

Splitting Integratoren für stochastische Schrödinger-Gleichungen

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

vorgelegt von
Matthias Loy
aus Kusterdingen

Wintersemester 2007/08

Tag der mündlichen Prüfung: 3. Dezember 2007

Dekan: Prof. Dr. N. Schopohl

1. Berichterstatter: Prof. Dr. C. Lubich

2. Berichterstatter: Prof. Dr. A. Prohl

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Stochastische Differentialgleichungen und numerische Methoden	5
1.1 Wiener-Prozesse und stochastische Differentialgleichungen	5
1.2 Iterierte stochastische Integrale und stochastische Taylor-Entwicklung	15
1.3 Numerische Verfahren, Konvergenzbegriffe und ein Konvergenzkriterium	20
1.4 Exponentielle Integratoren für lineare stochastische Differentialgleichungen	26
1.4.1 Stochastische Magnus-Integratoren	28
1.4.2 Stochastische Splitting Integratoren	29
2 Shuffle Algebren und iterierte stochastische Integrale	35
2.1 Shuffle Algebren	35
2.2 Erwartungswerte von Produkten iterierter stochastischer Integrale	38
2.3 Basen von Shuffle Algebren	41
2.4 Effiziente Simulation iterierter Stratonovich-Integrale	44
2.4.1 Reduktion der Anzahl der zu berechnenden Stratonovich-Integrale	44
2.4.2 Approximation iterierter Stratonovich-Integrale	46
3 Splitting Integratoren für lineare Stratonovich-Gleichungen mit beschränkten Koeffizienten	53
3.1 Splitting Integratoren im Falle zeitunabhängiger Koeffizienten	53
3.2 Splitting Integratoren für $q \geq 2$	63
3.2.1 Ordnungsbedingungen für Splitting Integratoren der Ordnung 0.5	63
3.2.2 Ordnungsbedingungen für Splitting Integratoren der Ordnung 1	64
3.3 Einige Beispiele zu Splitting Integratoren für $q = 1$	64
3.3.1 Splitting Integratoren für $s = 1$	65
3.3.2 Splitting Integratoren für $s = 2$	65
3.3.3 Splitting Integratoren für $s = 3$	67
3.4 Der zeitabhängige Fall	69
3.4.1 Splitting Integratoren der Ordnung 1	71
3.4.2 Splitting Integratoren der Ordnung 1.5	72
3.5 Numerische Experimente	74
4 Splitting Integratoren für lineare zeitabhängige Stratonovich-Schrödinger-Gleichungen	79
4.1 Exponentielle Integratoren für die deterministische zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	79
4.2 Splitting Integratoren für die Stratonovich-Schrödinger-Gleichung	84
4.3 Rückführung des lokalen Fehlers auf Quadraturfehler	87

4.3.1	Der starke lokale Fehler des θ -Splittings	93
4.4	Ein Kriterium zur globalen Ordnung eines Splitting Integrators im unbeschränkten Fall	96
4.4.1	Globale Fehlerabschätzungen für das θ -Splitting	101
4.5	Numerische Experimente	103
A	Die Matlab Routinen SHPR, MOPS und SUMRG	105
	Literaturverzeichnis	111
	Danksagung	115
	Lebenslauf	117

Einleitung

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{\partial X}{\partial t}(x,t) = H(x,t)X(x,t), \quad X(x,t_0) = X_0(x), \quad t \in [t_0, T], \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (i = \sqrt{-1}) \quad (1)$$

ist eine der fundamentalen Bewegungsgleichungen der klassischen Quantenmechanik. Hierbei setzt sich der sogenannte Hamilton-Operator $H(x,t) = -\frac{1}{2}\Delta + v(x,t)$ aus einem freien Anteil mit $\Delta = \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$, dem unbeschränkten Laplace-Operator, und einem deterministischen Potential v zusammen. Jedoch wurden in jüngster Zeit, etwa in der Quantenoptik, Phänomene aufgedeckt, die durch Lösungen einer deterministischen Gleichung unzureichende Erklärung finden. Ein derartiges Problem ist ein offenes Quantensystem (siehe [2]), ein (geschlossenes) System, das mit seiner Umgebung -auch Reservoir genannt- interagiert. Oft kann der Einfluss des Reservoirs als zusätzliches Potential in die Schrödinger-Gleichung eingebunden werden. Dadurch zerfällt dieses in einen deterministischen und einen stochastischen Anteil $v = v_0 + v_1 \cdot \frac{dW}{dt}$. Dabei sind v_j ($j = 0, 1$) deterministische Funktionen, und W ein reellwertiger skalarer stochastischer Prozess. Meist ist W ein Wiener-Prozess. Dieser ist fast sicher nirgendwo differenzierbar, also existiert $\frac{dW}{dt}$ im klassischen Sinne nicht. Itô [15] und Stratonovich [36] haben gezeigt, dass diese Schwierigkeit durch Interpretation der stochastischen Version der Gleichung (1) als Integralgleichung beseitigt wird. Nehmen wir des Weiteren eine passende räumliche Diskretisierung vor, so resultiert ein System linearer *stochastischer Schrödinger-Gleichungen*

$$X(t) = X_0 - i \int_{t_0}^t (U + V_0(s))X(s)ds - i \int_{t_0}^t V_1(s)X(s) \circ dW(s), \quad (2)$$

wobei die hermitesche Matrix U für eine räumliche Diskretisierung des Laplace-Operators auf einem Gebiet des \mathbb{R}^d steht. Die Funktionen V_j stammen von räumlichen Diskretisierungen der Potentiale v_j ($j = 0, 1$). W repräsentiere einen Wiener-Prozess, und das Symbol \circ deutet an, dass für das auftretende stochastische Integral das Stratonovich-Integral gewählt wurde (nur diese Wahl gewährt die Normerhaltung der exakten Lösung). Allerdings kann im Allgemeinen die Lösung von (2) nicht in geschlossener Form angegeben werden. Daher bieten sich numerische Zeitintegrationsverfahren zur Approximation der exakten Lösung an. Diese Arbeit konzentriert sich auf die starke bzw. L^2 -Konvergenz stochastischer Verfahren. Darüber hinaus soll die Aufgabe darin bestehen, solche Verfahren zur Integration der Gleichung (2) zu finden und zu analysieren, die möglichst folgende Eigenschaften besitzen:

- (a) Sofern die Potentiale hermitesch sind, soll die numerische Lösung, der Eigenschaft der exakten Lösung entsprechend, die euklidische Norm des Anfangswertes erhalten.
- (b) Die Konvergenz des Verfahrens darf nicht von der Beschränktheit des Produktes aus Zeitschrittweite und der euklidischen Norm von U abhängen.
- (c) Der Zeitdiskretisierungsfehler sollte weder explizit von der Feinheit der Raumdiskretisierung abhängen, noch höhere Zeitableitungen der exakten Lösung involvieren.

- (d) Das Verfahren soll von möglichst hoher starker globaler Ordnung bzgl. der Zeitschrittweite sein.

Obige Forderungen sind hauptsächlich durch die Arbeit [16] motiviert, in der der Fehler des Strang-Splittings, die deterministische Schrödinger-Gleichung betreffend, untersucht wird. Daher ist es konsequent das stochastische θ -Splitting

$$X_{k+1} = e^{-iU(1-\theta)h} e^{-i(V_0(t_k+h\theta)h+V_1(t_k+h\theta)\Delta W_k)} e^{-iU\theta h} X_k \quad (k = 0, 1, \dots) \quad (3)$$

zu studieren (für $\theta = 1/2$ ergibt sich das Strang-Splitting). Dabei stellt X_k eine Approximation an die exakte Lösung der Gleichung (2) zum Zeitpunkt t_k dar. h ist die äquidistante Zeitschrittweite, $\Delta W_k = W(t_{k+1}) - W(t_k)$ ein stochastischer Zeitschritt und $\theta \in [0, 1]$. Offensichtlich erhält das Verfahren (3) die euklidische Norm des Anfangswertes. Es ist aber nicht klar, ob (3) den Punkten (b) und (c) genügt, und zudem diese mit der Forderung (d) vereinbar sind. Jedenfalls drängt sich hier zuerst die Frage auf: Welche starke globale Konvergenzordnung besitzt im Allgemeinen ein stochastischer Splitting Integrator, ungeachtet der Stichpunkte (b) und (c)? Zur Beantwortung werden der Einfachheit halber alle Koeffizienten in Gleichung (1) zunächst als beschränkt angenommen. Die für den beschränkten Fall verwendeten Beweistechniken unterscheiden sich nämlich grundlegend von denen, wo Fehlerabschätzungen unabhängig von der euklidischen Norm von U sind. Sowohl der beschränkte wie der unbeschränkte Fall werden in dieser Arbeit untersucht.

In Kapitel 1 wird nach einer kurzen Einführung in die Numerik stochastischer Differentialgleichungen ein fundamentales Kriterium (Theorem 1.4) über die lokal-global Ordnungsreduktion des Zeitdiskretisierungsfehlers für stochastische numerische Verfahren bewiesen. Beachte, dass dieses, im Gegensatz zu einem Theorem von Milstein [27, Theorem 1.1], eine sogenannte schwache und starke Stabilität der Verfahrensfunktionen verlangt. Grob gesprochen ist die Gemeinsamkeit durch den Anspruch, dass die Ordnung des schwachen echt größer als die Ordnung des starken lokalen Fehlers ist, gegeben. Schließlich wird in Lemma 1.6 begründet, weshalb Splitting Integratoren unter gewissen Zusatzbedingungen im Sinne des Theorems 1.4 stabil sind.

Bei der Untersuchung des lokalen Defekts eines Splitting Integrators tritt das Problem der Berechnung des Erwartungswertes von Produkten iterierter stochastischer Integrale auf. Ein Resultat hierzu wird in Lemma 2.3 diskutiert, das eine Präzisierung des Theorems 2.6.3 in [3] ist, und das auch zur Entstehung der Matlab Routinen im Anhang A beiträgt. Außerdem wird unter Ausnutzung von Shuffle-Algebra-Strukturen in Korollar 2.2 dargelegt, dass in der Regel nicht alle in einem numerischen Integrator auftretenden stochastischen Integrale benötigt werden, da sie polynomiell durch gewisse Basis-Integrale darstellbar sind. Auch die konkrete Simulation iterierter stochastischer Integrale, mit Fokussierung auf Approximation mit Hilfe der bedingten Erwartung bzgl. einer geeigneten diskreten Filtration, wird besprochen.

Die Basis des 3. Kapitels bildet das Lemma 3.3. Dieses gibt über den starken lokalen Fehler eines allgemeinen Splitting Integrators in Bezug auf lineare Stratonovich-Gleichungen mit zeitunabhängigen und beschränkten Koeffizienten Auskunft. Weiter ermöglicht es, mittels der Ergebnisse der vorangegangenen Kapitel, das Hauptresultat (Theorem 3.2), eine vollständige Charakterisierung der Ordnungsbedingungen für Splitting Integratoren inklusive der Minimierung der Anzahl benötigter Bedingungsgleichungen, zu etablieren. In Korollar 3.1 ist festgehalten, dass dieses Resultat den deterministischen Fall impliziert. Anschließend werden einige Beispiele zu Splitting Integratoren der starken globalen Ordnung 1 und 1.5 ausführlich studiert. In den Theoremen 3.3 und 3.4 wird das Theorem 3.2 auf die Situation zeitabhängiger Koeffizienten $V_j(t)$ ($j = 0, 1$) für Verfahren der Ordnung 1 und 1.5 erweitert.

Im letzten Kapitel werden als Erstes allgemeine Splitting Integratoren für die Gleichung (2) im Hinblick auf (b) und (c) behandelt. In Lemma 4.2 ist erläutert, welche Eigenschaften

ein Splitting haben muss, damit der lokale Fehler gänzlich auf stochastische Quadraturfehler zurückgeführt werden kann. Letzteres ist für die Erfüllung von (b) und (c) wichtig. Zuvor wird in einem allgemeinen Rahmen in Lemma 4.1 eine Fehlerabschätzung für stochastische Quadraturformeln vorgestellt. Diese Resultate finden Anwendung im Theorem 4.3, das die Abschätzung des starken lokalen Fehlers des θ -Splittings (3) beinhaltet. Wir diskutieren in Theorem 4.4 welche zusätzliche Bedingung ein Splitting Integrator angewandt auf die Gleichung (2) besitzen muss, so dass einerseits ein, Theorem 1.4 entsprechendes, lokal-global Ordnungsreduktionskriterium zur Verfügung steht, und andererseits die Stichpunkte (a)–(c) erfüllt sind. Damit können wir das Hauptresultat Theorem 4.5 beweisen. Dieses besagt: Unter Voraussetzung passender Kommutatorschranken genügt das θ -Splitting (3) bzgl. Gleichung (2) den Forderungen (a)–(c) und ist, unabhängig von der Wahl für θ , von starker globaler Ordnung 1.

Zwar wurden bereits allgemeine Theorien zur (globalen) Ordnung von Splitting Verfahren für den deterministischen beschränkten Fall erstellt, siehe z.B. [39], für weitere Referenzen und einen umfassenden Überblick [11, Chapter III]. Sogar in Bezug auf die deterministische Schrödinger-Gleichung werden in [37] allgemeine Fehlerabschätzungen unter Einbeziehung von (b) und (c) bewiesen. Diese basieren übrigens auf den in [16] verwendeten Techniken zur Rückführung des lokalen Fehlers des Strang-Splittings auf Quadraturfehler. Auch sind Ergebnisse, siehe z.B. [29], für den beschränkten stochastischen Fall bekannt, jedoch keine Allgemeinen. Darüber hinaus scheint es bisher keine Erkenntnisse im Zusammenhang mit der stochastischen Schrödinger-Gleichung zu geben. Bleibt noch zu erwähnen, dass das einführende Kapitel vor allem auf den Werken [3], [17], [27] und [32] fußt. Die Grundlage des 2. Kapitels besteht aus den Arbeiten [3], [9], [21] und den Büchern [17], [34].

Somit liegt der wesentliche Beitrag der vorliegenden Dissertation in der Entwicklung einer allgemeinen Ordnungstheorie von Splitting Verfahren für lineare stochastische Differentialgleichungen mit beschränkten Koeffizienten, und der Fehleruntersuchung des θ -Splittings angewandt auf die stochastische Schrödinger-Gleichung unter Berücksichtigung der Bedingungen (a)–(c).

Kapitel 1

Stochastische Differentialgleichungen und numerische Methoden

Wir beginnen dieses Kapitel mit einer kurzen Einführung in die Theorie der stochastischen Differentialgleichungen, indem wir hauptsächlich Wiener-Prozesse, das Itô- und Stratonovich-Integral näher bringen. Es wird die stochastische Taylor-Entwicklung vorgestellt, für die hierarchische Mengen und der Begriff des iterierten stochastischen Integrals benötigt werden. Nach Erläuterung der schwachen und starken Konvergenz werden verschiedene Typen numerischer Verfahren präsentiert. Hierbei werden exponentielle Integratoren etwas ausführlicher besprochen. Außerdem wird ein Kriterium von Milstein, die starke Konvergenz betreffend, in modifizierter Form diskutiert. Dieses gibt über die lokal-global Ordnungsreduktion eines numerischen Verfahrens Auskunft und ist für das Herleiten der Hauptresultate des 3. Kapitels von zentraler Bedeutung.

1.1 Wiener-Prozesse und stochastische Differentialgleichungen

Als Ausgangspunkt diene uns ein System von Differenzgleichungen auf $[t_0, T] \times \mathbb{C}^d$, das einen Rauschterm (stochastischen Term) enthalte. Dieses könnte bzgl. einer Unterteilung $t_0 < t_1 < \dots < t_n = T$ wie folgt für $k = 0, 1, \dots$ aussehen:

$$\Delta X_k = v_0(t_k, X(t_k))\Delta t_k + v_1(t_k, X(t_k))\Delta W_k, \quad X(t_0) = X_0, \quad (1.1)$$

wobei $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, $\Delta W_k = W(t_{k+1}) - W(t_k)$, entsprechend $\Delta X_k = X(t_{k+1}) - X(t_k)$ und X_0 eine gegebene \mathbb{C}^d -wertige Zufallsvariable auf dem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathfrak{S}, P)$ sei. Zudem seien die $v_j : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ ($j = 0, 1$) geeignete Funktionen, und das Rauschen werde durch einen skalaren reellwertigen Wiener-Prozess W ins Spiel gebracht. Dieser Prozess ordnet jedem Wahrscheinlichkeitsexperiment $\omega \in \Omega$ zu einem Zeitpunkt t eine reelle Zahl zu ($(\omega, t) \mapsto W(\omega, t) \in \mathbb{R}$). Dabei wird für festes $\omega \in \Omega$ die Abbildung $t \mapsto W(\omega, t) =: W(t)$ als Pfad bezeichnet.

Versuchten wir nun ähnlich wie im klassischen (deterministischen) Fall zu einer kontinuierlichen Version der Gleichung (1.1) zu gelangen, indem wir diese durch Δt_k dividierten und anschließend $\max_k \Delta t_k \rightarrow 0$ zuließen, so erhielten wir die stochastische Differentialgleichung

$$\frac{dX}{dt}(t) = v_0(t, X(t)) + v_1(t, X(t)) \cdot \frac{dW}{dt}(t), \quad X(t_0) = X_0. \quad (1.2)$$

Allerdings ist ein Wiener-Prozess mit Wahrscheinlichkeit 1 (m.W.1) nirgendwo differenzierbar (siehe [17, Chapter 2]). Tatsächlich existiert $\frac{dW}{dt}$ lediglich im distributionellen Sinne und wird

dann *Brownsche Geschwindigkeit* oder *weißes Rauschen* genannt. Wie auch immer kann die Gleichung (1.2) nicht vom klassischen Standpunkt aus betrachtet werden. Daher stellen wir die Frage: In welchem Sinne und unter welchen Voraussetzungen an v_0 , v_1 und X_0 existiert zu jedem Wahrscheinlichkeitsexperiment ein Pfad $t \mapsto X(t)$, der die Gleichung (1.2) löst? Doch bevor wir nach Antworten suchen, beleuchten wir die definierenden Eigenschaften eines Wiener-Prozesses (siehe z.B. [17, Chapter 1.8], [32, Chapter 2]).

Definition 1.1. *Auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathfrak{G}, P)$ mit passendem Wahrscheinlichkeitsmaß P ist ein Wiener-Prozess $W = \{W(t) : t \geq 0\}$ wie folgt erklärt:*

- (a) *W ist ein Gauß-Prozess und somit insbesondere ein normalverteilter Prozess,*
- (b) *die Inkremente $\Delta W_k = W(t_{k+1}) - W(t_k)$ ($k = 0, \dots, n-1$) sind als Zufallsvariablen betrachtet für jede Unterteilung $t_0 < \dots < t_n \leq T$ unabhängig,*
- (c) *$W(0) = 0$ m.W.1,*
- (d) *der Erwartungswert von W verschwindet zu allen Zeitpunkten $t \geq 0$, d.h.*

$$E(W(t)) = 0 \quad \text{für alle } t \geq 0,$$

- (e) *für $t \geq 0$ ist die Varianz von W durch*

$$\text{Var}(W(t)) = E(W(t)^2) - (E(W(t)))^2 = E(W(t)^2) = t \quad (1.3)$$

gegeben.

Weiter, für $t \geq 0$ besitzt $W(t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x) = \exp(-x^2/2t)/\sqrt{2\pi t}$ ($x \in \mathbb{R}$), somit ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung $F(x) = P[W(t) \leq x]$ für $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$ durch

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \int_{-\infty}^x \exp(-y^2/2t) dy$$

gegeben. Folglich sind die Momente von $W(t)$ durch

$$E(W(t)^m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \int_{\mathbb{R}} x^m \exp(-x^2/2t) dx \quad (1.4)$$

für $m \in \mathbb{N}$ bestimmt.

Wir werden im Folgenden oft mit der sogenannten bedingten Erwartung einer Zufallsvariable arbeiten:

Definition 1.2. *Für eine komplexe Zufallsvariable Z auf $(\Omega, \mathfrak{G}, P)$ mit $E|Z| < \infty$ und eine σ -Algebra $\mathfrak{H} \subset \mathfrak{G}$ ist die Zufallsvariable $E(Z|\mathfrak{H})$, die bedingte Erwartung von Z unter \mathfrak{H} genannt, durch die Bedingungen $E(Z|\mathfrak{H})$ ist \mathfrak{H} -messbar und $\int_H E(Z|\mathfrak{H}) dP = \int_H Z dP$ für alle $H \in \mathfrak{H}$ eindeutig bestimmt.*

Es gelten folgende nützliche Rechenregeln:

Lemma 1.1. *Sind Y, Z komplexe Zufallsvariablen auf $(\Omega, \mathfrak{G}, P)$ mit $E|Y|, E|Z| < \infty$, $\mathfrak{H} \subset \mathfrak{G}$ und Z \mathfrak{H} -messbar, so gilt m.W.1*

$$E(Y) = E(E(Y|\mathfrak{H})), |E(Y|\mathfrak{H})| \leq (E(|Y|^2|\mathfrak{H}))^{1/2}, E(Z|\mathfrak{H}) = Z \text{ und } E(YZ|\mathfrak{H}) = E(Y|\mathfrak{H})Z.$$

Ist zudem Y unabhängig von \mathfrak{H} , d.h. die von Y erzeugte σ -Algebra $\{Y^{-1}(B) : B \subset \mathbb{C} \text{ offen}\}$ und \mathfrak{H} sind unabhängig, so ist $E(Y) = E(Y|\mathfrak{H})$.

Beweis. Siehe [32, Theorem B.2]. □

Wir erinnern, dass die bedingte Erwartung in die Definition eines Martingals einfließt. Dazu wird auch der Begriff der Filtration benötigt. Dabei ist $\mathcal{F} = \{\mathcal{F}_t \subset \mathfrak{G} : t \geq 0\}$ eine Filtration, wenn für $s < t$ stets $\mathcal{F}_s \subset \mathcal{F}_t$ ist. Z.B., die von den Mengen $\{W(s) : s \leq t\}$ für $t \geq 0$ erzeugten σ -Algebren bilden eine Filtration. Wir erläutern jetzt die Eigenschaften eines Martingals stellvertretend für einen Wiener-Prozess.

Bemerkung 1.1. *Ein Wiener-Prozess ist ein Martingal, dies bedeutet: Sei $0 \leq s \leq t$ und \mathcal{F} die von W erzeugte Filtration, dann ist $W(s)$ nach Konstruktion \mathcal{F}_s -messbar, nach (1.3) $E|W(s)| \leq s^{1/2} < \infty$ und aufgrund von Definition 1.1 (b), (c) gilt*

$$E_s(W(t)) := E(W(t)|\mathcal{F}_s) = W(s) \quad \text{m.W.1} \quad (1.5)$$

(siehe hierzu [32, Chapter 3]). Der Zusatz m.W.1 wird in zukünftigen Rechnungen meist weglassen. Auch wird für $t_k \in [t_0, T]$ häufig abkürzend E_k für E_{t_k} Verwendung finden.

Übrigens folgt aus (1.3), (1.5) und Lemma 1.1 für die Kovarianz von W für $s < t$:

$$E(W(s)W(t)) = E(E_s(W(s)W(t))) = E(W(s)E_s(W(t))) = E(W(s)^2) = s,$$

und folglich $E((W(t) - W(s))^2) = E(W(t)^2) - E(W(s)^2) = t - s$. Aus dem Lemma von Doob-Dynkin (siehe [32, Lemma 2.1]) und der Unabhängigkeit der Inkremente eines Wiener-Prozesses folgt, dass auch die Prozesse $(W(t) - W(s))^m$ ($t \geq s$, $m \in \mathbb{N}$) unabhängig von \mathcal{F}_s sind. Mittels Lemma 1.1 folgt sogar

$$E((W(t) - W(s))^m) = E_s((W(t) - W(s))^m).$$

Hieraus erhalten wir, zusammen mit der Formel (1.4) für die Momente, die Identität

$$E((W(t) - W(s))^4) = 3(t - s)^2.$$

Aus Letzterem folgt nach einem Theorem über die Stetigkeit von Pfaden stochastischer Prozesse von Kolmogorov (siehe [32, Theorem 2.6]), dass die Pfade eines Wiener-Prozesses fast sicher stetig, aber wie bereits erwähnt nirgendwo differenzierbar sind. Auch nicht bzgl. der L^2 -Norm, denn für $t, h \geq 0$ ist $E((W(t+h) - W(t))/h)^2 = 1/h \xrightarrow{h \rightarrow 0} \infty$.

Kommen wir nun auf das Problem zurück, in welchem Sinne eine stochastische Differentialgleichung wie (1.2) zu interpretieren ist? Das Vermeiden der Differentiation von W könnte, z.B. durch den Versuch diese als Integralgleichung zu verstehen erreicht werden. Tatsächlich können bzgl. W verschiedene Integralbegriffe eingeführt werden. Wir stellen hier die zwei meist Gebräuchlichen vor, nämlich das Itô- bzw. das Stratonovich-Integral (siehe [15] bzw. [36]). Diese gehören wiederum zur Klasse der sogenannten (λ) -Integrale (siehe [17, Chapter 3]), die über den folgenden L^2 -Limes definiert werden: Betrachte für Folgen feiner werdender Verteilungen $t_0 < t_1 < \dots < t_N = t$

$$I_\lambda[Y(\cdot)]_{t_0, t} := \int_{t_0}^t Y(s) d_\lambda W(s) := \lim_{N \rightarrow \infty} L^2 \sum_{n=0}^{N-1} (\lambda Y(t_n) + (1 - \lambda) Y(t_{n+1})) \Delta W_n, \quad (1.6)$$

d.h.,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} E \left\| I_\lambda[Y(\cdot)]_{t_0, t} - \sum_{n=0}^{N-1} (\lambda Y(t_n) + (1 - \lambda) Y(t_{n+1})) \Delta W_n \right\|^2 = 0,$$

wobei $\|\cdot\|$ für die gewöhnliche euklidische Norm steht, $Y \in L^2$ (soll heißen $\int_{t_0}^t E\|Y(s)\|^2 ds < \infty$) ein messbarer, \mathcal{F} -adaptierter Prozess und $\lambda \in [0, 1]$ ist. Für $\lambda = 1$ ergibt sich das Itô-Integral, das als

$$I_1[Y(\cdot)]_{t_0,t} = \int_{t_0}^t Y(s) dW(s)$$

notiert wird, und für $\lambda = 1/2$ erhalten wir das Stratonovich-Integral

$$I_{1/2}[Y(\cdot)]_{t_0,t} = \int_{t_0}^t Y(s) \circ dW(s),$$

wobei in Zukunft das Symbol \circ ein Stratonovich-Integral anzeigt. Die Stetigkeit der Pfade des Wiener-Prozesses wird auf die Prozesse $I_1[Y(\cdot)]_{t_0,t}$ und $I_{1/2}[Y(\cdot)]_{t_0,t}$ m.W.1 vererbt. Dieser Integralbegriff ermöglicht eine allgemeinere Version der Gleichung (1.2) wie folgt zu interpretieren (siehe dazu auch [32, Chapter 3] mit dem Unterschied: \mathbb{R}^d statt \mathbb{C}^d):

Definition 1.3. Für Funktionen $v_j : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ ($j = 0, \dots, q$) definiert

$$dX(t) = v_0(t, X(t))dt + \sum_{j=1}^q v_j(t, X(t))dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0 \quad (1.7)$$

eine Itô-Gleichung und

$$dX(t) = v_0(t, X(t))dt + \sum_{j=1}^q v_j(t, X(t)) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0 \quad (1.8)$$

eine Stratonovich-Gleichung. Dabei wird in (1.7) der erste Summand als Driftterm und die restlichen Summanden als Diffusionsterme bezeichnet. Die W^j ($j = 1, \dots, q$) stehen für unabhängige Wiener-Prozesse. Zudem stehen die Gleichungen (1.7), (1.8) für Abkürzungen der Integralgleichungen

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0 + \int_{t_0}^t v_0(s, X(s))ds + \sum_{j=1}^q \int_{t_0}^t v_j(s, X(s))dW^j(s), \\ X(t) &= X_0 + \int_{t_0}^t v_0(s, X(s))ds + \sum_{j=1}^q \int_{t_0}^t v_j(s, X(s)) \circ dW^j(s). \end{aligned}$$

Unter folgenden Voraussetzungen an die Funktionen v_j besitzt die Gleichung (1.7) eine sogenannte *starke Lösung*:

Theorem 1.1. Die in Gleichung (1.7) auftretenden Funktionen v_j mögen einem globalen linearen Wachstumsgesetz, d.h., es existiert eine Konstante K_1 , so dass

$$\sum_{j=0}^q \|v_j(t, x)\| \leq K_1(1 + \|x\|), \quad \text{für } (t, x) \in [t_0, T] \times \mathbb{C}^d,$$

und einer globalen Lipschitz-Bedingung, d.h., es existiert eine Konstante K_2 , so dass

$$\sum_{j=0}^q \|v_j(t, x) - v_j(t, y)\| \leq K_2\|x - y\|, \quad \text{für } (t, x), (t, y) \in [t_0, T] \times \mathbb{C}^d$$

genügen. Außerdem sei der Anfangswert X_0 eine von der Filtration \mathcal{F} (die von den W^j ($j = 1, \dots, q$) erzeugte) unabhängige Zufallsvariable mit $E\|X_0\|^2 < \infty$. Dann besitzt die Gleichung (1.7) eine eindeutige t -stetige, messbare, \mathcal{F} -adaptierte Lösung $X = \{X(t) : t_0 \leq t \leq T\}$ mit $\int_{t_0}^T E\|X(s)\|^2 ds < \infty$.

Beweis. Der Beweis von Theorem 5.5 in [32] lässt sich identisch für den \mathbb{C}^d -Fall führen. \square

Weiter werden wir gelegentlich die starke Lösung einer Itô-Gleichung auch Itô-Prozess nennen.

Bemerkung 1.2. Für einen \mathcal{F} -adaptierten Prozess X , d.h. für $t \geq 0$ ist $X(t)$ \mathcal{F}_t -messbar, gilt übrigens: Für $s \leq t$ ist $E(X(s)|\mathcal{F}_t) = X(s)$ m.W.1. Diese Relation ist nicht mit (1.5) zu verwechseln (s und t sind vertauscht).

Da später in erster Linie Stratonovich-Gleichungen betrachtet werden, benötigen wir folgende Formel, mit Hilfe derer Itô- in Stratonovich-Integrale und umgekehrt überführt werden können. Dafür setzen wir die involvierten Funktionen als holomorph voraus, da sonst, wie wir noch sehen werden, die Formel komplizierter wird. Außerdem sind in den folgenden Problemstellungen, bis auf eine Ausnahme in Kapitel 4, die Integranden stets holomorph.

Lemma 1.2. Ist eine Funktion $v : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$ bzgl. der zweiten Komponente holomorph und der Prozess X eine (starke) Lösung von (1.7) bzw. (1.8) so gilt für $j = 1, \dots, q$ die folgende Umrechnungsformel:

$$\int_{t_0}^t v(s, X(s)) d_\lambda W^j(s) = \int_{t_0}^t v(s, X(s)) dW^j(s) + (1 - \lambda) \int_{t_0}^t \nabla_x v(s, X(s)) v_j(s, X(s)) ds. \quad (1.9)$$

Dabei steht $\nabla_x v$ für die Jacobi-Matrix von v bzgl. der zweiten Komponente. Insbesondere gilt: Ist v bzgl. x konstant, so sind Itô- und Stratonovich-Integral identisch.

Beweis. Zur Erklärung des Korrektursummanden in (1.9), betrachte zur Unterteilung

$$t_0 < t_1 < \dots < t_N = t,$$

zunächst (1.6) und die Taylor-Entwicklung erster Ordnung von $v(t_{n+1}, X(t_{n+1}))$ um $(t_n, X(t_n))$ ($v := v(t_n, X(t_n))$, $v_j := v_j(t_n, X(t_n))$, $\Delta X_n = X(t_{n+1}) - X(t_n)$):

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{N-1} (\lambda v(t_n, X(t_n)) + (1 - \lambda)v(t_{n+1}, X(t_{n+1}))) \Delta W_n^j \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} v \Delta W_n^j + \sum_{n=0}^{N-1} (1 - \lambda) \frac{\partial v}{\partial t} \Delta t_n \Delta W_n^j + \sum_{n=0}^{N-1} (1 - \lambda) (\nabla_x v) \Delta X_n \Delta W_n^j + \sum_{n=0}^{N-1} O(\Delta X_n^2 \Delta W_n^j) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} v \Delta W_n^j + (1 - \lambda) \sum_{n=0}^{N-1} (\nabla_x v) v_j (\Delta W_n^j)^2 \\ &+ \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^q O(\Delta t_n^2 + \Delta t_n \Delta W_n^j + (\Delta W_n^j)^3 + \Delta W_n^i \Delta W_n^j). \end{aligned}$$

Der Rest folgt wegen

$$\begin{aligned}
E \left(\sum_{n=0}^{N-1} ((\Delta W_n^j)^2 - \Delta t_n) \right)^2 &= \sum_{0 \leq n, m \leq N-1} E \left(((\Delta W_n^j)^2 - \Delta t_n) ((\Delta W_m^j)^2 - \Delta t_m) \right) \\
&= \sum_{n=0}^{N-1} E \left((\Delta W_n^j)^2 - \Delta t_n \right)^2 = \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n^2 \\
&\leq (t - t_0) \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta t_n \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \\
E \left(\sum_{n=0}^{N-1} \Delta W_n^j \Delta t_n \right)^2 &= \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n^3 \leq (t - t_0)^2 \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta t_n \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \\
E \left(\sum_{n=0}^{N-1} \Delta W_n^i \Delta W_n^j \right)^2 &= \sum_{0 \leq n, m \leq N-1} E \left(\Delta W_n^i \Delta W_n^j \Delta W_m^i \Delta W_m^j \right) \\
&= \sum_{n=0}^{N-1} E \left(\Delta W_n^i \Delta W_n^j \right)^2 = \sum_{n=0}^{N-1} E \left(\Delta W_n^i \right)^2 E \left(\Delta W_n^j \right)^2 \\
&= \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t_n^2 \leq (t - t_0) \max_{0 \leq n \leq N-1} \Delta t_n \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0
\end{aligned}$$

für $j \neq i$, wobei -ohne Einschränkung- die Integranden weggelassen wurden. \square

Letztere Rechnungen werden in der Literatur oft durch die formale Schreibweise $dt^2 = 0 = dW^j(t)dt$ und $dW^j(t)dW^i(t) = \delta_{ij}dt$ ($\delta_{ij} =$ Kroneckersche Deltafunktion) angedeutet (siehe [32, Theorem 4.2]). Ein einfaches wichtiges Beispiel zu Lemma 1.2 ist:

Beispiel 1.1. Die Funktion $v(t, x) = V(t)x$ mit $V : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}$ ist offenbar bzgl. der zweiten Komponente holomorph und $\nabla_x v(t, x) = V(t)$. Also entspricht (1.9) für $\lambda = 1/2$:

$$\int_{t_0}^t V(s)X(s) \circ dW^j(s) = \int_{t_0}^t V(s)X(s)dW^j(s) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t V(s)v_j(s, X(s))ds.$$

Bemerkung 1.3. Aus Lemma 1.2 folgt zunächst, dass die Stratonovich-Gleichung (1.8) zu einer Itô-Gleichung mit modifiziertem Driftterm äquivalent ist, genauer

$$\begin{aligned}
X(t) &= X_0 + \int_{t_0}^t \left(v_0(s, X(s)) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^q (\nabla_x v_j)(s, X(s))v_j(s, X(s)) \right) ds \\
&\quad + \sum_{j=1}^q \int_{t_0}^t v_j(s, X(s))dW^j(s),
\end{aligned}$$

sofern die Funktionen v_j ($j = 1, \dots, q$) holomorph sind. Darüber hinaus folgt dann aus Theorem 1.1, dass die Gleichung (1.8) eine eindeutige starke Lösung besitzt, wenn zusätzlich die $(\nabla_x v_j)v_j$ für $j = 1, \dots, q$ ein globales lineares Wachstumsgesetz und eine globale Lipschitz-Bedingung erfüllen. Zusätzlich mit Beispiel 1.1 folgt, dass auch die lineare Stratonovich-Gleichung

$$dX(t) = X_0 + \sum_{j=0}^q \int_{t_0}^t V_j(s)X(s) \circ dW^j(s)$$

mit stetigen Koeffizienten $V_j : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}$ ($j = 0, \dots, q$) eine eindeutige starke Lösung besitzt.

Wir bevorzugen das Itô- bzw. Stratonovich-Integral aus folgenden Gründen: Einerseits ist das Itô-Integral das einzige (λ) -Integral, das die Martingaleigenschaft eines Wiener-Prozesses W erbt. Speziell gilt für einen Itô-Prozess X und eine Funktion v mit $v(\cdot, X(\cdot)) \in L^2$:

$$E_{t_0} \left(\int_{t_0}^t v(s, X(s)) dW(s) \right) = 0.$$

Außerdem ist für Funktionen u, v mit $u(\cdot, X(\cdot)), v(\cdot, X(\cdot)) \in L^2$:

$$E_{t_0} \left(\int_{t_0}^t u^*(s_1, X(s_1)) dW(s_1) \cdot \int_{t_0}^t v(s_2, X(s_2)) dW(s_2) \right) = \int_{t_0}^t E_{t_0}(u^*(s, X(s))v(s, X(s))) ds,$$

wobei $u^* = \bar{u}^T$. Für $u = v$, also

$$E_{t_0} \left\| \int_{t_0}^t v(s, X(s)) dW(s) \right\|^2 = \int_{t_0}^t E_{t_0} \|v(s, X(s))\|^2 ds, \quad (1.10)$$

ist diese Formel als Itô-Isometrie bekannt. Wir bemerken, dass in der Gleichung (1.10) im Allgemeinen $dW(s)$ nicht durch ds (ein Lebesgue-Integral) ersetzt werden kann. Stattdessen gilt stets aufgrund der Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$E_{t_0} \left\| \int_{t_0}^t v(s, X(s)) ds \right\|^2 \leq (t - t_0) \int_{t_0}^t E_{t_0} \|v(s, X(s))\|^2 ds. \quad (1.11)$$

In Zukunft wird häufig eine diskrete Version der Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.11) bzw. der Itô-Isometrie (1.10) benötigt:

Lemma 1.3. *Es sei eine äquidistante Unterteilung $t_0 < \dots < t_{n-1}$ des Intervalls $[t_0, t_{n-1}]$ mit $h = (t_{n-1} - t_0)/(n - 1)$ gegeben. Weiter seien für $k = 0, \dots, n - 1$ Funktionen $\varphi_k : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$, Zufallsvariablen $Z_k \in \mathbb{C}^d$ gegeben, wobei Z_k \mathcal{F}_{t_k} -messbar, φ_k $\mathcal{F}_{t_{k+1}}$ -messbar und*

$$E_k(\|\varphi_k(Z_k)\|^2) \leq K \|Z_k\|^2 \quad (1.12)$$

für eine von k unabhängige Konstante K ist.

(a) *Es gilt folgende Ungleichung:*

$$E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k(Z_k) \right\|^2 \leq nK \sum_{k=0}^{n-1} E \|Z_k\|^2. \quad (1.13)$$

Für $\varphi_k = h \cdot Id$ für $k = 0, \dots, n - 1$ ist $K = h^2$ und (1.13) wird diskrete Cauchy-Schwarz-Ungleichung genannt.

