &= -h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n) ds \\ &\quad -h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) \left(y(t_n + hs) - y(t_n) \right) ds. \end{aligned}$$

Der zweite Term lässt sich darstellen als:

$$-h^4 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \frac{1}{h} \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) \frac{1}{h} \left(y(t_n + hs) - y(t_n) \right) ds := h^4 r_{n,A}$$

mit

$$\|r_{n,A}\|, \quad \|h\Omega r_{n,A}\| \leq \|A_y\| \left(1 + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right) K^2.$$

Bleibt schließlich:

$$\begin{aligned} &-h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \left(A(y(t_n + hs)) - A(\bar{y}_h(t_n)) \right) y(t_n) ds \\ &= -h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega A_y(\bar{y}_h(t_n)) \left(y(t_n + hs) - y(\bar{y}_h(t_n)) \right) ds \\ &\quad -h \int_0^1 \Omega^{-1} \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \int_0^1 (1-u) A_{yy}(\bar{y}_h(t_n)) + u(y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n)) du \cdot \\ &\quad \quad \quad [y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n)]^2 y(t_n) ds. \end{aligned}$$

Der zweite Term ist wegen (4.4) wieder $\mathcal{O}_\Omega(h^4)$.

Dabei ist $r_n = \mathcal{O}(h^4)$, $r_n \in \mathbb{R}^N$ definiert, falls $\|r_n\| = \mathcal{O}(h^4)$ und $\|h\Omega r_n\| = \mathcal{O}(h^4)$. Immer wenn im folgenden Beweis ein \mathcal{O} -Term auftaucht, ist gemeint, dass sich die Konstante im \mathcal{O} -Term nur durch die in Lemma 4.4 auftretenden Größen abschätzen lässt. Im obigen Fall ist die Konstante im \mathcal{O} -Term durch

$$\|A_{yy}\| \left(1 + \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| \right)$$

beschränkt.

Wegen:

$$\|\phi(h\Omega) - \phi(h\Omega(y(t_n)))\| \leq h^2 C_\Phi \|A(y(t_n)) - A(y(t_0))\| \leq h^2 C_\Phi \|A_y\| TK$$

gilt

$$\begin{aligned} & -h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(\bar{y}_h(t_n)) \left(y(t_n + hs) - \bar{y}_h(t_n) \right) ds \\ & = \mathcal{O}_\Omega(h^4) - h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(\bar{y}_h(t_n)) \left(y(t_n + hs) - \phi(h\Omega)y(t_n) \right) ds. \end{aligned}$$

Mit der Darstellung

$$\begin{aligned} y(t_n + hs) - \phi(h\Omega)y(t_n) &= (\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))y(t_n) + \Omega^{-1} \sin hs\Omega \dot{y}(t_n) \\ &+ hs \int_0^1 \Omega^{-1} \sin hs(1-u)\Omega \left((A(y(t_n)) - A(y(t_n + hsu)))y(t_n + hsu) + g(y(t_n + hsu)) \right) du \\ &= \mathcal{O}((sh)^2) + (\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))y(t_n) + \Omega^{-1} \sin hs\Omega \dot{y}(t_n) \end{aligned} \quad (4.5)$$

folgt

$$\begin{aligned} & -h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(\bar{y}_h(t_n)) \left(y(t_n + hs) - \phi(h\Omega)y(t_n) \right) ds \\ & = \mathcal{O}_\Omega(h^4) \\ & -h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(\bar{y}_h(t_n)) \left((\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))y(t_n) + \Omega^{-1} \sin hs\Omega \dot{y}(t_n) \right) ds. \end{aligned}$$

Wegen

$$\|A_y(\bar{y}_h(t_n)) - A_y(y(t_n))\| \leq \|A_{yy}\| \|\bar{y}_h(t_n) - y(t_n)\| \leq \|A_{yy}\| \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| K$$

gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n + s)) \right) y(t_n + s) ds \\ & = \mathcal{O}_\Omega(h^4) \\ & -h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(y(t_n)) \left((\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))y(t_n) + \Omega^{-1} \sin hs\Omega \dot{y}(t_n) \right) ds. \end{aligned}$$

Dieselbe Rechnung mit $-h$ statt h ergibt

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n+s)) \right) y(t_n+s) ds \\
& \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n-s)) \right) y(t_n-s) ds \\
& = \mathcal{O}_\Omega(h^4) - 2h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(y(t_n)) \left[(\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))y(t_n) \right] ds y(t_n) \\
& = \mathcal{O}_\Omega(h^4) \\
& - 2h^3 \int_0^1 (h\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega A_y(y(t_n)) \left[y(t_n), (\cos hs\Omega - \phi(h\Omega))(h\Omega)^{-1} \Omega y(t_n) \right] ds.
\end{aligned}$$