(b) *Aus $E_k(\varphi_k(Z_k)) = 0$ für $k = 0, \dots, n - 1$ resultiert die diskrete Itô-Ungleichung*

$$E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k(Z_k) \right\|^2 = \sum_{k=0}^{n-1} E \|\varphi_k(Z_k)\|^2 \leq K \sum_{k=0}^{n-1} E \|Z_k\|^2. \quad (1.14)$$

Für $\varphi_k = \Delta W_k^j \cdot Id$ für $k = 0, \dots, n - 1$, $j = 1, \dots, q$ ist $K = h$ und in (1.14) wird Gleichheit angenommen. Daher wird (1.14) in diesem Fall als diskrete Itô-Isometrie deklariert.

Beweis. Zunächst folgt aus der Dreiecksungleichung:

$$E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k(Z_k) \right\|^2 \leq E \left(\sum_{k=0}^{n-1} \|\varphi_k(Z_k)\| \right)^2 = E (e^T \varphi)^2,$$

wobei $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$ und $\varphi = (\|\varphi_0(Z_0)\|, \dots, \|\varphi_{n-1}(Z_{n-1})\|)^T$ ist. Zunächst ergibt sich aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung bzgl. des euklidischen Skalarproduktes über \mathbb{R}^n :

$$E(e^T \varphi)^2 \leq E(\|e\| \|\varphi\|)^2 = nE\|\varphi\|^2.$$

Schließlich folgt aus der \mathcal{F}_{t_k} -Messbarkeit der Z_k für $k = 0, \dots, n-1$ und (1.12):

$$E\|\varphi_k(Z_k)\|^2 = E(E_k(\|\varphi_k(Z_k)\|^2)) \leq KE\|Z_k\|^2,$$

also Aussage (a).

Zur Behauptung (b): Aus der \mathcal{F}_{t_k} -Messbarkeit von Z_k , der $\mathcal{F}_{t_{k+1}}$ -Messbarkeit von φ_k , (1.12) und der Zusatzbedingung $E_k(\varphi_k(Z_k)) = 0$ für $k = 0, \dots, n-1$ resultiert:

$$\begin{aligned} E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \varphi_k(Z_k) \right\|^2 &= \sum_{k=0}^{n-1} E\|\varphi_k(Z_k)\|^2 + 2 \sum_{0 \leq l < k \leq n-1} \Re(E((\varphi_k(Z_k))^* \varphi_l(Z_l))) \\ &\leq K \sum_{k=0}^{n-1} E\|Z_k\|^2 + 2 \sum_{0 \leq l < k \leq n-1} \Re(E((E_k(\varphi_k(Z_k)))^* \varphi_l(Z_l))) \\ &= K \sum_{k=0}^{n-1} E\|Z_k\|^2. \end{aligned}$$

Für die diskrete Itô-Isometrie rechnen wir mittels (1.3) und (1.5)

$$E\|\Delta W_k^j Z_k\|^2 = E\left(|\Delta W_k^j|^2 \|Z_k\|^2\right) = E\left(E_k\left((\Delta W_k^j)^2\right) \|Z_k\|^2\right) = hE\|Z_k\|^2$$

aus, somit wird oben Gleichheit angenommen. \square

Gelegentlich benötigen wir auch die folgende wohlbekannte kontinuierliche bzw. diskrete Version des Gronwall-Lemmas:

Lemma 1.4. *Seien K_1, K_2 positive reelle Konstanten.*

(a) *Für eine stetige, nicht negative Funktion $z : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ gelte für alle $t \in [t_0, T]$*

$$z(t) \leq K_1 + K_2 \int_{t_0}^t z(s) ds.$$

Dann gilt auch

$$z(t) \leq K_1 \exp(K_2(t - t_0)).$$

(b) *Für $k = 0, \dots, n$ seien z_k nicht negative reelle Zahlen und $t_0 < \dots < t_n = T$ eine äquidistante Unterteilung mit Schrittweite $h = (T - t_0)/n$. Für ein $n_0 \geq 0$ und alle $n \geq n_0 + 1$ gelte*

$$z_n \leq K_1 + K_2 h \sum_{k=n_0}^{n-1} z_k.$$

Es folgt:

$$z_n \leq K_1(1 + hK_2)^{n-n_0} \leq K_1 \exp(K_2(t_n - t_{n_0})).$$

Andererseits ist der aus dem Stratonovich-Integral hervorgehende Differentialkalkül der Einzige, der den klassischen -deterministischen- Kalkül erhält. Definiere hierzu für \mathbb{C}^d -wertige holomorphe Funktionen v, f_1, \dots, f_k den elementaren Differentialoperator (eine multilineare Abbildung für festes v):

$$\nabla_x^k [f_1, \dots, f_k](v) = (\nabla_x^k v)[f_1, \dots, f_k] = v^{(k)}[f_1, \dots, f_k]. \quad (1.15)$$

Ein Sonderfall ergibt sich für $k = 1$: $\nabla_x [f_1](v) = v'[f_1] = v'f_1$. Hier handelt es sich um eine sogenannte *Lie-Ableitung*, die als Matrix-Vektor-Produkt geschrieben werden kann.

Es folgt aus den Überlegungen zu Lemma 1.2 für Itô-Prozesse die *Itô-Kettenregel* und ihr Zusammenhang mit der (λ) -*Kettenregel*:

$$\begin{aligned} dv(t, X(t)) &= \frac{\partial v}{\partial t}(t, X(t))dt + (\nabla_x v)(t, X(t))dX(t) + \frac{1}{2}(\nabla_x^2 v)(t, X(t))[dX(t), dX(t)] \\ &= \frac{\partial v}{\partial t}(t, X(t))dt + (\nabla_x v)(t, X(t))d_\lambda X(t) + \left(\lambda - \frac{1}{2}\right) (\nabla_x^2 v)(t, X(t))[d_\lambda X(t), d_\lambda X(t)], \end{aligned} \quad (1.16)$$

falls die Funktion v holomorph ist, und wobei

$$d_\lambda X(t) := \left(v_0(t, X(t)) - (1 - \lambda) \sum_{j=1}^q (\nabla_x v_j)(t, X(t))v_j(t, X(t)) \right) dt + \sum_{j=1}^q v_j(t, X(t))d_\lambda W^j(t),$$

$$\begin{aligned} (\nabla_x^2 v)(t, X(t))[dX(t), dX(t)] &= \sum_{j=1}^q (\nabla_x^2 v)(t, X(t))[v_j(t, X(t)), v_j(t, X(t))]dt \\ &= (\nabla_x^2 v)(t, X(t))[d_\lambda X(t), d_\lambda X(t)]. \end{aligned}$$

Also liegt nur für $\lambda = 1/2$ die gewohnte (Stratonovich-) Kettenregel

$$dv(t, X(t)) = \frac{\partial v}{\partial t}(t, X(t))dt + (\nabla_x v)(t, X(t)) \circ dX(t) \quad (1.17)$$

vor. Z.B., können die Größen $E(W(t)^m)$ für $m = 2, 3, \dots$ für einen Wiener-Prozess W leicht mittels der Itô-Kettenregel (1.16) ($\lambda = 1/2$) berechnet werden. Denn setzen wir in (1.16) $dX(t) := v_1(t)dW(t)$ ($d = 1$) für eine stetige, nicht zufällige Funktion v_1 , $t_0 = 0$ und $v(t, x) = x^m$ für ein $m \geq 2$, so ergibt sich

$$d(X(t)^m) = mv_1(t)X(t)^{m-1}dW(t) + \frac{1}{2}m(m-1)v_1^2(t)X(t)^{m-2}dt,$$

oder wegen $X(0) = v_1(0)W(0) = 0$ dazu gleichwertig

$$X(t)^m = m \int_0^t v_1(s)X(s)^{m-1}dW(s) + \frac{1}{2}m(m-1) \int_0^t v_1(s)^2 X(s)^{m-2}ds.$$

Also resultiert aufgrund (1.10) die Rekursionsformel

$$E(X(t)^m) = \frac{1}{2}m(m-1) \int_0^t v_1^2(s)E(X(s)^{m-2})ds.$$

Oder nach sukzessiver Anwendung und Berücksichtigung von $E(X(t)) = 0$

$$E(X(t)^m) = \begin{cases} \frac{m!}{2^{m/2}} \int_0^t v_1^2(s_1) \int_0^{s_1} v_1^2(s_2) \cdots \int_0^{s_{m/2-1}} v_1^2(s_{m/2}) ds_{m/2} \cdots ds_2 ds_1, & \text{falls } m \text{ gerade,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Z.B., für $v_1 \equiv 1$, also $X = W$ leiten wir daraus die Identität

$$E(W(t)^m) = \begin{cases} \frac{m!}{2^{m/2}(m/2)!} t^{m/2}, & \text{falls } m \text{ gerade,} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.18)$$

her. Beachte, dass wir diese Formel auch durch wiederholte partielle Integration von (1.4) hätten erhalten können. Allgemeiner, für $k \in \mathbb{N}$, $v_1(t) = t^k/k!$, also

$$X(t) = \int_0^t \int_0^{s_1} \cdots \int_0^{s_k} ds_{k+1} \cdots ds_2 dW(s_1)$$

ergibt sich

$$E(X(t)^m) = \begin{cases} \frac{m!}{(k!)^m (4k+2)^{m/2} (m/2)!} t^{m(2k+1)/2}, & \text{falls } m \text{ gerade,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Mit anderen Worten: Wir haben eine Formel zur Berechnung aller Momente für eine spezielle Klasse iterierter Stratonovich-Integrale hergeleitet. Derartige Berechnungen werden in Kapitel 2 in einem allgemeineren Rahmen präsentiert.

Ein weiteres interessantes Beispiel erhalten wir über den Itô-Prozess

$$X(t) = \sum_{j=0}^q \int_0^t v_j(s) dW^j(s).$$

Dieser ist nämlich für $d = 1$, $t_0 = 0$, $X_0 = 0$ und $v_j(t, x) = v_j(t)$ für stetige, nicht zufällige Funktionen v_j ($j = 0, \dots, q$) die starke Lösung der Stratonovich-Gleichung (1.8). Denn setzen wir nun $v(t, x) = v(x) = \exp(x)Y_0$ für eine komplex-wertige Zufallsvariable Y_0 mit beschränkter Varianz, so resultiert aus (1.17)

$$dv(t, X(t)) = (\nabla_x v)(t, X(t)) \circ dX(t) = v(t, X(t)) \circ dX(t) = \sum_{j=0}^q v_j(t) v(t, X(t)) \circ dW^j(t).$$

Also ist der Prozess

$$v(t, X(t)) = \exp\left(\sum_{j=0}^q \int_0^t v_j(s) dW^j(s)\right) Y_0$$

die starke Lösung von (1.8) für $d = 1$, $t_0 = 0$, $X_0 = Y_0$ und $v_j(t, x) = v_j(t)x$ ($j = 0, \dots, q$). Betrachten wir den Fall $d \geq 1$ und werden die v_j durch paarweise kommutierende Matrizen $V_j(t) \in \mathbb{C}^{d \times d}$ substituiert, so kann durch ähnliche Vorgehensweise gezeigt werden, dass der Prozess

$$X(t) = \exp\left(\sum_{j=0}^q \int_0^t V_j(s) dW^j(s)\right) X_0$$

die starke Lösung von (1.8) für $t_0 = 0$ und $v_j(t, x) = V_j(t)x$ bzw. von

$$X(t) = X_0 + \sum_{j=0}^q \int_0^t V_j(s) X(s) \circ dW^j(s)$$

ist.

Bemerkung 1.4. Die Itô-Kettenregel für holomorphe Funktionen ist ein Spezialfall der komplexen Itô-Formel (siehe dazu [38]):

$$\begin{aligned} dv(t, X(t)) &= \frac{\partial v}{\partial t}(t, X(t))dt + \nabla_x v(t, X(t))dX(t) + \nabla_{\bar{x}} v(t, X(t))d\bar{X}(t) \\ &+ \frac{1}{2}\nabla_x^2 v(t, X(t))[dX(t), dX(t)] + \nabla_x \nabla_{\bar{x}} v(t, X(t))[d\bar{X}(t), dX(t)] \\ &+ \frac{1}{2}\nabla_{\bar{x}}^2 v(t, X(t))[d\bar{X}(t), d\bar{X}(t)]. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Z.B. folgt hieraus für einen komplexen Itô-Prozess und $v(t, x) = \|x\|^2 = x^*x$:

$$d(\|X(t)\|^2) = d(X(t)^*)X(t) + X(t)^*dX(t) + d(X(t)^*)dX(t).$$

Auf die Formel für partielle Integration wird noch in Kapitel 2 eingegangen.

1.2 Iterierte stochastische Integrale und stochastische Taylor-Entwicklung

Um die stochastische Taylor-Entwicklung verstehen zu können, sollten wir zunächst gewisse hierarchische Mengen, deren Restmengen und spezielle Differentialoperatoren vorstellen. Zudem benötigen wir iterierte stochastische Integrale, die auch eine wichtige Rolle im 2. Kapitel spielen. Wir fahren mit der Einführung einiger Notationen fort. Dabei orientieren wir uns hauptsächlich an Kloeden & Platen [17, Chapter 5]. Für eine nicht negative ganze Zahl q sei

$$\mathcal{M}_q = \{\alpha \in \{0, \dots, q\}^l : l \in \mathbb{N} \cup \{0\}\}$$

eine Menge von Multiindizes, wobei wir (\emptyset) für den *leeren Index* ($l = 0$) schreiben.

Definition 1.4. • Wir bezeichnen eine endliche Menge $\mathcal{A} \subset \mathcal{M}_q$ als hierarchische Menge, falls $\mathcal{A} \neq \emptyset$ und wenn $-\alpha \in \mathcal{A}$ für alle $\alpha \in \mathcal{A} \setminus \{(\emptyset)\}$. Hierbei wurde für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ die Notation $-\alpha = (i_2, \dots, i_l)$ eingeführt.

- Weiter definieren wir für $r \in \mathbb{N}$ Mengen Λ_r , Γ_r und Θ_r durch

$$\begin{aligned} \Lambda_r &= \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha) \leq r\}, \\ \Gamma_r &= \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha) \leq r \text{ oder } \ell(\alpha) = \mathfrak{n}(\alpha) = (r+1)/2\}, \\ \Theta_r &= \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) \leq r\}, \end{aligned}$$

wobei die Abbildungen $\ell, \mathfrak{n} : \mathcal{M}_q \rightarrow \mathbb{N} \cup \{0\}$ für die Länge von α bzw. die Anzahl der Nullen in α stehen.

Z.B. für $\alpha = (01023)$ ist $\ell(\alpha) = 5$ und $\mathfrak{n}(\alpha) = 2$. Beispiele für hierarchische Mengen sind offenbar die Mengen Λ_r , Γ_r und Θ_r . Darüber hinaus gilt die Beziehung

$$\Gamma_r = \begin{cases} \Lambda_r, & \text{falls } r \text{ gerade,} \\ \Lambda_r \dot{\cup} \{(n_{(r+1)/2})\}, & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei die Notation

$$(n_k) = \text{Block-Multiindex, der genau aus } k \text{ Nullen besteht, d.h. } \ell((n_k)) = k = \mathfrak{n}((n_k))$$

eingeführt wurde. Außerdem benötigen wir für die stochastische Taylor-Entwicklung:

Definition 1.5. Eine Restmenge $\mathcal{B}(\mathcal{A})$ wird wie folgt aus einer hierarchischen Menge \mathcal{A} gewonnen:

$$\mathcal{B}(\mathcal{A}) = \{\alpha \in \mathcal{M}_q \setminus \mathcal{A} : -\alpha \in \mathcal{A}\}.$$

Es ist nicht schwierig einzusehen, dass die Restmengen $\mathcal{B}(\Lambda_r)$, $\mathcal{B}(\Gamma_r)$ und $\mathcal{B}(\Theta_r)$ durch

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\Lambda_r) &= \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha) = r + 1\} \dot{\cup} \{(0, \beta) = \alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\beta) + \mathfrak{n}(\beta) = r\}, \\ \mathcal{B}(\Gamma_r) &= \begin{cases} \mathcal{B}(\Lambda_r), & \text{falls } r \text{ gerade,} \\ \mathcal{B}(\Lambda_r) \dot{\cup} \{(j, n_{(r+1)/2}) : j \in \{0, \dots, q\}\}, & \text{sonst,} \end{cases} \\ \mathcal{B}(\Theta_r) &= \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) = r + 1\} \end{aligned}$$

gegeben sind. Z.B. ist für $q = 1$:

$$\begin{aligned} \Lambda_2 &= \{(\emptyset), (1), (0), (11)\}, & \mathcal{B}(\Lambda_2) &= \{(111), (10), (01), (011), (00)\}, \\ \Gamma_1 &= \{(\emptyset), (1), (0)\}, & \mathcal{B}(\Gamma_1) &= \{(11), (10), (01), (00)\}, \\ \Theta_2 &= \{(\emptyset), (1), (0), (11), (10), (01), (00)\}, & \mathcal{B}(\Theta_2) &= \{(111), (110), (101), (011), (100), \\ & & & (010), (001), (000)\}. \end{aligned}$$

Wir bemerken, dass offenbar

$$\Theta_{r+1} = \Theta_r \dot{\cup} \mathcal{B}(\Theta_r), \quad \Theta_r \subset \Lambda_{2r}.$$

Weiter ist

$$\Lambda_{r+1} \subset \mathcal{B}(\Lambda_r) \dot{\cup} \Lambda_r \subset \Lambda_{r+2}. \quad (1.20)$$

Die Inklusionen in (1.20) sind echt, da stets der Multiindex, der aus einem Block lauter gleicher von Null verschiedenen Elementen der Länge $r + 2$ besteht, in $\Lambda_{r+2} \setminus \mathcal{B}(\Lambda_r) \dot{\cup} \Lambda_r$ liegt. Weitere häufig gebrauchte Schreibweisen sind:

Definition 1.6. • $(e_{jk}) = \text{Block-Multiindex}$, der ausschließlich aus dem Element $j \in \{1, \dots, q\}$ besteht mit $\ell((e_{jk})) = k$.

- $\mathfrak{e}(\alpha) = \ell(\alpha) - \mathfrak{n}(\alpha) = \text{Anzahl der von Null verschiedenen Einträge in } \alpha$.
- $o(\alpha) = (\ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha))/2 = \mathfrak{e}(\alpha)/2 + \mathfrak{n}(\alpha) = \text{(starke) Ordnung von } \alpha$.

Z.B., für obig gegebenes α ist $\mathfrak{e}(\alpha) = 3$ und $o(\alpha) = 3.5$. Außerdem kann damit die Menge Λ_r auch durch

$$\Lambda_r = \{\alpha \in \mathcal{M}_q : o(\alpha) \leq r/2\}$$

charakterisiert werden. Wir brauchen die in (1.15) präsentierten elementaren Differentialoperatoren, um später die stochastische Taylor-Entwicklung in kompakter Form angeben zu können.

Definition 1.7. Die Differentialoperatoren

$$L^j = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} + \nabla_x[v_0] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^q \nabla_x^2[v_i, v_i] & \text{für } j = 0, \\ \nabla_x[v_j] & \text{für } 1 \leq j \leq q \end{cases}$$

zur Itô-Gleichung (1.7) heißen Itô-Operatoren. Damit können die Itô-Koeffizienten für eine holomorphe Funktion v zu einem vorgegebenen $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ rekursiv berechnet werden:

$$v_\alpha = \begin{cases} v, & \text{für } l = 0, \\ L^{i_1} v_{-\alpha} & \text{für } l \geq 1. \end{cases} \quad (1.21)$$

Entsprechend werden zur Berechnung der Stratonovich-Koeffizienten die Stratonovich-Operatoren (bzgl. der Stratonovich-Gleichung (1.8)) benötigt:

$$\hat{L}^j = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} + \nabla_x[v_0] & \text{für } j = 0, \\ L^j = \nabla_x[v_j] & \text{für } 1 \leq j \leq q. \end{cases}$$

Also

$$\hat{v}_\alpha = \begin{cases} v, & \text{für } l = 0, \\ \hat{L}^{i_1} \hat{v}_{-\alpha} & \text{für } l \geq 1. \end{cases} \quad (1.22)$$

Beispiel 1.2. Für $v(t, x) = x = \hat{v}_{(\emptyset)}(x)$ und $q = 1, r = 2$ sind die \hat{v}_α ($\alpha \in \Lambda_r$) durch

$$\begin{cases} \hat{v}_{(1)} = v_1, & \hat{v}_{(0)} = v_0, & \hat{v}_{(11)} = v_1' v_1, \\ \hat{v}_{(10)} = v_0' v_1, & \hat{v}_{(01)} = v_1' v_0 + \dot{v}_1, & \hat{v}_{(00)} = v_0' v_0 + \dot{v}_0, \\ \hat{v}_{(111)} = v_1''[v_1, v_1] + (v_1')^2 v_1, & \hat{v}_{(011)} = v_1''[v_1, v_0] + (v_1')^2 v_0 + \dot{v}_1' v_1 + v_1' \dot{v}_1, \\ \hat{v}_{(101)} = v_1''[v_0, v_1] + v_1' v_0' v_1 + \dot{v}_1' v_1, & \hat{v}_{(110)} = v_0''[v_1, v_1] + v_0' v_1' v_1, \\ \hat{v}_{(1111)} = v_1'''[v_1, v_1, v_1] + 2v_1''[v_1' v_1, v_1] + v_1' v_1''[v_1, v_1] + v_1''[v_1, v_1' v_1] + (v_1')^3 v_1 \end{cases} \quad (1.23)$$

gegeben ($v_j' = \nabla_x v_j, \frac{\partial v}{\partial t} = \dot{v}$). Daraus erhalten wir zwei weitere Beispiele, die hauptsächlich in Kapitel 3 und 4 Anwendung finden:

- Für $v_j(t, x) = V_j x$ mit $V_j \in \mathbb{C}^{d \times d}$ ($j = 0, 1$) entspricht (1.23):

$$\begin{cases} \hat{v}_{(1)} = V_1 x, & \hat{v}_{(0)} = V_0 x, & \hat{v}_{(11)} = V_1^2 x, & \hat{v}_{(10)} = V_0 V_1 x, \\ \hat{v}_{(01)} = V_1 V_0 x, & \hat{v}_{(00)} = V_0^2 x, & \hat{v}_{(111)} = V_1^3 x, & \hat{v}_{(011)} = V_1^2 V_0 x, \\ \hat{v}_{(101)} = V_1 V_0 V_1 x, & \hat{v}_{(110)} = V_0 V_1^2 x, & \hat{v}_{(1111)} = V_1^4 x, \end{cases}$$

wobei $\hat{v}_\alpha = \hat{v}_\alpha(x)$. Beachte, dass wegen der Linearität von v_j bzgl. x , alle Ableitungen höherer Ordnung entfallen.

- Für $v_j(t, x) = V_j(t)x$ mit einmal stetig differenzierbaren $V_j : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}$ ($j = 0, 1$) entspricht (1.23):

$$\begin{cases} \hat{v}_{(1)} = V_1(t)x, & \hat{v}_{(0)} = V_0(t)x, & \hat{v}_{(11)} = V_1^2(t)x, \\ \hat{v}_{(10)} = V_0(t)V_1(t)x, & \hat{v}_{(01)} = (V_1(t)V_0(t) + \dot{V}_1(t))x, & \hat{v}_{(00)} = (V_0^2(t) + \dot{V}_0(t))x, \\ \hat{v}_{(111)} = V_1^3(t)x, & \hat{v}_{(011)} = (V_1^2(t)V_0(t) + \dot{V}_1(t)V_1(t) + V_1(t)\dot{V}_1(t))x, \\ \hat{v}_{(101)} = (V_1(t)V_0(t)V_1(t) + \dot{V}_1(t)V_1(t))x, & \hat{v}_{(110)} = V_0(t)V_1^2(t)x, & \hat{v}_{(1111)} = V_1^4(t)x, \end{cases}$$

wobei $\hat{v}_\alpha = \hat{v}_\alpha(t, x)$.

Als Nächstes führen wir das *iterierte Itô- bzw. Stratonovich-Integral* ein:

Definition 1.8. Für geeignete Funktionen $v : \mathbb{R}_+^l \times \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$, einen Itô-Prozess X und einen Multiindex $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ ist das iterierte Itô- bzw. Stratonovich-Integral rekursiv über

$$I_\alpha[v(\cdot, X(\cdot))]_{t_0, t} = \begin{cases} v(t, X(t)), & \text{falls } \alpha = (\emptyset), \\ \int_{t_0}^t I_{\alpha-}[v(s_1, \cdot, X(\cdot))]_{t_0, s_1} dW^{i_1}(s_1), & \text{sonst,} \end{cases} \quad (1.24)$$

$$J_\alpha[v(\cdot, X(\cdot))]_{t_0, t} = \begin{cases} v(t, X(t)), & \text{falls } \alpha = (\emptyset), \\ \int_{t_0}^t J_{\alpha-}[v(s_1, \cdot, X(\cdot))]_{t_0, s_1} \circ dW^{i_1}(s_1), & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.25)$$

gegeben, wobei die Konventionen $\alpha- = (i_1, \dots, i_{l-1})$ und

$$dW^j(t) = \begin{cases} dt, & \text{falls } j = 0, \\ dW^j(t), & \text{falls } j \in \{1, \dots, q\} \end{cases}$$

benutzt wurden.

Bemerkung 1.5. Für eine möglichst allgemeine Klasse geeigneter Funktionen v in Bezug auf Definition 1.8 siehe [17, Chapter 5.2]. Jedenfalls ist eine passende und für diese Arbeit fundamentale Funktionenklasse für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ durch

$$\{v(t_1, \dots, t_l, X(t_l)) = V_{i_l}(t_1) \cdots V_{i_1}(t_l) X(t_l) : V_{i_j} \in C^k([t_0, t], \mathbb{C}^{d \times d}), j = 1, \dots, l\}$$

gegeben. Dabei steht $C^k([t_0, t], \mathbb{C}^{d \times d})$ für den Raum aller einparametrischen, k -fach stetig differenzierbaren komplexen $d \times d$ -Matrizen.

Beispiel 1.3. Jedoch ist das einfachste Beispiel für $v \equiv 1$ gegeben. Es gilt nämlich

$$I_\alpha[1]_{t_0, t} = \int_{t_0}^t \cdots \int_{t_0}^{s_{l-1}} dW^{i_1}(s_l) \cdots dW^{i_l}(s_1)$$

bzw.

$$J_\alpha[1]_{t_0, t} = \int_{t_0}^t \cdots \int_{t_0}^{s_{l-1}} \circ dW^{i_1}(s_l) \cdots \circ dW^{i_l}(s_1).$$

Zur Erleichterung der Notation setzen wir $J_\alpha[1]_{t_0, t} = J_{\alpha, t_0, t}$ bzw. $I_\alpha[1]_{t_0, t} = I_{\alpha, t_0, t}$, und falls das zugrunde liegende Integrationsintervall bereits aus dem Zusammenhang klar ist, schreiben wir J_α bzw. I_α . Weiter definieren wir:

Definition 1.9. Durch die rekursive Definition der iterierten stochastischen Integrale kann die Menge

$$\mathcal{I}_q = \{I_\alpha : \alpha \in \mathcal{M}_q\} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{J}_q = \{J_\alpha : \alpha \in \mathcal{M}_q\}$$

aller iterierten Itô- bzw. Stratonovich-Integrale leicht mittels Verkettung als Verknüpfung zu einem Monoid mit neutralem Element $I_{(\emptyset)}$ bzw. $J_{(\emptyset)}$ erweitert werden. Dabei ist diese Verkettung für $I_\alpha, I_\beta \in \mathcal{I}_q$ bzw. $J_\alpha, J_\beta \in \mathcal{J}_q$ durch

$$I_\alpha[I_{\beta, t_0, \cdot}]_{t_0, t} = I_{(\beta, \alpha), t_0, t} \quad \text{bzw.} \quad J_\alpha[J_{\beta, t_0, \cdot}]_{t_0, t} = J_{(\beta, \alpha), t_0, t}$$

definiert.

Mit Hilfe der Notationen für die iterierten stochastischen Integrale in (1.24), (1.25) und die Koeffizienten-Funktionen (1.21), (1.22) lässt sich für $v(t, x) = x$ und holomorphe Koeffizienten-Funktionen die *Itô-Taylor-* bzw. *Stratonovich-Taylor-Entwicklung* bequem angeben. Dabei interessiert uns in erster Linie die Entwicklung der Lösung von Gleichung (1.7) bzw. (1.8) um das Paar (t_0, X_0) :

Theorem 1.2. *Unter obigen Voraussetzungen ist für eine hierarchische Menge \mathcal{A} die Itô-Taylor- bzw. Stratonovich-Taylor-Entwicklung für die Lösung von (1.7) bzw. (1.8) durch*

$$\begin{aligned} X(t) &= \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} I_{\alpha, t_0, t} v_{\alpha}(t_0, X_0) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\mathcal{A})} I_{\alpha} [v_{\alpha}(\cdot, X(\cdot))]_{t_0, t}, \\ X(t) &= \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} J_{\alpha, t_0, t} \hat{v}_{\alpha}(t_0, X_0) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\mathcal{A})} J_{\alpha} [\hat{v}_{\alpha}(\cdot, X(\cdot))]_{t_0, t} \end{aligned}$$

gegeben. Beachte, dass hier $v_{\alpha}(s_1, \dots, s_{\ell(\alpha)}, X(s_{\ell(\alpha)})) = v_{\alpha}(s_{\ell(\alpha)}, X(s_{\ell(\alpha)}))$ und Entsprechendes für \hat{v}_{α} gilt.

Beweis. Da die komplexe Itô-Formel für holomorphe Koeffizienten-Funktionen der reellen Itô-Formel entspricht, sind die Beweise in [17, Theorem 5.5.1 & 5.6.1] direkt übertragbar. \square

Zur Illustration geben wir ein für diese Arbeit wichtiges Beispiel:

Beispiel 1.4. *Die Funktionen v_j ($j = 0, \dots, q$) in Definition 1.3 seien linear, genauer $v_j(t, x) = V_j x$ mit zeitunabhängiger komplexer $d \times d$ -Matrix V_j . Die Stratonovich-Taylor-Entwicklung der Lösung (die Forderungen in Theorem 1.1 und 1.2 an die v_j sind erfüllt) von (1.8) ist*

$$X(t) = X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{A} \setminus \{\emptyset\}} J_{\alpha, t_0, t} V_{\alpha} X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\mathcal{A})} V_{\alpha} J_{\alpha} [X(\cdot)]_{t_0, t}.$$

Dabei sind die Stratonovich-Koeffizienten für $v(t, x) = x$ und $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ von der einfachen Form

$$\hat{v}_{\alpha}(t, x) = \hat{v}_{\alpha}(x) = \begin{cases} x, & \text{für } l = 0, \\ V_{i_l} \cdots V_{i_1} x =: V_{\alpha} x, & \text{für } l \geq 1 \end{cases} \quad (1.26)$$

(siehe Beispiel 1.2). Außerdem ist die Itô-Taylor-Entwicklung, wegen $L^0 v = \hat{L}^0 v$, von ähnlicher Gestalt:

$$X(t) = X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{A} \setminus \{\emptyset\}} I_{\alpha, t_0, t} V_{\alpha} X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\mathcal{A})} V_{\alpha} I_{\alpha} [X(\cdot)]_{t_0, t}.$$

Bemerkung 1.6. *In Beispiel 1.4 ergibt sich im Falle $q = 0$, $\mathcal{A} = \Theta_r$ die klassische (deterministische) Taylor-Entwicklung, denn*

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0 + \sum_{\alpha \in \Theta_r \setminus \{\emptyset\}} J_{\alpha, t_0, t} V_{\alpha} X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Theta_r)} V_{\alpha} J_{\alpha} [X(\cdot)]_{t_0, t} \\ &= \sum_{k=0}^r \frac{(t-t_0)^k}{k!} V_0^k X_0 + V_0^{r+1} \int_{t_0}^t \cdots \int_{t_0}^{s_r} X(s_{r+1}) ds_{r+1} \cdots ds_1. \end{aligned}$$

Darüber hinaus ist die zugehörige Taylor-Reihe offenbar konvergent und durch

$$X(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t-t_0)^k}{k!} V_0^k X_0 = \exp(V_0(t-t_0)) X_0$$

gegeben. Ähnlich folgt für $q = 1$ und $V_0 = 0$, aber $V_1 \neq 0$:

$$X(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(J_{(1),t_0,t})^k}{k!} V_1^k X_0 = \exp(V_1(W^1(t) - W^1(t_0)))X_0,$$

denn wie wir in Kapitel 2 erfahren werden ist $(J_{(1),t_0,t})^k = k!J_{(e_{1k})}$.

1.3 Numerische Verfahren, Konvergenzbegriffe und ein Konvergenzkriterium

Im Allgemeinen ist das Lösen der Gleichung (1.7) bzw. (1.8) auf analytischem Wege, wie z.B. in Bemerkung 1.6, nicht möglich. Sogar in der Situation des Beispiels 1.4 mit $q = 1$ und nicht kommutierenden Matrizen V_0, V_1 ist die Lösung im Allgemeinen nicht in einer geschlossenen Form anzugeben. Wir werden auf die letztere Problematik später in diesem Kapitel zurückkommen. Jedenfalls besteht die Möglichkeit die Gleichungen (1.7) und (1.8) numerisch zu behandeln. In dieser Arbeit legen wir unser Hauptaugenmerk auf explizite (stochastische) Einschrittverfahren.

Definition 1.10. Sei X eine Lösung der Gleichung (1.7) bzw. (1.8). Zu einer Unterteilung $t_0 < \dots < t_n = T$ von $[t_0, T]$ ist ein explizites stochastisches Einschrittverfahren durch

$$X_{k+1} = X_k + \Phi_k(X_k, h_k, \xi_{1,k}, \dots, \xi_{m,k}) =: X_k + \Phi_k(X_k) \quad (1.27)$$

gegeben, wobei $h_k = t_{k+1} - t_k$ für die Schrittweiten steht. Die Φ_k sind die Verfahrensfunktionen und die $\xi_{1,k}, \dots, \xi_{m,k}$ sind reellwertige, unabhängige, standard normalverteilte Zufallsvariablen. X_k wird als Approximation an die Lösung X zum Zeitpunkt t_k betrachtet.

Bevor geklärt wird in welchem Sinne X_k eine Approximation an $X(t_k)$ ist, werden einige Beispiele zu numerischen Verfahren diskutiert.

Beispiel 1.5. (i) Eine wichtige Integratoren-Klasse besteht aus den starken (expliziten) Itô- bzw. Stratonovich-Taylor-Verfahren (siehe auch [17, Chapter 10]). Diese ergeben sich aus der abgebrochenen Taylor-Reihe bzgl. der hierarchischen Menge $\mathcal{A} = \Gamma_r$ bzw. $\mathcal{A} = \Lambda_r$, genauer:

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{\alpha \in \Gamma_r \setminus \{\emptyset\}} I_{\alpha, t_k, t_{k+1}} v_{\alpha}(t_k, X_k), \quad (1.28)$$

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} J_{\alpha, t_k, t_{k+1}} \hat{v}_{\alpha}(t_k, X_k). \quad (1.29)$$

Offensichtlich ist die Verfahrensfunktion in (1.27) bzgl. (1.29) durch

$$\Phi_k(X_k, h_k, \xi_{1,k}, \dots, \xi_{m,k}) = \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} J_{\alpha, t_k, t_{k+1}} \hat{v}_{\alpha}(t_k, X_k)$$

gegeben. Hierbei ist jedes Integral $J_{\alpha, t_k, t_{k+1}}$ durch h_k und passende Zufallsvariablen $\xi_{1,k}, \dots, \xi_{m,k}$ zu approximieren. Letzteres wird in Kapitel 2.4 behandelt.

(ii) Das einfachste Beispiel für ein Verfahren der Form (1.28) ist das Euler-Maruyama-Verfahren, das von Maruyama in [24] untersucht wird. Dieses Verfahren ist bzgl. Gleichung (1.7) durch

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{j=0}^q I_{(j), t_k, t_{k+1}} v_j(t_k, X_k) \quad (1.30)$$

erklärt. Die rechte Seite in (1.30) entspricht der abgebrochenen Itô-Taylor-Reihe mit $\mathcal{A} = \Gamma_1$. Wir bemerken: Im Falle $q = 0$ liegt das klassische explizite Euler-Verfahren vor.

(iii) Das Milstein-Verfahren, welches von Milstein erstmals in [26] präsentiert wurde, ergibt sich aus (1.28) für $r = 2$, also

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{j=0}^q I_{(j),t_k,t_{k+1}} v_j(t_k, X_k) + \sum_{1 \leq i,j \leq q} I_{(ji),t_k,t_{k+1}} v'_i(t_k, X_k) v_j(t_k, X_k). \quad (1.31)$$

(iv) Um den einfachsten Integrator für eine Stratonovich-Gleichung zu finden, wird diese zunächst mittels Lemma 1.2 in die entsprechende Itô-Gleichung überführt, damit anschließend das entsprechende Itô-Taylor-Verfahren mit Γ_1 verwendet werden kann. Es resultiert

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{j=0}^q J_{(j),t_k,t_{k+1}} v_j(t_k, X_k) + \frac{1}{2} J_{(0),t_k,t_{k+1}} \sum_{j=1}^q v'_j(t_k, X_k) v_j(t_k, X_k).$$

(v) Das einfachste Stratonovich-Taylor-Verfahren erhalten wir aus (1.29) mit $r = 2$. Dieses entspricht dem Milstein-Verfahren für die zugehörige Itô-Gleichung, denn

$$X_{k+1} = X_k + \sum_{j=0}^q J_{(j),t_k,t_{k+1}} v_j(t_k, X_k) + \sum_{1 \leq i,j \leq q} J_{(ji),t_k,t_{k+1}} v'_i(t_k, X_k) v_j(t_k, X_k)$$

und $J_{(ji)} = I_{(ji)} + \frac{1}{2} \delta_{ij} I_{(0)}$ für $1 \leq i, j \leq q$.

Wir stellen nun die Fragen: In welchem Sinne konvergieren solche Verfahren? Wie ist der zugehörige Ordnungsbegriff zu definieren? Mit welcher Ordnung konvergiert das jeweilige Verfahren? In der bisherigen Literatur werden am häufigsten die *schwache* und *starke Konvergenz* untersucht.

Definition 1.11. (*schwache Konvergenz*) Ein numerisches Verfahren vom Typ (1.27) heißt *schwach* mit Ordnung p gegen die exakte Lösung von (1.7) bzw. (1.8) konvergent, wenn für jedes Polynom g (oder eine allgemeinere Funktionenklasse, siehe z.B. [17, Chapter 9]) eine von h und n unabhängige Konstante K existiert, so dass

$$\|E(g(X(t_n))) - E(g(X_n))\| \leq Kh^p,$$

wobei $h = \max_{k=0,\dots,n-1} h_k$.

Bemerkung 1.7. Im Falle $g(x) = x$, $q = 0$ stimmt der schwache Konvergenz- und Ordnungsbegriff mit dem Konvergenz- und Ordnungsbegriff für klassische (deterministische) Differentialgleichungen überein.

Bemerkung 1.8. Da Untersuchungen der schwachen Konvergenz nicht Bestandteil dieser Arbeit sind, verweisen wir an dieser Stelle für Resultate zu exponentiellen Integratoren (für die stochastische Schrödinger-Gleichung) auf die Arbeiten [30], [31].

Definition 1.12. (*starke Konvergenz*) Ein numerisches Verfahren vom Typ (1.27) wird als *stark konvergent* mit Ordnung p gegen die exakte Lösung von (1.7) bzw. (1.8) bezeichnet, wenn

$$(E\|X(t_n) - X_n\|^2)^{1/2} \leq Kh^p,$$

wobei die Konstante K nicht von h und n abhängt.

Grob umschrieben misst die starke Konvergenz die pfadweise Abweichung zwischen der numerischen und exakten Lösung der zugrunde liegenden Gleichung.

Wir diskutieren in Bezug auf die Itô-Gleichung (1.7) zwei Beispiele:

Beispiel 1.6. (i) Das Euler-Maruyama- bzw. Milstein-Verfahren ((1.30), (1.31)) konvergiert schwach mit Ordnung 1, falls die im Verfahren auftretenden Koeffizienten v_α einem globalen linearen Wachstumsgesetz unterliegen (siehe [17, Theorem 14.5.1]).

(ii) Das Euler-Maruyama- bzw. Milstein-Verfahren ((1.30), (1.31)) konvergiert stark mit Ordnung $1/2$ bzw. 1, falls die im Verfahren auftretenden Koeffizienten v_α einem globalen linearen Wachstumsgesetz und einer globalen Lipschitz-Bedingung genügen (siehe [17, Theorem 10.6.3]).

Tatsächlich sind die obigen Beispiele nur Spezialfälle aus der Klasse der (expliziten) Itô-Taylor-Verfahren. Für diese Arbeit ist aber die folgende Aussage interessanter:

Theorem 1.3. (Kloeden & Platen) Das Stratonovich-Taylor-Verfahren (1.29) mit $r = 2p$ konvergiert stark mit Ordnung p , falls alle involvierten Stratonovich-Koeffizienten \hat{v}_α in der zweiten Komponente holomorph, bzgl. der Ersten integrierbar sind, einem globalen linearen Wachstumsgesetz und einer globalen Lipschitz-Bedingung genügen.

Beweis. Siehe [17, Corollary 10.7.2]. □

Bemerkung 1.9. Eine zu Theorem 1.3 entsprechende Aussage über Itô-Taylor-Verfahren wird im Korollar 10.6.4 in [17] wiedergegeben.

Bisher wurde nur der globale Fehler von numerischen Verfahren angesprochen. Jetzt soll der Zusammenhang des starken lokalen mit dem starken globalen Fehler eines Verfahrens vom Typ (1.27) untersucht werden. Dazu erinnern wir zuerst an die für numerische Verfahren für klassische (deterministische) Differentialgleichungen zutreffende Regel: Beim Übergang vom lokalen zum globalen Fehler findet eine Ordnungsreduktion von -etwa- $p + 1$ auf p statt. Da bei Verfahren für eine stochastische Gleichung durch Wiener-Prozesse halbzahlige Ordnungen ins Spiel geraten, besteht Hoffnung auf Halbierung der Reduktion sprich auf $p + 1/2$. Letztere erweist sich aber als falsch (siehe dazu [27, Theorem 1.1]). Dagegen ist die für den deterministischen Fall gültige Regel auch für stochastische Probleme richtig, aber im Allgemeinen zu grob. Das folgende einfache Beispiel könnte zu einem besseren Verständnis dieser Schwierigkeit beitragen. Doch zuvor definieren wir:

Definition 1.13. Für $k = 0, \dots, n-1$ sei $X_{k+1}^k = X(t_k) + \Phi_k(X(t_k))$ (Φ_k ist Verfahrensfunktion) die Approximation an die exakte Lösung X (von (1.7) bzw. (1.8)) zum Zeitpunkt t_{k+1} , die aus einem Schritt mit Startwert $X(t_k)$ hervorgeht. Wir sagen, dass ein Verfahren vom Typ (1.27) von schwacher bzw. starker lokaler Ordnung p_1 bzw. p_2 ist, wenn eine von n, h unabhängige Konstante K_1 bzw. K_2 existiert, so dass

$$\|E(X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k)\| \leq K_1 h^{p_1} \quad \text{bzw.} \quad \left(E\|X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k\|^2\right)^{1/2} \leq K_2 h^{p_2}.$$

Beispiel 1.7. Betrachte die Itô-Gleichung ($q = 1, W := W^1$)

$$dX(t) = \nu X(t)dt + \mu X(t)dW(t), \quad X(0) = X_0 \tag{1.32}$$

für Konstanten $\nu, \mu \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, oder wegen (1.9) dazu äquivalent die Stratonovich-Gleichung

$$dX(t) = \left(\nu - \frac{1}{2}\mu^2\right) X(t)dt + \mu X(t) \circ dW(t), \quad X(0) = X_0,$$

auf $[0, T] \times \mathbb{C}^d$. Wie wir bereits gesehen haben, ist die exakte Lösung durch

$$X(t) = \exp((\nu - \mu^2/2)t + \mu W(t)) X_0 = \sum_{j \geq 0} \frac{1}{j!} ((\nu - \mu^2/2)t + \mu W(t))^j X_0$$

gegeben. Zudem halten wir fest, dass nach Anwendung der Itô-Isometrie (1.10) auf (1.32)

$$E(X(t)) = \exp(\nu t) E(X_0) \quad (1.33)$$

folgt.

- Das Euler-Maruyama-Verfahren auf (1.32) angewandt lautet dann

$$X_{k+1} = (1 + \nu h + \mu \Delta W_k) X_k. \quad (1.34)$$

Der pfadweise Fehler nach dem ersten Schritt ergibt sich zu

$$\begin{aligned} X(h) - X_1 &= \frac{1}{2} \mu^2 (W(h)^2 - h) X_0 + (\nu - \mu^2/2) \mu h W(h) X_0 \\ &\quad + \frac{1}{6} \mu^3 W(h)^3 X_0 + O(W(h)^4 + h^2). \end{aligned}$$

Daraus erhalten wir aufgrund der Formel (1.18) zur Berechnung der Momente von W :

$$\begin{aligned} \|E_0(X(h) - X_1)\| &= O(h^2), \\ (E\|X(h) - X_1\|^2)^{1/2} &= O(h). \end{aligned}$$

Also beträgt die starke bzw. schwache lokale Ordnung $p_2 = 1$ bzw. $p_1 = 2$. Beachte auch, dass $p_1 > p_2$, und dass nach Beispiel 1.6 (ii) das Euler-Maruyama-Verfahren von starker globaler Ordnung $p = 1/2 (= p_2 - 1/2)$ ist.

- Das Milstein-Verfahren ergibt sich in Bezug auf Gleichung (1.32) zu

$$X_{k+1} = \left(1 + \left(\nu - \frac{1}{2} \mu^2 \right) h + \mu \Delta W_k + \frac{1}{2} \mu^2 (\Delta W_k)^2 \right) X_k.$$

Diesmal folgt:

$$X(h) - X_1 = (\nu - \mu^2/2) \mu h W(h) X_0 + \frac{1}{6} \mu^3 W(h)^3 X_0 + O(W(h)^4 + h^2)$$

und somit

$$\begin{aligned} \|E_0(X(h) - X_1)\| &= O(h^2), \\ (E\|X(h) - X_1\|^2)^{1/2} &= O(h^{3/2}). \end{aligned}$$

Daher gilt bzgl. obiger Notation $p_1 = 2 > 3/2 = p_2$ und wiederum nach Beispiel 1.6 (ii) ist hier $p = 1 (= p_2 - 1/2)$.

- Jetzt werde das Verfahren (1.34) ohne Berücksichtigung des Drifttermes, soll heißen

$$X_{k+1} = (1 + \mu \Delta W_k) X_k \quad (1.35)$$

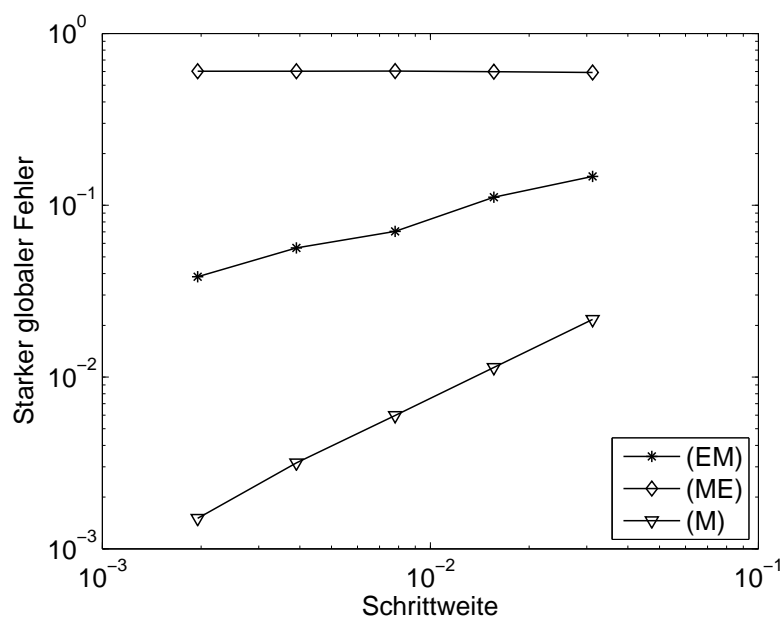


Abbildung 1.1: Auf diesem Bild sind die starken globalen Fehler des Euler-Maruyama- (EM), Milstein- (M) Verfahrens und des Verfahrens (1.35) (ME) angewandt auf das Testbeispiel (1.32) für $d = 1$, $\nu = 1/2$ und $\mu = 1$ zum Zeitpunkt $T = 1$ im doppeltlogarithmischen Maßstab zu fünf verschiedenen Schrittweiten geplottet.

auf Gleichung (1.32) angewendet. Nun gilt

$$\begin{aligned} X(h) - X_1 &= \frac{1}{2}\mu^2(W(h)^2 - h)X_0 + \nu hX_0 \\ &\quad + \frac{1}{6}\mu^3W(h)^3X_0 + (\nu - \mu^2/2)\mu hW(h)X_0 + O(W(h)^4 + h^2). \end{aligned}$$

Da $\nu \neq 0$ ergibt sich $p_1 = 1 = p_2$. Jedoch kann das Verfahren (1.35) nicht stark global konvergieren, da es wegen $E(X_k) = E(X_0)$ für $k = 0, 1, \dots$ nicht einmal schwach gegen die erwartete Lösung (1.33) konvergiert.

- Zur Erstellung der Abbildung 1.1 wurden die Konkretisierungen $d = 1$, $\nu = 1/2$ und $\mu = 1$ vorgenommen. Zu sehen sind nahezu Geraden verschiedener Steigungen. Diese wurden durch die starken globalen Fehler des Euler-Maruyama- (EM), Milstein- (M) Verfahrens und des Verfahrens (1.35) (ME) angewandt auf das Testbeispiel (1.32) zu den Schrittweiten $h_j = 2^{-9+j}$ für $j = 0, 1, 2, 3, 4$ zum Zeitpunkt $T = 1$ im doppeltlogarithmischen Maßstab erzeugt. Hierbei wurden alle Approximationen mit der exakten Lösung verglichen und der Fehler durch Mittelung über 500 Pfade berechnet. Wir lesen für (M) bzw. (EM) den Steigungswert und damit die Ordnung 1 bzw. $1/2$ ab. Hingegen beträgt die Steigung für (ME) 0, also keine (starke) Konvergenz.

Das Beispiel 1.7 suggeriert eine Beziehung zwischen dem Verhältnis des schwachen zum starken lokalen Fehler, und der lokal-global Ordnungsreduktion. Tatsächlich hat Milstein ([27, Theorem 1.1]) das Folgende bewiesen: Ist $p_2 \geq 1/2$ und $p_1 \geq p_2 + 1/2$ (also $p_1 > p_2$) so beträgt der starke globale Fehler $p = p_2 - 1/2$. Das Beispiel 1.7 zeigt, dass die Bedingung $p_1 > p_2$ im Allgemeinen gebraucht wird. Der Konvergenznachweis beruht auf der einen Seite auf der globalen Lipschitz-Stetigkeit der Koeffizientenfunktionen v_j und auf der anderen Seite

auf der Regularität der numerischen (siehe [27, Lemma 1.2]) und der Stabilität der exakten Lösung. Insbesondere wird dadurch jegliche Stabilitätsbedingung an die Verfahrensfunktionen Φ_k vermieden. In den Kapiteln 3 und 4 wird sich herauskristallisieren, dass das zu Milstein's duale Kriterium, welches im Folgenden vorgestellt wird, für die Anwendung und das Verständnis von Splitting-Integratoren geeigneter ist.

Theorem 1.4. *Es existiere eine eindeutige (starke) Lösung X von (1.7) bzw. (1.8). Weiter sei X_k eine numerische Approximation an $X(t_k)$, wobei*

$$X_{k+1} = X_k + \Phi_k(X_k) =: \tilde{\Phi}_k(X_k)$$

mit äquidistanter Schrittweite $h = t_{k+1} - t_k = J_{(0),t_k,t_{k+1}}$ für $k = 0, \dots, n-1$. Die Verfahrensfunktion Φ_k besitze für $k = 0, \dots, n-1$ die Stabilitätseigenschaften

$$\|E_k(\Phi_k(X(t_k)) - \Phi_k(X_k))\| \leq \tilde{K}_1 h \|X(t_k) - X_k\|, \quad (1.36)$$

$$(E\|\Phi_k(X(t_k)) - \Phi_k(X_k)\|^2)^{1/2} \leq \tilde{K}_2 h^{1/2} (E\|X(t_k) - X_k\|^2)^{1/2}, \quad (1.37)$$

wobei \tilde{K}_1, \tilde{K}_2 von h, n unabhängige Konstanten sind. Außerdem sei $X_{k+1}^k = \tilde{\Phi}_k(X(t_k))$ die numerische Lösung, die aus einem Schritt mit Anfangswert $X(t_k)$ resultiert. Existieren von h und n unabhängige Konstanten K_1, K_2 , so dass für $k = 0, \dots, n-1$ die schwache und starke lokale Fehlerabschätzung

$$\|E_k(X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k)\| \leq K_1 \|X(t_k)\| h^{p_1}, \quad (1.38)$$

$$\left(E\|X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k\|^2\right)^{1/2} \leq K_2 (E\|X(t_k)\|^2)^{1/2} h^{p_2} \quad (1.39)$$

gilt, wobei

$$p_2 \geq \frac{1}{2}, \quad p_1 \geq p_2 + \frac{1}{2}, \quad (1.40)$$

dann existiert auch für $k = 1, \dots, n$ eine von h und n unabhängige Konstante K , so dass die starke globale Fehlerabschätzung

$$(E\|X(t_k) - X_k\|^2)^{1/2} \leq K \left(\max_{0 \leq j \leq k-1} E\|X(t_j)\|^2 \right)^{1/2} h^{p_2-1/2}$$

gilt. Somit ist das Verfahren von starker globaler Ordnung $p = p_2 - 1/2$.

Beweis. Zuerst führen wir Abkürzungen für den pfadweisen globalen Fehler $e_k = X(t_k) - X_k$ ($k = 0, \dots, n, e_0 = 0$) und den lokalen Fehler $\varepsilon_k = X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k$ ($k = 0, \dots, n-1$) ein. Offenbar gilt

$$\begin{aligned} e_{k+1} &= X(t_{k+1}) - \tilde{\Phi}_k(X(t_k)) + \tilde{\Phi}_k(X(t_k)) - \tilde{\Phi}_k(X_k) \\ &= \varepsilon_k + e_k + \Phi_k(X(t_k)) - \Phi_k(X_k). \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich rekursiv

$$e_{k+1} = \sum_{j=0}^k (\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j)) + \sum_{j=0}^k \varepsilon_j.$$

Also folgt mittels der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13)

$$E\|e_{k+1}\|^2 \leq 2E \left\| \sum_{j=0}^k (\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j)) \right\|^2 + 2E \left\| \sum_{j=0}^k \varepsilon_j \right\|^2 =: 2d_1 + 2d_2.$$

Um das diskrete Gronwall-Lemma anwenden zu können, schätzen wir d_1 mit Hilfe der diskreten Itô- bzw. Cauchy-Schwarz-Ungleichungen (1.14) bzw. (1.13) und den Bedingungen (1.36), (1.37) wie folgt ab:

$$\begin{aligned}
d_1 &\leq 2E \left\| \sum_{j=0}^k (\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j) - E_j(\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j))) \right\|^2 \\
&\quad + 2E \left\| \sum_{j=0}^k E_j(\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j)) \right\|^2 \\
&\leq 2 \sum_{j=0}^k E \|\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j) - E_j(\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j))\|^2 \\
&\quad + 2(k+1) \sum_{j=0}^k E \|E_j(\Phi_j(X(t_j)) - \Phi_j(X_j))\|^2 \\
&\leq 4 \sum_{j=0}^k \left(\tilde{K}_2^2 h^2 E \|e_j\|^2 + \tilde{K}_1^2 h^2 E \|e_j\|^2 \right) + 2(k+1) \sum_{j=0}^k \tilde{K}_1^2 h^2 E \|e_j\|^2 \\
&\leq \tilde{K} h \sum_{j=0}^k E \|e_j\|^2
\end{aligned}$$

mit $\tilde{K} = 4\tilde{K}_2^2 + 6\tilde{K}_1^2(t_{k+1} - t_0)$. Somit resultiert aus dem Gronwall-Lemma 1.4 b)

$$E \|e_{k+1}\|^2 \leq 2E \left\| \sum_{j=0}^k \varepsilon_j \right\|^2 \exp(2\tilde{K}(t_{k+1} - t_0)).$$

Ähnlich wie für d_1 erhalten wir eine Abschätzung für d_2 mittels (1.38), (1.39):

$$\begin{aligned}
d_2 &\leq 2E \left\| \sum_{j=0}^k (\varepsilon_j - E_j(\varepsilon_j)) \right\|^2 + 2E \left\| \sum_{j=0}^k E_j(\varepsilon_j) \right\|^2 \\
&\leq 4 \sum_{j=0}^k (E \|\varepsilon_j\|^2 + E \|E_j(\varepsilon_j)\|^2) + 2(k+1) \sum_{j=0}^k E \|E_j(\varepsilon_j)\|^2 \\
&\leq 4 \sum_{j=0}^k (K_2^2 h^{2p_2} E \|X(t_j)\|^2 + K_1^2 h^{2p_1} E \|X(t_j)\|^2) + 2(k+1) \sum_{j=0}^k K_1^2 h^{2p_1} E \|X(t_j)\|^2 \\
&\leq (t_{k+1} - t_0) (4K_2^2 + 6K_1^2 h^{2(p_1-p_2)-1} (t_{k+1} - t_0)) h^{2p_2-1} \max_{0 \leq j \leq k} E \|X(t_j)\|^2.
\end{aligned}$$

Die Behauptung folgt schließlich aus (1.40), denn $2(p_1 - p_2) - 1 \geq 2(p_2 + 1/2 - p_2) - 1 = 0$. \square

Bemerkung 1.10. Betrachten wir (1.7) bzw. (1.8) für $q = 0$, so sind in Theorem 1.4 die Bedingungen (1.37), (1.39) überflüssig. Es ergibt sich das lokal-global Konvergenzkriterium bzgl. expliziten Einschrittverfahren für deterministische gewöhnliche Differentialgleichungen und daher $p = p_1 - 1$. Dabei ist (1.36) eine globale Lipschitz- bzw. Stabilitätsbedingung für die Verfahrensfunktionen und (1.38) der lokale Fehler.

1.4 Exponentielle Integratoren für lineare stochastische Differentialgleichungen

Wir wollen in diesem Abschnitt einerseits bereits ausgearbeitete Resultate zum Thema exponentielle Integratoren für lineare stochastische Differentialgleichungen diskutieren und andererseits einen Ausblick auf neue Resultate geben, die in den Kapiteln 3 und 4 präsentiert werden. Ausgangspunkt soll die lineare zeitabhängige Stratonovich-Gleichung

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j(t) X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0 \quad (1.41)$$

mit stetigen $V_j : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}$ ($j = 0, \dots, q$) sein. Im Falle paarweise kommutierender V_j ist die Gleichung (1.41) analytisch lösbar (siehe Abschnitt 2). Es gilt dann

$$X(t) = \exp\left(\sum_{j=0}^q \int_{t_0}^t V_j(t) dW^j(t)\right) X_0.$$

Selbst wenn die Matrizen V_j nicht vertauschen, aber eine nilpotente oder auflösbare Lie-Algebra erzeugen, kann die Lösung in geschlossener Form angegeben werden (siehe [18]). In letzterer Situation ist die Lösung durch $X(t) = \exp(\Omega(t))X_0$ gegeben, wobei Ω (nicht mit dem Ereignisraum zu verwechseln) für die sogenannte *Magnus-Reihe* steht, die an einer gewissen Stelle abbricht. Allerdings trifft dies im Allgemeinen nicht zu, folglich existiert nur selten eine Darstellung der Lösung in geschlossener Form. Daher ist das Suchen nach geeigneten numerischen Approximationen naheliegend. Doch zuvor soll die Magnus-Reihe ausführlich vorgestellt werden. Dazu betrachten wir zunächst die deterministische Differentialgleichung

$$dX(t) = V(t)X(t)dt, \quad X(t_0) = X_0, \quad (1.42)$$

wobei V stetig und X_0 als nicht zufällig angenommen wird. Wir gehen aber nicht vom Verschwinden des Kommutators $[V(t), V(s)]$ für $s \neq t$ aus. Das folgende Theorem über eine Darstellung der Lösung von (1.42) stammt von Magnus ([22]):

Theorem 1.5. (*Magnus*) Die Lösung der Gleichung (1.42) kann in der Form

$$X(t) = \exp(\Omega(t))X_0$$

geschrieben werden. Dabei ist Ω durch die Differentialgleichung

$$\dot{\Omega}(t) = \sum_{k \geq 0} \frac{B_k}{k!} ad_{\Omega}^k(V(t)), \quad \Omega(t_0) = 0 \quad (1.43)$$

bestimmt, wobei B_k ($k = 0, 1, \dots$) die Bernoulli-Zahlen sind und ad_{Ω} ein linearer Operator, der durch $ad_{\Omega}(V(t)) = [\Omega, V(t)]$ erklärt ist. Die Gleichung (1.43) besitzt eine Lösung, falls $\|\Omega\| < \pi$ gilt.

Durch Integration der Gleichung (1.43) und anschließender Anwendung der Picard-Fixpunktiteration erhalten wir die Magnus-Reihe:

$$\begin{aligned} \Omega(t) &= \int_{t_0}^t V(s)ds - \frac{1}{2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s [V(s_1), V(s)] ds_1 ds \\ &+ \frac{1}{4} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^{s_1} [[V(s_2), V(s_1)], V(s)] ds_2 ds_1 ds \\ &+ \frac{1}{12} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^s [V(s_2), [V(s_1), V(s)]] ds_2 ds_1 ds + \dots \end{aligned} \quad (1.44)$$

Die nicht genauer spezifizierten Restterme sind bei stetig differenzierbarem V von der Größenordnung $O((t - t_0)^5)$. Durch Abbruch der Magnus-Reihe und anschließender Approximation der iterierten Integrale durch passende Quadraturformeln ergibt sich ein sogenannter *Magnus-Integrator*. Für eine ausführliche Diskussion dieser Integratoren siehe z.B. [14].

1.4.1 Stochastische Magnus-Integratoren

Wir betrachten jetzt aus Bequemlichkeit die autonome Gleichung

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0 \quad (1.45)$$

mit beschränkten Operatoren V_j ($j = 0, \dots, q$). Weiter folgen wir dem formalen Ansatz in [3], indem wir in (1.44) $V(t)dt$ durch $\sum_{j=0}^q V_j \circ dW^j(t)$ substituieren:

$$\begin{aligned} \Omega(t) &= \sum_{j=0}^q V_j J_{(j)} - \frac{1}{2} \sum_{0 \leq i \neq j \leq q} [V_i, V_j] J_{(ij)} + \frac{1}{4} \sum_{k=0}^q \sum_{0 \leq i \neq j \leq q} [[V_i, V_j], V_k] J_{(ijk)} \\ &\quad + \frac{1}{12} \sum_{i=0}^q \sum_{0 \leq j \neq k \leq q} [V_i, [V_j, V_k]] J_{(k)} [J_{(i)} J_{(j)}] + \dots \\ &= \sum_{j=0}^q V_j J_{(j)} - \frac{1}{2} \sum_{0 \leq i < j \leq q} [V_i, V_j] (J_{(ij)} - J_{(ji)}) \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{k=0}^q \sum_{0 \leq i < j \leq q} [[V_i, V_j], V_k] \left((J_{(ijk)} - J_{(jik)}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} ((J_{(kji)} - J_{(kij)}) + (J_{(jki)} - J_{(ikj)}) \right) + \dots \quad (1.46) \end{aligned}$$

Im zweiten Schritt in (1.46) wurde die Antisymmetrie des Kommutators und die Identität $J_{(i)} J_{(j)} = J_{(ij)} + J_{(ji)}$ (siehe Kapitel 2) ausgenutzt. Die in obiger Formel auftretenden Ausdrücke $A_{ij} := (J_{(ij)} - J_{(ji)})/2$ werden auch als *Lévy-Flächen* bezeichnet (siehe Kapitel 2). Es sei bemerkt, dass eine ähnliche, aber etwas kompliziertere Formel im nicht autonomen Fall angegeben werden kann. Ungeachtet der Konvergenz der Magnus-Reihe (1.46) können damit nach Burrage ([3]) explizite numerische Integratoren durch Abbruch der Magnus-Reihe an einer geeigneten Stelle konstruiert werden. Gemeint sind Verfahren der Form

$$X_{k+1} = \exp(\Omega_k) X_k,$$

wobei $\Omega_k = \sum_{j=0}^q V_j J_{(j)} + \dots$ eine passende Approximation an $\Omega(t_k + h)$ ist. Es ist nicht schwierig zu zeigen, dass die Stabilitätsbedingungen (1.36) und (1.37) in der Situation beschränkter V_j erfüllt sind. Denn aus der Entwicklung

$$X_{k+1} = \left(Id + \Omega_k + \frac{1}{2} \Omega_k^2 + \frac{1}{3!} \Omega_k^3 \sum_{j \geq 0} \frac{3!}{(j+3)!} \Omega_k^j \right) X_k =: X_k + \Phi_k(X_k)$$

und $E_k(\sum_{j=0}^q V_j J_{(j)}) = V_0 J_{(0)}$ ergibt sich $\|E_k(\Phi_k)\| = O(h)$. Weiter folgt aus der Itô-Isometrie: $E_k \|\Phi_k\|^2 = O(h)$, sofern $\left\| \sum_{j \geq 0} \frac{3!}{(j+3)!} \Omega_k^j \right\|$ beschränkt ist. Später werden wir sehen, dass Letzteres der Fall ist, wenn Ω_k schieferhermitesch ist. Darüber hinaus zeigt Burrage in [3], dass das Abbrechen der Magnus-Reihe nach den Kommutatoren der 0-ten bzw. 1-ten bzw. 2-ten Ordnung auf Integratoren der starken globalen Ordnung 0.5 bzw. 1 bzw. 1.5 für $q \geq 2$ führt (für $q = 1$ ergibt sich 1 bzw. 1.5 bzw. 1.5). *Stochastische Magnus-Integratoren* beliebiger Ordnung für lineare stochastische Differentialgleichungen mit beschränkten Koeffizienten werden in [21] analysiert. Ein Nachteil der Magnus-Integratoren besteht offenbar darin, dass in jedem Schritt das Produkt der Exponentialfunktion von einer (nicht diagonalen) Matrix mit einem Vektor bestimmt werden muss. Trotz effektiver Lanczos- oder Tschebyscheff-Approximationen führt dies vor allem

dann zu Schwierigkeiten, wenn viele Pfade berechnet werden sollen. Andererseits wird in [21] gezeigt, dass die Simulation bzw. Approximation der Lévy-Flächen bereits für einen Integrator der globalen Ordnung 1.5 im Allgemeinen noch aufwendiger ist. Daher kann gegebenenfalls ein Integrator der Ordnung 1 trotzdem effektiver sein. Weitere interessante Resultate in Bezug auf exponentielle Integratoren, meist über einen Lie-algebraischen Zugang, sind in den Arbeiten [1], [6], [7], [23] zu finden.

1.4.2 Stochastische Splitting Integratoren

Wir kehren wieder zur deterministischen Gleichung (1.42) zurück, gehen aber von der Zerlegbarkeit des Operators V in eine Summe von $q + 1$ ($q \geq 1$) beschränkter Operatoren V_0, \dots, V_q aus. Dies bedeutet

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j(t)X(t)dt, \quad X(t_0) = X_0. \quad (1.47)$$

Es gelte $[V_i(\cdot), V_j(\cdot)] \neq 0$ für $i \neq j$. Diesmal soll die Lösung via eines Splitting-Ansatzes zu einer gegebenen äquidistanten Schrittweite h approximiert werden. Dazu werden die exakten Flüsse der aufgesplitteten Gleichung (1.47) bzgl. dem Zeitschrittintervall $[t_k, t_{k+1}]$ zu vorgegebenen Zwischenzeitpunkten $t_{k,j}$ ($j = 0, \dots, q$) verwendet, genauer:

$$\begin{aligned} dX^{(0)}(t) &= V_0(t_{k,0})X^{(0)}(t)dt, & X^{(0)}(t_0) &= X_0, \\ &\vdots & & \vdots \\ dX^{(q)}(t) &= V_q(t_{k,q})X^{(q)}(t)dt, & X^{(q)}(t_0) &= X_0. \end{aligned}$$

Die Flüsse hierzu sind offenbar durch die Abbildungen $\varphi_{j,k,t} : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$, $x \mapsto e^{V_j(t_{k,j})(t-t_k)x}$ ($j = 0, \dots, q$, $x \in \mathbb{C}^d$) gegeben. Damit wird ein (exponentielles) Splitting Verfahren wie folgt definiert:

$$X_{k+1} = \varphi_{q,k,t_{k+1}}(\dots \varphi_{0,k,t_{k+1}}(X_k)) = e^{V_q(t_{k,q})h} \dots e^{V_0(t_{k,0})h} X_k.$$

Wir nennen q *Splitting-Index*. Wir wollen aber allgemeinere Splitting Verfahren untersuchen:

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= \Psi_{k,h}^{(s)} X_k \\ &= e^{b_{qs}hV_q(t_{k,c_{qs}})} \dots e^{b_{1s}hV_1(t_{k,c_{1s}})} e^{a_s hV_0(t_{k,d_s})} \dots e^{b_{q1}hV_q(t_{k,c_{q1}})} \dots e^{b_{11}hV_1(t_{k,c_{11}})} e^{a_1 hV_0(t_{k,d_1})} X_k \end{aligned}$$

mit Konstanten $b_{ij}, a_j \in \mathbb{R}$ für $i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$, die die Konsistenzbedingungen

$$\sum_{j=1}^s a_j = 1, \quad \sum_{j=1}^s b_{ij} = 1$$

erfüllen, und gegebenen Zwischenzeitpunkten $t_{k,d_j} = t_k + hd_j$, $t_{k,c_{ij}} = t_k + hc_{ij} \in [t_k, t_{k+1}]$ ($i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$). Wir bezeichnen s als *Kompositions-Index*. Wir geben zwei fundamentale Beispiele für zeitunabhängige V_0, \dots, V_q :

Beispiel 1.8. (i) *Der (einfachste) Splitting Integrator* ($s = 1$)

$$X_{k+1} = e^{V_q h} \dots e^{V_0 h} X_k$$

ist von globaler Ordnung 1 (siehe [11, Chapter II.5]).

(ii) *Das Strang- oder symmetrische Trotter-Splitting* ($s = 2$)

$$X_{k+1} = e^{V_0 h/2} \dots e^{V_{q-1} h/2} e^{hV_q} e^{V_{q-1} h/2} \dots e^{V_0 h/2} X_k$$

ist von globaler Ordnung 2 (siehe [11, Chapter II.5]).

Darüber hinaus zeigt Yoshida in [39] über einen allgemeineren Lie-algebraischen Zugang und der *Baker-Campbell-Hausdorff-Formel*, wie Splitting Integratoren auch für die Gleichung (1.47) für $q = 1$ von beliebig hoher gerader Ordnung konstruiert werden können.

Beispiel 1.9. In [39] wird z.B. das (symmetrische) Yoshida-Splitting der globalen Ordnung 4 für $q = 1$

$$X_{k+1} = e^{V_0 h \zeta / 2} e^{V_1 h \zeta} e^{V_0 h (1-\zeta) / 2} e^{V_1 h (1-2\zeta)} e^{V_0 h (1-\zeta) / 2} e^{V_1 h \zeta} e^{V_0 h \zeta / 2} X_k$$

hergeleitet. Dabei ist die reelle Zahl ζ durch die kubische Gleichung $6\zeta(\zeta - 1)^2 = 1$ eindeutig bestimmt.

Für die Konstruktion (symmetrischer) Splitting Integratoren erweist sich dabei das Konzept der adjungierten Methode $\Psi_{k,h}^{(s)*} := \left(\Psi_{k,-h}^{(s)}\right)^{-1}$ als fruchtbar. Dieses wird durch die Eigenschaft des exakten Flusses, sagen wir φ_t , der autonomen Gleichung

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j X(t) dt, \quad X(t_0) = X_0$$

motiviert. Denn es gilt $\varphi_t = \varphi_{-t}^{-1} = \varphi_t^*$. Z.B. ergibt sich das Strang-Splitting aus der Komposition $\Phi_{k,h}^{(2)} := \Psi_{k,h/2}^{(1)*} \Psi_{k,h/2}^{(1)}$ und das Yoshida-Splitting durch

$$\Psi_{k,\zeta h/2}^{(1)*} \Psi_{k,\zeta h/2}^{(1)} \Psi_{k,(1-2\zeta)h/2}^{(1)*} \Psi_{k,(1-2\zeta)h/2}^{(1)} \Psi_{k,\zeta h/2}^{(1)*} \Psi_{k,\zeta h/2}^{(1)} = \Phi_{k,\zeta h}^{(2)} \Phi_{k,(1-2\zeta)h}^{(2)*} \Phi_{k,\zeta h}^{(2)}.$$

Für ein ausführliches Studium der Splitting Integratoren -auch ungerader Ordnung- siehe [11, Chapter III.5.3]. Nebenbei bemerken wir, dass durch die fehlende Zeitreversibilität bei stochastischen Differentialgleichungen nicht klar ist, wie die adjungierte Methode für einen stochastischen Splitting Integrator zu definieren ist. Dabei ist ein stochastischer Splitting Integrator bzgl. Gleichung (1.41) wie folgt erklärt:

Definition 1.14. Ein stochastisches Splitting Verfahren ist durch

$$X_{k+1} = \Psi_k^{(s)} X_k \tag{1.48}$$

gegeben, wobei X_k als Approximation an die exakte Lösung X zur Gleichung (1.41), also

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j(t) X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0,$$

an der Stelle t_k aufgefasst wird. $\Psi_k^{(s)}$ ist rekursiv über

$$\Psi_k^{(j)} = \left(e^{b_{qj}^{(k)} V_q(t_k, c_{qj})} \dots e^{b_{1j}^{(k)} V_1(t_k, c_{1j})} e^{a_j^{(k)} V_0(t_k, d_j)} \right) \Psi_k^{(j-1)}, \quad \Psi_k^{(0)} = Id \tag{1.49}$$

für $j = 1, \dots, s$ definiert. Hierbei sind für $i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$, $k = 0, 1, \dots$, $a_j^{(k)}$, $b_{ij}^{(k)}$ skalare reellwertige Zufallsvariablen, die ausschließlich vom Integrationsintervall $[t_k, t_{k+1}]$ abhängen. Darüber hinaus soll für $1 \leq i \leq q$, $1 \leq j \leq s$ $b_{ij}^{(k)}$, $a_j^{(k)}$ $\mathcal{F}_{t_{k+1}}$ -messbar und für $s \leq t_k$ unabhängig von \mathcal{F}_s sein, also insbesondere

$$\begin{aligned} E_{t_k}(b_{ij}^{(k)}) &= E(b_{ij}^{(k)}), & E_{t_k}(a_j^{(k)}) &= E(a_j^{(k)}), \\ E_{t_{k+1}}(b_{ij}^{(k)}) &= b_{ij}^{(k)}, & E_{t_{k+1}}(a_j^{(k)}) &= a_j^{(k)}. \end{aligned}$$

Zugunsten der Übersichtlichkeit wird im Folgenden die k -Abhängigkeit nicht mehr betont und die Notation

$$b_{ij} := b_{ij}^{(k)}, \quad a_j := a_j^{(k)}$$

benutzt. Auch wird gelegentlich die vereinheitlichende Notation

$$b_{0j} := a_j, \quad t_{k,c_{0j}} := t_{k,d_j}$$

für $j = 1, \dots, s$ Verwendung finden. Schließlich sind $t_{k,d_j} = t_k + hd_j$, $t_{k,c_{ij}} = t_k + hc_{ij} \in [t_k, t_{k+1}]$ feste, nicht zufällige Knoten.

Formal kann (1.49) mit Hilfe der Exponentialreihe auch wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(j)} &= \left(\prod_{l=0}^q e^{b_{lj} V_l(t_{k,c_{lj}})} \right) \Psi_k^{(j-1)} = \prod_{i=1}^j \left(\prod_{l=0}^q e^{b_{li} V_l(t_{k,c_{li}})} \right) \\ &= \left(\sum_{m_0, \dots, m_q \geq 0} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{lj}^{m_l}}{m_l!} V_l^{m_l}(t_{k,c_{lj}}) \right) \right) \Psi_k^{(j-1)} \\ &= \prod_{i=1}^j \left(\sum_{m_{0i}, \dots, m_{qi} \geq 0} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{li}^{m_{li}}}{m_{li}!} V_l^{m_{li}}(t_{k,c_{li}}) \right) \right). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Hierbei wurde für (nicht notwendig kommutierende) lineare Operatoren \mathfrak{L}_j ($j = 0, \dots, q$) für $0 \leq m, k \leq q$ die Konvention

$$\prod_{j=m}^k \mathfrak{L}_j = \begin{cases} \mathfrak{L}_k \cdots \mathfrak{L}_m, & \text{falls } m \leq k, \\ Id, & \text{falls } m > k \end{cases} \quad (1.51)$$

eingeführt. In Bezug auf das Zeitschrittintervall $[t_k, t_{k+1}]$ setzen wir für $j = 1, \dots, s$ folgende Momentenbedingungen an: Für alle

$$\gamma = (m_{01}, \dots, m_{q1}, \dots, m_{0j}, \dots, m_{qj}) \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^{j(q+1)}$$

mit

$$|\gamma|_o := \sum_{i=1}^j \left(2m_{0i} + \sum_{l=1}^q m_{li} \right) > 0$$

existiere eine von n, h unabhängige Konstante K_γ so, dass

$$E_k |\mathfrak{c}_j^\gamma|^2 = K_\gamma h^{|\gamma|_o}. \quad (1.52)$$

Hierbei wurde der Vektor $\mathfrak{c}_j = (b_{01}, \dots, b_{q1}, \dots, b_{0j}, \dots, b_{qj})$ und die übliche Multiindexnotation

$$\mathfrak{c}_j^\gamma = \prod_{i=1}^j \prod_{l=0}^q b_{li}^{m_{li}}$$

verwendet. Damit später das Theorem 1.4 auf Splitting Integratoren angewendet werden kann, benötigen wir für einen linearen Operator \mathfrak{L} die formale Entwicklung der Exponentialfunktion:

$$e^{\mathfrak{L}} = \sum_{k=0}^{l-1} \frac{1}{k!} \mathfrak{L}^k + \frac{1}{l!} \mathfrak{L}^l r_l(\mathfrak{L}) \quad (l = 1, 2, \dots), \quad (1.53)$$

wobei die Funktion r_l (formal) durch

$$r_l(\mathfrak{L}) = l \int_0^1 (1 - \xi)^{l-1} e^{\xi \mathfrak{L}} d\xi = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{l!}{(m+l)!} \mathfrak{L}^m \quad (1.54)$$

gegeben ist. Offenbar ist die Integraldarstellung der Funktion r_l in (1.54) z.B. für beschränkte Operatoren oder Generatoren von unitären Gruppen wohldefiniert.