Dass $\|\Omega y(t_n)\|$ beschränkt ist, lässt sich nach Verwendung der Variation-der-Konstanten-Formel sofort erkennen. Wird die Darstellungsmatrix der linearen Abbildung

$$G_A(t)[\cdot] = A_y(y(t))[y(t), \cdot] \quad (4.6)$$

mit $G_A(t)$ bezeichnet, so gilt

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n+s)) \right) y(t_n+s) ds \\
& \int_0^h \Omega(\bar{y}_h(t_n))^{-1} \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \left(A(\bar{y}_h(t_n)) - A(y(t_n-s)) \right) y(t_n-s) ds \\
& = \mathcal{O}_\Omega(h^4) \\
& - 2h^3 \int_0^1 (h\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega G_A(t_n) (\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)) (h\Omega)^{-1} ds \Omega y(t_n)
\end{aligned}$$

mit

$$\dot{G}_A(t) = A_{yy}(y(t_n))[\dot{y}(t), y(t)] + A_y(y(t_n))[\dot{y}(t)] \quad (4.7)$$

und daher

$$\|\dot{G}_A(t)\| \leq \|A_{yy}\|K(\|y(t_0)\| + KT) + \|A_y\|K.$$

Nun zu den Termen, die im lokalen Defekt durch die Nichtlinearität g entstehen. Es gilt

$$\begin{aligned}
& \int_0^h \Omega^{-1}(\bar{y}_h(t_n)) \sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \cdot \\
& \quad \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\
& = h^2 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\
& + h^2 \int_0^1 (1-s) \left(\operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) - \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \right) \cdot \\
& \quad \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds.
\end{aligned}$$

Nach Anwenden von Korollar 2.8 lässt sich erkennen, dass der zweite Term $\mathcal{O}_\Omega(h^4)$ ist, mit einer Konstante, die durch $4\|A_y\|(1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|)\|g\|K$ beschränkt ist.

Der führende Fehlerterm lässt sich weiter aufspalten zu

$$\begin{aligned} & h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\ &= h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega)y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\ &\quad - 2h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \left(g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) - g(\phi(h\Omega)y(t_n)) \right) ds, \end{aligned}$$

wobei der zweite Term die Darstellung

$$\begin{aligned} & -2h^4 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s) \Omega \cdot \\ & \quad \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega)y(t_n) + u(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n) - \phi(h\Omega)y(t_n))) du \cdot \\ & \quad \frac{1}{h^2} (\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \phi(h\Omega))y(t_n) ds \end{aligned}$$

erlaubt und wegen

$$\left\| \frac{1}{h^2} (\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \phi(h\Omega)) \right\| \leq C_{\Phi} \|A_y\| (1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|) K$$

wieder $\mathcal{O}_{\Omega}(h^4)$ ist.

Mit

$$\begin{aligned} & g(y(t_n \pm hs)) - g(\phi(h\Omega)y(t_n)) \\ &= g_y(\phi(h\Omega)y(t_n)) \left(y(t_n \pm hs) - \phi(h\Omega)y(t_n) \right) \\ & \quad + \int_0^1 g_{yy}(\phi(h\Omega)y(t_n) + u(y(t_n \pm hs) - \phi(h\Omega)y(t_n))) du [y(t_n \pm hs) - \phi(h\Omega)y(t_n)]^2 \end{aligned}$$

folgt nach Verwendung von (4.5)

$$\begin{aligned} & h \int_0^1 \Omega^{-1} \sin h(1-s) \Omega \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega)y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\ &= \mathcal{O}_{\Omega}(h^4) + 2h^3 \int_0^1 (h\Omega)^{-1} \sin h(1-s) \Omega g_y(\phi(h\Omega)y(t_n)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \Omega y(t_n). \end{aligned}$$

Die Abschätzung

$$\|g_y(\phi(h\Omega)y(t_n)) - g_y(y(t_n))\| \leq h \|g_{yy}\| \max_{x \geq 0} \left| \frac{\phi(x) - 1}{x} \right| K$$

ergibt

$$\begin{aligned} & \int_0^h \frac{\sin(h-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n))}{\Omega(\bar{y}_h(t_n))} \left(g(y(t_n+s)) - 2g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) + g(y(t_n-s)) \right) ds \\ &= \mathcal{O}_{\Omega}(h^4) + 2h^3 \int_0^1 (h\Omega)^{-1} \sin h(1-s) \Omega g_y(y(t_n)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \Omega y(t_n). \end{aligned}$$

Damit ist das Lemma mit

$$L_n = 2 \int_0^1 (h\Omega)^{-1} \sin h(1-s)\Omega (g_y(y(t_n)) - G_A(t_n)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds$$

bewiesen. \square

Beweis von Lemma 4.5: Durch Subtraktion der numerischen von der exakten Lösung ergibt sich

$$\begin{aligned} e_{n+1} - (2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n) - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_n)y_n) + e_{n-1} \\ = h^2 \left(\operatorname{sinc}\left(\frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n))\right)g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) - \operatorname{sinc}\left(\frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_n)\right)g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n) \right) + d_n. \end{aligned}$$

Da die folgende Differenz mehrfach in den Abschätzungen auftritt, wird für sie zuerst eine einfachere Darstellung aufgeschrieben:

$$\begin{aligned} \bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n &= \phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n) - \phi(h\Omega(y_n))y_n \\ &= (\phi(h\Omega(y(t_n))) - \phi(h\Omega(y_n)))y(t_n) + \phi(h\Omega(y_n))e_n. \end{aligned}$$