Bemerkung 1.11. Später wird uns das Problem der Abschätzung von Ausdrücken der Form

$$E\|e^{b\mathfrak{L}}\|^2, \quad E\|r_l(b\mathfrak{L})\|^2 \quad (l = 1, 2, \dots) \quad (1.55)$$

oft begegnen, wobei b eine stochastische Zeitschrittweite (reelle skalare Zufallsvariable) und \mathfrak{L} ein linearer Operator ist. Im Gegensatz zum deterministischen Fall könnte (1.55), auch wenn \mathfrak{L} beschränkt ist, nur für sehr kleine Zeiten existieren (siehe [1],[21]). Letzteres Problem kann bei Schiefhermiteizität des Operators \mathfrak{L} nicht auftreten, da dann die Terme in (1.55) unabhängig von der Wahl von b unitär, also durch 1 beschränkt sind. Deswegen werden im Folgenden, die in den Splitting Integratoren auftretenden Operatoren als schiefhermitesch angenommen.

Wir präsentieren noch eine nützliche elementare Produktformel für (nicht notwendig kommutierende) Operatoren, die durch Induktion leicht einzusehen ist:

Lemma 1.5. Für lineare Operatoren $\mathfrak{K}_j, \mathfrak{L}_j$ ($j = m, \dots, k, m \leq k$) gilt die diskrete Variation-der-Konstanten-Formel

$$\prod_{j=m}^k (\mathfrak{K}_j + \mathfrak{L}_j) = \prod_{j=m}^k \mathfrak{K}_j + \sum_{j=m}^k \left(\prod_{l=j+1}^k \mathfrak{K}_l \right) \mathfrak{L}_j \prod_{l=m}^{j-1} (\mathfrak{K}_l + \mathfrak{L}_l). \quad (1.56)$$

Unter Anderem damit, zeigen wir:

Lemma 1.6. Die Verfahrensfunktionen

$$\Phi_k = \Psi_k^{(s)} - Id, \quad k = 0, 1, \dots$$

des Splitting Integrators (1.48) bzgl. Gleichung (1.41) erfüllen die Stabilitätsbedingungen (1.36) und (1.37) des Theorems 1.4, falls

- die Konsistenzbedingungen

$$\sum_{j=1}^s b_{ij} = J_{(i)} \quad (i = 0, \dots, q) \quad (1.57)$$

gelten.

- die Funktionen V_i ($i = 0, \dots, q$) schiefhermitesch und Hölder-stetig mit Exponent $1/2$ sind. Letzteres bedeutet, dass eine Konstante $K_{1/2}$ existiert, so dass für $t_0 \leq s, t \leq T$

$$\|V_i(t) - V_i(s)\| \leq K_{1/2}|t - s|^{1/2}.$$

Beweis. Mit den Abkürzungen

$$\mathfrak{B}_{ij} = b_{ij}V_i(t_{k,c_{ij}})r_1(b_{ij}V_i(t_{k,c_{ij}})) \quad (0 \leq i \leq q)$$

für $j = 1, \dots, s$ kann $\Psi_k^{(s)}$ mittels (1.53) formal auch als Produkt

$$\Psi_k^{(s)} = \prod_{j=1}^s \left(\prod_{i=0}^q (Id + \mathfrak{B}_{ij}) \right)$$

geschrieben werden. Zuerst erhalten wir durch Anwendung der diskreten Variation-der-Konstanten-Formel (1.56) mit $\mathfrak{K}_i = Id, \mathfrak{L}_i = \mathfrak{B}_{ij}$ ($i = 0, \dots, q$) für $j = 1, \dots, s$:

$$\prod_{i=0}^q (Id + \mathfrak{B}_{ij}) = Id + \sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} \prod_{l=0}^{i-1} (Id + \mathfrak{B}_{lj}).$$

Nochmaliges Benutzen der Produktformel (1.56) mit $\mathfrak{K}_j = Id$, $\mathfrak{L}_j = \sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} \prod_{l=0}^{i-1} (Id + \mathfrak{B}_{lj})$ ($j = 1, \dots, s$) liefert

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(s)} &= Id + \sum_{j=1}^s \left(\sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} \prod_{l=0}^{i-1} (Id + \mathfrak{B}_{lj}) \right) \prod_{l=1}^{j-1} \left(Id + \sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{il} \prod_{m=0}^{i-1} (Id + \mathfrak{B}_{ml}) \right) \\ &= Id + \sum_{j=1}^s \left(\sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} (Id + R_{ij}) \right) (Id + R_j) \\ &= Id + \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} + \tilde{R}_s, \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \sum_{l=0}^{i-1} \mathfrak{B}_{lj} \prod_{m=0}^{l-1} e^{b_{mj} V_m(t_k, c_{mj})}, \\ R_j &= \sum_{l=1}^{j-1} \left(\sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{il} \prod_{m=0}^{i-1} e^{b_{ml} V_m(t_k, c_{ml})} \right) \Psi_k^{(l-1)}, \\ \tilde{R}_s &= \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q \mathfrak{B}_{ij} (R_j + R_{ij} + R_{ij} R_j). \end{aligned}$$

Außerdem ist $\mathfrak{B}_{ij} = b_{ij} V_i(t_k, c_{ij}) + \hat{R}_{ij}$, wobei $\hat{R}_{ij} = \frac{1}{2} (b_{ij} V_i(t_k, c_{ij}))^2 r_2(b_{ij} V_i(t_k, c_{ij}))$. Damit folgt:

$$\Phi_k = \Psi_k^{(s)} - Id = \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q b_{ij} V_i(t_k, c_{ij}) + R_{s,k},$$

wobei $R_{s,k} = \tilde{R}_s + \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q \hat{R}_{ij}$. Des Weiteren genügt es aufgrund der Linearität von Φ_k

$$\|E_k(\Phi_k)\| = O(h), \quad (1.58)$$

$$E_k \|\Phi_k\|^2 = O(h) \quad (1.59)$$

zu zeigen. Zunächst folgt aus der (Hölder-) Stetigkeit der V_j ihre Beschränktheit auf $[t_0, T]$, also existieren Konstanten M_j mit $\|V_j(t)\| \leq M_j$ für alle $t \in [t_0, T]$, $j = 0, \dots, q$. Wir stellen mittels der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13) fest:

$$\begin{aligned} E_k \|R_{s,k}\|^2 &\leq 4s(q+1) \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q \left(E_k \|\mathfrak{B}_{ij} R_j\|^2 + E_k \|\mathfrak{B}_{ij} R_{ij}\|^2 + E_k \|\mathfrak{B}_{ij} R_{ij} R_j\|^2 + E_k \|\hat{R}_{ij}\|^2 \right) \\ &=: 4s(q+1) \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q \left(d_{ij}^{(1)} + d_{ij}^{(2)} + d_{ij}^{(3)} + d_{ij}^{(4)} \right). \end{aligned}$$

Dabei ergibt sich aus den Momentenbedingungen (1.52), der Beschränktheit, Schiefhermiteizität der V_j , und wiederum der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13):

$$\begin{aligned} d_{ij}^{(1)} &\leq (j-1)(q+1) \sum_{l=1}^{j-1} \sum_{i=0}^q M_i^4 E_k |b_{ij} b_{il}|^2 \leq K_{ij}^{(1)} h^2, \\ d_{ij}^{(2)} &\leq i \sum_{l=1}^{i-1} M_i^2 M_l^2 E_k |b_{ij} b_{lj}|^2 \leq K_{ij}^{(2)} h^2, \\ d_{ij}^{(3)} &\leq i(j-1)(q+1) \sum_{n=0}^{i-1} \sum_{l=1}^{j-1} \sum_{i=0}^q M_n^2 M_i^4 E_k |b_{ij} b_{nj} b_{il}|^2 \leq K_{ij}^{(3)} h^3, \\ d_{ij}^{(4)} &\leq \frac{1}{4} M_i^4 E_k |b_{ij}^2|^2 \leq K_{ij}^{(4)} h^2, \end{aligned}$$

wobei $K_{ij}^{(l)}$ für $l = 1, 2, 3, 4$ von i, j, q, M_m ($m = 0, \dots, q$) abhängt. Somit erhalten wir

$$E_k \|R_{s,k}\|^2 \leq Kh^2, \quad (1.60)$$

wobei $K = K(s, q, M_j$ ($j = 0, \dots, q$), $T - t_0$). Mit ähnlichen Argumenten folgt:

$$E_k \left\| \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q b_{ij} V_i(t_{k,c_{ij}}) \right\|^2 \leq s(q+1) \sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q E_k |b_{ij}|^2 M_i \leq Kh,$$

wobei $K = K(s, q, M_j$ ($j = 0, \dots, q$)), und deswegen auch (1.59). Darüber hinaus resultiert aus (1.60):

$$\|E_k(R_{s,k})\| \leq (E_k \|R_{s,k}\|^2)^{1/2} = O(h). \quad (1.61)$$

Schließlich folgt wegen der Hölder-Stetigkeit der V_i ($i = 0, \dots, q$), (1.57) und (1.52):

$$\begin{aligned} \left\| E_k \left(\sum_{j=1}^s \sum_{i=0}^q b_{ij} V_i(t_{k,c_{ij}}) \right) \right\| &\leq \sum_{i=0}^q \left\| \sum_{j=1}^s E_k(b_{ij}) V_i(t_{k,c_{ij}}) \right\| \\ &= \sum_{i=0}^q \left\| \sum_{j=1}^s E_k(b_{ij}) (V_i(t_{k,c_{ij}}) - V_i(t_k)) \right\| \\ &\leq \sum_{i=0}^q \sum_{j=1}^s |E_k(b_{ij})| \|V_i(t_{k,c_{ij}}) - V_i(t_k)\| \\ &\leq \sum_{i=0}^q \sum_{j=1}^s (E_k |b_{ij}|^2)^{1/2} K_{1/2} (|c_{ij}|h)^{1/2} \leq Kh, \end{aligned}$$

wobei $K = K(s, q, K_{1/2})$. Zusammen mit (1.61) erhalten wir die Abschätzung (1.58). \square

Bemerkung 1.12. Das Lemma 1.6 gilt insbesondere, wenn die Funktionen V_j ($j = 0, \dots, q$) als zeitunabhängig oder stetig differenzierbar vorausgesetzt werden.

Bisher waren nur wenige (und keine allgemeinen) Resultate zur starken Konvergenz für stochastische Splitting Integratoren für lineare stochastische Differentialgleichungen bekannt. Z.B. zeigt Misawa in [29] lediglich in einem gewissen 'schwachen Sinn', dass das stochastische Strang-Splitting

$$X_{k+1} = e^{V_0 h/2} e^{V_1 \Delta W_k} e^{V_0 h/2} X_k$$

angewandt auf Gleichung (1.45) für $q = 1$ von starker globaler Ordnung 1 ist. Jedoch werden wir im 3. Kapitel das Theorem 1.4 und das vorangegangene Lemma verwenden, um ein allgemeines Kriterium für die starke globale Ordnung eines Splitting Integrators zu beweisen.

Kapitel 2

Shuffle Algebren und iterierte stochastische Integrale

Überwiegend basierend auf der Arbeit [9] und den Kapiteln 0, 1, 5, 7 des Buches [34] werden zunächst Zusammenhänge von Shuffle Algebren mit iterierten stochastischen Integralen erläutert. Unter Ausnutzung von Strukturen der Shuffle Algebren werden Formeln zur Berechnung von Erwartungswerten von Produkten iterierter Stratonovich Integrale hergeleitet, die durch ein Matlab Programm (siehe Anhang A) zur Berechnung solcher Produkte umgesetzt wurde. Da im Allgemeinen einerseits die Simulation iterierter stochastischer Integrale sehr kompliziert ist, andererseits aber häufig ein gegebenes Integral mittels anderer Integrale polynomiell dargestellt werden kann, ist es unabdingbar die unabhängigen iterierten stochastischen Integrale heraus zu filtern. Dazu wird eine spezielle Basis, die Lyndon-Basis, einer Shuffle Algebra vorgestellt, mit Hilfe derer diese unabhängigen Integrale identifiziert werden können. Schließlich werden Möglichkeiten zur Approximation der (unabhängigen) iterierten stochastischen Integrale präsentiert, die in den Kapiteln 3 und 4 bei den numerischen Experimenten Anwendung finden.

2.1 Shuffle Algebren

Bei der Analyse, sowohl der schwachen als auch der starken Konvergenz, tritt in natürlicher Weise ein Problem auf, nämlich die Berechnung von Momenten oder allgemeiner von Erwartungswerten von Produkten von iterierten stochastischen Integralen. Hierbei bezieht sich das Wichtigste auf iterierte Stratonovich-Integrale, genauer: Für Multiindizes $\alpha_j \in \mathcal{M}_q$ ($j = 1, \dots, m$) ist

$$E \left(\prod_{j=1}^m J_{\alpha_j} \right)$$

zu bestimmen. Hierzu erinnern wir, dass sich genau das Stratonovich-Integral, durch seine Eigenschaft den klassischen Kalkül der Differential- und Integralrechnung zu erhalten, gegenüber den anderen stochastischen Integralen auszeichnet. Insbesondere haben wir die Formel für partielle Integration für Stratonovich-Integrale zur Verfügung (siehe [3]). Mit anderen Worten, für $\alpha_1 = (i_1, \dots, i_{l_1})$, $\alpha_2 = (k_1, \dots, k_{l_2}) \in \mathcal{M}_q$ gilt

$$J_{\alpha_1} \cdot J_{\alpha_2} = J_{(i_1)}[J_{\alpha_1-} \cdot J_{\alpha_2}] + J_{(k_{l_2})}[J_{\alpha_1} \cdot J_{\alpha_2-}]. \quad (2.1)$$

Wir stellen nach wiederholter Anwendung der Formel (2.1) fest, dass das Produkt zweier Stratonovich-Integrale als ganzzahlige Linearkombination von iterierten Stratonovich-Integralen geschrieben werden kann. Präziser:

$$J_{\alpha_1} \cdot J_{\alpha_2} = \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha_1, \alpha_2}} r_\gamma J_\gamma, \quad (2.2)$$

wobei auf die Menge $\mathcal{S}_{\alpha_1, \alpha_2}$, die als die Menge aller *Shuffles* von α_1 und α_2 bezeichnet wird, später noch eingegangen wird. Außerdem wird r_γ als die Vielfachheit des Auftretens des Shuffles γ interpretiert. Bevor geklärt wird inwiefern die Formel (2.2) zur Lösung des obig gestellten Problems beiträgt, wird die algebraische Struktur der Shuffles genauer erläutert (siehe z.B. [34, Chapter 1]). Sei dazu A eine endliche Menge deren Elemente als Buchstaben bezeichnet seien. Die Menge A wird auch Alphabet genannt. Zudem werden endliche Folgen von Buchstaben als Wörter bezeichnet, wobei auch die leere Folge -das leere Wort- $\mathbf{1}$ zugelassen ist.

Definition 2.1. *Auf der Menge A^* aller Wörter, wird durch Verknüpfung (engl.: concatenation) $w = uv$ zweier Worte $u, v \in A^*$ ein Produkt erklärt.*

Durch dieses Produkt wird A^* zu einem freien Monoid (siehe [34, Proposition 1.1]). Z.B. ist jedes Wort das Produkt seiner Buchstaben (von links nach rechts). Wir führen noch weitere Begriffe ein: Ein Wort u wird als *Faktor* eines Wortes w bezeichnet, falls $w = xuy$ für gewisse Wörter x, y . Ist $x = \mathbf{1}$, so wird u *Linksfaktor* oder *Präfix* von w genannt. Entsprechend wird der *Rechtsfaktor* oder das *Suffix* erklärt. Der Faktor u heißt *echt*, wenn $u \neq w$, und *nicht trivial*, wenn $u \neq \mathbf{1}$. Mittels obig definiertem Produkt auf A wird der \mathbb{K} -Modul $\mathbb{K}[A]$, für einen kommutativen Ring $\mathbb{K} \subseteq \mathbb{R}$ mit Eins, zu einer freien assoziativen \mathbb{K} -Algebra (siehe [34, Proposition 1.2]). Außerdem kann auf $\mathbb{K}[A]$ in folgender Weise eine assoziative und kommutative algebraische Struktur eingeführt werden:

Definition 2.2. *Es sei $\sqcup : \mathbb{K}[A] \times \mathbb{K}[A] \rightarrow \mathbb{K}[A]$ eine bilineare Abbildung mit den folgenden Eigenschaften:*

$$(i) \quad \mathbf{1} \sqcup \mathbf{1} = \mathbf{1},$$

$$(ii) \quad \mathbf{1} \sqcup w = w \sqcup \mathbf{1} \text{ für } w \in A^*,$$

$$(iii) \quad (ux) \sqcup (vy) = (u \sqcup (vy))x + ((ux) \sqcup v)y \text{ für } x, y \in A, u, v \in A^*.$$

Die Abbildung \sqcup heißt *Shuffle Produkt* und das Paar $(\mathbb{K}[A], \sqcup)$ wird als *Shuffle Algebra* bezeichnet. Für das k -fache Shuffle Produkt eines Wortes u werden wir auch $u^{\sqcup k}$ schreiben.

Das Shuffle Produkt behält die Reihenfolge der Buchstaben jedes Faktors bei, somit tritt jeder Faktor als *Subwort* auf. Dabei ist ein Wort $u = u_1 \dots u_n$ ($u_j \in A$) ein Subwort eines Wortes $w \in A^*$, wenn Wörter $w_j \in A^*$ ($j = 1, \dots, n+1$) existieren, so dass $w = w_1 u_1 w_2 u_2 \dots w_n u_n w_{n+1}$. Insbesondere kann das Shuffle Produkt von Wörtern w_j ($j = 1, \dots, m$) als homogenes Polynom vom Grad $l = \sum_{j=1}^m \ell(w_j)$ ($\ell(w) =$ Anzahl der Buchstaben im Wort w) aufgefasst werden, denn

$$w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m = \sum_{w \in A^*} (w, w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m) w = \sum_{w \in \mathcal{S}_{w_1, \dots, w_m}} (w, w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m) w.$$

Dazu haben wir folgende Notation benutzt:

Definition 2.3. *Die Vielfachheit -die Häufigkeit des Auftretens- eines Wortes w im Shuffle Produkt $w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m$ wird mit $(w, w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m) \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ bezeichnet, und die Menge aller Shuffles von w_1, \dots, w_m durch*

$$\mathcal{S}_{w_1, \dots, w_m} = \{w \in A^* : (w, w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m) \neq 0\}$$

definiert.

Dabei ist $\mathcal{S}_{w_1, \dots, w_m}$ eine endliche Menge, die im schlimmsten Fall $l! / \prod_{j=1}^m \ell(w_j)!$ Elemente umfasst. Darüber hinaus gilt

$$\sum_{w \in \mathcal{S}_{w_1, \dots, w_m}} (w, w_1 \sqcup \dots \sqcup w_m) = \frac{l!}{\prod_{j=1}^m \ell(w_j)!}.$$

Bemerkung 2.1. Die über die Vielfachheiten eingeführte bilineare Abbildung $(\cdot, \cdot) : \mathbb{K}[A] \times \mathbb{K}[A] \rightarrow \mathbb{K}$ definiert ein Skalarprodukt auf der Algebra $\mathbb{K}[A]$ mit der orthonormalen Basis A^* (siehe [34, Chapter 1]), d.h., für ein Polynom $P \in \mathbb{K}[A]$ gilt

$$P = \sum_{w \in A^*} (P, w)w.$$

Beispiel 2.1. Betrachte für Buchstaben $u_0, u_1 \in A$ das Shuffle Produkt der Wörter $w_1 = u_0u_1u_0$ und $w_2 = u_1u_0$:

$$w_1 \sqcup w_2 = 2u_1u_0u_0u_1u_0 + 2u_0u_1u_0u_1u_0 + 4u_0u_1u_1u_0u_0 + 2u_1u_0u_1u_0u_0.$$

Es ist

$$\mathcal{S}_{w_1, w_2} = \{u_1u_0u_0u_1u_0, u_0u_1u_0u_1u_0, u_0u_1u_1u_0u_0, u_1u_0u_1u_0u_0\},$$

$$l = 5, l! / \prod_{j=1}^m \ell(w_j)! = 10 \text{ und } |\mathcal{S}_{w_1, w_2}| = 4.$$

Ein Vergleich der Formeln (2.1) und (iii) aus Definition 2.2 legt einen Zusammenhang zwischen Produkten iterierter Stratonovich-Integrale und dem Shuffle Produkt von Wörtern nahe. Dieser Zusammenhang soll im Folgenden skizziert werden. Sei hierzu $A = \{u_0, \dots, u_q\}$ eine $q+1$ elementige Menge von Buchstaben. Gaines ([9]) hat gezeigt, dass ein-eindeutige Abbildungen F_j ($j = 1, 2$) existieren, so dass für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$

$$\begin{aligned} F_1(J_\alpha) &= u_{i_1} \cdots u_{i_l}, \\ F_2(I_\alpha) &= u_{i_1} \cdots u_{i_l} \end{aligned}$$

gilt. Es gilt noch mehr:

Proposition 2.1. (Gaines) Die Algebren $\mathbb{K}[\mathcal{J}_q]$ und $\mathbb{K}[\mathcal{I}_q]$ sind mittels der Abbildungen F_j ($j = 1, 2$) zur Algebra $\mathbb{K}[A]$ isomorph.

Mit Hilfe von Proposition 2.1 kann Folgendes gezeigt werden:

Theorem 2.1. (Gaines) Das Produkt zweier Stratonovich-Integrale ist ein Shuffle Produkt. Zudem induziert die Abbildung F_1 die Algebra-Isomorphie

$$(\mathbb{K}[\mathcal{J}_q], \cdot) \cong (\mathbb{K}[A], \sqcup).$$

Mittels Theorem 2.1 deduzieren wir für die in Gleichung (2.2) eingeführten Vielfachheiten r_γ und die Menge $\mathcal{S}_{\alpha_1, \alpha_2}$ die Formeln

$$\begin{aligned} r_\gamma &= (\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2), \\ \mathcal{S}_{\alpha_1, \alpha_2} &= \{\gamma \in \mathcal{M}_q : (\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2) \neq 0\}. \end{aligned}$$

Beispiel 2.2. Für $\alpha_1 = (101)$, $\alpha_2 = (110)$ gilt

$$J_{\alpha_1} \cdot J_{\alpha_2} = 3J_{(111010)} + 6J_{(111001)} + 4J_{(110110)} + 3J_{(110101)} + 3J_{(101110)} + J_{(101101)}$$

mit $l = \ell(\alpha_1) + \ell(\alpha_2) = 6$, $l! / (\ell(\alpha_1)! \ell(\alpha_2)!) = 20$ und $|\mathcal{S}_{\alpha_1, \alpha_2}| = 6$.

Abschließend bemerken wir, dass das (gewöhnliche) Produkt zweier Itô-Integrale kein Shuffle-Produkt induziert. Denn es gilt für $\alpha_1 = (i_1, \dots, i_{l_1})$, $\alpha_2 = (k_1, \dots, k_{l_2}) \in \mathcal{M}_q$ (siehe [9, Proposition 2.3]):

$$I_{\alpha_1} \cdot I_{\alpha_2} = I_{(k_{l_2})}[I_{\alpha_1} \cdot I_{\alpha_2-}] + I_{(i_{l_1})}[I_{\alpha_1-} \cdot I_{\alpha_2}] + \tilde{\delta}_{i_{l_1} k_{l_2}} I_{(0)}[I_{\alpha_1-} \cdot I_{\alpha_2-}], \quad (2.3)$$

wobei

$$\tilde{\delta}_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{falls } i = j \neq 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Aber durch das sogenannte *Wick-Produkt* (siehe [20], [19]) kann eine Shuffle-Algebra-Struktur auf $\mathbb{K}[\mathcal{I}_q]$ erzeugt werden, und somit eine ähnliche Isomorphie von Shuffle Algebren wie in Theorem 2.1 erzielt werden (siehe dazu [9, Proposition 2.4]).

2.2 Erwartungswerte von Produkten iterierter stochastischer Integrale

Wir erörtern in diesem Abschnitt den Zusammenhang zwischen den Tatsachen, dass Produkte iterierter Stratonovich-Integrale als Linearkombination von Stratonovich-Integralen (größerer konstanter Länge) geschrieben werden können und der Berechnung von Erwartungswerten von Produkten iterierter Stratonovich-Integrale. Dabei wird ein Resultat von Burrage ([3, Theorem 2.6.3]) verallgemeinert und zugleich der Beweis dazu, unter zu Hilfenahme von Shuffle-Algebra-Strukturen, vereinfacht. Hierbei spielt eine Umrechnungsformel zwischen Stratonovich- und Itô-Integralen eine wichtige Rolle. Zuvor erinnern wir an die Schreibweise $(e_{jk}) = (j, \dots, j)$ mit $\ell((e_{jk})) = k$ ($j = 1, \dots, q$) für Block-Multiindizes und führen einige neue Notationen ein.

Definition 2.4. *Es sei \mathcal{E}_α die Menge, die abgesehen von $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ alle weiteren Multiindizes enthält, bei denen eine beliebige Anzahl an Paaren (i_{j-1}, i_j) mit $\tilde{\delta}_{i_{j-1} i_j} = 1$ bzw. $(i_{j-1}, i_j) = (e_{i_2})$ für ein $i \in \{1, \dots, q\}$ durch eine einzige Null ersetzt wurden. Weiter sei $k_\alpha = (\mathbf{e}(\alpha) - \min_{\beta \in \mathcal{E}_\alpha} \mathbf{e}(\beta))/2$.*

Bemerkung 2.2. \mathcal{E}_α ist eine disjunkte Vereinigung von Mengen $\mathcal{E}_{\alpha, k}$, also

$$\mathcal{E}_\alpha = \dot{\cup}_{k=0}^{k_\alpha} \mathcal{E}_{\alpha, k},$$

die jeweils alle Multiindizes enthalten, bei denen exakt k Paare (e_{j2}) ($j = 1, \dots, q$) ersetzt wurden. Stets sind $\mathcal{E}_{\alpha, k_\alpha}$, $\mathcal{E}_\alpha \neq \emptyset$. Offensichtlich ist genau dann $\mathcal{E}_{\alpha, k_\alpha} = \{(n_{\alpha(\alpha)})\}$ und damit $k_\alpha = \mathbf{e}(\alpha)/2$, wenn alle in α auftretenden (e_{jk}) -Blöcke für $j = 1, \dots, q$ von gerader Länge sind.

Beispiel 2.3. Für $\alpha = (11011012201)$ ist $k_\alpha = 3$ und

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\alpha = & \{\alpha_{01} = \alpha\} \dot{\cup} \{\alpha_{11} = (0011012201), \alpha_{12} = (1100012201), \alpha_{13} = (1101101001)\} \\ & \dot{\cup} \{\alpha_{21} = (000012201), \alpha_{22} = (110001001), \alpha_{23} = (001101001)\} \dot{\cup} \{\alpha_{31} = (00001001)\}. \end{aligned}$$

Mittels der obigen Notationen können wir die folgende Aussage formulieren:

Lemma 2.1. Für $\alpha \in \mathcal{M}_q$ gilt

$$J_\alpha = \sum_{\beta \in \mathcal{E}_\alpha} 2^{-(\mathbf{e}(\alpha) - \mathbf{e}(\beta))/2} I_\beta = \sum_{k=0}^{k_\alpha} 2^{-k} \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k}} I_\beta, \quad (2.4)$$

wobei für $\beta \in \mathcal{E}_\alpha$: $(\mathbf{e}(\alpha) - \mathbf{e}(\beta))/2 = \ell(\alpha) - \ell(\beta) = \mathbf{n}(\beta) - \mathbf{n}(\alpha) \geq 0$.

Beweis. Nach [1] gilt für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ die Rekursionsformel

$$J_\alpha = I_{(i_l)}[J_{\alpha^-}] + \frac{1}{2} \tilde{\delta}_{i_{l-1} i_l} I_{(0)}[J_{(\alpha^-)^-}].$$

Nach sukzessiver Anwendung dieser Relation ergibt sich die Behauptung. \square

Bevor wir ein weiteres Hilfsmittel heranziehen, werden weitere Notationen vorgestellt. Für einen Multiindex $\alpha \in \mathcal{M}_q$ deklarieren wir α^+ als den Multiindex, der durch Streichung aller Nullen aus α hervorgeht, z.B. für $\alpha = (0103204)$ ist $\alpha^+ = (1324)$. Des Weiteren bezeichne $n_j(\alpha)$ ($j = 1, \dots, e(\alpha) + 1$) die Länge des j -ten Nullblocks vom linken Ende von α an gezählt, der sich entweder an den Rändern oder zwischen dem $(j-1)$ -ten und dem j -ten Nicht-Null Eintrag befindet. Z.B. für obiges α ist $n_1(\alpha) = 1$, $n_2(\alpha) = 1$, $n_3(\alpha) = 0$, $n_4(\alpha) = 1$ und $n_5(\alpha) = 0$. Wir notieren das folgende nützliche Resultat:

Lemma 2.2. (Kloeden & Platen) Für $\alpha, \beta \in \mathcal{M}_q$ gilt

$$E(I_\alpha I_\beta) = \begin{cases} 0, & \text{falls } \alpha^+ \neq \beta^+, \\ \frac{I_{(0)}^{\sigma(\alpha, \beta)}}{\sigma(\alpha, \beta)!} \prod_{j=1}^{e(\alpha)+1} \binom{n_j(\alpha) + n_j(\beta)}{n_j(\beta)} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Bemerkung 2.3. Gaines gibt in [9], durch Ausnutzung von Shuffle-Algebra-Strukturen einen kombinatorischen Beweis für Lemma 2.2, der scheinbar einfacher als jener von Kloeden & Platen in [17, Lemma 5.7.2] ist.

Bemerkung 2.4. Lemma 2.2 impliziert, dass $E(I_\alpha)$ genau dann verschwindet, wenn $\alpha^+ \neq (\emptyset)$ ist. Damit erkennen wir, dass dies für ein Stratonovich-Integral im Allgemeinen nicht zutreffend ist, denn via Lemma 2.1 und Bemerkung 2.2 folgt:

$$\begin{aligned} E(J_\alpha) &= \sum_{k=0}^{k_\alpha} 2^{-k} \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k}} E(I_\beta) = 2^{-k_\alpha} \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k_\alpha}} E(I_\beta) \\ &= \begin{cases} 0, & \text{falls } \beta^+ \neq (\emptyset) \text{ für } \beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k_\alpha} \\ \frac{J_{(0)}^{\sigma(\alpha)}}{2^{e(\alpha)/2} \sigma(\alpha)!}, & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Siehe hierzu auch [3].

Jetzt geben wir eine Formel für das zu Beginn dieses Kapitels angesprochene Problem an.

Lemma 2.3. (i) Für $\alpha_j \in \mathcal{M}_q$ ($j = 1, \dots, m$) gilt

$$E\left(\prod_{j=1}^m J_{\alpha_j}\right) = \begin{cases} 0, & \text{falls } \mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m} = \emptyset, \\ \frac{1}{2^{e/2} \sigma!} J_{(0)}^{\sigma} \sum_{\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \dots \sqcup \alpha_m) & \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.6)$$

wobei $\sigma = \sigma(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, $e = e(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ nicht von $\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$ abhängen und

$$\mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m} := \{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m} : \text{die Länge jedes } (e_{jk})\text{-Blocks in } \gamma \text{ ist gerade}\}.$$

Im Speziellen ist $\mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m} = \emptyset$, wenn e ungerade ist.

(ii) Für $m = 2$ gilt

$$\sum_{\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2) = 2^{e'} \sum_{k=0}^{k'} 2^{-2k} \sum_{(\beta_1, \beta_2) \in \mathcal{E}_{\alpha_1, \alpha_2, k}} \prod_{j=1}^{e'-2k+1} \binom{n_j(\beta_1) + n_j(\beta_2)}{n_j(\beta_2)}, \quad (2.7)$$

wobei $k_{21} = \max\{0, (e(\alpha_2) - e(\alpha_1))/2\}$, $k_{12} = k_{21} - (e(\alpha_2) - e(\alpha_1))/2$, $e' = \min\{e(\alpha_1), e(\alpha_2)\}$, $k' = \min\{k_{\alpha_1}, k_{\alpha_2}\}$ und

$$\mathcal{E}_{\alpha_1, \alpha_2, k} = \{(\beta_1, \beta_2) \in \mathcal{E}_{\alpha_1, k+k_{12}} \times \mathcal{E}_{\alpha_2, k+k_{21}} : \beta_1^+ = \beta_2^+\}.$$

Beweis. Zunächst folgt aus (2.2), (2.4) und Bemerkung 2.4:

$$\begin{aligned} E\left(\prod_{j=1}^m J_{\alpha_j}\right) &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \dots \sqcup \alpha_m) E(J_\gamma) \\ &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \dots \sqcup \alpha_m) \sum_{\beta \in \mathcal{E}_\gamma} 2^{-(e(\gamma) - e(\beta))/2} E(I_\beta) \\ &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \dots \sqcup \alpha_m) 2^{-k_\gamma} \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\gamma, k_\gamma}} E(I_\beta). \end{aligned}$$

Weiter resultiert aus 2.2, dass $e(\beta) = 0$ und gleichzeitig $\beta \in \mathcal{E}_{\gamma, k_\gamma}$ dann und nur dann möglich ist, wenn die Länge jedes in γ auftretenden (e_{jk}) -Blocks für $j = 1, \dots, q$ gerade ist, also $\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}$. In diesem Fall gilt $k_\gamma = e(\gamma)/2 = e(\alpha_1, \dots, \alpha_m)/2 = e/2$ und $\mathcal{E}_{\gamma, k_\gamma} = \{(n_o(\gamma))\} = \{(n_o(\alpha_1, \dots, \alpha_m))\} = \{(n_o)\}$ und die Behauptung (i) folgt.

Um die Formel (2.7) zu zeigen, wenden wir zuerst die Formel (2.4) an und beachten, dass nach (2.5) einige Summanden entfallen:

$$\begin{aligned} E(J_{\alpha_1} J_{\alpha_2}) &= \sum_{k_1=0}^{k_{\alpha_1}} \sum_{k_2=0}^{k_{\alpha_2}} 2^{-(k_1+k_2)} \sum_{\beta_1 \in \mathcal{E}_{\alpha_1, k_1}} \sum_{\beta_2 \in \mathcal{E}_{\alpha_2, k_2}} E(I_{\beta_1} I_{\beta_2}) \\ &= \sum_{k=0}^{k'} 2^{-(2k+k_{12}+k_{21})} \sum_{\beta_1 \in \mathcal{E}_{\alpha_1, k+k_{12}}} \sum_{\beta_2 \in \mathcal{E}_{\alpha_2, k+k_{21}}} E(I_{\beta_1} I_{\beta_2}). \end{aligned}$$

Nach Abspaltung des Faktors $2^{-e(\alpha_1, \alpha_2)/2}$ und nochmaliger Verwendung von (2.5) finden wir nach Vergleich mit (2.6) die Relation (2.7) wieder. \square

Bemerkung 2.5. Die Formel (2.6) gibt nebenbei eine praktische Anleitung zur Berechnung von Produkten iterierter Stratonovich-Integrale. Dies wurde durch das Matlab Programm MOPS umgesetzt, das die zuvor durch die Routine SHPR berechneten Shuffles verwertet (siehe Anhang A). Zumindest für Shuffle Produkte zweier Multiindizes stellt die Formel (2.7) eine effizientere Methode zur Berechnung von $\sum_{\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2}} (\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2)$ dar, da das Bestimmen der Mengen \mathcal{E}_{α_1} und \mathcal{E}_{α_2} in der Regel weniger Aufwand als die Berechnung von $\alpha_1 \sqcup \alpha_2$ in Anspruch nimmt. Die Formel (2.7) ist in das Programm SUMRG (siehe Anhang A) eingebunden.

Beispiel 2.4. (i) In Beispiel 2.2 ist für $\alpha_1 = (101)$ und $\alpha_2 = (110)$ die Menge $\mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2} = \{\gamma = (110110)\}$ und $(\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2) = 4$ und somit

$$E(J_{\alpha_1} J_{\alpha_2}) = (J_{(0)}^4 / (2^2 4!)) 4 = J_{(0)}^4 / 4!.$$

(ii) Sei $\alpha_1 = (101)$ und $\alpha_2 = (1001)$. Es gilt $J_{(101)} = I_{(101)}$ und $J_{(1001)} = I_{(1001)}$. Es ist $\mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2} = \{\gamma = (1100011)\}$ und $(\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2) = 12$. Weiter berechnen wir

$$E(I_{\alpha_1} I_{\alpha_2}) = E(J_{\alpha_1} J_{\alpha_2}) = (J_{(0)}^5 / (2^2 5!)) 12 = J_{(0)}^5 / 40$$

(vergleiche [9]).

(iii) Für $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha = (110)$ gilt $\mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2} = \{\gamma_1 = (110110), \gamma_2 = (111100)\}$, $(\gamma_1, \alpha^{\sqcup 2}) = 2$ und $(\gamma_2, \alpha^{\sqcup 2}) = 12$. Damit folgt

$$E(J_{(110)}^2) = (J_{(0)}^4 / (2^2 4!))(2 + 12) = 7J_{(0)}^4 / 48.$$

(iv) Für $\alpha_1 = (10)$, $\alpha_2 = (10101)$ ist $\mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2} = \emptyset$ und somit $E(J_{\alpha_1} J_{\alpha_2}) = 0$. Dagegen gilt, ist $\alpha_2 = (11001)$, so ist $\mathcal{P}_{\alpha_1, \alpha_2} = \{\gamma = (1100110)\}$ und $(\gamma, \alpha_1 \sqcup \alpha_2) = 2$, also

$$E(J_{\alpha_1} J_{\alpha_2}) = (J_{(0)}^5 / (2^2 5!)) 2 = J_{(0)}^5 / 240.$$

(v) Wir demonstrieren die Effizienz der Formel (2.7) anhand des Beispiels 2.3, indem wir $\sum_{\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha, \alpha}} (\gamma, \alpha^{\sqcup 2})$ berechnen ($\alpha = (11011012201)$): Es ist $e' = 8$; die Menge $\mathcal{E}_{\alpha, \alpha, k}$ enthält für $k = 0$ nur das Paar (α, α) . Für $k = 1, 2$ liegen jeweils 5 Paare vor:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\alpha, \alpha, 1} &= \{(\alpha_{11}, \alpha_{11}), (\alpha_{11}, \alpha_{12}), (\alpha_{12}, \alpha_{11}), (\alpha_{12}, \alpha_{12}), (\alpha_{13}, \alpha_{13})\}, \\ \mathcal{E}_{\alpha, \alpha, 2} &= \{(\alpha_{21}, \alpha_{21}), (\alpha_{22}, \alpha_{22}), (\alpha_{22}, \alpha_{23}), (\alpha_{23}, \alpha_{22}), (\alpha_{23}, \alpha_{23})\} \end{aligned}$$

und für $k = k_\alpha = 3$ gibt es ein Paar $(\alpha_{31}, \alpha_{31})$. Via (2.7) berechnen wir

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma \in \mathcal{P}_{\alpha, \alpha}} (\gamma, \alpha^{\sqcup 2}) &= 2^8 (8 + 2^{-2}(24 + 2 \cdot 8 + 24 + 40) \\ &\quad + 2^{-4}(140 + 120 + 2 \cdot 24 + 72) + 2^{-6}(420)) = 16464. \end{aligned}$$

2.3 Basen von Shuffle Algebren

Kenntnisse über Basen von Shuffle Algebren sind auf der einen Seite zur Vermeidung überflüssiger Simulationen iterierter stochastischer Integrale, die im Allgemeinen sehr aufwendig sind (siehe [17, Chapter 5.8] und den darauf folgenden Abschnitt), sehr nützlich. Auf der anderen Seite sind sie beim Lösen nicht linearer Gleichungssysteme, die iterierte stochastische Integrale involvieren, hilfreich (siehe Kapitel 3). Dazu müssen wir die Algebra $\mathbb{K}[A]$ genauer studieren. Bereits in Bemerkung 2.1 wurde festgehalten, dass A^* eine orthonormale Basis bzgl. des Skalarproduktes (\cdot, \cdot) ist. Wir suchen aber nun nach einer geeigneten Transzendenzbasis für die Shuffle Algebra $(\mathbb{K}[A], \sqcup)$. Hierfür stattdessen wir die Menge $A = \{u_0, \dots, u_q\}$ mit der Ordnung $u_q < \dots < u_0$ und die Menge A^* mit der -durch die Ordnung auf A induzierten- lexikographischen Ordnung aus. D.h., für Wörter $u, v \in A^*$ gilt genau dann $u < v$, wenn entweder $v = ux$ für ein nicht-leeres Wort x , oder $u = xau'$, $v = xbv'$ für Wörter $x, u', v' \in A^*$ und Buchstaben $a < b$. Weiter definieren wir:

Definition 2.5. Ein Lyndon-Wort ist ein nicht leeres Wort, das kleiner als all seine nicht trivialen echten Rechtsfaktoren ist, oder präziser: $w \in A^*$ ist genau dann ein Lyndon-Wort, wenn $w \neq \mathbf{1}$ und wenn für jede Faktorisierung $w = uv$ mit $u, v \neq \mathbf{1}$, $w < v$ gilt. Wir deklarieren die Gesamtheit aller Lyndon-Wörter mit $L = L(A^*)$.

Nach [34, Theorem 5.1 & Corollary 4.7] besitzt jedes $w \in A^*$ eine eindeutige Darstellung als absteigende Faktorisierung in Lyndon-Wörter. Zudem ist obige Definition auch von praktischem Wert, wenn zu Entscheiden ist, ob ein vorliegendes Wort ein Lyndon-Wort ist. Weiter gilt folgendes Theorem:

Theorem 2.2. (i) (Radford, [33]) Die Shuffle Algebra $(\mathbb{Q}[A], \sqcup)$ wird frei von der Menge der Lyndon-Wörter L erzeugt.

(ii) (Melançon & Reutenauer, [25]) Für jedes Wort w mit der Darstellung $w = l_1^{i_1} \cdots l_k^{i_k}$ ($l_i \in L, l_1 > \cdots > l_k, i_1, \dots, i_k \geq 1$) existieren nicht negative ganze Zahlen n_u , so dass

$$\frac{1}{i_1! \cdots i_k!} l_1^{\sqcup i_1} \sqcup \cdots \sqcup l_k^{\sqcup i_k} = w + \sum_{u < w} n_u u. \quad (2.8)$$

Eine erste Folgerung aus Theorem 2.2 stellt eine weitere Charakterisierung der Lyndon-Wörter dar:

Korollar 2.1. Ein Wort w ist genau dann ein Lyndon-Wort, wenn für jede nicht triviale Faktorisierung $w = xy$ ein Shuffle von $x \sqcup y$ existiert, der größer als w ist.

Beweis. Siehe [34, Corollary 6.2]. □

Darüber hinaus gibt die Formel (2.8) einen praktischen Algorithmus zur sukzessiven Berechnung der Darstellung eines Wortes w als Polynom in Lyndon-Wörtern.

Schließlich folgt mittels Proposition 2.1 die Gültigkeit der Theorem 2.2 (i) entsprechenden Aussage für die Shuffle Algebra der Stratonovich-Integrale.

Theorem 2.3. (Gaines) Die Menge

$$L(\mathcal{J}_q) = \{J_\alpha \in \mathcal{J}_q : F_1(J_\alpha) \in L\}$$

bildet eine Transzendenzbasis der Shuffle Algebra $(\mathbb{Q}[\mathcal{J}_q], \sqcup)$.

Bemerkung 2.6. Des Weiteren können genaue Aussagen über die Anzahl \mathbf{n}_q der Lyndon-Wörter einer gegebenen Länge n und die Anzahl $\mathbf{n}_{q,i}$ der Lyndon-Wörter, in denen mit Häufigkeit n_i der Buchstabe u_i ($i = 0, \dots, q$) vorkommt, getroffen werden. Beide Werte lassen sich über die Formeln von Witt berechnen:

$$\mathbf{n}_q(n) = \frac{1}{n} \sum_{d|n} \mu(d) (q+1)^{n/d},$$

$$\mathbf{n}_{q,i}(n) = \frac{1}{n} \sum_{n_0 + \dots + n_q = n} \sum_{d|n_i} \mu(d) \frac{(n/d)!}{(n_0/d)! \cdots (n_q/d)!},$$

wobei μ die Möbius-Funktion ist, die für eine natürliche Zahl d mit Primfaktorzerlegung $d = p_1^{m_1} \cdots p_r^{m_r}$ (p_i sind paarweise verschiedene Primzahlen) durch

$$\mu(d) = \begin{cases} 1, & \text{falls } d = 1, \\ (-1)^r, & \text{falls } m_1 = \dots = m_r = 1, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben ist.

Beweis. Siehe [34, Theorem 7.1 & Corollary 7.7]. □

Beispiel 2.5. Die Anzahl der Basiselemente n_q steigt mit wachsendem n rasch an (asymptotisch nimmt die Anzahl der Basiselemente um den Faktor $(q+1)$ zu). Dies verdeutlicht die folgende Tabelle:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
n_1	2	1	2	3	6	9	18	30	56	99	186	335
n_2	3	3	8	18	48	116	312	810	2184	5880	16104	44220
n_3	4	6	20	60	204	670	2340	8160	29120	104754	381300	1397740

Gaines beweist in [9, Proposition 3.4] eine weitere, Korollar 2.3 entsprechende, Aussage über die Algebra der Itô-Integrale $(\mathbb{Q}[\mathcal{I}_q], \cdot)$, obwohl diese keine Shuffle Algebra ist.

Theorem 2.4. (Gaines) Die Menge

$$L(\mathcal{I}_q) = \{I_\alpha \in \mathcal{I}_q : F_2(I_\alpha) \in L\}$$

bildet eine Transzendenzbasis der Algebra $(\mathbb{Q}[\mathcal{I}_q], \cdot)$.

Für weitere Ergebnisse zu Transzendenzbasen der Algebra der Itô-Integrale siehe z.B. [19] und [35]. Jedoch ist für unsere Zwecke vor allem die Lyndon-Basis für Stratonovich-Integrale interessant. Zur systematischen Erzeugung von Lyndon-Wörtern siehe [34, Chapter 7]. Wir stellen hier nur ein Lemma vor, das oft zusammen mit Bemerkung 2.6 bequem ausreicht, um alle Lyndon-Wörter bis zu einer vorgegebenen Länge zu bestimmen.

Lemma 2.4. Sind u, v Lyndon-Wörter mit $u < v$, dann ist für $i_1, i_2 \in \mathbb{N}$ auch $u^{i_1}v^{i_2}$ ein Lyndon-Wort.

Beweis. Siehe den Beweis von Lemma 7.9 in [34]. □

Nachfolgend sind Beispiele für Lyndon-Basen angegeben (siehe auch [9]), die mit Hilfe von Lemma 2.4 und Bemerkung 2.6 berechnet werden können.

Beispiel 2.6. (i) Die vollständige Liste der Lyndon-Basiselemente der Shuffle Algebra der Stratonovich-Integrale der Länge ≤ 6 für $q = 1$ (bzgl. obig eingeführter Ordnung) ist durch

$$\begin{aligned} & J_{(1)}, J_{(0)}, J_{(10)}, J_{(110)}, J_{(100)}, J_{(1110)}, J_{(1100)}, J_{(1000)}, J_{(11110)}, J_{(11100)}, \\ & J_{(11010)}, J_{(11000)}, J_{(10100)}, J_{(10000)}, J_{(111110)}, J_{(111100)}, J_{(111010)}, \\ & J_{(111000)}, J_{(110100)}, J_{(110010)}, J_{(110000)}, J_{(101000)}, J_{(100000)} \end{aligned}$$

gegeben.

(ii) Die Lyndon-Basiselemente der Länge ≤ 4 im Falle $q = 2$ sind durch

$$\begin{aligned} & J_{(2)}, J_{(1)}, J_{(0)}, J_{(21)}, J_{(20)}, J_{(10)}, J_{(221)}, J_{(220)}, J_{(211)}, J_{(210)}, J_{(201)}, J_{(200)}, J_{(110)}, J_{(100)}, \\ & J_{(2221)}, J_{(2220)}, J_{(2211)}, J_{(2210)}, J_{(2201)}, J_{(2200)}, J_{(2120)}, J_{(2111)}, J_{(2110)}, \\ & J_{(2101)}, J_{(2100)}, J_{(2011)}, J_{(2010)}, J_{(2001)}, J_{(2000)}, J_{(1110)}, J_{(1100)}, J_{(1000)} \end{aligned}$$

gegeben.

Zum Abschluss dieses Abschnitts werden einfache Beispiele zur Darstellung von Stratonovich- und Itô-Integralen als Polynome in der Lyndon-Basis mit Hilfe der Formel (2.8) diskutiert.

Beispiel 2.7. (i) Es sei $\alpha = (101)$ ($q = 1$). Es gilt $\alpha = l_1 l_2$, wobei $l_1 = (10) > (1) = l_2$ ist. Also

$$\alpha = l_1 \sqcup l_2 - \sum_{\beta < \alpha} n_\beta \beta = (10) \sqcup (1) - 2(110),$$

weil $l_1 \sqcup l_2 = 2(110) + (101)$. Daher

$$J_{(101)} = J_{(10)} \cdot J_{(1)} - 2J_{(110)}.$$

(ii) Sei nun $\alpha = (011)$, dann gilt $\alpha = l_1 l_2^2$, wobei $l_1 = (0) > (1) = l_2$ ist. Es folgt

$$\alpha = \frac{1}{2!} l_1 \sqcup l_2^{\sqcup 2} - \sum_{\beta < \alpha} n_\beta \beta = \frac{1}{2}(0) \sqcup (1) \sqcup (1) - (110) - (101).$$

Weiter folgt via (i), dass $\alpha = \frac{1}{2}(0) \sqcup (1) \sqcup (1) - (10) \sqcup (1) + (110)$ und daher

$$J_{(011)} = \frac{1}{2} J_{(0)} \cdot J_{(1)}^2 - J_{(10)} \cdot J_{(1)} + J_{(110)}.$$

(iii) Sei $\alpha = (1021)$. Es ist $\alpha = l_1 l_2$ mit $l_1 = (10) > (21) = l_2$. Also

$$\begin{aligned} \alpha &= l_1 \sqcup l_2 - (1201) - (1210) - (2101) - 2(2110) \\ &= (10) \sqcup (21) + (120) \sqcup (1) - (1) \sqcup (20) + 2(2011) + (2101), \end{aligned}$$

und folglich

$$J_{(1021)} = J_{(10)} \cdot J_{(21)} + J_{(120)} \cdot J_{(1)} - J_{(1)}^2 \cdot J_{(20)} + 2J_{(2011)} + J_{(2101)}.$$

(iv) Sei wieder $\alpha = (101)$. Aber jetzt soll eine Darstellung für I_α gefunden werden. Dazu muss das modifizierte Shuffle Produkt (2.3) betrachtet werden. Damit erhalten wir

$$I_{(101)} = I_{(10)} \cdot I_{(1)} - 2I_{(110)} - \frac{1}{2} I_{(0)}^2.$$

2.4 Effiziente Simulation iterierter Stratonovich-Integrale

2.4.1 Reduktion der Anzahl der zu berechnenden Stratonovich-Integrale

Im Allgemeinen sind iterierte stochastische Integrale höherer Ordnung nicht mehr exakt berechenbar (siehe [17, Chapter 5.8]). Aber auch deren Simulation oder Approximation ist sehr aufwendig. Immerhin hat die vorangegangene Diskussion gezeigt, dass häufig nicht alle iterierten Integrale, die z.B. zu einer (in einem numerischen Verfahren auftretenden) hierarchischen Menge gehören, simuliert werden müssen. Für die in Definition 1.4 erklärten Mengen Λ_r und Θ_r gilt folgende Aussage:

Proposition 2.2. Jedes $\alpha \in \Lambda_r$ bzw. $\alpha \in \Theta_r$ kann als \mathbb{Q} -Linearkombination von Shuffle Produkten, die nur aus Elementen aus $L(\Lambda_r)$ bzw. $L(\Theta_r)$ bestehen, geschrieben werden.

Beweis. Sei $\alpha \in \Lambda_r$ mit der Darstellung $\alpha = l_1^{i_1} \cdots l_k^{i_k}$ (siehe Theorem 2.2) gegeben. Offensichtlich gilt $l_j \in \Lambda_r$ ($j = 1, \dots, k$). Zudem besagt (2.8):

$$\frac{1}{i_1! \cdots i_k!} l_1^{\sqcup i_1} \sqcup \cdots \sqcup l_k^{\sqcup i_k} - \alpha = \sum_{\beta < \alpha} n_\beta \beta.$$

Daher gilt für jedes β mit $n_\beta \neq 0$ in obiger Summe: $\ell(\beta) = \ell(\alpha)$ und $\mathfrak{n}(\beta) = \mathfrak{n}(\alpha)$. Deswegen ist auch jedes β wieder durch eine aufsteigende Verkettung von Lyndon-Wörtern gegeben, wobei jedes dieser Lyndon-Wörter ein Element von $L(\Lambda_r)$ ist. Schließlich folgt die Behauptung aus wiederholter Anwendung der Formel (2.8). Entsprechend ist die Argumentation für $\alpha \in \Theta_r$ durchführbar. \square

Bemerkung 2.7. Eine entsprechende Aussage gilt für die Menge $\Lambda_r \cup \mathcal{B}(\Lambda_r)$ nicht.

Beweis. Wir betrachten dazu die nicht leere Menge

$$\mathcal{R}_r = \{(0, \beta) = \alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\beta) + \mathfrak{n}(\beta) = r\} \subset \mathcal{B}(\Lambda_r),$$

die also alle Elemente $\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)$ mit $\ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha) = r + 2$ umfasst. Es gilt nämlich

$$\Lambda_r \cup \mathcal{B}(\Lambda_r) = \Lambda_{r+1} \dot{\cup} \mathcal{R}_r.$$

Offensichtlich kann ein Wort, das mit einer Null beginnt nur dann ein Lyndon-Wort sein, wenn es das Wort (0) ist. Es gilt also $L(\mathcal{R}_r) = \emptyset$. Das Wort $(0, e_{1r}) \in \mathcal{R}_r$ besitzt die eindeutige Faktorisierung $(0, e_{1r}) = (0)(1)^r$ in Lyndon-Wörtern. Also taucht nach Theorem 2.2 das Lyndon-Wort $(e_{1r}, 0)$ in seiner Darstellung auf. Aber wegen $\ell((e_{1r}, 0)) + \mathfrak{n}((e_{1r}, 0)) = r + 2$ ist $(e_{1r}, 0) \notin L(\Lambda_r \cup \mathcal{B}(\Lambda_r))$. \square

Für $q = 1$ ist z.B. $\Lambda_1 \cup \mathcal{B}(\Lambda_1) = \{(\emptyset), (1), (0), (11), (01)\}$ und $L(\Lambda_1 \cup \mathcal{B}(\Lambda_1)) = \{(1), (0)\}$. Der Multiindex (01) besitzt die Darstellung $(01) = (1) \sqcup (0) - (10)$ in Lyndon-Wörtern, aber $(10) \notin L(\Lambda_1 \cup \mathcal{B}(\Lambda_1))$.

Zudem folgt zusätzlich mit Theorem 2.3:

Korollar 2.2. Jedes $J_\alpha \in \mathcal{J}_q$ mit $\alpha \in \Lambda_r$ bzw. Θ_r besitzt eine Darstellung als \mathbb{Q} -Linearkombination von Produkten, die nur aus iterierten Stratonovich-Integralen J_β mit $\beta \in L(\Lambda_r)$ bzw. $L(\Theta_r)$ bestehen.

Als Nächstes leiten wir Zählformeln für die Mengen Λ_r und $L(\Lambda_r)$ her:

Proposition 2.3. Es gilt

$$|\Lambda_r| = \sum_{n_0=0}^{r'} \sum_{n=n_0}^{r-n_0} \binom{n}{n_0} q^{n-n_0},$$

wobei $r' = \max_{k \in \mathbb{N} \cup \{0\}} \{k : k \leq r/2\}$. Des Weiteren beträgt die Anzahl $|L(\Lambda_r)|$ der Lyndon-Wörter

$$|L(\Lambda_r)| = \sum_{n_0=0}^{r'} \sum_{n=n'_0}^{r-n_0} \mathfrak{n}_{q,0}(n),$$

wobei $n'_0 = 1$, falls $n_0 = 0$, sonst $n'_0 = n_0$.

Beweis. Die Menge Λ_r ist die disjunkte Vereinigung der Mengen

$$\Lambda_{n_0,r} = \{\alpha \in \Lambda_r : \mathfrak{n}(\alpha) = n_0\}, \quad n_0 = 0, \dots, r',$$

wobei $n_0 \leq r'$ wegen $2\mathfrak{n}(\alpha) \leq r$ für $\alpha \in \Lambda_r$ gilt. Also ist $|\Lambda_r| = \sum_{n_0=0}^{r'} |\Lambda_{n_0,r}|$. Zu einer gegebenen Länge $n = \ell(\alpha) \leq r - \mathfrak{n}(\alpha)$ für $\alpha \in \Lambda_r$ existieren genau $\binom{n}{n_0} q^{n-n_0}$ verschiedene $\alpha \in \Lambda_{n_0,r}$. Summation über alle möglichen Längen liefert die erste Formel in Proposition 2.3. Die zweite Aussage folgt mittels der zweiten Formel in Bemerkung 2.6 für $i = 0$. \square

Beispiel 2.8. Für $q = 1$ ist das Verhältnis $|L(\Lambda_r)|/|\Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}|$ streng monoton fallend. Z.B. gilt für $r = 1, \dots, 15$:

r	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$ \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\} $	1	3	6	11	19	32	53	87	142	231	376	609	986	1596	2583
$ L(\Lambda_r) $	1	2	3	4	6	8	12	17	25	36	54	79	119	177	267

Des Weiteren ist für $q = 1$:

$$\begin{aligned} \Lambda_1 \setminus \{(\emptyset)\} &= \{(1)\}, \\ L(\Lambda_1) &= \{(1)\}, \\ \Lambda_2 \setminus \{(\emptyset)\} &= \{(1), (0), (11)\}, \\ L(\Lambda_2) &= \{(1), (0)\}, \\ \Lambda_3 \setminus \{(\emptyset)\} &= \{(1), (0), (11), (10), (01), (111)\}, \\ L(\Lambda_3) &= \{(1), (0), (10)\}, \\ \Lambda_4 \setminus \{(\emptyset)\} &= \{(1), (0), (11), (10), (01), (00), (111), (110), (101), (011), (1111)\}, \\ L(\Lambda_4) &= \{(1), (0), (10), (110)\}, \\ \Lambda_5 \setminus \{(\emptyset)\} &= \{(1), (0), (11), (10), (01), (00), (111), (110), (101), (100), (011), (010), (001), \\ &\quad (1111), (1110), (1101), (1011), (0111), (11111)\}, \\ L(\Lambda_5) &= \{(1), (0), (10), (110), (100), (1110)\}. \end{aligned}$$

2.4.2 Approximation iterierter Stratonovich-Integrale

Auch wenn die letztere Diskussion gezeigt hat, dass nur gewisse Stratonovich-Integrale berechnet werden müssen, so bleibt die Simulation der benötigten Integrale im Allgemeinen ein schwieriges Hindernis, da diese mit einem hohen Rechenaufwand verbunden ist. Dies betrifft vor allem die Integrale $J_{(ij)}$ bzw. Lévy-Flächen A_{ij} für $1 \leq j < i \leq q$, also wenn $q \geq 2$ ist bzw. die betrachtete Gleichung von mindestens zwei unabhängigen Wiener-Prozessen getrieben wird. Verschiedenste Ansätze zur Approximation eines gegebenen Stratonovich-Integrals sind untersucht worden. Eine davon basiert auf der *Karhunen-Loève-Entwicklung*, die im Wesentlichen einer Fourier-Reihen-Entwicklung entspricht, die auf den *Brownschen Brücken-Prozess*, der eine Periodisierung des zugehörigen Wiener-Prozesses erzeugt, angewendet wird (siehe hierzu [17, Chapter 5.8]). Eine neuere Möglichkeit eröffnet die Approximation mit Hilfe der Berechnung der bedingten Erwartung bzgl. einer geeigneten Diskretisierung der zugrunde liegenden Filtration \mathcal{F} (siehe [10], [21]). Dazu betrachten wir zunächst ein äquidistant unterteiltes Zeitgitter

$$t_0 < t_1 < \dots < t_n = t_0 + nh$$

und definieren für eine natürliche Zahl Q die diskrete Filtration auf einer feineren Unterteilung

$$t_0 < t_0 + h_0 < \dots < t_1 < t_1 + h_0 < \dots < t_n$$

durch

$$\mathcal{F}_Q = \{\Delta W^j(t_k + fh_0) : j = 1, \dots, q, f = 0, \dots, Q - 1, k = 0, \dots, n - 1\},$$

wobei $h_0 = h/Q$ und

$$\Delta W^j(t_k + fh_0) = W^j(t_k + (f + 1)h_0) - W^j(t_k + fh_0)$$

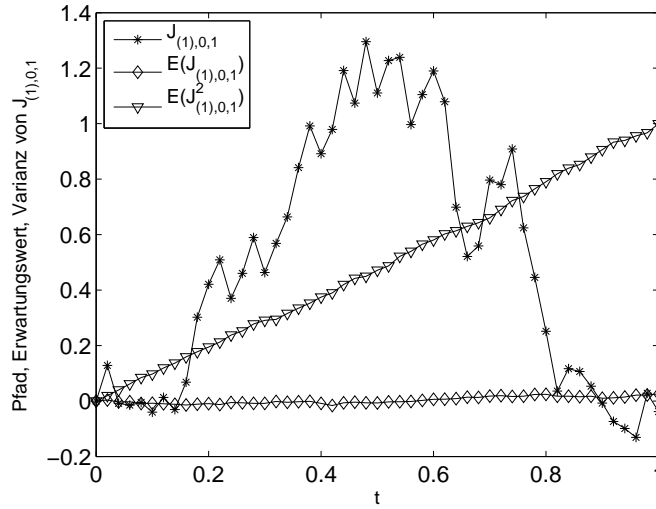


Abbildung 2.1: Zu sehen ist ein einzelner Pfad eines Wiener-Prozesses, sein Erwartungswert und seine Varianz auf dem Intervall $[0, 1]$.

ist. Wir beginnen mit den einfacheren Fällen $J_{(j)}$ und $J_{(j_0)}$ für $j = 1, \dots, q$. Wir setzen dazu $\zeta_{j,k,f} = h_0^{-1/2} \Delta W^j(t_k + fh_0)$, wodurch wir unabhängige standard normalverteilte Zufallsvariablen erhalten. Außerdem gilt

$$J_{(j),t_k+fh_0,t_k+(f+1)h_0} = h_0^{1/2} \zeta_{j,k,f} \quad (2.9)$$

und somit

$$J_{(j),t_k,t_k+h} = h_0^{1/2} \sum_{f=0}^{Q-1} \zeta_{j,k,f}. \quad (2.10)$$

Auf diese Art werden in [12] solche Integrale mittels Matlab simuliert, und damit auch in Experimenten zum Euler-Maruyama- und Milstein-Verfahren die entsprechenden starken globalen Ordnungen gut wiedergegeben. Auch die Integrale $J_{(j_0),t_k,t_k+h}$ können exakt beschrieben werden (siehe z.B. [27, Chapter 2.6]), denn

$$J_{(j_0),t_k+fh_0,t_k+(f+1)h_0} = \frac{1}{2} h_0^{3/2} \left(\zeta_{j,k,f} + \frac{1}{\sqrt{3}} \eta_{j,k,f} \right),$$

wobei die

$$\eta_{j,k,f} = 2\sqrt{3} h_0^{-3/2} \left(J_{(0j),t_k+fh_0,t_k+(f+1)h_0} - \frac{1}{2} h_0 J_{(j),t_k+fh_0,t_k+(f+1)h_0} \right)$$

standard normalverteilte Zufallsvariablen sind, die wiederum von den $\zeta_{j,k,f}$ unabhängig sind. Damit können wir auch die Integrale $J_{(j_0),t_k,t_{k+1}}$ wie folgt exakt angeben:

$$J_{(j_0),t_k,t_{k+1}} = \frac{1}{2} h_0^{3/2} \sum_{f=0}^{Q-1} \left((2(Q-f)-1) \zeta_{j,k,f} + \frac{1}{\sqrt{3}} \eta_{j,k,f} \right). \quad (2.11)$$

Unter Berücksichtigung von (2.10) ergibt sich

$$J_{(0j),t_k,t_{k+1}} = \frac{1}{2} h_0^{3/2} \sum_{f=0}^{Q-1} \left((2f+1) \zeta_{j,k,f} - \frac{1}{\sqrt{3}} \eta_{j,k,f} \right). \quad (2.12)$$

Auch Integrale der Form $J_{(j00),t_k,t_{k+1}}$ ($j = 1, \dots, q$) können auf diesem Weg exakt simuliert werden (siehe dazu [28, Chapter 1.6]).

Die Abbildung 2.1, die mit Hilfe der Formel (2.10), $h_0 = 1/Q = 1/50$ und 1000 Pfade erstellt wurde, beinhaltet eine Simulation eines einzelnen Pfades von $J_{(1),0,t}$, seinen Erwartungswert und Varianz auf dem Intervall $[0, 1]$. Analoges wurde in der Abbildung 2.2 mittels der Relationen (2.11) bzw. (2.12) für die Integrale $J_{(10),0,t}$ bzw. $J_{(01),0,t}$ simuliert. Bemerkenswert ist die 'Glätte' des Pfades für $J_{(10),0,t}$. Letzteres liegt zum Einen an der Stetigkeit des Wiener-Prozesses und zum Anderen daran, dass $J_{(10),0,t}$ ein Riemann-Integral ist, also als Funktion in t aufgefasst stetig differenzierbar ist. Dies trifft auf das Itô-Integral $J_{(01),0,t}$ nicht zu, da Wiener-Prozesse nicht differenzierbar sind.

Jetzt studieren wir (für $q = 1$) das Integral $J_{(110),t_k,t_{k+1}}$. Dazu setzen wir $t_k + fh_0 = \tau_{k,f}$ und für $\alpha \in \mathcal{M}_1$ zur Abkürzung $J_{\alpha,\tau_{k,f},\tau_{k,f+1}} = J_{\alpha,k,f}$. Es gilt zunächst

$$\begin{aligned} J_{(110),t_k,t_{k+1}} &= \frac{1}{2} \sum_{f=0}^{Q-1} \int_{\tau_{k,f}}^{\tau_{k,f+1}} (W(t) - W(t_k))^2 dt \\ &= \frac{1}{2} \sum_{f=0}^{Q-1} \int_{\tau_{k,f}}^{\tau_{k,f+1}} (W(t) - W(\tau_{k,f}) + W(\tau_{k,f}) - W(t_k))^2 dt \\ &= \sum_{f=0}^{Q-1} \left(J_{(110),k,f} + (W(\tau_{k,f}) - W(t_k)) J_{(10),k,f} + \frac{1}{2} (W(\tau_{k,f}) - W(t_k))^2 J_{(0),k,f} \right) \\ &= \sum_{f=0}^{Q-1} \left(J_{(110),k,f} + \left(\sum_{i=0}^{Q-1} J_{(1),k,i} \right) J_{(10),k,f} + \frac{1}{2} \left(\sum_{i=0}^{Q-1} J_{(1),k,i} \right)^2 J_{(0),k,f} \right). \end{aligned}$$

Unglücklicher Weise ist das Integral $J_{(110),k,f}$ nicht exakt berechenbar. Daher approximieren wir dieses Integral mit Hilfe der bedingten Erwartung bzgl. \mathcal{F}_Q :

$$\hat{J}_{(110),k,f} := E(J_{(110),k,f} | \mathcal{F}_Q).$$

Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} \hat{J}_{(110),k,f} &= E(J_{(110),k,f} | \Delta W(\tau_{k,f})) = E \left(\frac{1}{2} \int_{\tau_{k,f}}^{\tau_{k,f+1}} (W(t) - W(\tau_{k,f}))^2 dt \mid \Delta W(\tau_{k,f}) \right) \\ &= E \left(\frac{1}{2} \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{K-1} (W(s_k) - W(\tau_{k,f}))^2 \Delta s \mid \Delta W(\tau_{k,f}) \right) \\ &= \frac{1}{2} \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{K-1} E \left((W(s_k) - W(\tau_{k,f}))^2 \mid \Delta W(\tau_{k,f}) \right) \Delta s \\ &= \frac{1}{2} \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^{K-1} \left((s_k - \tau_{k,f}) - \frac{(s_k - \tau_{k,f})^2}{h_0} + \frac{(s_k - \tau_{k,f})^2}{h_0^2} \Delta W(\tau_{k,f})^2 \right) \Delta s \\ &= \frac{1}{2} \int_{\tau_{k,f}}^{\tau_{k,f+1}} \left((s - \tau_{k,f}) - \frac{(s - \tau_{k,f})^2}{h_0} + \frac{(s - \tau_{k,f})^2}{h_0^2} \Delta W(\tau_{k,f})^2 \right) ds \\ &= \frac{1}{6} J_{(0),k,f} \left(J_{(1),k,f}^2 + \frac{1}{2} J_{(0),k,f} \right), \end{aligned}$$

wobei zwischenzeitlich eine feinere Unterteilung $s_0 < \dots < s_K$ mit $s_{k+1} = s_k + \Delta s$ und $\Delta s = h_0/K$ eingesetzt wurde. Zudem haben wir die folgende Eigenschaft eines Wiener-Prozesses benutzt (siehe [21]): Für $t_0 \leq s, u \leq t$ sind die Inkremente $W(s) - W(u)$ bedingt unter $W(t) - W(t_0)$ normalverteilt mit Erwartung $\frac{s-u}{t-t_0}(W(t) - W(t_0))$ und Varianz $s - u - \frac{(s-u)^2}{t-t_0}$.

Wir definieren nun

$$\hat{J}_{(110),t_k,t_{k+1}} = \sum_{f=0}^{Q-1} \left(\hat{J}_{(110),k,f} + \left(\sum_{i=0}^{Q-1} J_{(1),k,i} \right) J_{(10),k,f} + \frac{1}{2} \left(\sum_{i=0}^{Q-1} J_{(1),k,i} \right)^2 J_{(0),k,f} \right).$$

Aus der Konstruktion von $\hat{J}_{(110),t_k,t_{k+1}}$ folgt:

$$\begin{aligned} \left(E(J_{(110),t_k,t_{k+1}} - \hat{J}_{(110),t_k,t_{k+1}})^2 \right)^{1/2} &= \left(E \left(\sum_{f=0}^{Q-1} (J_{(110),k,f} - E(J_{(110),k,f} | \mathcal{F}_Q)) \right)^2 \right)^{1/2} \\ &= \left(\sum_{f=0}^{Q-1} E(E(J_{(110),k,f} - E(J_{(110),k,f} | \mathcal{F}_Q) | \mathcal{F}_Q)^2) \right)^{1/2} \\ &= \frac{1}{6} \frac{h^2}{Q^{3/2}}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir für $Q \approx h^{-1/3}$, sofern ein Integrator der starken globalen Ordnung 2 verwendet werden soll, eine ausreichend gute Approximation des Integrals $J_{(110),t_k,t_{k+1}}$. Allgemein: Für einen Integrator der Ordnung p muss $Q \approx h^{1-2p/3}$ gewählt werden. Ähnlich kann auch das Integral $J_{(21)}$ behandelt werden. In [10] wird gezeigt, dass

$$\hat{J}_{(21),k,f} := E(J_{(21),k,f} | \mathcal{F}_Q) = \frac{1}{2} J_{(2),k,f} J_{(1),k,f}$$

gilt und zudem mittels (2.9):

$$\begin{aligned} \hat{J}_{(21),t_k,t_{k+1}} &= \frac{1}{2} \sum_{f=0}^{Q-1} \left(2 \sum_{i=0}^{f-1} J_{(2),k,i} + J_{(2),k,f} \right) J_{(1),k,f}, \\ &= \frac{h_0}{2} \sum_{f=0}^{Q-1} \left(2 \sum_{i=0}^{f-1} \zeta_{2,k,i} + \zeta_{2,k,f} \right) \zeta_{1,k,f}. \end{aligned}$$

Schließlich folgt:

$$\begin{aligned} \left(E(J_{(21),t_k,t_{k+1}} - \hat{J}_{(21),t_k,t_{k+1}})^2 \right)^{1/2} &= \left(E \left(\sum_{f=0}^{Q-1} (J_{(21),k,f} - E(J_{(21),k,f} | \mathcal{F}_Q)) \right)^2 \right)^{1/2} \quad (2.13) \\ &= \left(\sum_{f=0}^{Q-1} E(E(J_{(21),k,f} - E(J_{(21),k,f} | \mathcal{F}_Q) | \mathcal{F}_Q)^2) \right)^{1/2} \\ &= O(h/Q^{1/2}). \end{aligned}$$

Außerdem wird in [8] erläutert, dass dies auch die best mögliche Konvergenzrate für (2.13) darstellt. Daher muss für einen Integrator der starken globalen Ordnung 1 mindestens Q von der Größenordnung h^{-1} gewählt werden, und allgemein für einen Integrator der Ordnung p muss $Q \approx h^{1-2p}$ berücksichtigt werden. Im Falle $q \geq 2$ bedeutet dies, dass für einen Integrator das Integral $J_{(21)}$ in der Regel den größten Rechenaufwand in Anspruch nimmt. Darüber hinaus wird in [21, Lemma 6.1] folgendes verblüffendes Resultat zum vorgestellten Approximationsprinzip bewiesen:

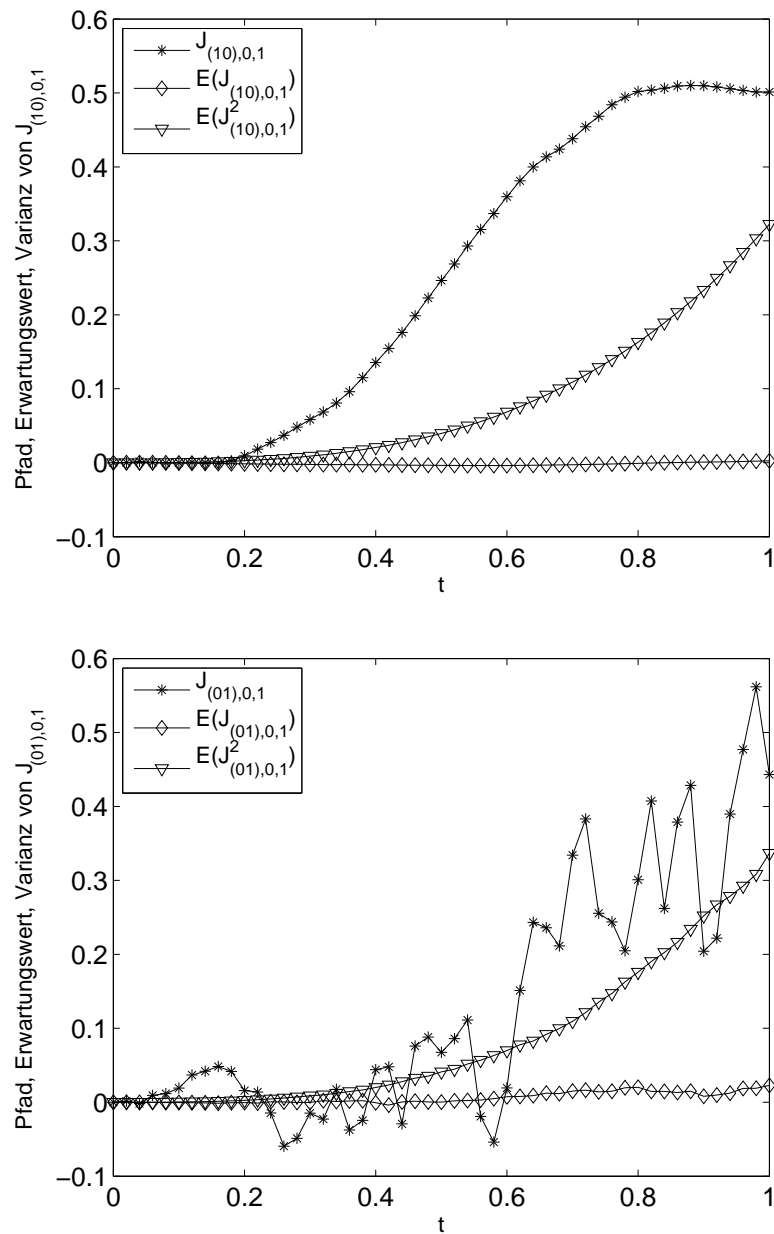


Abbildung 2.2: Auf dem oberen Bild ist ein einzelner Pfad des Integrals $J_{(10),0,t}$, sein Erwartungswert und seine Varianz auf $[0, 1]$ abgetragen. Auf der unteren Graphik ist entsprechendes für $J_{(01),0,t}$ abgebildet.

Lemma 2.5. *Mindestens zwei Einträge des Multiindex $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ ($q \geq 1$) seien verschieden. Weiter sei*

$$j' = \min_{1 \leq j \leq l-1} \{i_j : i_n = i_m \text{ für alle } n, m > j'\}$$

und $\alpha_{j'} = (i_{j'}, \dots, i_l)$. Dann beträgt der Fehler für die Approximation $E(J_{\alpha, t_k, t_{k+1}} | \mathcal{F}_Q)$:

$$(E \| J_{\alpha, t_k, t_{k+1}} - E(J_{\alpha, t_k, t_{k+1}} | \mathcal{F}_Q) \|^2)^{1/2} = O(h^{o(\alpha)} / Q^{(n(\alpha_{j'})+1)/2}).$$

Allerdings haben wir durch das zuvor diskutierte Beispiel $J_{(110), t_k, t_{k+1}}$ erfahren, dass diese Abschätzung auch zu grob sein kann. Denn nach Lemma 2.5 wäre der Fehler von der Größenordnung $O(h^2/Q)$ statt $O(h^2/Q^{3/2})$.

Kapitel 3

Splitting Integratoren für lineare Stratonovich-Gleichungen mit beschränkten Koeffizienten

Zuerst werden in diesem Kapitel Splitting Integratoren für lineare Stratonovich-Gleichungen mit beschränkten aber zeitunabhängigen Koeffizienten behandelt. Dazu wird basierend auf dem Theorem 1.4, den Lemmata 1.5, 1.6 und der Resultate des 2. Kapitels über Lyndon-Basen ein Kriterium für die starke globale Ordnung eines Splitting Integrators ausgearbeitet. Für den Fall $q = 1$ werden einige Beispiele für Splitting Integratoren der Ordnung 1 und 1.5 vorgestellt. Anschließend wird gezeigt, dass alle betrachteten Beispiele auch bei Zeitabhängigkeit der Koeffizienten V_j ($j = 0, 1$) unter gewissen Zusatzannahmen das gleiche Konvergenzverhalten aufweisen. Die Ergebnisse werden schließlich durch numerische Experimente illustriert.