Hier wird die Abschätzung für allgemeines ϕ vorgeführt. Für die meisten Filterfunktionen ergeben sich mit Lemma 2.7 bessere Abschätzungen, die nicht wie \sqrt{N} wachsen. Mit $\tilde{\phi}(x) = \phi(\sqrt{x})$ folgt die Darstellung:

$$\begin{aligned} \bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n &= \left(\tilde{\phi}(h^2 A(y(t_n))) - \tilde{\phi}(h^2 A(y_n)) \right) y(t_n) + \phi(h\Omega(y_n))e_n \\ &= M_n[e_n], \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} M_n[\cdot] &= h^2 \int_0^1 \frac{d\tilde{\phi}}{dA} (h^2(A(y_n)) + u(A(y(t_n)) - A(y_n))) \left[\int_0^1 A_y(y_n + ve_n)[\cdot] dv \right] du y(t_n) \\ &\quad + \phi(h\Omega(y_n))[\cdot] \end{aligned}$$

und

$$\|M_n\| \leq T^2 C_{\Phi} (\|y(t_0)\| + TK) + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|.$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} &\cos h\Omega(\bar{y}_n)y_n - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n) \\ &= (\cos h\Omega(\bar{y}_n) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y_n + \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))(y_n - y(t_n)) \\ &= (\cos h\Omega(\bar{y}_n) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))(y(t_n) + y_n - y(t_n)) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))e_n \\ &= (\cos h\Omega(\bar{y}_n) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n) \\ &\quad - (\cos h\Omega(\bar{y}_n) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))e_n - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))e_n \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} &\cos h\Omega(\bar{y}_n) - \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \\ &= h^2 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) (A(\bar{y}_h(t_n)) - A(\bar{y}_n)) \cos hs\Omega(\bar{y}_n) ds \\ &= h^2 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \cdot \\ &\quad \int_0^1 A_y(\bar{y}_n + u(\bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n))[\bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n] du \cos hs\Omega(\bar{y}_n) ds. \end{aligned}$$

Wird jetzt

$$G_n^{A,1}[\cdot] := \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \int_0^1 A_y(\bar{y}_n + u(\bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n))[\cdot] du \cos hs\Omega(\bar{y}_n) ds y(t_n)$$

definiert, so gilt

$$\|G_n^{A,1}\| \leq \frac{1}{2} \|A_y\| \|y\|_\infty \leq \frac{1}{2} \|A_y\| (\|y(t_0)\| + KT),$$

und mit

$$G_n^{A,2}[\cdot] := - \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \int_0^1 A_y(\bar{y}_n + u(\bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_n))[\cdot] du \cos hs\Omega(\bar{y}_n) ds [\cdot],$$

gilt

$$\|G_n^{A,2}\| \leq \frac{1}{2} \|A_y\|.$$

Wird weiter definiert

$$\begin{aligned} \tilde{H}_n^1[\cdot] &:= G_n^{A,1}[M_n[\cdot]] \\ \tilde{H}_n^2[\cdot, \cdot] &:= G_n^{A,2}[M_n[\cdot], \cdot], \end{aligned}$$

so gilt

$$-(2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n) - 2 \cos h\Omega(\bar{y}_n)y_n) = -2 \cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n))e_n + 2h^2 \tilde{H}_n^1[e_n] + 2h^2 \tilde{H}_n^2[e_n, e_n].$$

Der Zusatz ergibt sich, indem hier Korollar 2.8 verwendet wird, um im Integral von $\|\tilde{H}_n^1\|$ und $\|\tilde{H}_n^2\|$ zu $\Omega(y(t_0))$ überzugehen. Genauer wird nach der Aufspaltung

$$\begin{aligned} &\int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) G(n, h, s) ds \\ &= \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(y(t_0)) G(n, h, s) ds + \\ &\quad \int_0^1 (1-s) (\operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n)) - \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega(y(t_0))) G(n, h, s) ds \end{aligned}$$

der zweite Term mit Korollar 2.8 behandelt.

Weiter gilt mit $\psi(x) = \operatorname{sinc}^2 \frac{x}{2}$:

$$\begin{aligned} &\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) - \psi(h\Omega(\bar{y}_n))g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n) \\ &= \psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) (g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) - g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n)) \\ &\quad + (\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \psi(h\Omega(\bar{y}_n))) g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n). \end{aligned}$$

Zur Behandlung des ersten Termes nützt zunächst die folgende Darstellung:

$$g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n)) - g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n) = G_n[\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n) - \phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n]$$

mit

$$G_n[\cdot] = \int_0^1 g_y(\phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n + u(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n) - \phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n)) [\cdot] du.$$

Weiter gilt

$$\begin{aligned} G_n [\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))y(t_n) - \phi(h\Omega(\bar{y}_n))y_n] \\ = G_n [(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \phi(h\Omega(\bar{y}_n)))y(t_n)] + G_n [\phi(h\Omega(\bar{y}_n))e_n]. \end{aligned}$$

Es gilt die Darstellung

$$G_n [(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \phi(h\Omega(\bar{y}_n)))y(t_n)] = h^2 G_n [G_n^1 [G_n^2 [M_n[e_n]]] y(t_n)],$$

dabei ist

$$G_n^2[\cdot] = \int_0^1 A_y(\bar{y}_n + u(\bar{y}_n(t_n) - \bar{y}_n))[\cdot] du,$$

und

$$G_n^1[\cdot] = \int_0^1 \frac{d\tilde{\phi}}{dA}(h^2 A(\bar{y}_n) + u(h^2 A(\bar{y}_h(t_n)) - h^2 A(\bar{y}_n)))[\cdot] du$$

mit $\tilde{\phi}(x) = \phi(\sqrt{x})$, falls die Filterfunktion ϕ analog wie im Beweis von Lemma 3.1 behandelt werden muss. Bei vielen Filterfunktionen lässt sich Lemma 2.7 verwenden, und die Abschätzungen sind günstiger.