3.1 Splitting Integratoren im Falle zeitunabhängiger Koeffizienten

Wir studieren eine besondere Version der Gleichung (1.41), indem wir die Koeffizienten als zeitunabhängig annehmen, genauer

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0. \quad (3.1)$$

Dafür werden die Matrizen $V_j \in \mathbb{C}^{d \times d}$ ($j = 0, \dots, q$) als schieferhermitesch vorausgesetzt. Weiter seien M_j ($j = 0, \dots, q$) Konstanten, so dass $\|V_j\| \leq M_j$ ist. Die Gleichung (3.1) ist zur Integralgleichung

$$X(t) = X_0 + \sum_{j=0}^q \int_{t_0}^t V_j X(s) \circ dW^j(s) \quad (3.2)$$

äquivalent. In diesem Fall ist der Splitting Integrator (1.48) durch

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= \Psi_k^{(s)} X_k = e^{b_{qs}V_q} \dots e^{b_{1s}V_1} e^{a_s V_0} \Psi_k^{(s-1)} X_k \\ &= e^{b_{qs}V_q} \dots e^{b_{1s}V_1} e^{a_s V_0} \dots e^{b_{q1}V_q} \dots e^{b_{11}V_1} e^{a_1 V_0} X_k \end{aligned} \quad (3.3)$$

gegeben. Oder letztere Zeile in (3.3) in kompakter Schreibweise

$$X_{k+1} = \left(\prod_{j=1}^s \prod_{i=0}^q e^{b_{ij}V_i} \right) X_k,$$

wobei $b_{0j} := a_j$ ($j = 1, \dots, s$). Die Zufallsvariablen a_j , b_{ij} ($i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$) haben die in Definition 1.14 besprochenen Eigenschaften. Des Weiteren setzen wir

$$X_{k+1}^k = \Psi_k^{(s)} X(t_k)$$

für $k = 0, \dots, n-1$. Aus der Schiefhermitizität der Matrizen V_j ($j = 0, \dots, q$) ergibt sich die wichtige Tatsache, dass

$$\|e^{b_{ij}V_i}\|, \|e^{a_jV_0}\|, \|r_l(b_{ij}V_i)\|, \|r_l(a_jV_0)\| = 1 \quad (3.4)$$

für $i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$, $l = 1, 2, \dots$. Für unsere Zwecke ist es bequem mit der p -ten Picard-Iterierten der Integralgleichung (3.2) zu arbeiten. In dieser Situation stimmt diese mit der Stratonovich-Taylor-Entwicklung bzgl. der hierarchischen Menge Λ_{2p} überein:

$$X(t) = X_0 + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p} \setminus \{(\emptyset)\}} V_\alpha J_{\alpha, t_0, t} X_0 + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p})} V_\alpha J_\alpha [X(\cdot)]_{t_0, t}. \quad (3.5)$$

Die Notation V_α wurde bereits unter (1.26) eingeführt. In Bezug auf das Zeitschrittintervall $[t_k, t_{k+1}]$ setzen wir für $j = 1, \dots, s$ folgende Momentenbedingungen an: Dazu benutzen wir die Abkürzung $b_{0j} := a_j$ für $j = 1, \dots, s$. Für alle

$$\gamma = (m_{01}, \dots, m_{q1}, \dots, m_{0j}, \dots, m_{qj}) \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^{j(q+1)}$$

mit

$$|\gamma|_o := \sum_{i=1}^j \left(2m_{0i} + \sum_{l=1}^q m_{li} \right) > 0$$

gelte

$$E_k |\mathbf{c}_j^\gamma|^2 = O(h^{|\gamma|_o}). \quad (3.6)$$

Hierbei wurde der Vektor

$$\mathbf{c}_j = (b_{01}, \dots, b_{q1}, \dots, b_{0j}, \dots, b_{qj})$$

und die übliche Multiindexnotation

$$\mathbf{c}_j^\gamma = \prod_{i=1}^j \prod_{l=0}^q b_{li}^{m_{li}}$$

eingeführt.

Es soll zur Herleitung eines Kriteriums für die starke globale Ordnung eines Splitting Integrators das Theorem 1.4 einbezogen werden. Dazu ist das Prüfen der Bedingungen (1.36)–(1.40) notwendig. Wie bereits in Bemerkung 1.12 erwähnt ist das Lemma 1.6 auf den zeitunabhängigen Fall anwendbar. Somit sind die Stabilitätsbedingungen (1.36) und (1.37), die Verfahrensfunktionen betreffend, erfüllt. Folglich sind nur noch (1.38)–(1.40), also der schwache und starke lokale Fehler zu untersuchen. Hierzu stellen wir einige nützliche Lemmata bereit. Das Erste ist einerseits eine Verallgemeinerung des Lemmas 2.1 und erleichtert andererseits die Behandlung der Restterme, die in den später folgenden lokalen Fehlerabschätzungen auftreten. Doch zuvor wird eine weitere Notation benötigt. Sei dazu $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ und $\beta \in \mathcal{E}_\alpha$ (siehe Definition 2.4). Wir definieren einen Vektor s_β , der wie folgt aus dem Vektor der Integrationsvariablen $s_\alpha = (s_1, \dots, s_l)$ hervorgeht: Stammt ein Nulleintrag in β von der Ersetzung zweier Einträge i_{j-1}, i_j , so wird s_{j-1} durch s_j substituiert. Z.B., sei $\alpha = (211033)$ und $\beta = (2000) \in \mathcal{E}_\alpha$, dann ist $s_\beta = (s_1, s_3, s_3, s_4, s_5, s_5)$.

Lemma 3.1. Sei X die Lösung der Stratonovich-Gleichung (1.41) und für einen Multiindex $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$ sei $V_\alpha(s_\alpha) = V_{i_1}(s_1) \cdots V_{i_l}(s_l)$.

(i) Es gelten die folgenden Rekursionsformeln:

$$J_{(i_1)}[V_{i_1}(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t} = I_{(i_1)}[V_{i_1}(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t} + \frac{1}{2}\tilde{\delta}_{i_1,i_1}I_{(0)}[V_{i_1}^2(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t}, \quad (3.7)$$

falls $l = 1$ ist und

$$\begin{aligned} J_\alpha[V_\alpha(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t} &= I_{(i_l)}[V_{i_l}(s_l)J_{\alpha-}[V_{\alpha-}(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,s_l}]_{t_0,t} \\ &\quad + \frac{1}{2}\tilde{\delta}_{i_l,i_{l-1}}I_{(0)}[V_{i_l}^2(s_l)J_{(\alpha-)-}[V_{(\alpha-)-}(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,s_l}]_{t_0,t}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

wenn $l \geq 2$ ist. Des Weiteren resultiert aus (3.7) und (3.8):

$$\begin{aligned} J_\alpha[V_\alpha(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t} &= \sum_{k=0}^{k_\alpha} 2^{-k} \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\alpha,k}} \left(I_\beta[V_\alpha(s_\beta)X(\cdot)]_{t_0,t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}\tilde{\delta}_{i_1,i_1}I_{(0,-\beta)}[V_{-\alpha}(s_{-\beta})V_{i_1}^2(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t} \right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

(ii) Es gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} E_{t_0}\|J_\alpha[V_\alpha(\cdot)X(\cdot)]_{t_0,t}\|^2 &\leq K_1 \frac{(J_{(0),t_0,t})^{2o(\alpha)}}{(2o(\alpha))!} \sup_{s \in [t_0,t]} E_{t_0}\|X(s)\|^2 \\ &\leq K_2 \frac{(J_{(0),t_0,t})^{2o(\alpha)}}{(2o(\alpha))!} \|X(t_0)\|^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Konstanten K_1 und K_2 hängen nur von M_j ($j = 0, \dots, q$), $t - t_0$, k_α ab.

Beweis. (i) : Die Aussage (3.7) entspricht der Anwendung der Umrechnungsformel (1.9) (für $\lambda = 1/2$) auf $v(t, X(t)) = V_{i_1}(t)X(t)$. Die Beweisidee für $l \geq 2$ beruht auf [17, Chapter 5.2]. Wir behandeln zunächst den Fall $l = 2$, etwa $\alpha = (i_1, i_2)$. Dazu ergänzen wir die Lösung $X(t)$ von (1.41) zu einem \mathbb{C}^{3d} -wertigen Prozess $\check{X}(t) = (X(t)^T, Y(t)^T, Z(t)^T)^T$, wobei

$$\begin{aligned} Y(t) &= \int_{t_0}^t V_{i_1}(s)X(s) \circ dW^{i_1}(s), \\ Z(t) &= \int_{t_0}^t V_{i_2}(s)Y(s) \circ dW^{i_2}(s). \end{aligned}$$

Die Gleichung für $\check{X}(t)$ ist eine lineare 3×3 -Block Stratonovich-Gleichung:

$$d\check{X}(t) = \sum_{j=0}^q \begin{pmatrix} V_j(t) & 0 & 0 \\ \delta_{j,i_1}V_{i_1}(t) & 0 & 0 \\ 0 & \delta_{j,i_2}V_{i_2}(t) & 0 \end{pmatrix} \check{X}(t) \circ dW^j(t) =: \sum_{j=0}^q \check{V}_j(t)\check{X}(t) \circ dW^j(t)$$

Die zugehörigen Stratonovich-Operatoren sind für $j = 1, \dots, q$ durch

$$\hat{L}^j = \nabla_{x,y,z}[\check{V}_j(t)\check{X}(t)]$$

gegeben. Daher ergibt die Anwendung der Umrechnungsformel (1.9) auf die dritte Block-Komponente von

$$v(t, \check{X}(t)) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ Z(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_{i_2}(t) & 0 \end{pmatrix} \check{X}(t) =: \check{V}(t) \check{X}(t),$$

wegen

$$\hat{L}^{i_2} v(t, \check{X}(t)) = \check{V}(t) \check{V}_{i_2}(t) \check{X}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ V_{i_2}(t) \delta_{i_2, i_1} V_{i_1}(t) & 0 & 0 \end{pmatrix} \check{X}(t)$$

für $j = i_2$:

$$Z(t) = \int_{t_0}^t V_{i_2}(s) Y(s) dW^{i_2}(s) + \frac{1}{2} \tilde{\delta}_{i_2, i_2} \int_{t_0}^t V_{i_2}(s) \delta_{i_2, i_1} V_{i_1}(s) X(s) ds,$$

also die Behauptung. Setzen wir für $l \geq 3$

$$Y(t) = \int_{t_0}^t V_{i_{l-1}}(s) J_{(\alpha-)-} [V_{(\alpha-)-}(\cdot) X(\cdot)]_{t_0, s} \circ dW^{i_{l-1}}(s),$$

$$Z(t) = \int_{t_0}^t V_{i_l}(s) Y(s) \circ dW^{i_l}(s),$$

und führen weitere $l-2$ analog rekursiv definierte Zufallsvariablen ein, so erhalten wir eine $(l+1) \times (l+1)$ -Block Stratonovich-Gleichung. Mittels eines induktiven Arguments und nochmaliger Verwendung der Umrechnungsformel (1.9) folgt schließlich die Behauptung. Die Formel (3.9) resultiert aus sukzessiver Anwendung der Formeln (3.7), (3.8) und den Ideen im Beweis zu Lemma 2.1.

(ii) : Zunächst liefert die Anwendung der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13) auf (3.9):

$$E_{t_0} \|J_\alpha [V_\alpha(\cdot) X(\cdot)]_{t_0, t}\|^2 \leq (k_\alpha + 1) \sum_{k=0}^{k_\alpha} 2^{-2k+1} |\mathcal{E}_{\alpha, k}| \sum_{\beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k}} \left(E_{t_0} \|I_\beta [V_\alpha(s_\beta) X(\cdot)]_{t_0, t}\|^2 + \frac{1}{4} \tilde{\delta}_{i_1, i_1} E_{t_0} \|I_{(0, -\beta)} [V_{-\alpha}(s_{-\beta}) V_{i_1}^2(\cdot) X(\cdot)]_{t_0, t}\|^2 \right).$$

Für $\beta \in \mathcal{E}_{\alpha, k}$ gilt $2o(\beta) = 2n(\beta) + e(\beta) = 2(n(\alpha) + k) + e(\alpha) - 2k = 2o(\alpha)$ und falls $i_1 \neq 0$ ist, folgt $2o((0, -\beta)) = 2 + 2n(-\beta) + e(-\beta) = 1 + 2o(\beta) = 1 + 2o(\alpha)$. Damit gelangen wir nach wiederholter Anwendung der Itô-Isometrie (1.10) bzw. der Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.11) zur ersten Abschätzung in (3.10). Zuletzt ergibt sich die zweite Abschätzung nach Benutzen des Gronwall-Lemmas 1.4 (a). □

Um den Splitting Integrator (3.3) mit der Entwicklung (3.5) der exakten Lösung vergleichen zu können, schreiben wir zunächst (1.50) formal um:

$$\Psi_k^{(j)} = \sum_{\alpha \in \mathcal{M}_q} \mathbf{c}_{\alpha, j} V_\alpha \quad (j = 1, \dots, s). \quad (3.11)$$

Hierbei sind die $\mathbf{c}_{\alpha, j}$ homogene Polynome in den a_i, b_{li} ($l = 1, \dots, q$) für $i \in \{1, \dots, j\}$. Das nächste Lemma zeigt wie die unter (3.11) eingeführten Polynome $\mathbf{c}_{\alpha, j}$ über eine Rekursionsformel effektiv berechnet werden können.

Lemma 3.2. Sei $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_q$. Die in (3.11) auftretenden Polynome $\mathbf{c}_{\alpha,j}$ können über folgende Rekursionsformel berechnet werden: Setze $\mathbf{c}_{\alpha,0} = 0$ und $\mathbf{c}_{(\emptyset),i} = 1$ für $i \geq 0$, dann gilt für $j \geq 1$:

$$\mathbf{c}_{\alpha,j} = \mathbf{c}_{\alpha,j-1} + \sum_{\substack{(\alpha', n_{m_{0j}}, e_{m_{1j}}, \dots, e_{m_{qj}}) = \alpha \\ m_{0j} + m_{1j} + \dots + m_{qj} > 0}} \left(\prod_{f=0}^q \frac{b_{fj}^{m_{fj}}}{m_{fj}!} \right) \mathbf{c}_{\alpha',j-1}. \quad (3.12)$$

Des Weiteren sind die Polynome $\mathbf{c}_{\alpha,j}$ in geschlossener Form durch

$$\mathbf{c}_{\alpha,j} = \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,j}} \frac{1}{\gamma!} \mathbf{c}_j^\gamma, \quad \gamma! = \prod_{i=1}^j \prod_{f=0}^q m_{fi}! \quad (3.13)$$

gegeben, wobei die Menge

$$\mathcal{T}_{\alpha,j} = \left\{ (m_{01}, m_{11}, \dots, m_{q1}, \dots, m_{0j}, m_{1j}, \dots, m_{qj}) \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^{j(q+1)} : \right. \\ \left. (n_{m_{01}}, e_{m_{11}}, \dots, e_{m_{q1}}, \dots, n_{m_{0j}}, e_{m_{1j}}, \dots, e_{m_{qj}}) = \alpha, \sum_{f=1}^q \sum_{i=1}^j m_{fi} = \mathbf{e}(\alpha), \sum_{i=1}^j m_{0i} = \mathbf{n}(\alpha) \right\}$$

eingeführt wurde. Hierbei steht $e_{m_{fi}}$ bzw. $n_{m_{0i}}$ für einen Block der Länge $m_{fi} \geq 0$, der ausschließlich aus dem Element $f \neq 0$ besteht bzw. für einen Block der Länge $m_{0i} \geq 0$, der nur aus Nullen besteht.

Beweis. Die Rekursionsformel (3.12) resultiert unmittelbar aus Kombination und Koeffizientenvergleich der Formeln (1.50) und (3.11). Die Identität (3.13) folgt induktiv aus (3.12). \square

Bemerkung 3.1. Für $\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,j}$ gilt zunächst

$$|\gamma|_o = \sum_{i=1}^j \left(2m_{0i} + \sum_{f=1}^q m_{fi} \right) = 2\mathbf{n}(\alpha) + \mathbf{e}(\alpha) = 2o(\alpha)$$

und somit bzgl. des Intervalls $[t_k, t_{k+1}]$:

$$E_k |\mathbf{c}_j^\gamma|^2 = O(h^{2o(\alpha)}). \quad (3.14)$$

Das folgende Lemma beinhaltet ein Kriterium für den starken lokalen Fehler eines Splitting Integrators und entspricht dabei der Voraussetzung (1.39) in Theorem 1.4. Dieser Fehler ergibt sich im Wesentlichen aus dem Vergleich der p -ten Picard-Iterierten (3.5) mit der Entwicklung (3.11) des Splitting Integrators:

Lemma 3.3. Das Splitting Verfahren (3.3) angewandt auf die Gleichung (3.1) ist von starker lokaler Ordnung $p_2 = p + 1/2$, falls die Momentenbedingung (3.14) und

$$\mathbf{c}_{\alpha,s} = J_\alpha \quad \text{für alle } \alpha \in \Lambda_{2p}$$

erfüllt ist, wobei die $\mathbf{c}_{\alpha,s}$ durch (3.12) bestimmt sind.

Bemerkung 3.2. Es gibt natürliche von s und q abhängige Schranken für p , nämlich

$$p \leq \begin{cases} (3s - 1)/2, & \text{falls } q = 1, \\ s - 1/2, & \text{falls } q \geq 2. \end{cases}$$

Beweis. In der Entwicklung (3.5) der exakten Lösung tritt zu jedem $\alpha \in \Lambda_{2p}$ der Ausdruck $J_\alpha V_\alpha$ auf. Dabei ist das einfachste, nicht mehr durch das Splitting darstellbare, V_α durch $(V_{q-1} V_q)^s$ gegeben, sprich $\alpha = (q, q-1, \dots, q, q-1)$ mit $\ell(\alpha) = 2s$. Aus $o(\alpha) = 3s/2$ für $q = 1$ bzw. $o(\alpha) = s$ für $q \geq 2$ folgt die Behauptung. \square

Nun zum Beweis von Lemma 3.3:

Beweis. Wir betrachten den lokalen Fehler auf dem Intervall $[t_k, t_{k+1}]$. Wir zeigen mittels vollständiger Induktion über s , dass

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(s)} &= \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s} V_\alpha + R_{s,k}, \\ R_{s,k} &= \sum_{\alpha \in \mathcal{M}_q \setminus \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s} V_\alpha, \quad E_k \|R_{s,k}\|^2 = O(h^{2p+1}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

gilt. Wir bedienen uns der Formel (1.50), diese liefert nämlich unter Berücksichtigung der Induktionsannahme:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{(s)} &= \prod_{l=1}^q \left(\sum_{m_l=0}^{2p} \frac{b_{ls}^{m_l}}{m_l!} V_l^{m_l} + \frac{b_{ls}^{2p+1}}{(2p+1)!} V_l^{2p+1} r_{2p+1}(b_{ls} V_l) \right) \\ &\quad \cdot \left(\sum_{m_0=0}^{p'} \frac{b_{0s}^{m_0}}{m_0!} V_0^{m_0} + \frac{b_{0s}^{p'+1}}{(p'+1)!} V_0^{p'+1} r_{p'+1}(b_{0s} V_0) \right) \Psi_k^{(s-1)} \\ &= \left(\sum_{m_q=0}^{2p} \cdots \sum_{m_1=0}^{2p} \sum_{m_0=0}^{p'} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{ls}^{m_l}}{m_l!} V_l^{m_l} \right) + \tilde{R}_{s,k} \right) \left(\sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s-1} V_\alpha + R_{s-1,k} \right) \\ &= \sum_{(\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha',s-1} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{ls}^{m_l}}{m_l!} \right) \left(\prod_{l=0}^q V_l^{m_l} \right) V_{\alpha'} + R_{s,k} \\ &= \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s} V_\alpha + R_{s,k}, \end{aligned}$$

wobei letzteres Gleichheitszeichen aufgrund von (3.12) gilt. Des Weiteren wurde

$$p' = \max_{m \in \mathbb{N} \cup \{0\}} \{m : m \leq p\}$$

(also entweder $p' = p$ oder $p' = p - 1/2$) und

$$R_{s,k} = \left(\prod_{l=0}^q e^{V_l b_{ls}} \right) R_{s-1,k} + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s-1} \tilde{R}_{s,k} V_\alpha + \hat{R}_{s,k} \quad (3.16)$$

gesetzt. Da der Restterm $\tilde{R}_{j,k}$ ($j = 1, \dots, s$) kompliziert ist, führen wir die Abkürzungen

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_{ij} &= \begin{cases} \sum_{m_i=0}^{2p} \frac{1}{m_i!} (b_{ij} V_i)^{m_i}, & \text{falls } 1 \leq i \leq q, \\ \sum_{m_0=0}^{p'} \frac{1}{m_0!} (b_{0j} V_0)^{m_0}, & \text{falls } i = 0, \end{cases} \\ \tilde{r}_{ij} &= \begin{cases} \frac{1}{(2p+1)!} (b_{ij} V_i)^{2p+1} r_{2p+1}(b_{ij} V_i), & \text{falls } 1 \leq i \leq q, \\ \frac{1}{(p'+1)!} (b_{0j} V_0)^{p'+1} r_{p'+1}(b_{0j} V_0), & \text{falls } i = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

ein. Nach Anwendung der Produktformel (1.56) mit $\mathfrak{K}_i = \mathfrak{B}_{ij}$, $\mathfrak{L}_i = \tilde{r}_{ij}$ ($i = 0, \dots, q$) und anschließendem Koeffizientenvergleich folgt

$$\tilde{R}_{j,k} = \sum_{i=0}^q \left(\prod_{l=i+1}^q e^{b_{lj} V_l} \right) \tilde{r}_{ij} \prod_{l=0}^{i-1} \mathfrak{B}_{lj}.$$

Der andere Restterm ist für $j = 1, \dots, s$ durch

$$\hat{R}_{j,k} = \sum_{(\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \Lambda_{2p, \text{res}}} \mathfrak{c}_{\alpha', j-1} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{lj}^{m_l}}{m_l!} \right) \left(\prod_{l=0}^q V_l^{m_l} \right) V_{\alpha'}$$

gegeben, wobei die Menge

$$\Lambda_{2p, \text{res}} = \left\{ (\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \mathcal{M}_q \setminus \Lambda_{2p} : 0 < 2m_0 + \sum_{l=1}^q m_l \leq 2p, m_0 \leq p', \alpha' \in \Lambda_{2p} \right\}$$

eingeführt wurde. Es folgt zunächst mit Hilfe sukzessiver Anwendung der Fehlerrekursionsformel (3.16) und der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13):

$$\begin{aligned} E_k \|R_{s,k}\|^2 &\leq (2 + |\Lambda_{2p}|) \left(E_k \|R_{s-1,k}\|^2 + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} E_k \|\mathfrak{c}_{\alpha, s-1} \tilde{R}_{s,k} V_{\alpha}\|^2 + E_k \|\hat{R}_{s,k}\|^2 \right) \\ &\leq \sum_{j=0}^{s-1} (2 + |\Lambda_{2p}|)^{s-j} \left(E_k \|\hat{R}_{j+1,k}\|^2 + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} E_k \|\mathfrak{c}_{\alpha, j} \tilde{R}_{j+1,k} V_{\alpha}\|^2 \right). \end{aligned}$$

Des Weiteren finden wir mittels (3.13), (3.6), (3.4) und der Ungleichung (1.13) für jedes $\alpha \in \Lambda_{2p}$ und $j = 1, \dots, s$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} E_k \|\mathfrak{c}_{\alpha, j} \tilde{R}_{j+1,k} V_{\alpha}\|^2 &\leq K \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, j}} E_k \|\mathfrak{c}_j^{\gamma} \tilde{R}_{j+1,k}\|^2 \\ &\leq K \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, j}} (q+1) \sum_{i=0}^q E_k \left\| \mathfrak{c}_j^{\gamma} \tilde{r}_{ij+1} \prod_{l=0}^{i-1} \mathfrak{B}_{lj+1} \right\|^2 \\ &= \begin{cases} O(h^{2p+1+2o(\alpha)}) & \text{für } i = 1, \dots, q, \\ O(h^{(2p+1+2o(\alpha))+2(p'-p)+1}) & \text{für } i = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Also erhalten wir wegen $2(p' - p) + 1 \geq 2(p - 1/2 - p) + 1 = 0$:

$$E_k \|\mathfrak{c}_{\alpha, j} \tilde{R}_{j+1,k} V_{\alpha}\|^2 \leq \tilde{K}_{\alpha} h^{2p+1+2o(\alpha)}.$$

Außerdem hängen die in der Abschätzung auftretenden Konstanten nur von p , α und $\|V_m\|$ ($m = 0, \dots, q$) ab. Für $\alpha \in \Lambda_{2p, \text{res}}$ gilt $\ell(\alpha) + \mathfrak{n}(\alpha) \geq 2p+1$ oder dazu gleichwertig $2o(\alpha) \geq 2p+1$. Somit gilt

$$\begin{aligned} E_k \|\hat{R}_{j+1,k}\|^2 &\leq \hat{K} \sum_{(\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \Lambda_{2p, \text{res}}} E_k \left| \mathfrak{c}_{\alpha', j} \prod_{l=0}^q \frac{b_{lj+1}^{m_l}}{m_l!} \right|^2 \\ &\leq \hat{K} \sum_{(\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \Lambda_{2p, \text{res}}} |\mathcal{T}_{\alpha', j}| \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha', j}} \frac{1}{\gamma!^2} E_k \left| \mathfrak{c}_j^{\gamma} \prod_{l=0}^q \frac{b_{lj+1}^{m_l}}{m_l!} \right|^2 \\ &\leq \hat{K} \sum_{(\alpha', n_{m_0}, e_{m_1}, \dots, e_{m_q}) \in \Lambda_{2p, \text{res}}} |\mathcal{T}_{\alpha', j}| \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha', j}} \frac{1}{\gamma!^2} \hat{K}_{\gamma} h^{2o(\alpha') + 2m_0 + \sum_{i=1}^q m_i} \\ &= O(h^{2p+1}), \end{aligned}$$

wobei \hat{K}_γ von den Momentenbedingungen (3.6) herrührt und \hat{K} eine generische Konstante ist, die nur von $|\Lambda_{2p, \text{res}}|$ und $\|V_m\|$ ($m = 0, \dots, q$) abhängt. Daraus resultiert für den Restterm $R_{s,k}$ die Gesamtabschätzung:

$$E_k \|R_{s,k}\|^2 \leq \sum_{j=0}^{s-1} (1 + |\Lambda_{2p}|)^{s-j} \left(\hat{K} h^{2p+1} + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \tilde{K}_\alpha h^{2p+1+2o(\alpha)} \right) = O(h^{2p+1}),$$

wobei \hat{K} , \tilde{K}_α nur von $\|V_j\|$ ($j = 0, \dots, q$), p , α und s abhängen. Schließlich, falls (3.18) gilt, erhalten wir bzgl. der Notation von Theorem 1.4 mit Hilfe der Abschätzung für $R_{s,k}$ und Anwendung der Ungleichung (3.10):

$$\begin{aligned} E \|X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k\|^2 &= E \left\| \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p})} V_\alpha J_\alpha[X(\cdot)] - R_{s,k} X(t_k) \right\|^2 \\ &\leq (|\mathcal{B}(\Lambda_{2p})| + 1) \left(\sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p})} E \|V_\alpha J_\alpha[X(\cdot)]\|^2 + E(E_k(\|R_{s,k}\|^2) \|X(t_k)\|^2) \right) \\ &\leq (|\mathcal{B}(\Lambda_{2p})| + 1) \left(\sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p})} K_\alpha h^{2o(\alpha)} E \|X(t_k)\|^2 + K h^{2p+1} E \|X(t_k)\|^2 \right) \\ &\leq K_1 E \|X(t_k)\|^2 h^{2p+1}. \end{aligned}$$

□

Die Aussage des Lemmas 3.3 lässt sich verschärfen, denn im Allgemeinen sind nicht alle Gleichungen bzgl. Λ_{2p} unabhängig. Um ein System unabhängiger Gleichungen zu finden stützen wir uns auf die Tatsache, dass die Menge L der Lyndon-Wörter eine Transzendenzbasis der Shuffle Algebra $(\mathbb{Q}[\mathcal{M}_q], \sqcup)$ bilden (siehe Kapitel 2), und auf das folgende Resultat:

Lemma 3.4. *Für jedes $s \in \mathbb{N}$ existiert ein Algebra-Homomorphismus*

$$\begin{aligned} f_s : (\mathbb{Q}[\mathcal{M}_q], \sqcup) &\rightarrow (\mathbb{Q}[b_{ij} : i = 0, \dots, q, j = 1, \dots, s], \cdot), \\ f_s : \alpha &\mapsto \mathbf{c}_{\alpha, s}. \end{aligned}$$

Also gilt

$$\sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha, \beta}} (\gamma, \alpha \sqcup \beta) \mathbf{c}_{\gamma, s} = \mathbf{c}_{\alpha \sqcup \beta, s} = f_s(\alpha \sqcup \beta) = f_s(\alpha) \cdot f_s(\beta) = \mathbf{c}_{\alpha, s} \cdot \mathbf{c}_{\beta, s} \quad (3.17)$$

für $\alpha, \beta \in \mathcal{M}_q$.

Beweis. Wir zeigen die Formel (3.17) via Induktion über s . Für $s = 1$ ist nur dann $\mathbf{c}_{\alpha \sqcup \beta, 1} \neq 0$, wenn $\alpha = (n_{m_{01}}, e_{m_{11}}, \dots, e_{m_{q1}})$ und $\beta = (n_{j_{01}}, e_{j_{11}}, \dots, e_{j_{q1}})$. In diesem Fall gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{\alpha \sqcup \beta, 1} &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha, \beta}} (\gamma, \alpha \sqcup \beta) \mathbf{c}_{\gamma, 1} = \left(\prod_{l=0}^q \binom{m_{l1} + j_{l1}}{j_{l1}} \right) \mathbf{c}_{(n_{m_{01}+j_{01}}, e_{m_{11}+j_{11}}, \dots, e_{m_{q1}+j_{q1}}), 1} \\ &= \prod_{l=0}^q \binom{m_{l1} + j_{l1}}{j_{l1}} \frac{b_{l1}^{m_{l1}+j_{l1}}}{(m_{l1} + j_{l1})!} = \mathbf{c}_{\alpha, 1} \cdot \mathbf{c}_{\beta, 1}. \end{aligned}$$

Für $s \geq 2$ wenden wir die Rekursionsformel (3.12) an:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{c}_{\alpha,s} \cdot \mathbf{c}_{\beta,s} &= \sum_{\substack{(\alpha', n_{m_{0s}}, e_{m_{1s}}, \dots, e_{m_{qs}}) = \alpha \\ (\beta', n_{j_{0s}}, e_{j_{1s}}, \dots, e_{j_{qs}}) = \beta}} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{ls}^{m_{ls} + j_{ls}}}{m_{ls}! j_{ls}!} \right) \mathbf{c}_{\alpha',s-1} \mathbf{c}_{\beta',s-1} \\
 &= \sum_{\substack{(\alpha', n_{m_{0s}}, e_{m_{1s}}, \dots, e_{m_{qs}}) = \alpha \\ (\beta', n_{j_{0s}}, e_{j_{1s}}, \dots, e_{j_{qs}}) = \beta}} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{ls}^{m_{ls} + j_{ls}}}{m_{ls}! j_{ls}!} \right) \sum_{\gamma' \in \mathcal{S}_{\alpha', \beta'}} (\gamma', \alpha' \sqcup \beta') \mathbf{c}_{\gamma',s-1} \\
 &= \sum_{\substack{(\alpha', n_{m_{0s}}, e_{m_{1s}}, \dots, e_{m_{qs}}) = \alpha \\ (\beta', n_{j_{0s}}, e_{j_{1s}}, \dots, e_{j_{qs}}) = \beta}} \sum_{\gamma' \in \mathcal{S}_{\alpha', \beta'}} (\gamma', \alpha' \sqcup \beta') \mathbf{c}_{\gamma',s-1} \left(\prod_{l=0}^q \binom{m_{ls} + j_{ls}}{m_{ls}} \frac{b_{ls}^{m_{ls} + j_{ls}}}{(m_{ls} + j_{ls})!} \right) \\
 &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha, \beta}} (\gamma, \alpha \sqcup \beta) \sum_{(\gamma', n_{v_{0s}}, e_{v_{1s}}, \dots, e_{v_{qs}}) = \gamma} \left(\prod_{l=0}^q \frac{b_{ls}^{v_{ls}}}{v_{ls}!} \right) \mathbf{c}_{\gamma',s-1} \\
 &= \sum_{\gamma \in \mathcal{S}_{\alpha, \beta}} (\gamma, \alpha \sqcup \beta) \mathbf{c}_{\gamma,s} = \mathbf{c}_{\alpha \sqcup \beta, s}.
 \end{aligned}$$

Hierbei muss die Induktionsannahme für das zweite Gleichheitszeichen investiert werden. Das vorletzte Gleichheitszeichen kann auf folgende Weise begründet werden: Für jedes $(\gamma', n_{v_{0s}}, e_{v_{1s}}, \dots, e_{v_{qs}}) = \gamma \in \mathcal{S}_{\alpha, \beta}$ existieren (mehrere) Partitionen $\alpha = (\alpha', n_{m_{0s}}, e_{m_{1s}}, \dots, e_{m_{qs}})$ und $\beta = (\beta', n_{j_{0s}}, e_{j_{1s}}, \dots, e_{j_{qs}})$ mit der Eigenschaft $m_{ls} + j_{ls} = v_{ls}$ ($l = 0, \dots, q$), so dass γ ein Konstituent des kartesischen Produktes

$$\mathcal{S}_{\alpha', \beta'} \times \mathcal{S}_{(n_{m_{0s}}), (n_{j_{0s}})} \times \mathcal{S}_{(e_{m_{1s}}), (e_{j_{1s}})} \times \dots \times \mathcal{S}_{(e_{m_{qs}}), (e_{j_{qs}})}$$

mit Vielfachheit

$$(\gamma', \alpha' \sqcup \beta') \cdot \prod_{l=0}^q \binom{v_{ls}}{m_{ls}}$$

ist. Schließlich resultiert die Vielfachheit $(\gamma, \alpha \sqcup \beta)$ aus der Summe obiger Vielfachheiten bzgl. aller verschiedenen Partitionen. \square

Das Lemma 3.4 hat folgende Auswirkung auf die starke lokale Fehlerbedingung in Lemma 3.3:

Theorem 3.1. *Folgende Aussagen sind gleichwertig:*

- (i) $\mathbf{c}_{\alpha,s} = J_{\alpha}$ für alle $\alpha \in \Lambda_r$,
- (ii) $\mathbf{c}_{\alpha,s} = J_{\alpha}$ für alle $\alpha \in L(\Lambda_r)$.

Beweis. Da stets die Implikation $L(\Lambda_r) \subseteq \Lambda_r$ gilt, ist nur zu zeigen, dass aus Aussage (ii) auch (i) folgt. Aber dies ergibt sich sofort aus der Anwendung von Proposition 2.2 auf das Korollar 2.2 und Lemma 3.4. \square

Beispiel 3.1. *Betrachte die Situation $s = 2, q = 1$ und $\alpha = (101) \in \Lambda_4$. Weiter gelte die Aussage (ii) in Theorem 3.1 für $r = 4$. α ist kein Lyndon-Wort. Es besitzt nach Beispiel 2.7 (i) die Darstellung $\alpha = (10) \sqcup (1) - 2(110)$ mit Lyndon-Wörtern aus Λ_4 . Ebenfalls in Kapitel 2 wurde gezeigt, dass $J_{(101)} = J_{(10)}J_{(1)} - 2J_{(110)}$ gilt. Tatsächlich folgt mittels (3.12):*

$$\begin{aligned}
 J_{(101)} &= J_{(10)}J_{(1)} - 2J_{(110)} = \mathbf{c}_{(10),2} \mathbf{c}_{(1),2} - 2\mathbf{c}_{(110),2} \\
 &= (a_2 b_1)(b_1 + b_2) - 2(a_2 b_1^2/2) = a_2 b_1 b_2 = \mathbf{c}_{(101),2}.
 \end{aligned}$$

Es fehlt noch eine schwache lokale Fehlerbedingung, die der in Theorem 1.4 auftretenden Voraussetzung (1.38) entspricht. Diese ist in das folgende Hauptresultat dieses Kapitels eingeflochten, welches eine Konsequenz aus Kombination des Theorems 1.4 mit den Lemmata 3.2, 3.3 und Theorem 3.1 ist:

Theorem 3.2. *Der Splitting Integrator (3.3) angewandt auf die Gleichung (3.1) ist von starker globaler Ordnung p , falls die Momentenbedingung (3.14) und in Bezug auf das Zeitschrittintervall $[t_k, t_{k+1}]$ für $k = 0, \dots, n-1$*

$$\mathbf{c}_{\alpha,s} = J_\alpha \quad \text{für alle } \alpha \in L(\Lambda_{2p}), \quad (3.18)$$

$$E_k(\mathbf{c}_{\alpha,s}) = E_k(J_\alpha) \quad \text{für alle } \alpha \in L(\Lambda_{2p+1} \setminus \Lambda_{2p}) \quad (3.19)$$

gilt. Dabei wird die Berechnung von $E_k(J_\alpha)$ in Bemerkung 2.4 diskutiert.

Beweis. Betrachte die Formel (3.15) bzgl. Λ_{2p+1} :

$$\Psi_k^{(s)} = \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s} V_\alpha + \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p+1} \setminus \Lambda_{2p}} \mathbf{c}_{\alpha,s} V_\alpha + R_{s,k},$$

wobei nach Lemma 3.3: $E_k \|R_{s,k}\|^2 = O(h^{2p+2})$. Sofern (3.18) und (3.14) erfüllt sind, führt uns das Lemma 3.3 auf

$$\begin{aligned} E_k(X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k) &= \sum_{\alpha \in \Lambda_{2p+1} \setminus \Lambda_{2p}} E_k(J_\alpha - \mathbf{c}_{\alpha,s}) V_\alpha X(t_k) \\ &\quad - E_k(R_{s,k}) X(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p+1})} V_\alpha E_k(J_\alpha[X(\cdot)]). \end{aligned}$$

Aufgrund von Theorem 3.1 und (3.19) verschwindet die erste Summe auf der rechten Seite m.W.1. Weiter folgt mittels (3.10):

$$\begin{aligned} \|E_k(X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k)\| &\leq \|E_k(R_{s,k})X(t_k)\| + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p+1})} \|V_\alpha E_k(J_\alpha[X(\cdot)])\| \\ &\leq (E_k \|R_{s,k}\|^2)^{1/2} \|X(t_k)\| + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p+1})} (E_k \|V_\alpha J_\alpha[X(\cdot)]\|^2)^{1/2} \\ &\leq K h^{p+1} \|X(t_k)\| + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_{2p+1})} K_\alpha h^{\sigma(\alpha)} \sup_{s \in [t_k, t_{k+1}]} (E_k \|X(s)\|^2)^{1/2} \\ &\leq K_2 \|X(t_k)\| h^{p+1}. \end{aligned}$$

Somit folgt bzgl. der Notation von Theorem 1.4, dass $p_1 = p + 1$ und durch Lemma 3.3, dass $p_2 = p + 1/2$. Die Behauptung resultiert jetzt aus Theorem 3.1. \square

Zuerst sei an dieser Stelle bemerkt, dass Burrage & Burrage in [5] mit Hilfe von *B-Reihen* ein zu Theorem 3.2 ähnliches Kriterium für die starke globale Ordnung für *stochastische Runge-Kutta-Verfahren* (diese können auch implizit sein) für Stratonovich-Gleichungen hergeleitet haben.

Offensichtlich inkludiert das Theorem 3.2 auch den deterministischen Fall, genauer: Ersetzen wir in Gleichung (3.1) $\circ dW^j(t)$ durch dt für $j = 1, \dots, q$, so erhalten wir ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$dX(t) = \sum_{j=0}^q V_j X(t) dt, \quad X(t_0) = X_0. \quad (3.20)$$

Das Theorem 3.2 vereinfacht sich zu:

Korollar 3.1. *Der Splitting Integrator (3.3) angewandt auf die Gleichung (3.20) ist von globaler Ordnung p ($\in \mathbb{N} \cup \{0\}$), falls*

$$\epsilon_{\alpha,s} = J_{(0)}^{\ell(\alpha)} / \ell(\alpha)! \quad \text{für alle } \alpha \in L(\Theta_p).$$

Bereits die Struktur der zu Θ_p gehörigen Restmenge

$$\mathcal{B}(\Theta_p) = \{\alpha \in \mathcal{M}_q : \ell(\alpha) = p + 1\}$$

suggeriert, dass der lokale Fehler von der Ordnung $p+1$ ist. Vergleiche dazu [11, Chapter III.5.3].

3.2 Splitting Integratoren für $q \geq 2$

Wir behandeln jetzt Splitting Integratoren für den zeitunabhängigen Fall und $q \geq 2$.

3.2.1 Ordnungsbedingungen für Splitting Integratoren der Ordnung 0.5

Wir widmen uns zunächst den Verfahren mit starker globaler Ordnung 0.5. Nach Theorem 3.2 müssen wir Lösungen des folgenden linearen Systems finden ($L(\Lambda_1) = \{(q), \dots, (1)\}$):

$$\sum_{j=1}^s b_{ij} = J_{(i)} \quad (i = 1, \dots, q). \quad (3.21)$$

Offenbar finden wir eine Lösung zu (3.21) indem wir $b_{ij} = \hat{b}_{ij} J_{(i)}$ mit $\hat{b}_{ij} \in \mathbb{R}$ für $i = 1, \dots, q$, $j = 1, \dots, s$ setzen. Es muss dann lediglich das System

$$\sum_{j=1}^s \hat{b}_{ij} = 1 \quad (i = 1, \dots, q) \quad (3.22)$$

gelöst werden. Bevor ein Beispiel diskutiert wird stellen wir fest, dass eine Lösung von (3.22) und damit eine Lösung von (3.21) stets die schwachen Ordnungsbedingungen erfüllt. Diese sind wegen

$$L(\Lambda_2 \setminus \Lambda_1) = \{(0)\} \cup \{(l, i) : 1 \leq i < l \leq q\}$$

durch

$$\sum_{1 \leq m \leq j \leq s} \hat{b}_{im} \hat{b}_{lj} E_k(J_{(i)} J_{(l)}) = E_k(J_{(li)}) \quad (1 \leq i < l \leq q), \quad (3.23)$$

$$\sum_{j=1}^s a_j = J_{(0)} \quad (3.24)$$

gegeben. Die Bedingung (3.23) ist aber wegen $E_k(J_{(i)} J_{(l)}) = 0 = E_k(J_{(li)})$ für $1 \leq i < l \leq q$ redundant. Es kommt nur die Bedingung (3.24) hinzu, und insgesamt gibt es $q+1$. Weiter wird aus Letzterem ersichtlich, dass keiner dieser Integratoren von starker globaler Ordnung ≥ 1 ist.

Beispiel 3.2. *Für $s = 1$ ist die Lösung von (3.21) offensichtlich eindeutig durch $b_{i1} = J_{(i)}$ ($i = 1, \dots, q$) und $a_1 = J_{(0)}$ bestimmt. Ergo ist der Splitting Integrator der Ordnung 0.5 durch*

$$X_{k+1} = e^{J_{(q)} V_q} \dots e^{J_{(1)} V_1} e^{J_{(0)} V_0} X_k$$

gegeben.

3.2.2 Ordnungsbedingungen für Splitting Integratoren der Ordnung 1

Für einen Splitting Integrator von starker globaler Ordnung 1 ist folgendes System von $(q^2 + q + 2)/2$ Gleichungen gültig:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^s b_{ij} &= J_{(i)} \quad (1 \leq i \leq q), \\ \sum_{j=1}^s a_j &= J_{(0)}, \\ \sum_{1 \leq m \leq j \leq s} b_{im} b_{lj} &= J_{(li)} \quad (1 \leq i < l \leq q), \end{aligned}$$

denn

$$L(\Lambda_2) = \{(i) : 0 \leq i \leq q\} \cup \{(l, i) : 1 \leq i < l \leq q\}.$$

Aufgrund

$$L(\Lambda_3 \setminus \Lambda_2) = \{(i, 0) : 1 \leq i \leq q\} \cup \{(j, i, l) : 1 \leq l < i = j \leq q, 1 \leq l, i < j \leq q\}$$

ist auch folgendes System von $q(q^2 + 2)/3$ Gleichungen erfüllt:

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq m \leq j \leq s} E_k(b_{im}) a_j &= E_k(J_{(i0)}) = 0 \quad (1 \leq i \leq q), \\ \frac{1}{2} \sum_{1 \leq u \leq v \leq s} E_k(b_{ju}^2 b_{iu}) + \sum_{1 \leq u \leq v < w \leq s} E_k(b_{jv} b_{jw} b_{iu}) &= E_k(J_{(jji)}) = 0 \quad (1 \leq i < j \leq q), \\ \frac{1}{2} \sum_{1 \leq u \leq w \leq s} E_k(b_{iu}^2 b_{jw}) + \sum_{1 \leq u < v \leq w \leq s} E_k(b_{jv} b_{iv} b_{iu}) &= E_k(J_{(jii)}) = 0 \quad (1 \leq i < j \leq q), \\ \sum_{1 \leq u \leq v \leq w \leq s} E_k(b_{jw} b_{iv} b_{lu}) &= E_k(J_{(jil)}) = 0 \quad (1 \leq l \neq i < j \leq q). \end{aligned}$$

Bemerkung 3.3. Zur Konstruktion eines Splitting Integrators von starker globaler Ordnung 1 für $q = 2$ ist $s \geq 3$ notwendig. Allerdings ist das zugrunde liegende nicht lineare System bereits für $s = 3$ sehr kompliziert (das System besteht aus 4 starken & 4 schwachen Gleichungen mit 9 Unbekannten), und keine Resultate sind dazu bekannt.

Im Gegensatz dazu ist in der deterministischen Situation (3.20) für $q = s + 1$ das Strang-Splitting

$$X_{k+1} = e^{V_0 h/2} \dots e^{V_{q-1} h/2} e^{V_q h} e^{V_{q-1} h/2} \dots e^{V_0 h/2} X_k,$$

welches von globaler Ordnung 2 ist, leicht mit Hilfe der in Kapitel 1 erwähnten adjungierten Methode zu konstruieren.

3.3 Einige Beispiele zu Splitting Integratoren für $q = 1$

Wir leiten im zeitunabhängigen Fall, für $s = 1, 2, 3$ und $q = 1$, Splitting Integratoren von starker globaler Ordnung 1 und 1.5 her. Genauer: Wir betrachten (3.1) für $q = 1$ und $W := W^1$:

$$dX(t) = V_0 X(t) dt + V_1 X(t) \circ dW(t), \quad X(t_0) = X_0$$

und Splitting Integratoren ($b_j := b_{1j}$ ($j = 1, \dots, s$))

$$X_{k+1} = e^{b_s V_1} e^{a_s V_0} \dots e^{b_1 V_1} e^{a_1 V_0} X_k.$$

Dabei konzentrieren wir uns ausschließlich auf die Situation nicht zufälliger

$$a_j \geq 0 \quad (j = 1, \dots, s).$$

Wir erinnern uns, dass zuvor die Forderung der Schiefhermiteizität von V_0 notgedrungen aus dem möglichen Vorzeichenwechsel der a_j und zugleich der Gültigkeit der Ungleichung $\|e^{a_j V_0}\| \leq 1$ erfolgte. In der jetzigen Situation kann letztere Ungleichung durch eine Reskalierung $Y(t) = e^{-at} X(t)$ ($a \in \mathbb{R}$, so dass $\|e^{a_j(V_0 - a \cdot Id)}\| \leq 1$) der exakten Lösung der Ausgangsgleichung (3.1) erzwungen werden. Das Anfangswertproblem für Y ist durch

$$dY(t) = (V_0 - a \cdot Id)Y(t)dt + V_1 Y(t) \circ dW(t), \quad Y(t_0) = e^{-at_0} X_0 = Y_0 \quad (3.25)$$

gegeben. Es wird dann das entsprechende Splitting zur Gleichung für Y mit Startwert Y_0 studiert. Wir stellen keine zusätzlichen Forderungen an die b_j ($j = 1, \dots, s$). Bei den folgenden Ausführungen verwenden wir stets: Für einen Splitting Integrator der starken globalen Ordnung p ist aufgrund von Theorem 3.2 jeweils das Betrachten der Bedingungsgleichungen ausreichend, die durch $L(\Lambda_{2p+1})$ induziert werden.

3.3.1 Splitting Integratoren für $s = 1$

Im Falle $s = 1$ ist das Verfahren

$$X_{k+1} = e^{b_1 V_1} e^{a_1 V_0} X_k$$

zu studieren. Hier ist die natürliche Schranke $p \leq (3s - 1)/2 = 1$. Außerdem sind die (starken) unabhängigen Ordnungsbedingungen durch

$$\begin{aligned} b_1 &= \mathbf{c}_{(1),1} = J_{(1)}, \\ a_1 &= \mathbf{c}_{(0),1} = J_{(0)} \end{aligned}$$

gegeben, denn $L(\Lambda_2) = \{(1), (0)\}$. Die schwache Ordnungsbedingung ($L(\Lambda_2 \setminus \Lambda_1) = \{(10)\}$) ist automatisch erfüllt, da $\mathbf{c}_{(10),1} = 0$ und $E_k(J_{(10)}) = 0$. D.h. für

$$\begin{cases} a_1 = J_{(0)}, \\ b_1 = J_{(1)} \end{cases}$$

ist das Verfahren von starker globaler Ordnung 1.

3.3.2 Splitting Integratoren für $s = 2$

Im Falle $s = 2$ ist das Verfahren

$$X_{k+1} = e^{b_2 V_1} e^{a_2 V_0} e^{b_1 V_1} e^{a_1 V_0} X_k \quad (3.26)$$

zu analysieren, wobei hier die natürliche Schranke für p durch $(3s - 1)/2 = 2.5$ gegeben ist. Aber im Folgenden zeigen wir, dass bestenfalls $p = 1.5$ möglich ist. Für ein Verfahren der Ordnung 1.5 muss zunächst das System

$$b_1 + b_2 = \mathbf{c}_{(1),2} = J_{(1)}, \quad (3.27)$$

$$a_1 + a_2 = \mathbf{c}_{(0),2} = J_{(0)}, \quad (3.28)$$

$$b_1 a_2 = \mathbf{c}_{(10),2} = J_{(10)} \quad (3.29)$$

gelöst werden, denn $L(\Lambda_3) = \{(1), (0), (10)\}$. Da $L(\Lambda_3 \setminus \Lambda_2) = \{(110)\}$ ist, kommt nur eine zusätzliche schwache Ordnungsbedingung

$$E_k(\mathbf{c}_{(110),2}) = E_k(J_{(110)}) = J_{(0)}^2/4 \quad (3.30)$$

hinzu, wobei $\mathbf{c}_{(110),2} = b_1^2 a_2/2$. Dabei liefert die Gleichung (3.29): $b_1 = J_{(10)}/a_2$, falls $a_2 \neq 0$. Einsetzen des letzteren Ausdrucks in Gleichung (3.30) ergibt $a_2 = 2J_{(0)}/3$. Da der Multiindex (110) ein Lyndon-Wort ist, gilt tatsächlich $\mathbf{c}_{(110),2} - J_{(110)} \neq 0$. Folglich erhalten wir aus den Bedingungen (3.27) und (3.28):

Proposition 3.1. *Das Splitting Verfahren (3.26) ist genau dann von starker globaler Ordnung 1.5, wenn*

$$\begin{cases} a_1 = J_{(0)}/3, & a_2 = 2J_{(0)}/3, \\ b_1 = 3J_{(10)}/2J_{(0)}, & b_2 = J_{(1)} - 3J_{(10)}/2J_{(0)} = (J_{(01)} - J_{(10)}/2)/J_{(0)} \end{cases} \quad (3.31)$$

gilt. Außerdem ist für das allgemeine Verfahren (3.26) 1.5 die bestmögliche Ordnung.

Bemerkung 3.4. *In der deterministischen Situation (ersetze in (3.1) mit $q = 1: \circ dW^1(t)$ durch dt) sind die entsprechenden Koeffizienten durch*

$$\begin{cases} a_1 = J_{(0)}/4, & a_2 = 3J_{(0)}/4, \\ b_1 = 2J_{(0)}/3, & b_2 = J_{(0)}/3 \end{cases}$$

gegeben. Diese Wahl führt auf ein Verfahren von globaler Ordnung 2.

Wir betrachten weitere Beispiele für $s = 2$:

Beispiel 3.3. *Von $b_2 = 0$ ausgehend ergibt sich der einfachste nicht triviale Fall, das sogenannte θ -Splitting:*

$$X_{k+1} = e^{J_{(0)}(1-\theta)V_0} e^{J_{(1)}V_1} e^{\theta J_{(0)}V_0} X_k, \quad (3.32)$$

wobei die Wahlen $a_2 = J_{(0)} - a_1$, $a_1 = \theta J_{(0)}$, $\theta \in \mathbb{R}$ und $b_1 = J_{(1)}$ für den Erhalt eines konsistenten Verfahrens garantieren. Wir bemerken, dass für $\theta = 1/2$ das symmetrische Trotter- oder Strang-Splitting vorliegt. Offensichtlich sind die starken und schwachen Ordnungsbedingungen für $p = 1$ unabhängig von der Wahl von θ erfüllt. Aber, es existiert kein θ , so dass die vom Multiindex (10) induzierte starke Ordnungsbedingung gilt, da

$$\mathbf{c}_{(10),2} - J_{(10)} = b_1 a_2 - J_{(10)} = (1 - \theta)J_{(0)}J_{(1)} - J_{(10)} \neq 0.$$

Bemerkung 3.5. *Im deterministischen Fall (siehe Bemerkung 3.4) gilt: Nur für $\theta = 1/2$ liegt globale Ordnung 2 statt 1 vor. Zwar ist für $\theta = 1/2$ die starke globale Ordnung des θ -Splittings (3.32) nicht erhöht, aber immerhin wird in diesem Fall die Fehlerkonstante $\theta^2 - \theta + 1/3$ zu $1/12$ minimiert.*

Beispiel 3.4. *Das vorangegangene Beispiel könnte den Versuch motivieren die Rollen von V_0 und V_1 zu vertauschen. Mit anderen Worten, wir setzen in (3.26) $a_1 = 0$, $a_2 = J_{(0)}$ und betrachten*

$$X_{k+1} = e^{b_2 V_1} e^{J_{(0)} V_0} e^{b_1 V_1} X_k. \quad (3.33)$$

Tatsächlich können in dieser Situation die starken Ordnungsbedingungen für $p = 1.5$ erfüllt werden, denn das System

$$\begin{aligned} J_{(1)} &= b_1 + b_2, \\ J_{(10)} &= b_1 J_{(0)} \end{aligned}$$

besitzt die Lösung

$$\begin{cases} b_1 = J_{(10)}/J_{(0)}, \\ b_2 = J_{(01)}/J_{(0)}. \end{cases}$$

Allerdings gilt die schwache Bedingung $E_k(J_{(110)}) = E_k(b_1^2)J_{(0)}/2$ nicht. Denn es ist

$$E_k(\mathfrak{d}) = J_{(0)}^3/6, \quad (3.34)$$

wobei

$$\mathfrak{d} := 2J_{(0)}J_{(110)} - J_{(10)}^2 (\neq 0). \quad (3.35)$$

Bzgl. der Notation in Theorem 1.4, haben wir $p_1 = 2 = p_2$ gezeigt, also dass das Verfahren (3.33) im Allgemeinen nur von starker globaler Ordnung 1 ist.

3.3.3 Splitting Integratoren für $s = 3$

Jetzt untersuchen wir Splitting Integratoren für $s = 3$, also

$$X_{k+1} = e^{V_1 b_3} e^{V_0 a_3} e^{V_1 b_2} e^{V_0 a_2} e^{V_1 b_1} e^{V_0 a_1} X_k. \quad (3.36)$$

Wir zeigen, dass in dieser Situation kein Verfahren existiert, das die starken globalen Ordnung 2 Bedingungen des Theorems 3.2 und damit die des Theorems 1.4 erfüllt. Angenommen es existieren Koeffizienten a_j, b_j ($j = 1, 2, 3$) derart, dass das Verfahren von starker globaler Ordnung 2 ist. Dann erfüllten diese Koeffizienten notwendig die folgenden unabhängigen starken Bedingungen, die durch $L(\Lambda_4) = \{(1), (0), (10), (110)\}$ induziert werden:

$$b_1 + b_2 + b_3 = \mathfrak{c}_{(1),3} = J_{(1)}, \quad (3.37)$$

$$a_1 + a_2 + a_3 = \mathfrak{c}_{(0),3} = J_{(0)}, \quad (3.38)$$

$$(b_1 + b_2)a_3 + b_1 a_2 = \mathfrak{c}_{(10),3} = J_{(10)}, \quad (3.39)$$

$$(b_1 + b_2)^2 a_3 / 2 + b_1^2 a_2 / 2 = \mathfrak{c}_{(110),3} = J_{(110)}. \quad (3.40)$$

Aber, durch ineinander Einsetzen der Gleichungen (3.37)–(3.40) finden wir folgende Aussage:

Proposition 3.2. Für $a_2, a_3 \neq 0$ und $\mathfrak{d}_1 \geq 0$ führt die Wahl

$$\begin{cases} b_1 = (J_{(10)} \pm \mathfrak{d}_1^{1/2}) / (a_2 + a_3), \\ b_2 = \mp \mathfrak{d}_1^{1/2} / a_3, \\ b_3 = J_{(1)} - ((J_{(10)} \mp a_2 \mathfrak{d}_1^{1/2} / a_3) / (a_2 + a_3)), \end{cases} \quad (3.41)$$

wobei $\mathfrak{d}_1 := a_3(2(a_2 + a_3)J_{(110)} - J_{(10)}^2) / a_2$, auf ein Verfahren von starker globaler Ordnung 1.5.

Beweis. Eine leichte Rechnung zeigt, dass die Koeffizienten in (3.41) die starken lokalen Ordnung 2 Bedingungen erfüllen. Außerdem verweisen wir für die Existenz von $a_2, a_3 \neq 0$, so dass $\mathfrak{d}_1 \geq 0$ auf (3.35). Jedoch das Auswerten der schwachen Ordnung 2 Bedingungen führt auf einen Widerspruch, denn

$$E_k(b_1)(a_2 + a_3)^2/2 + E_k(b_2)a_3^2/2 = E_k(\mathfrak{c}_{(100),3}) = E_k(J_{(100)}) = 0$$

bedeutet $E_k(\mathfrak{d}_1^{1/2})a_2 = 0$, also $a_2 = 0$. Wir schließen, dass $p_1 = 2.5 = p_2$, und wir können nach Theorem 1.4 nur $p = 1.5$ folgern. \square

Proposition 3.2 führt unmittelbar zu der Einsicht:

Proposition 3.3. *Ein Splitting Integrator der Form (3.3) kann nur dann von starker globaler Ordnung 2 sein, wenn $s \geq 4$, die Koeffizienten b_j wenigstens von den Integralen $J_{(0)}$, $J_{(1)}$, $J_{(10)}$, $J_{(110)}$ abhängen und einem System sechs (vier starke und zwei schwache) unabhängiger Gleichungen genügen.*

Dafür gibt es im Gegensatz zum Fall $s = 2$ ein *schwach symmetrisches Splitting* der starken globalen Ordnung 1.5. Dabei heißt ein Splitting Integrator schwach symmetrisch, wenn dieser bzgl. der Koeffizienten $E(b_j)$ ($j = 1, \dots, s$) statt b_j im klassischen Sinne symmetrisch ist.

Beispiel 3.5. *Wir setzen in (3.41) $a_2 = J_{(0)}/2 = a_3$ und $a_1 = 0$ ein. Somit erhalten wir*

$$X_{k+1} = e^{V_1 b_3} e^{V_0 J_{(0)}/2} e^{V_1 b_2} e^{V_0 J_{(0)}/2} e^{V_1 b_1} X_k,$$

wobei die Koeffizienten b_j ($j = 1, 2, 3$) durch

$$\begin{cases} b_1 = (J_{(10)} \pm \mathfrak{d}^{1/2})/J_{(0)}, \\ b_2 = \mp 2\mathfrak{d}^{1/2}/J_{(0)}, \\ b_3 = (J_{(01)} \pm \mathfrak{d}^{1/2})/J_{(0)} \end{cases}$$

gegeben sind. Hier ist \mathfrak{d} durch (3.35) bestimmt, wobei $\mathfrak{d} \geq 0$ aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$J_{(10)}^2 \leq 2J_{(0)}J_{(110)}$$

folgt. Also ist $p_1 = 2.5 = p_2$ und das Verfahren ist Theorem 1.4 zufolge von starker globaler Ordnung 1.5.

Beispiel 3.6. *Das in Beispiel 3.5 vorgestellte Verfahren involviert das iterierte Stratonovich-Integral $J_{(110)}$, welches über die starke Ordnung 2 Bedingung ins Spiel gelangte. Aber eine einfache Rechnung zeigt, dass die Verwendung von $E(\mathfrak{d})$ statt \mathfrak{d} ausreicht, um starke globale Ordnung 1.5 zu erhalten. Damit wird auch die, in Kapitel 2 erwähnte, aufwendige Simulation des Integrals $J_{(110)}$ umgangen. Via (3.34) folgt schließlich*

$$\begin{cases} b_1 = J_{(10)}/J_{(0)} \pm (J_{(0)}/6)^{1/2}, \\ b_2 = \mp 2(J_{(0)}/6)^{1/2}, \\ b_3 = J_{(01)}/J_{(0)} \pm (J_{(0)}/6)^{1/2}. \end{cases} \quad (3.42)$$

Bemerkung 3.6. *Mit Hilfe der Formel (2.6) kann gezeigt werden, dass in allen angeführten Beispielen die Momentenbedingung (3.6) erfüllt ist.*

3.4 Der zeitabhängige Fall

Hier betrachten wir Gleichung (1.41) für $q = 1$ und $W := W^1$, also

$$dX(t) = V_0(t)X(t)dt + V_1(t)X(t) \circ dW(t), \quad X(t_0) = X_0$$

und wenden darauf Splitting Integratoren der Form ($b_j := b_{1j}$)

$$X_{k+1} = \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1(t_k, c_j)} e^{a_j V_0(t_k, d_j)} \right) X_k \quad (3.43)$$

an, wobei $t_{k, c_j} = t_k + c_j J_{(0)}$, $t_{k, d_j} = t_k + d_j J_{(0)}$ mit Knoten $d_j, c_j \in [0, 1]$ für $j = 1, \dots, s$. Außerdem seien die $V_j(t)$ ($j = 0, 1$) schieferhermitesch und ausreichend glatt. Ferner seien M_j ($j = 0, 1$) reelle Konstanten so, dass $\left\| \frac{d^m V_j}{dt^m}(t) \right\| \leq M_j$ für $m = 0, 1, \dots$. Aus der Glattheit der V_j folgt bereits (siehe Lemma 1.6, Bemerkung 1.12), dass die Stabilitätsbedingungen (1.36) und (1.37) des Theorems 1.4 für ein Splitting mit (1.57) erfüllt ist. Also bleibt wiederum das Studium des lokalen Fehlers.

Definition 3.1. (*assoziertes Splitting*) Es seien Koeffizienten a_j, b_j ($j = 1, \dots, s$) gegeben bzgl. dieser der Splitting Integrator (3.3) in Bezug auf Gleichung (3.1) (also den zeitunabhängigen Fall) für $q = 1$ von starker globaler Ordnung p ist. Das mit selbigen Koeffizienten ausgestattete Splitting (3.43) bezeichnen wir als zu (3.3) assoziiert.

Wir stellen die Frage:

- Existiert zu einem gegebenen Splitting Verfahren (3.3) der starken globalen Ordnung p stets ein assoziiertes Splitting (oder gleichbedeutend Knoten d_j, c_j ($j = 1, \dots, s$)) derart, dass dieses von gleicher Ordnung ist?

Wir werden für die Fälle $p \in \{1, 1.5\}$ die Frage vollständig beantworten und einige Beispiele dazu diskutieren. Hierfür nutzen wir aus, dass der zeitabhängige den zeitunabhängigen Fall inkludiert. Dies soll mit Hilfe der Taylor-Entwicklung der Koeffizientenfunktionen um das linke Ende des jeweiligen Integrationsintervalls geschehen. Doch zuvor werden basierend auf Lemma 3.2 folgende Notationen bereitgestellt:

$$\tilde{\mathbf{c}}_{\alpha, s} = \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, s}} \frac{1}{\gamma!} \mathbf{c}_s^\gamma,$$

wobei für $\gamma = (m_{01}, m_{11}, \dots, m_{0s}, m_{1s}) \in \mathcal{T}_{\alpha, s}$

$$\mathbf{c}_s^\gamma = \prod_{j=1}^s (b_j V_1(t_k, c_j))^{m_{1j}} (a_j V_0(t_k, d_j))^{m_{0j}} = \prod_{j=1}^s \prod_{i=0}^1 (b_{ij} V_i(t_k, c_{ij}))^{m_{ij}},$$

wobei $b_{0j} = a_j$, $c_{0j} = d_j$, $b_{1j} = b_j$, $c_{1j} = c_j$ ist.

Bemerkung 3.7. Gilt $t_{k, c_j} = t_k = t_{k, d_j}$ für alle $j = 1, \dots, s$, dann ist für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_1$

$$\tilde{\mathbf{c}}_{\alpha, s} = \mathbf{c}_{\alpha, s} V_\alpha(t_k), \quad V_\alpha(t_k) = \prod_{j=1}^l V_{i_j}(t_k),$$

wobei $\mathbf{c}_{\alpha, s}$ durch (3.13) gegeben ist.

Bemerkung 3.7 liefert die Idee, wie der zeitunabhängige Fall zur Analyse der zeitabhängigen Situation eingesetzt werden kann. Dazu setzen wir die Funktionen V_j ($j = 0, 1$) als zweimal stetig differenzierbar voraus, und benutzen den Hauptsatz der Integralrechnung

$$V_j(t) = V_j(t_k) + J_{(0)}[\dot{V}_j(\cdot)]_{t_k, t} \quad (t_{k+1} \geq t \geq t_k).$$

Um die einzelnen lokalen Fehlerterme zu untersuchen, verwenden wir bzgl. $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_1$ und $s_\alpha = (s_1, \dots, s_l) \in \mathbb{R}^l$ die Produktformel (1.56) mit $\mathfrak{K}_j = V_{i_j}(t_k)$, $\mathfrak{L}_j = J_{(0)}[\dot{V}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-j}}$ ($j = 1, \dots, l$):

$$\begin{aligned} V_\alpha(s_\alpha) &= \prod_{j=1}^l \left(V_{i_j}(t_k) + J_{(0)}[\dot{V}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-j}} \right) \\ &= V_\alpha(t_k) + \sum_{j=1}^l \left(\prod_{m=j+1}^l V_{i_m}(t_k) \right) J_{(0)}[\dot{V}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-j}} \prod_{m=1}^{j-1} V_{i_m}(s_{l+1-m}). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Nochmaliges Anwenden von (1.56) mit selbigen \mathfrak{K}_j , \mathfrak{L}_j auf letzteres Produkt in (3.44) ergibt

$$V_\alpha(s_\alpha) = V_\alpha(t_k) + \sum_{j=1}^l J_{(0)}[V_{\alpha, j}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-j}} + \tilde{R}_{\alpha, k}, \quad (3.45)$$

wobei

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{\alpha, k} &= \sum_{j=1}^l \left(\prod_{m=j+1}^l V_{i_m}(t_k) \right) J_{(0)}[\dot{V}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-j}} \\ &\quad \cdot \left(\sum_{m=1}^{j-1} \left(\prod_{n=m+1}^{j-1} V_{i_n}(t_k) \right) J_{(0)}[\dot{V}_{i_m}(\cdot)]_{t_k, s_{l+1-m}} \prod_{n=1}^{m-1} V_{i_n}(s_{l+1-n}) \right) \end{aligned} \quad (3.46)$$

und die abkürzende Schreibweise

$$V_{\alpha, j}(t) = \left(\prod_{m=j+1}^l V_{i_m}(t_k) \right) \dot{V}_{i_j}(t) \left(\prod_{m=1}^{j-1} V_{i_m}(t_k) \right) \quad (j = 1, \dots, l)$$

verwendet wurde. Dabei ist der zweite Summand in (3.45) von der Größenordnung $O(h)$, und $\|\tilde{R}_{\alpha, k}\| = O(h^2)$. Zusammen mit Bemerkung 3.7 folgt:

$$J_\alpha[V_\alpha(\cdot)]_{t_k, t_{k+1}} - \tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha, s} = (J_\alpha - \mathfrak{c}_{\alpha, s})V_\alpha(t_k) + R_{\alpha, s, k}. \quad (3.47)$$

Hierbei ist

$$R_{\alpha, s, k} = \sum_{j=1}^l \left(J_{(0, \alpha)}[V_{\alpha, j}(\cdot)]_{t_k, t_{k+1}} - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, s}} \frac{1}{\gamma!} \mathfrak{c}_s^\gamma J_{(0)}[V_{\alpha, j}(\cdot)]_{t_k, t_{k, j}(\gamma)} \right) + \tilde{R}_{\alpha, s, k},$$

wobei

$$\begin{aligned} t_k(\gamma) &= (t_{k, 1}(\gamma), \dots, t_{k, l}(\gamma)) \\ &= (t_{k, c_s}, \dots, t_{k, c_s}, t_{k, d_s}, \dots, t_{k, d_s}, \dots, t_{k, c_1}, \dots, t_{k, c_1}, t_{k, d_1}, \dots, t_{k, d_1}). \end{aligned}$$

Die Länge jedes t_{k, d_j} - bzw. t_{k, c_j} -Blocks beträgt m_{0j} bzw. m_{1j} . Der zusätzliche Restterm $\tilde{R}_{\alpha, s, k}$ enthält nach (3.46) Summen von Produkten der $V_j(\cdot)$, die wenigstens auch noch zwei Faktoren $\dot{V}_j(\cdot)$ involvieren. Aus letzterer Überlegung schließen wir, dass

$$E_k \|R_{\alpha, s, k}\|^2 = O(h^{2(o(\alpha)+1)}), \quad E_k \|\tilde{R}_{\alpha, s, k}\|^2 = O(h^{2(o(\alpha)+2)}).$$

Bemerkung 3.8. *Obige Ausführungen deuten an: Ist ein Splitting Verfahren vom Typ (3.3), also in der zeitunabhängigen Situation, von starker lokaler Ordnung $p_2 = p + 1/2$ und schwacher lokaler Ordnung $p_1 \geq p_2 + 1/2 = p + 1$, so gilt dies auch für das assoziierte Splitting, sofern dieses für $\alpha \in \Lambda_{2p} \setminus \{(\emptyset)\}$ zusätzliche starke lokale Ordnungsbedingungen für den Multiindex $((n_j), \alpha)$ für alle $1 \leq j \leq p - o(\alpha)$, und eine schwache lokale Ordnungsbedingung falls $j = p - o(\alpha) + 1/2 \in \mathbb{N}$ erfüllt.*

Folglich sind für $p \geq 1.5$ Taylor-Entwicklungen der Koeffizientenfunktionen höherer Ordnung notwendig. Daher zerlegen wir weiter:

$$R_{\alpha,s,k} = \bar{R}_{\alpha,s,k} + \hat{R}_{\alpha,s,k} + \tilde{R}_{\alpha,s,k},$$

wobei

$$\begin{aligned} \bar{R}_{\alpha,s,k} &= \sum_{j=1}^l \left(J_{(0,\alpha),t_k,t_{k+1}} - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} \mathbf{c}_s^\gamma J_{(0),t_k,t_{k,j}(\gamma)} \right) V_{\alpha,j}(t_k), \\ \hat{R}_{\alpha,s,k} &= \sum_{j=1}^l \left(J_{(00,\alpha)}[V_{\alpha,jj}(\cdot)]_{t_k,t_{k+1}} - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} \mathbf{c}_s^\gamma J_{(00)}[V_{\alpha,jj}(\cdot)]_{t_k,t_{k,j}(\gamma)} \right) \end{aligned}$$

mit

$$V_{\alpha,jj}(t) = \left(\prod_{m=j+1}^l V_{i_m}(t_k) \right) \dot{V}_{i_k}(t) \left(\prod_{m=1}^{j-1} V_{i_m}(t_k) \right) \quad (j = 1, \dots, l)$$

eingeführt wurden. Letzterer Restterm hat die Eigenschaft: $E_k \|\hat{R}_{\alpha,s,k}\|^2 = O(h^{2(o(\alpha)+2)})$.

Bemerkung 3.9. *Die maximal benötigte Ordnung für die Taylor-Entwicklung wird durch $\alpha = (1)$ bestimmt. Diese Ordnung beträgt gemäß Bemerkung 3.8 höchstens $p + o(\alpha) + 1/2 = p + 1$, falls $p \in \mathbb{N}$ und $p + 1/2$ sonst. Zudem führen die von $\alpha = (1)$ induzierten Ordnungsbedingungen auf eine stochastische Quadraturaufgabe bzgl. der Quadraturformel (b_j, c_j) , $(j = 1, \dots, s)$. Diese werden wir in Kapitel 4 behandeln und dabei zeigen, dass ihre starke Ordnung höchstens s ist.*

3.4.1 Splitting Integratoren der Ordnung 1

Als Konsequenz von Theorem 3.2 und der Gleichung (3.47) erhalten wir auch im zeitabhängigen Fall ein Kriterium für die starke globale Ordnung eines Splitting Integrators.

Theorem 3.3. *Der Splitting Integrator (3.43) ist von starker globaler Ordnung $p = 1$, wenn die Bedingungen in Theorem 3.2 für $q = 1$ und*

$$\sum_{j=1}^s E_k(b_j)c_j = 0 \tag{3.48}$$

erfüllt sind.

Beweis. Da der zeitabhängige den zeitunabhängigen Fall inkludiert, ist nur das Auftreten der zusätzlichen Bedingung (3.48) zu erklären. Für $\alpha \in \Lambda_2 \setminus \{(\emptyset)\}$ gilt $p - o(\alpha) = 1 - o(\alpha) \leq 1/2$, also ist lediglich die schwache Ordnungsbedingung, die durch $\alpha = (1)$ induziert wird, zu betrachten (nur dann gilt $p - o(\alpha) + 1/2 = p \in \mathbb{N}$). Dies bedeutet

$$\begin{aligned} E_k \left(J_{(1)}[V_1(\cdot)]_{t_k,t_{k+1}} - \sum_{j=1}^s b_j V_1(t_{k,c_j}) \right) &= E_k(\bar{R}_{(1),s,k}) + E_k(\hat{R}_{(1),s,k}) \\ &= E_k \left(J_{(01)} - \sum_{j=1}^s b_j c_j J_{(0)} \right) \dot{V}_1(t_k) + E_k(\hat{R}_{(1),s,k}), \end{aligned}$$

wobei $E_k(\hat{R}_{(1),s,k}) = O(h^{2.5})$. Weiter ist das Verschwinden des Ausdrucks $E_k(\bar{R}_{(1),s,k})$ zur Bedingung (3.48) äquivalent. \square

Bemerkung 3.10. Für Splitting Integratoren starker globaler Ordnung 1 sind keine Bedingungen an die d_j gestellt. Außerdem ist die Bedingung (3.48) überflüssig, wenn $E_k(b_j) = 0$ für alle $j = 1, \dots, s$.

Beispiel 3.7. Für $s = 1$ hat eine Splitting Methode von starker globaler Ordnung 1 notwendig die Eigenschaft $b_1 = J_{(1)}$, folglich also $E_k(b_1) = 0$. Für $s = 2$ hat die zu (3.32) bzw. (3.33) assoziierte Methode die Koeffizienten $b_1 = J_{(1)}$, $b_2 = 0$ bzw. $b_1 = J_{(10)}/J_{(0)}$, $b_2 = J_{(01)}/J_{(0)}$. Ergo $E_k(b_1) = 0 = E_k(b_2)$.