Mit

$$\tilde{H}_n^3[\cdot] = \psi(h\Omega(y(t_n)))G_n [G_n^1 [G_n^2 [M_n[\cdot]]] y(t_n)]$$

und

$$\tilde{H}_n^4[\cdot] = \psi(h\Omega(y(t_n)))G_n [\phi(h\Omega(\bar{y}_n))\cdot]$$

gilt

$$\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) (g(\phi(h\Omega(y(t_n))))y(t_n) - g(\phi(h\Omega(y_n)))y_n) = h^2 \tilde{H}_n^3[e_n] + \tilde{H}_n^4[e_n],$$

dabei ist

$$\begin{aligned} \|\tilde{H}_n^3\| &\leq \max_{x \geq 0} |\psi(x)| \|g_y\| \left\{ \frac{\sqrt{N} \max_{x \geq 0} |\tilde{\phi}(x)|}{C} \right\} \|A_y\| \|M_n\| \\ \|\tilde{H}_n^4\| &\leq \max_{x \geq 0} |\psi(x)| \|g_y\| \max_{x \geq 0} |\phi(x)|. \end{aligned}$$

Der Zusatz ergibt sich für diese Operatoren durch

$$\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) = \psi(h\Omega(y(t_0))) + (\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \psi(h\Omega(y(t_0))))$$

und Anwenden von Lemma 2.7 auf $\psi(x) = \text{sinc}^2 \frac{x}{2}$.

Wegen

$$\begin{aligned} (\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \psi(h\Omega(\bar{y}_n))) \\ = -\text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n)) (\text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_n) - \text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n))) \\ - (\text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_n) - \text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n))) \text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_n) \end{aligned}$$

folgt nach Anwenden von Korollar 2.8 und mit

$$\begin{aligned} \tilde{H}_n^5[\cdot] &= \text{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h(t_n)) \cdot \\ &\int_0^1 (1-s) \text{sinc}(h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n))) \int_0^1 A_y(\bar{y}_n - u(\bar{y}_n + \bar{y}_h(t_n))) [M_n \cdot] du \cdot \\ &\quad s \text{sinc} hs\Omega(\bar{y}_n) ds g(\phi(h\Omega(\bar{y}_n)))y_n \end{aligned}$$

und

$$\tilde{H}_n^6[\cdot] = \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc}(h(1-s)\Omega(\bar{y}_h(t_n))) \int_0^1 A_y(\bar{y}_h + u(\bar{y}_h(t_n) - \bar{y}_h)) [M_n \cdot] du \cdot \\ s \operatorname{sinc} hs\Omega(\bar{y}_h) ds \operatorname{sinc} \frac{h}{2}\Omega(\bar{y}_h)g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h))y_n)$$

schließlich

$$(\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))) - \psi(h\Omega(\bar{y}_h)))g(\phi(h\Omega(y_n))y_n) = \frac{h^2}{4}\tilde{H}_n^5[e_n] + \frac{h^2}{4}\tilde{H}_n^6[e_n],$$

mit

$$\|\tilde{H}_n^5\| \leq \|A_y\| \|g\| \|M_n\| \quad \text{und} \quad \|\tilde{H}_n^6\| \leq \|A_y\| \|g\| \|M_n\|.$$

Der Zusatz ergibt sich wie oben. Insgesamt gilt jetzt

$$h^2 (\psi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n)))g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h(t_n))y(t_n)) - \psi(h\Omega(\bar{y}_h))g(\phi(h\Omega(\bar{y}_h))y_n)) \\ = h^4 \tilde{H}_n^3[e_n] + h^2 \tilde{H}_n^4[e_n] + \frac{h^4}{4} \tilde{H}_n^5[e_n] + \frac{h^4}{4} \tilde{H}_n^6[e_n].$$

Die Rekursionsgleichung lässt sich jetzt schreiben als

$$e_{n+1} - 2 \cos h\Omega(y(t_n))e_n + e_{n-1} = h^2 \left(-2\tilde{H}_n^1[e_n] - 2\tilde{H}_n^2[e_n, e_n] + \tilde{H}_n^4[e_n] \right) \\ + h^4 \left(\tilde{H}_n^3[e_n] + \frac{1}{4}\tilde{H}_n^5[e_n] + \frac{1}{4}\tilde{H}_n^6[e_n] \right) + d_n \\ =: h^2 H_n^1[e_n] + h^4 H_n^2[e_n] + h^2 H_n^3[e_n, e_n] + d_n.$$

□

Beweis von Lemma 4.6: Die neue Rekursion ergibt sich aus der Tatsache, dass

$$2(\cos h\Omega(\bar{y}_h(t_n)) - \cos h\Omega) = 2h^2 \int_0^1 (1-s) \operatorname{sinc} h(1-s)\Omega \cdot \\ \int_0^1 A_y(\bar{y}_h(t_n) + u(y(t_0) - \bar{y}_h(t_n))) du \cdot \\ [y(t_0) - \phi(h\Omega(y(t_n)))y(t_n)] \cos hs\Omega(\bar{y}_h(t_n)) ds \\ =: h^2 F_n$$

mit

$$\|F_n\| \leq \|A_y\| (1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|) K$$

und

$$\|h\Omega F_n\| \leq \|A_y\| (1 + \max_{x \geq 0} |\phi(x)|) K$$

gilt.

□

Beweis von Lemma 4.8: Mit Lemma 4.4 gilt:

$$\sum_{j=1}^n W_{n-j} d_j = h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_j \Omega y(t_j) + h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} l_j.$$

Unmittelbar folgt wegen $\|W_n\|_2 \leq n + 1$:

$$\left\| h^4 \sum_{j=1}^n W_{n-j} l_j \right\|_2 \leq h^2 T^2 C.$$

Um die erste Summe zu beschränken, wird analog wie in [16] vorgegangen. Mit der Variationder-Konstanten-Formel lässt sich die erste Summe auch darstellen als:

$$h^3 \sum_{j=1}^n W_{n-j} L_j \Omega y(t_j) = h^2 (a_n + b_n)$$

mit

$$a_n := 2h \sum_{j=1}^n W_{n-j} \int_0^1 \frac{\sin h(1-s)\Omega}{h\Omega} (g_y(y(t_j)) - G_A(t_j)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \cdot \\ \left(\cos(t_j - t_0)\Omega \Omega y(t_0) + \sin(t_j - t_0)\Omega \dot{y}(t_0) \right)$$

und

$$b_n := 2h \sum_{j=1}^n W_{n-j} \int_0^1 \frac{\sin h(1-s)\Omega}{h\Omega} (g_y(y(t_j)) - G_A(t_j)) \frac{\cos hs\Omega - \phi(h\Omega)}{h\Omega} ds \cdot \\ \int_{t_0}^{t_j} \sin(t_j - s)\Omega \left((A(y(t_0)) - A(y(s)))y(s) + g(y(s)) \right) ds.$$

Wie in [16] folgt

$$\|a_n\|_2 \leq (t_n - t_0) C l(n, N) \left(\|g_y\| + \|G_A\| + (t_n - t_0)(\|g_{yy}\|K + \|\dot{G}_A\|) \right) 2K,$$

mit $l(n, N) = \min\{\log(n+1) \log(N+1), \sqrt{N}\}$, und

$$\|b_n\|_2 \leq (t_n - t_0)^2 C l(n, N) \left(4(\|g_{yy}\|K + \|\dot{G}_A\|)K + (\|g_y\| + \|G_A\|)\|g\| \right. \\ \left. + (t_n - t_0)(\|g_y\| + \|G_A\|)\|A_y\|K\|y\|_\infty \right).$$

Mit (4.6) und (4.7) folgt

$$\|G_A\| \leq \|A_y\|K$$

und

$$\|\dot{G}_A\| \leq \|A_{yy}\|K\|y\|_\infty + \|A_y\|K,$$

und damit die Behauptung. □

4.3 Numerische Simulationsergebnisse

Um die Aussage von Satz 4.2 zu überprüfen, wird zunächst das System

$$\ddot{y}(t) = -A(y(t))y(t) + g(y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0, \quad (4.8)$$

mit

$$A(y(t)) = \text{diag}(0, 0, 0, \omega^2(y_1(t)), \omega^2(y_2(t)), \omega^2(y_3(t)))$$

und

$$\omega(y) = \omega + \frac{1}{\omega} \sin(y),$$

für $\omega = 50$ und $\omega = 100$ numerisch gelöst. Die rechte Seite g ist dabei so gewählt, dass die Differentialgleichung (4.8) aus der Hamilton-Funktion

$$H(\dot{y}, y) = \frac{1}{2} \dot{y}^T \dot{y} + \sum_{i=1}^3 \frac{\omega(y_{3+i})^2}{2} y_{3+i}^2 + \frac{1}{4} (y_1 - y_4)^4 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^2 (y_{i+1} - y_{i+4} - y_i - y_{3+i})^4 + \frac{1}{4} (y_3 + y_6)^4$$

entsteht. Als Filterfunktion für das Verfahren (4.2) wird (3.14) gewählt. In Abbildung 4.1 ist der Fehler des Verlet-Schemas und des exponentiellen Integrators für $\omega = 50$ zu sehen. Dabei ist der Fehler in der Euklidnorm logarithmisch über der verwendeten Schrittweite dargestellt. Alle Schrittweiten, für die das Verlet-Schema eine Lösung liefert, sind gezeichnet. Die Fehler der Verfahren für $\omega = 100$ ist in Abbildung 4.2 zu sehen.

Während System (4.8) dazu diente, an einem bekannten Testproblemen zu prüfen, ob der exponentielle Integrator ein Lange-Zeitschritt-Integrator ist, sind die weiteren numerischen Rechnungen in diesem Abschnitt spezifischer. Sie helfen, das vorgeschlagene Verfahren auf seine Anwendbarkeit auf dem Gebiet der Moleküldynamik zu testen. Um zu prüfen, ob der vorgeschlagene Lange-Zeitschritt-Integrator den numerischen Herausforderungen auf diesem Gebiet gewachsen ist, werden zwei bekannte Simulationen aus dem Gebiet der Moleküldynamik durchgeführt, die sich noch in vertretbarem Rechenaufwand ausüben lassen (vgl. [10], [20]).

Das erste Testproblem ist die Simulation eines Wassertropfens von 10 \AA Radius ($1 \text{ \AA} = 1 \text{ Angström} = 10^{-10} \text{ m}$). Die einzelnen Wassermoleküle werden als dreiatomige Moleküle mit einem Sauerstoffatom in der Mitte und zwei Wasserstoffatomen simuliert. Die Potentiale sind aufgespaltet in gebundene U^{geb} und ungebundene U^{ung} Potentiale. Diese sind weiter unterteilt in schnelle und langsame Potentiale.

$$\begin{aligned} U^s &= U^{\text{s, geb.}} + U^{\text{s, ung.}} \\ U^{\text{s, geb.}} &= U^{\text{Winkel}} + U^{\text{Bindungen}} \\ U^{\text{s, ung.}} &= U^{\text{s, el.}} + U^{\text{s, Lennard-Jones}} \\ U^{\text{s, el.}} &= U^{\text{el.}} SW(r_{ij}) \\ U^{\text{s, Lennard-Jones}} &= U^{\text{Lennard-Jones}} SW(r_{ij}) \\ U^l &= (1 - SW(r_{ij})) U^{\text{el.}} + (1 - SW(r_{ij})) U^{\text{Lennard-Jones}} \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $SW(r)$ eine Umschaltfunktion die eins ist bis zu einem bestimmten Abstand und dann innerhalb eines vorgegebenen Intervalles auf Null abfällt. $SW(r)$ ist hier zweimal stetig differenzierbar gewählt, und r_{ij} bezeichnet den Abstand von Atom i zu Atom j . Die genauen Daten sind für die Bindungen $K_B = 450 \text{ kcal mol}^{-1}$, die Bindungswinkel $K_A = 55 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ rad}^{-2}$, die Ladungen $q_O = 0.417e$, $q_H = -0.834e$, den Abstand Sauerstoff-Wasserstoff $r_{OH} = 0.957 \text{ \AA}$

Abbildung 4.1: Fehler in den Orten, $\omega = 50$

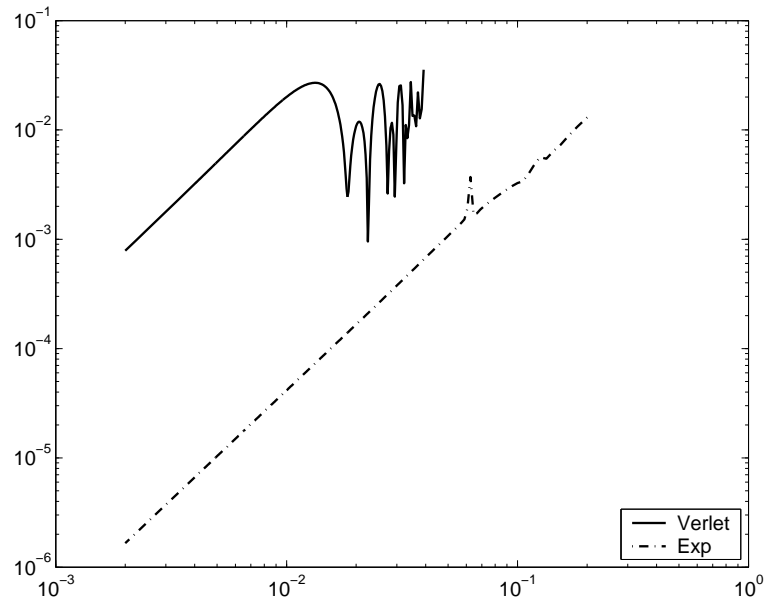
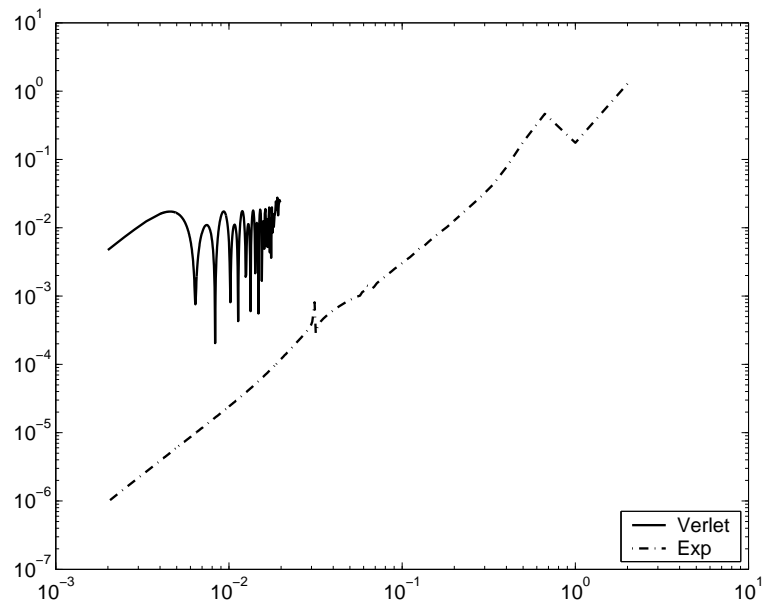


Abbildung 4.2: Fehler in den Orten, $\omega = 100$



und den Ruhebindungswinkel $\theta_0 = 104.52$ Grad. Die Lennard-Jones-Daten sind $\sigma_{H-H} = 0.4\text{\AA}$, $\sigma_{O-H} = 1.75253\text{\AA}$, $\epsilon_{H-H} = 0.046 \text{ kcal mol}^{-1}$ und $\epsilon_{O-H} = 0.08365 \text{ kcal mol}^{-1}$.

Das zweite Problem besteht aus einer Kette von hundert Punktmassen, die miteinander verbunden sind. Dihedralkräfte werden nicht beachtet und durch Versetzen der einzelnen Punktmassen mit Ladungen wird ein zur Dynamik von Proteinen ähnliches Verhalten erzeugt (vgl. [10]). Da einige Werte bei der verwendeten Simulation in [10] nicht exakt gegeben sind, wird das hier verwendete Modell mit den Daten ausführlicher beschrieben als beim Wassertropfen. Die Potentiale lauten:

$$\begin{aligned}
 U^{\text{Bindungen}} &= \sum_{\text{Bindungen}} \frac{1}{2} K_B (r_{ij} - r_0)^2 \\
 U^{\text{Winkel}} &= \sum_{\text{Bindungswinkel}} \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\
 U^{\text{van der Waals}} &= \sum_{\text{Paare } (i,j)} \left(\frac{A}{r_{ij}^{12}} - \frac{B}{r_{ij}^6} \right) \\
 U^{\text{Ladungen}} &= \sum_{\text{Paare } (i,j)} \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}}.
 \end{aligned}$$

Wie zuvor bezeichnet r_{ij} den Abstand zwischen Atom i und Atom j . Die Daten für die Simulation sind: Masse der Massepunkte $m = 14u$, $r_0 = 1.52\text{\AA}$, $K_B = 255 \text{ kcal mol}^{-1} \text{\AA}^{-2}$, $K_\theta = 45 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ rad}^{-2}$, $\theta_0 = 110$ Grad, $A = 6.8 \cdot 10^3 \text{ kJ mol}^{-1} \text{\AA}^{12}$ und $B = 1705 \text{ kJ mol}^{-1} \text{\AA}^6$. Die Verteilung der Ladungen ergibt sich aus Abbildung 4.3. Als Anfangsdaten wurden die Kette in eine Ebene gelegt, das zweite Atom aber um 90 Grad nach oben geklappt. Die Anfangsimpulse wurden zu Null gesetzt. Innerhalb der ersten 10 Pikosekunden geht das Molekül in eine kompakte Struktur über. Der Ablauf ist in Abbildung 4.4 zu sehen. Dabei steigt die Temperatur auf Grund der hohen Anfangsverspannung der Moleküls stark an. Nach 2 Nanosekunden Hochenergie-dynamik, wird das Molekül langsam auf 300 K abgekühlt. Anschließend wird die Bewegung des Moleküls weitere 2 Nanosekunden simuliert. Die Aufspaltung in schnelle und langsame Kräfte ist bei dieser Simulation genau wie bei der Simulation des Wassertropfens gewählt.

Beide Simulationen wurden mit dem Verlet-Schema und dem vorgeschlagenen exponentiellen Integrator mit Filterfunktion (3.14) durchgeführt. Bei beiden Testproblemen konnte mit dem neuen Verfahren die Schrittweite um den Faktor 10 gegenüber dem Verlet-Schema erhöht werden. Dies bedeutet eine erhebliche Rechenzeiteinsparung bei großen Simulationen in der Moleküldynamik. Entsprechend den theoretischen Ergebnissen und den numerischen Tests erscheint eine saubere Implementierung der neuen Verfahren in bestehende Software zur Simulation großer Moleküle sehr Erfolg versprechend.

Abbildung 4.3: Ladungsverteilung

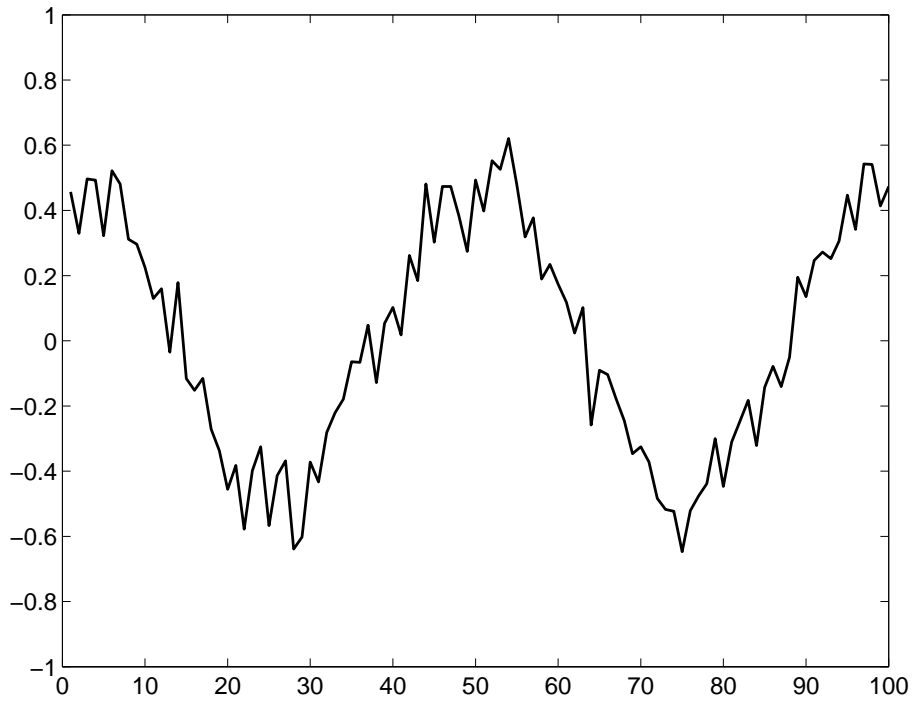
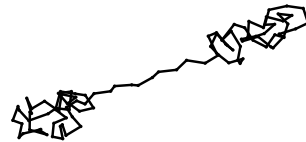


Abbildung 4.4: Proteinfaltung

Zeit in Pikosekunden: 3.0358



Zeit in Pikosekunden: 6.035



Zeit in Pikosekunden: 7.0226



Zeit in Pikosekunden: 8.4125



Literaturverzeichnis

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulations of Liquids*. Clarendon Press, 1987.
- [2] U. M. Ascher and S. Reich. On some difficulties in integrating highly oscillatory Hamiltonian systems. pages 281–296, 1998.
- [3] Folkmar A. Bornemann. *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*. Springer-Verlag, 1998.
- [4] B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus. Charmm: A program for macromolecular energy, minimization and dynamics calculations. *J. Comp. Chem.*, 4:187–217, 1983.
- [5] David Cohen, Ernst Hairer, and Christian Lubich. Modulated fourier expansions of highly oscillatory differential equations. Preprint, 2002.
- [6] W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, Jr. K. M. Merz, D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell, and P. A. Kollman. A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules. *J. Am. Chem. Soc.*, 117:5179–5197, 1995.
- [7] V. L. Druskin and L. A. Knizhnerman. Error bounds in the simple Lanczos procedure for computing functions of symmetric matrices and eigenvalues. *Comput. Math. Phys.*, 7:20–30, 1991.
- [8] V. L. Druskin and L. A. Knizhnerman. Krylov subspace approximation of eigenpairs and matrix functions in exact and computer arithmetic. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 2:205–217, 1995.
- [9] B. Garcia-Archilla, J. Sanz-Serna, and R. Skeel. Long-time-step methods for oscillatory differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 30(3):930–963, 1998.
- [10] H. Grubmüller. Dynamiksimulation sehr großer Makromoleküle auf einem Parallelrechner. Dissertation, Physik-Dept. der Tech. Univ. München , 1994.
- [11] E. Hairer and C. Lubich. Long-time energy conservation of numerical methods for oscillatory differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38:414–414, 2000.
- [12] E. Hairer, Ch. Lubich, and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration*. Springer-Verlag, 2002.
- [13] Marlis Hochbruck and Christian Lubich. A Bunch of Time Integrators for Quantum/Classical Molecular Dynamics. In P. Deuffhard, J. Hermans, B. Leimkuhler, A. E.

- Mark, S. Reich, and R. D. Skeel, editors, *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*, volume 4 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 421–432. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [14] Marlis Hochbruck and Christian Lubich. On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34:1911–1925, 1997.
- [15] Marlis Hochbruck and Christian Lubich. Exponential integrators for quantum-classical molecular dynamics. *BIT*, 39:620–645, 1999.
- [16] Marlis Hochbruck and Christian Lubich. A Gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations. *Numer. Math.*, 83:403–426, 1999.
- [17] Marlis Hochbruck, Christian Lubich, and Hubert Selhofer. Exponential integrators for large systems of differential equations. *SIAM J. Sci. Comp.*, 19:1552–1574, 1998.
- [18] Arieh Iserles. On the global error of discretization methods for highly-oscillatory ordinary differential equations. Preprint, 2000.
- [19] Arieh Iserles. Think globally, act locally: solving highly-oscillatory ordinary differential equations. Preprint, August 2001.
- [20] Jesús A. Izaguirre, Sebastian Reich, and Robert D. Skeel. Longer time steps for molecular dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 110(20):9853–9864, 1999.
- [21] Dušanka Janežič and Franzi Merzel. Long time step md simulations using split integration symplectic method. In P. Deuffhard, J. Hermans, B. Leimkuhler, A. E. Mark, S. Reich, and R. D. Skeel, editors, *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*, volume 4 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 323–348. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [22] Linda Petzold, Laurent Jay, and Jeng Yen. Numerical Solution of Highly Oscillatory Ordinary Differential Equations. *Acta Numerica*, 6:437–484, 1997.
- [23] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 1995.
- [24] Y. Saad. Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29:209–228, 1992.
- [25] J. M. Sanz-Serna and M. P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*. Chapman & Hall, 1994.
- [26] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5:506–517, 1968.
- [27] A.M. Stuart and A.R. Humphries. *Dynamical Systems and Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 1996.
- [28] H. F. Trotter. On the product of semi-groups of operators. *Proc. Am. Math. Soc.*, 10:545–551, 1959.
- [29] M. Tuckerman, B. J. Berne, and G. J. Martyna. Reversible multiple time scale molecular dynamics. *J. Chem. Phys.*, 97:1990–2001, 1992.

- [30] L. Verlet. Computer “experiments“ on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical Review*, 159:98–103, 1967.
- [31] S. J. Weiner, P. A. Kollman, D. A. Case, U. C. Singh, C. Ghio, G. Alagona, Jr. S. Profeta, and P. Weiner. A new force field for molecular mechanical simulation of nucleic acids and proteins. *J. Am. Chem. Soc.*, 106:765–784, 1984.
- [32] J.H. Wilkinson. Error analysis of floating-point computation. *Numer. Math.*, 2:319–340, 1960.