3.4.2 Splitting Integratoren der Ordnung 1.5

Im Allgemeinen sind für Verfahren starker globaler Ordnung 1.5 drei Zusatzbedingungen erforderlich:

Theorem 3.4. Der Splitting Integrator (3.43) ist von starker globaler Ordnung 1.5, wenn die Bedingungen von Theorem 3.2 für $q = 1$ gelten und falls zusätzlich

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j = J_{(01)}/J_{(0)}, \quad (3.49)$$

$$\sum_{j=1}^s a_j d_j = J_{(0)}/2, \quad (3.50)$$

$$\sum_{1 \leq i < j \leq s} E_k(b_j b_i)(c_j - c_i) = 0. \quad (3.51)$$

Beweis. Für $p = 1.5$ liegt genau eine zusätzliche starke Ordnungsbedingung vor, denn für $\alpha \in \Lambda_3 \setminus \{(\emptyset)\}$ ist $p - o(\alpha) = 3/2 - o(\alpha) \geq 1$ nur für $\alpha = (1)$ richtig. Wir betrachten daher

$$\begin{aligned} J_{(1)}[V_1(\cdot)]_{t_k, t_{k+1}} - \sum_{j=1}^s b_j V_1(t_k, c_j) &= \bar{R}_{(1),s,k} + \hat{R}_{(1),s,k} \\ &= \left(J_{(01)} - \sum_{j=1}^s b_j c_j J_{(0)} \right) \dot{V}_1(t_k) + \hat{R}_{(1),s,k}, \end{aligned}$$

wobei $E_k(\hat{R}_{(1),s,k}) = O(h^{2.5})$. Genau dann verschwindet $\bar{R}_{(1),s,k}$, wenn die Gleichung (3.49) gilt. Wir müssen bzgl. den schwachen lokalen Ordnungsbedingungen von zwei zusätzlichen Annahmen ausgehen, da $p - o(\alpha) + 1/2 = 2 - o(\alpha) \in \mathbb{N}$ und $o(\alpha) \geq 1/2$ genau dann zutrifft, wenn $\alpha \in \{(0), (11)\}$. Für $\alpha = (0)$ folgt:

$$\begin{aligned} J_{(0)}[V_0(\cdot)]_{t_k, t_{k+1}} - \sum_{j=1}^s a_j V_0(t_k, d_j) &= \bar{R}_{(0),s,k} + \hat{R}_{(0),s,k} \\ &= \left(J_{(00)} - \sum_{j=1}^s a_j d_j J_{(0)} \right) \dot{V}_0(t_k) + \hat{R}_{(0),s,k}, \end{aligned}$$

wobei $E_k(\hat{R}_{(0),s,k}) = O(h^3)$. Weiter ist $\bar{R}_{(0),s,k} = 0$ mit (3.50) gleichbedeutend. Schließlich müssen wir für $\alpha = (11)$ den folgenden Fehlerterm kontrollieren:

$$\begin{aligned} &E_k \left(J_{(11)}[V_{(11)}(\cdot)]_{t_k, t_{k+1}} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s b_j^2 V_1(t_k, c_j)^2 - \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_j b_i V_1(t_k, c_j) V_1(t_k, c_i) \right) \\ &= E_k(\bar{R}_{(11),s,k}) + E_k(\hat{R}_{(11),s,k}) + E_k(\tilde{R}_{(11),s,k}), \end{aligned}$$

wobei $E_k(\hat{R}_{(11),s,k}) = O(h^3)$, $E_k(\tilde{R}_{(11),s,k}) = O(h^3)$. Wir bemerken, dass $E_k(J_{(011)}) = J_{(0)}^2/4$ und

$E_k(J_{(101)}) = 0$. Folglich ist $\bar{R}_{(11),s,k} = 0$ zu $(V_1 := V_1(t_k), \dot{V}_1 := \dot{V}_1(t_k), [V_1, \dot{V}_1] = V_1 \dot{V}_1 - \dot{V}_1 V_1)$

$$\begin{aligned} 0 &= E_k \left(J_{(011)} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s b_j^2 c_j J_{(0)} - \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_j b_i c_i J_{(0)} \right) V_1 \dot{V}_1 \\ &\quad + E_k \left(J_{(101)} + J_{(011)} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^s b_j^2 c_j J_{(0)} - \sum_{1 \leq i < j \leq s} b_j b_i c_j J_{(0)} \right) \dot{V}_1 V_1 \\ &= \frac{1}{2} J_{(0)} \left(\frac{1}{2} J_{(0)} - \sum_{j=1}^s E_k(b_j^2) c_j - \sum_{1 \leq i < j \leq s} E_k(b_j b_i) (c_j + c_i) \right) (\dot{V}_1 V_1 + V_1 \dot{V}_1) \\ &\quad + \frac{1}{2} J_{(0)} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq s} E_k(b_j b_i) (c_j - c_i) \right) [V_1, \dot{V}_1] =: r_1 + r_2 \end{aligned}$$

äquivalent, wobei $r_1 = 0$. Letzteres ergibt sich aus der Berechnung des Erwartungswertes des Produktes der Konsistenzbedingung $\sum_{j=1}^s b_j = J_{(1)}$ und der Bedingung (3.49):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} J_{(0)}^2 &= E_k(J_{(01)} J_{(1)}) = E_k \left(\left(\sum_{j=1}^s b_j c_j J_{(0)} \right) \left(\sum_{j=1}^s b_j \right) \right) \\ &= \sum_{j=1}^s E_k(b_j^2) c_j J_{(0)} + \sum_{1 \leq i < j \leq s} E_k(b_j b_i) (c_j + c_i) J_{(0)}. \end{aligned}$$

Wir schließen also, dass $r_2 = 0$ mit Bedingung (3.51) gleichwertig ist. \square

Bemerkung 3.11. *Auf ähnliche Weise können Ordnungsbedingungen für $p \geq 2$ hergeleitet werden.*

Beispiel 3.8. *Die Koeffizienten einer Splitting Methode für $s = 2$ und $p = 1.5$ genügen insbesondere den Gleichungen*

$$(b_1 c_1 + b_2 c_2) J_{(0)} = J_{(01)}, \quad (3.52)$$

$$a_1 d_1 + a_2 d_2 = J_{(0)}/2, \quad (3.53)$$

$$E_k(b_2 b_1) (c_2 - c_1) = 0. \quad (3.54)$$

Wir wissen bereits, dass die Koeffizienten a_1, a_2, b_1, b_2 in diesem Fall durch (3.31) bestimmt sind. Einsetzen dieser Koeffizienten in (3.52) liefert

$$(3c_1 - c_2) J_{(10)}/2 + c_2 J_{(01)} = J_{(01)},$$

also

$$\begin{cases} c_1 = 1/3, \\ c_2 = 1. \end{cases}$$

Die Gleichung (3.54) ist ebenfalls erfüllt, da

$$E_k(b_2 b_1) = \frac{1}{2 J_{(0)}^2} \left(E_k(J_{(10)} J_{(01)}) - \frac{1}{2} E_k(J_{(10)}^2) \right) = 0.$$

Schließlich führt Gleichung (3.53) in Verbindung mit (3.31) auf

$$d_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - d_1 \right),$$

wobei $d_1 \in [0, 1]$ beliebig gewählt werden kann.

Beispiel 3.9. Wir betrachten das zu (3.36) assoziierte Splitting mit den Koeffizienten b_j aus (3.41). Weiter sind die drei zusätzlichen Bedingungen von der Form:

$$(b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3)J_{(0)} = J_{(01)}, \quad (3.55)$$

$$a_1d_1 + a_2d_2 + a_3d_3 = J_{(0)}/2, \quad (3.56)$$

$$E_k(b_2b_1)(c_2 - c_1) + E_k(b_3b_1)(c_3 - c_1) + E_k(b_3b_2)(c_3 - c_2) = 0. \quad (3.57)$$

Einsetzen von (3.41) in (3.55) ergibt zunächst

$$J_{(01)} = \frac{J_{(0)}}{a_2 + a_3} \left(J_{(10)} \left(c_1 - \frac{a_1}{J_{(0)}} c_3 \right) + J_{(01)} \left(\frac{a_2 + a_3}{J_{(0)}} c_3 \right) \pm \mathfrak{d}_1^{1/2} \left(c_1 - \frac{a_2 + a_3}{a_3} c_2 + \frac{a_2}{a_3} c_3 \right) \right).$$

Wir erkennen die Lösung

$$\begin{cases} c_1 = a_1/J_{(0)}, \\ c_2 = 1 - a_3/J_{(0)}, \\ c_3 = 1. \end{cases}$$

Eine etwas kompliziertere Rechnung zeigt, dass die obigen Koeffizienten unabhängig von der Wahl der a_j auch die Bedingung (3.57) erfüllen. Denn Einsetzen aller Größen in die linke Seite von (3.57) ergibt

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(a_2 + a_3)J_{(0)}} \left(\frac{a_2}{a_3} E_k \left(\pm J_{(10)} \mathfrak{d}_1^{1/2} + \mathfrak{d}_1 \right) - E_k \left(\left(J_{(10)} \pm \mathfrak{d}_1^{1/2} \right) \left(J_{(1)} \pm \frac{a_2}{a_3} \mathfrak{d}_1^{1/2} \right) \right) \right. \\ & \quad \left. - E_k \left(\left(J_{(1)}(a_2 + a_3) - J_{(10)} \pm a_2 \mathfrak{d}_1^{1/2} / a_3 \right) \left(\mp \mathfrak{d}_1^{1/2} \right) \right) \right) \\ & = \frac{1}{(a_2 + a_3)J_{(0)}} \left(a_2 E_k(\mathfrak{d}_1) / a_3 - (a_2 + a_3) E_k(J_{(10)} J_{(1)}) + E_k(J_{(10)}^2) \right) \\ & = \frac{1}{J_{(0)}} (E_k(2J_{(110)} - J_{(10)} J_{(1)})) = \frac{1}{J_{(0)}} E_k(J_{(101)}) = 0. \end{aligned}$$

Da mit Gleichung (3.56) nur eine Bedingung an die d_j gestellt wird, stehen für die Koeffizienten d_j zwei Freiheitsgrade zur Verfügung. Z.B. gilt für das symmetrische Splitting (3.42):

$$\begin{cases} c_1 = 0, \\ c_2 = 1/2, \\ c_3 = 1, \\ d_2 = 1 - d_3. \end{cases}$$

3.5 Numerische Experimente

Wir illustrieren die Ergebnisse des vorangegangenen Abschnitts mit Hilfe einer pseudo-spektral diskretisierten zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für ein fixiertes Raugitter mit Parameter N . Wir betrachten dazu die (1-d raum-kontinuierliche) zeitabhängige Stratonovich-Schrödinger-Gleichung

$$i dX(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}(x, t) dt + v(x, t) X(x, t) \circ dW(t), \quad x \in \mathbb{R}, t \in [0, T], \quad (i = \sqrt{-1}) \quad (3.58)$$

wobei $v : \mathbb{R} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ ein glattes Potential beschreibt, das 2π -periodisch im Raum ist. Des Weiteren oktruieren wir periodische Randbedingungen $X(x, 0) = X_0(x)$ und beschränken unsere Betrachtungen auf das Intervall $(-\pi, \pi)$. Wir nehmen folgende pseudo-spektral Diskretisierung vor: Wir ersetzen in Gleichung (3.58) $X(x, t)$ durch ein trigonometrisches Polynom

$$X^N(x, t) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_k^N(t) e^{ikx}.$$

Somit ergibt sich ein System gewöhnlicher Stratonovich-Gleichungen:

$$\begin{cases} i dX^N(x_l, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 X^N}{\partial x^2}(x_l, t) dt + v(x_l, t) X^N(x_l, t) \circ dW(t), \\ X^N(x_l, 0) = X_0(x_l), \end{cases}$$

wobei die Raumbitterpunkte durch $x_l = 2\pi l/N$ für $l = -N/2, \dots, N/2 - 1$ gegeben sind.

Weiter ist eine Lösung der obigen Gleichung genau dann gefunden, wenn das System gewöhnlicher stochastischer Differentialgleichungen für die Fourier-Koeffizienten

$$\begin{cases} i d\hat{U}^N(t) = \frac{1}{2} (D^N)^2 \hat{U}^N(t) dt + V^N(t) \hat{U}^N(t) \circ dW(t), \\ \hat{U}^N(0) = F_N X_0^N \end{cases}$$

gelöst wird, wobei $X_0^N = (X_0(x_l))$ für den Anfangsvektor steht. Außerdem beinhaltet der Vektor $\hat{U}^N(t) = (\hat{u}_k^N(t))$ die Fourier-Koeffizienten und D^N, V^N sind Matrizen von der Form

$$\begin{aligned} D^N &= \text{diag}(ik), & k &= -N/2, \dots, N/2 - 1, \\ V^N(t) &= F_N \text{diag}(v(x_l, t)) F_N^{-1}. \end{aligned}$$

Durch die Identifikationen $V_0^N = -\frac{i}{2} (D^N)^2$ und $V_1^N(t) = -iV^N(t)$ erhalten wir eine Gleichung die vom Typ (3.43) mit $d = N$ ist, genauer

$$d\hat{U}^N(t) = V_0^N \hat{U}^N(t) dt + V_1^N(t) \hat{U}^N(t) \circ dW(t). \quad (3.59)$$

Wir bemerken, dass die Matrizen V_j^N ($j = 0, 1$) für ein festes N beschränkt und schiefhermitesch sind, also kann Theorem 3.2 auf die Gleichung (3.59) angewendet werden. Für die numerischen Experimente werten wir das Potential

$$v(x, t) = \frac{1}{2} (1 - \cos(x)) + \sin^2(t) \sin(x) \quad (3.60)$$

auf einem Raum-Zeitgitter $(-\pi, \pi) \times [0, T]$ aus (siehe [13, Section 8]). Wir investieren die glatte Anfangsfunktion $X(x, 0) = e^{-x^2/2}$, die im Wesentlichen das niedrigste Energieniveau des freien harmonischen Oszillators beschreibt. Es wird der starke globale Fehler untersucht, den ein Splitting Integrator der Form (3.43):

$$\hat{U}_{k+1}^N = \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1^N(t_{k,c_j})} e^{a_j V_0^N} \right) \hat{U}_k^N \quad (3.61)$$

zum Zeitpunkt $T = 1$ für verschiedene Schrittweiten $J_{(0), t_k, t_{k+1}} = T/n = 1/n$ produziert. Für die Fehlerplots werden $d = N = 8$ Raumbitterpunkte und $L = 200$ Pfade gewählt. Des Weiteren vergleichen wir die numerischen Lösungen zu fünf verschiedenen Zeitschrittweiten $h_j = 2^{-j}$ ($j = 3, 4, 5, 6, 7$). Da aber im Allgemeinen keine analytische Lösung für (3.59) angegeben werden kann, müssen wir eine möglichst gute Approximation an die exakte Lösung als Referenzlösung

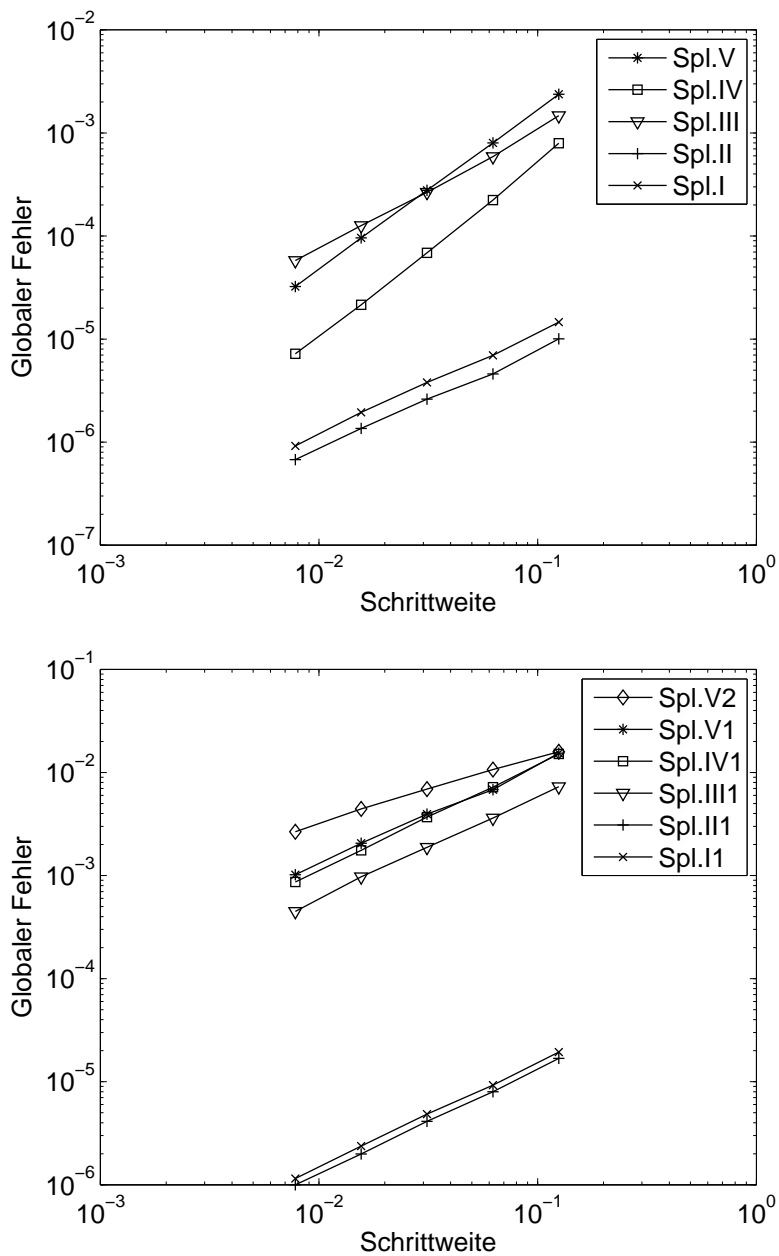


Abbildung 3.1: Der Plott auf dem oberen bzw. unterem Graphen zeigt die starken globalen Fehler der Methoden Spl.I, ..., Spl.V bzw. Spl.I1, ..., Spl.V1, Spl.V2 angewandt auf das Testproblem (3.59) mit Potential (3.60) im doppeltlogarithmischen Maßstab.

berechnen. Diese Referenzlösung wird ausschließlich mit der entsprechenden Splitting Methode zur kleinsten Schrittweite $h_0 = 2^{-10}$ identifiziert.

Kommentar zur Abbildung 3.1: Spl.I ist der Splitting Integrator (3.61) für $s = 1$, $p = 1$ bzgl. der Basis $a_1 = J_{(0)}$, $b_1 = J_{(1)}$, wobei das Potential jeweils in den Intervallmittelpunkten ($c_1 = 1/2$) ausgewertet wurde. Spl.II ist das symmetrische Splitting für $s = 2$, $p = 1$, ($b_2 = 0$) bzgl. der Basis $a_1 = J_{(0)}/2 = a_2$, $b_1 = J_{(1)}$, wobei die Potentialauswertung stets bzgl. den Intervallmittelpunkten ($c_1 = 1/2$) stattfindet. Auch das Verfahren Spl.III ist symmetrisch mit $s = 2$, $p = 1$, aber verwendet die Basis $J_{(0)}$, $J_{(1)}$, $J_{(10)}$ ($b_1 = J_{(10)}/h$, $b_2 = J_{(01)}/h$) wobei das Potential jeweils an den Intervallendpunkten ($c_1 = 0$, $c_2 = 1$) ausgewertet wurde. Weiter gilt für Splitting Spl.IV: $s = 2$, $p = 1.5$, Basis $J_{(0)}$, $J_{(1)}$, $J_{(10)}$ und $c_1 = 1/3$, $c_2 = 1$. Spl.V ist das schwach symmetrische Verfahren mit $s = 3$, $p = 1.5$, Basis $J_{(0)}$, $J_{(1)}$, $J_{(10)}$ und $c_1 = 0$, $c_2 = 1/2$, $c_3 = 1$. Die Abbildung 3.1 unterstreicht die Resultate der vorangegangenen Abschnitte, da die Methoden Spl.I1, Spl.II1, Spl.III1 jeweils zu den Methoden Spl.I, Spl.II, Spl.III assoziiert sind (also sich nur durch verschiedene Auswertungspunkte des Potentials unterscheidet), aber trotzdem die gleiche Ordnung aufweisen, nämlich $p = 1$. Außerdem lesen wir Ordnungsreduktionen bei den Verfahren Spl.IV1 ($c_1 = 0 = c_2$), Spl.V1 ($c_1 = 1$, $c_2 = 1/2$, $c_3 = 0$), bzw. Spl.V2 ($c_1 = 1/2 = c_2$, $c_3 = 1$) ab, nämlich auf $p = 1$ bzw. $p = 0.5$.

Kapitel 4

Splitting Integratoren für lineare zeitabhängige Stratonovich-Schrödinger-Gleichungen

Wir beginnen dieses Kapitel mit einem Rückblick auf Resultate zu Zeitintegrationsverfahren für die deterministische Schrödinger-Gleichung und Einführung einiger Notationen. Anschließend diskutieren wir zunächst einen allgemeinen Ansatz für Splitting Integratoren für eine pseudo-spektral diskretisierte Stratonovich-Schrödinger-Gleichung, der insbesondere auf eine stochastische Quadraturaufgabe führt. Des Weiteren untersuchen wir den lokalen Fehler eines speziellen Typs eines Splitting Integrators, nämlich des θ -Splittings. Diesmal kann zur Bestimmung des globalen Fehlers das Theorem 1.4 und das Lemma 1.6 nicht herangezogen werden. Stattdessen wird gezeigt, dass ähnliche Resultate durch Modifikation einiger Bedingungen -vorallem (1.57)- gelten. Zum Abschluss werden globale Fehlerabschätzungen für das θ -Splitting bewiesen und anhand numerischer Experimente illustriert.

4.1 Exponentielle Integratoren für die deterministische zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Wir betrachten zunächst die bzgl. des Raums pseudo-spektral diskretisierte deterministische Schrödinger-Gleichung mit zeitabhängigem Hamilton-Operator, oder präziser ein (großes) System gewöhnlicher Differentialgleichungen auf $[t_0, T] \times \mathbb{C}^N$:

$$\frac{dX}{dt}(t) = H(t)X(t), \quad X(t_0) = X_0, \quad (4.1)$$

wobei $H(t) = U + V_0(t)$. Hierbei steht

- U für eine räumliche Diskretisierung des schiefhermiteschen unbeschränkten Operators $-i(I - \Delta/2)$,

wobei $i = \sqrt{-1}$ und $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ der Laplace Operator in einer Dimension ist. Also repräsentiert U im Wesentlichen ein diskretes Pendant eines Differentialoperators 2. Ordnung. Des Weiteren erklären wir

- D als eine entsprechende räumliche Diskretisierung des Operators $(I - \Delta/2)^{1/2}$, also $D = (-iU)^{1/2}$.

Wir könnten D mit einem Differentialoperator 1. Ordnung assoziieren. Es ist

- $V_0 = -iV$, wobei V eine räumliche Diskretisierung eines reellen zeitabhängigen glatten Potentials ist.

Es existiere eine positive Konstante M_0 so, dass $\|\frac{d^j V_0}{dt^j}(t)\| \leq M_0 < \infty$ für $j = 0, 1, 2, \dots$. Als pseudo-spektrale Diskretisierung eines Multiplikationsoperators ist V_0 bzgl. des Ortsraums diagonal und bzgl. des Impulsraumes zu einer Diagonalmatrix unitär-äquivalent. Insbesondere gilt $V_0(s)V_0(t) = V_0(t)V_0(s)$ für alle $s, t \in [t_0, T]$. Weiter ist V_0 schieferhermitesch. Wir gehen aber nicht davon aus, dass die Operatoren U und V_0 vertauschen. Beachte, dass für die euklidische Norm der Matrix $U \in \mathbb{C}^{N \times N}$, wobei N die Anzahl der Raumgitterpunkte ist, gilt

$$\|U\| = O(N^2). \quad (4.2)$$

Zudem ist i.A. die Lösung einer zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung hoch oszillatorisch. Deswegen sollen drei Aspekte bei der Suche nach Integratoren für die Schrödinger-Gleichung im Vordergrund stehen:

- Vermeidung von Schrittweiteinschränkungen und die Fehlerkonstante sollte nicht von N abhängen.
- Außerdem sollte ein Integrator pfadweise die Masse des physikalischen Systems erhalten, d.h.

$$\|X(t)\| = \|X_0\|.$$

- Die Fehlerkonstante sollte aufgrund der i.A. hoch oszillatorischen Lösung der Schrödinger-Gleichung keine höheren Zeitableitungen der Lösung involvieren.

Bemerkung 4.1. • *Im Allgemeinen ist bei Anwendung expliziter (Runge-Kutta-) Verfahren eine Schrittweiteinschränkung der Form $h\|U\| \leq K$ erforderlich, die wegen (4.2) von N abhängt. Außerdem erhält ein solcher Integrator nicht die Masse des Systems.*

- *Bei Verwendung impliziter (Runge-Kutta-) Verfahren können zwar die Bedingungen (i) und (ii) erfüllt werden, hingegen die Bedingung (iii) nicht. Z.B. gilt für den globalen Fehler der impliziten Mittelpunktsregel*

$$X_{k+1} = X_k + \frac{1}{2}hH(t_k + h/2)(X_k + X_{k+1})$$

für eine Konstante K , die nur von M_0 abhängt:

$$\|X(t_n) - X_n\| \leq K(t_n - t_0)h^2 \max_{t \in [t_0, t_n]} \left\| \frac{d^3 X}{dt^3}(t) \right\|$$

(siehe [13]).

- *Da das implizite Behandeln eines Rauschterms in der Regel nicht sinnvoll ist, wird ein stochastisches Runge-Kutta-Verfahren die Masse des Systems nicht erhalten.*
- *Mit der Methode zur Bestimmung des Fehlers für Splitting Integratoren für den beschränkten Fall (siehe Kapitel 3) treten Schrittweiteinschränkungen von der Form $h\|U\| \leq K$ auf.*

Die folgende Diskussion zeigt, wie Schrittweiteinschränkungen, das Auftreten höherer Zeitableitungen der exakten Lösung in den Fehlerabschätzungen vermieden werden können und die Masse des Systems erhalten bleibt, sofern die involvierten Potentiale und die exakte Lösung eine gewisse räumliche Regularität aufweisen. Die Ansprüche an die Regularität der Potentiale

und der Lösung kommen durch natürlich gegebene Kommutatorschranken ins Spiel. Denn in der räumlich kontinuierlichen Situation gelten für den Differentialoperator ∇_x folgende Gleichungen: Für eine viermal stetig differenzierbare Funktion v und eine ebenso glatte Potentialfunktion V ist

$$\begin{aligned} [\nabla_x, V]v &= V'v, \\ [[\nabla_x^2, V], V]v &= 2(V')^2v, \\ [\nabla_x^2, V]v &= V''v + V'v', \\ [\nabla_x^2, [\nabla_x^2, V]]v &= V^{(4)}v + 4V'''v' + 4V''v''. \end{aligned}$$

Mit anderen Worten, ein Differentialoperator 1. bzw. 2. Ordnung wird zu einem Multiplikations- bzw. einem Differentialoperator 1. Ordnung. Daraus resultieren folgende Kommutatorabschätzungen:

$$\begin{aligned} \|[\nabla_x, V]v\|_{L^2} &\leq \tilde{\kappa}_0 \|v\|_{L^2}, \\ \|[[\nabla_x^2, V], V]v\|_{L^2} &\leq \tilde{\kappa}_{00} \|v\|_{L^2}, \\ \|[\nabla_x^2, V]v\|_{L^2} &\leq \tilde{\kappa}_1 \|v\|_{H^1}, \\ \|[\nabla_x^2, [\nabla_x^2, V]]v\|_{L^2} &\leq \tilde{\kappa}_2 \|v\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Dabei hängen die auftretenden Konstanten nur von der räumlichen Regularität des Potentials ab und $\|\cdot\|_{H^j}$ steht für die j -te Sobolev-Norm. Da wir aber ausschließlich räumlich diskretisierte (stochastische) Schrödinger-Gleichungen betrachten, wäre eine diskrete Version für die Kommutatorabschätzungen von Interesse. Genauer, für diskretisierte Potentiale V_j ($j = 0, 1$) und für Vektoren $X \in \mathbb{C}^N$ sollte

$$\|[D, V_j]X\| \leq \kappa_0 \|X\|, \quad (4.3)$$

$$\|[[D^2, V_j], V_j]X\| \leq \kappa_{00} \|X\|, \quad (4.4)$$

$$\|[D^2, V_j]X\| \leq \kappa_1 \|X\|_{\mathcal{H}^1}, \quad (4.5)$$

$$\|[D^2, [D^2, V_j]]X\| \leq \kappa_2 \|X\|_{\mathcal{H}^2} \quad (4.6)$$

gelten. Hierbei wurden die Kommutatorschranken κ_{00} , κ_m ($m = 0, 1, 2$) und zur Abkürzung eine diskrete Sobolev-Norm

$$\|X\|_{\mathcal{H}^r} = \sum_{j=0}^r \|D^j X\|$$

für $r = 1, 2, \dots$ eingeführt.

Bemerkung 4.2. *Kommutatorabschätzungen wie z.B. (4.3)–(4.6) sind nach [16, Lemma 3.1] für die räumlich pseudo-spektral diskretisierte (stochastische) Schrödinger-Gleichung erfüllt, falls die Potentiale und die Randbedingungen periodisch sind. Des Weiteren repräsentiert das Quadrat der 1. Sobolevnorm $\|X(t)\|_{\mathcal{H}^1}^2$, der exakten Lösung der Gleichung (4.1), die kinetische Energie des zugrunde liegenden physikalischen Systems und ist daher a-priori für endliche Zeiten beschränkt (siehe [13]).*

Sowohl in der Arbeit [13] als auch [16] werden Kommutatorabschätzungen verwendet und die Beschränktheit der kinetischen Energie ausgenutzt. Dabei stehen in [13] Magnus-Integratoren wie z.B. die *exponentielle Mittelpunktsregel*

$$X_{k+1} = \exp(hH(t_k + h/2))X_k \quad (4.7)$$

im Blickpunkt. Für diesen Integrator gilt Folgendes:

Theorem 4.1. (Hochbruck & Lubich) *Vorausgesetzt seien die Kommutatorabschätzungen (4.3) und (4.5). Für den globalen Fehler der exponentiellen Mittelpunktsregel (4.7) angewandt auf die Gleichung (4.1) gilt folgende Abschätzung:*

$$\|X(t_n) - X_n\| \leq K(t_n - t_0)h^2 \max_{t \in [t_0, t_n]} \|X(t)\|_{\mathcal{H}^1}.$$

Hierbei hängt die Konstante K nur von M_0 und κ_0, κ_1 , aber nicht von $\|U\|$ ab.

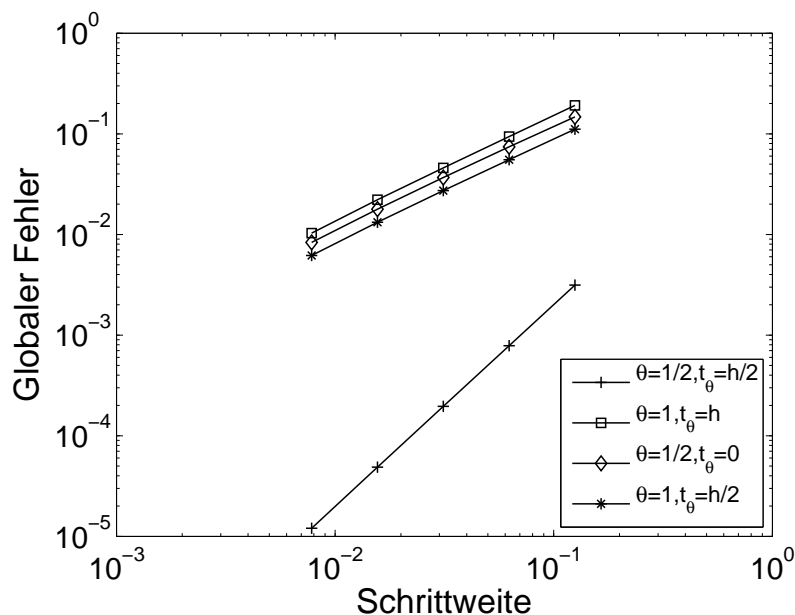


Abbildung 4.1: Die Graphik zeigt den globalen Fehler der Splitting Methode (4.8) bzgl. dem Potential (3.60) aus Kapitel 3 für $\theta = 1/2, 1$ und verschiedene Potentialauswertungspunkte $t_\theta = 0, h/2, h$ im doppeltlogarithmischen Maßstab.

Bereits in Kapitel 1 wurde erwähnt, dass bei Magnus-Integratoren das Produkt der Exponentialfunktion einer (nicht diagonalen) Matrix (hoher Dimension) mit einem Vektor in jedem Schritt bestimmt werden muss. Dies stellt vorallem bei Anwesenheit von Rauschen und Simulation einer großen Anzahl an Pfaden eine Schwierigkeit dar. Ein weiteres Problem tritt bei der Konvergenzanalyse auf. Denn scheinbar gibt es in dieser Situation kein Analogon zum Ordnungsreduktionskriterium Theorem 1.4. Auch die in [13] präsentierten Beweistechniken zum Theorem 4.1 sind nicht ohne Weiteres übertragbar, denn mit diesen Techniken ist beim Schritt vom lokalen zum globalen Fehler eine Ordnungsreduktion (echt) größer als 0.5 zu erwarten. Genaueres Studium letzterer Schwierigkeit legt die Verwendung von Splitting Verfahren nahe. Darüber hinaus sind Splitting Methoden für die pseudo-spektral diskretisierte Schrödinger-Gleichung mit Hilfe der FFT günstig zu berechnen. Dieser Ansatz wird in [16] anhand des bereits in Kapitel 3 erwähnten Strang-Splittings angewandt auf die Gleichung (4.1) verfolgt. Wir geben hier eine modifizierte und allgemeinere Version des Theorems 3.2 in [16] wieder, um später bessere Vergleiche herstellen zu können. Konkret bedeutet dies: Die Rollen der exakten und numerischen Lösungen sind vertauscht, wir lassen Zeitabhängigkeit des Potentials zu und betrachten den Splitting Integrator

$$X_{k+1} = e^{U(1-\theta)h} e^{hV_0(t_k+\theta h)} e^{U\theta h} X_k, \tag{4.8}$$

wobei $\theta \in [0, 1]$ ein freier Parameter ist. Es gilt:

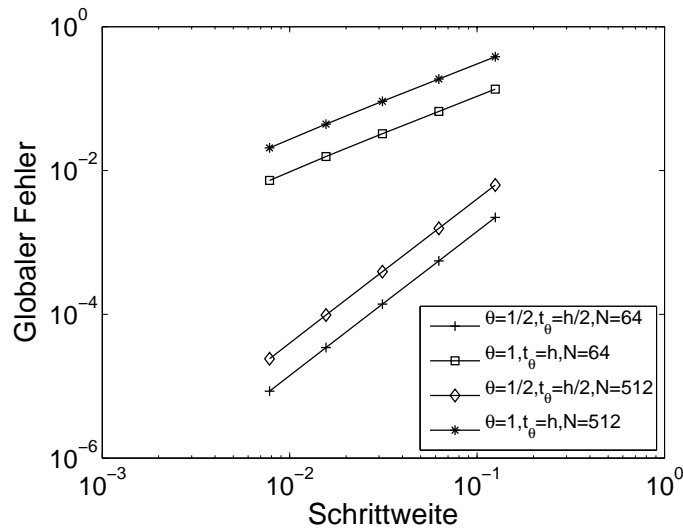


Abbildung 4.2: Die Abbildung zeigt den globalen Fehler des θ -Splittings für $\theta = 1/2, 1$ für $N = 64, 512$ im doppeltlogarithmischen Maßstab.

Theorem 4.2. *Es seien die Kommutatorabschätzungen (4.3)-(4.6) erfüllt. Der Splitting Integrator (4.8) angewandt auf die Gleichung (4.1) genügt folgender globaler Fehlerabschätzung:*

$$\|X(t_n) - X_n\| \leq K(t_n - t_0) \begin{cases} h^2 \max_{t \in [t_0, t_n]} \|X(t)\|_{\mathcal{H}^2}, & \text{falls } \theta = 1/2, \\ h \max_{t \in [t_0, t_n]} \|X(t)\|_{\mathcal{H}^1}, & \text{falls } \theta \in [0, 1]. \end{cases}$$

Dabei hängt K nur von M_0 und κ_j ($j = 0, 1, 2$), aber nicht von N ab.

Beweis. Der Beweis funktioniert analog zum Beweis von Theorem 2.1 in [16]. □

Wir beachten aber, dass die exakte Lösung nicht mehr von der einfachen Form

$$X(t) = \exp\left(\int_{t_0}^t H(s) ds\right) X(t_0)$$

ist. Dennoch diskutieren wir einige Ideen aus dem Beweis zu Theorem 4.2, auf die wir später zurückgreifen. Durch Verwendung der iterierten Variation-der-Konstanten-Formel lässt sich nämlich der (kritische) führende lokale Fehlerterm auf den Fehler einer einstufigen Quadraturformel zurückführen (hingegen ist in [16], wegen der Vertauschung der Rollen der Operatoren, eine zweistufige Quadraturformel -für $\theta = 1/2$ die Trapezregel- zu untersuchen). Genauer: In der Entwicklung des lokalen Fehlers $X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k$ tritt der Term

$$\text{qerr}_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} H_0(t) dt - hH_0(t_k + \theta h) \quad (4.9)$$

auf, wobei $H_0(t) = e^{-U(t-t_k)} V_0(t) e^{U(t-t_k)}$ ist. Dieser Quadraturfehler lässt sich für beliebiges θ durch

$$\text{qerr}_k = h^2 \int_0^1 P_{(0),1}(\tau) \dot{H}_0(t_k + \tau h) d\tau$$

beschreiben, wobei

$$P_{(0),1}(\tau) = \begin{cases} -\tau, & \text{falls } \tau \leq \theta, \\ 1 - \tau, & \text{falls } \tau > \theta \end{cases}$$

den 1. Peano-Kern bezeichnet. Für $\theta = 1/2$ ist (4.9) der Fehler der einstufigen Gauß-Quadraturformel bzw. der Mittelpunktsregel. Also

$$\text{qerr}_k = h^3 \int_0^1 P_{(0),2}(\tau) \ddot{H}_0(t_k + \tau h) d\tau,$$

wobei

$$P_{(0),2}(\tau) = \begin{cases} \tau^2/2, & \text{falls } \tau \leq 1/2, \\ (1 - \tau)^2/2, & \text{falls } \tau > 1/2. \end{cases}$$

Wir beenden diesen Abschnitt mit Veranschaulichung des Ergebnisses von Theorem 4.2. Die Experimente wurden bzgl. Gleichung (3.58) nach Ersetzung von $\circ dW(t)$ durch dt mit dem selben Potential (3.60), sowie Anfangsdatum durchgeführt. Die Abbildung 4.1 zeigt den globalen Fehler des θ -Splittings für $\theta = 1/2, 1$. Des Weiteren wird darin illustriert, dass nur im Falle $\theta = 1/2$ das Potential zwingend an der Stelle $t_{k,\theta}$ ausgewertet werden muss, um Ordnungsreduktionen zu vermeiden. Hingegen soll die Abbildung 4.2 unterstreichen, dass, unabhängig von θ , die globale Fehlerordnung nicht mit wachsendem Gitterparameter N reduziert wird. Außerdem ist keine Schrittweitereinschränkung zu erkennen.

4.2 Splitting Integratoren für die Stratonovich-Schrödinger-Gleichung

Wir wenden nun Splitting Integratoren auf die pseudo-spektral diskretisierte Stratonovich-Schrödinger-Gleichung

$$dX(t) = UX(t)dt + V_0(t)X(t)dt + V_1(t)X(t) \circ dW(t), \quad X(t_0) = X_0 \tag{4.10}$$

an. Hierbei sind U, V_0 wie im vorangegangenen Abschnitt erklärt. Außerdem steht $V_1 : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}^{N \times N}$ für eine zeitabhängige schieferhermitesche Matrix, die aus einer Diskretisierung eines Multiplikationsoperators hervorgeht. Daher vertauschen die Potentiale V_0, V_1 zu allen Zeitpunkten. Zudem sollen Konstanten M_j ($j = 0, 1$) existieren, so dass $\|\frac{d^m}{dt^m} V_j(t)\| \leq M_j < \infty$ für $m = 0, 1, \dots$. Wir betrachten für $k = 0, 1, \dots$ den rekursiv definierten Splitting Integrator

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= \Psi_k^{(s)} X_k = e^{b_s V_1(t_{k,c_s})} e^{U \theta_{2s} h} e^{a_s V_0(t_{k,d_s})} e^{U \theta_{2s-1} h} \Psi_k^{(s-1)} X_k \\ &= e^{b_s V_1(t_{k,c_s})} e^{U \theta_{2s} h} e^{a_s V_0(t_{k,d_s})} e^{U \theta_{2s-1} h} \dots e^{b_1 V_1(t_{k,c_1})} e^{U \theta_2 h} e^{a_1 V_0(t_{k,d_1})} e^{U \theta_1 h} X_k \\ &= \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1(t_{k,c_j})} e^{U \theta_{2j} h} e^{a_j V_0(t_{k,d_j})} e^{U \theta_{2j-1} h} \right) X_k, \end{aligned} \tag{4.11}$$

wobei $\Psi_k^{(0)} = Id$ und X_k als Approximation an die Lösung von (4.10) zum Zeitpunkt t_k aufgefasst wird. Wie bisher ist h die äquidistante Zeitschrittweite und für $j = 1, \dots, s$ ist $t_{k,c_j} = t_k + c_j h$ bzw. $t_{k,d_j} = t_k + d_j h$ mit $d_j, c_j \in \mathbb{R}$. Zusätzlich sollen die $\theta_j \in \mathbb{R}$ ($j = 1, \dots, 2s$) die Konsistenzbedingung $\sum_{j=1}^{2s} \theta_j = 1$ erfüllen. Die b_j seien reelle Zufallsvariablen, und die a_j ($j = 1, \dots, s$) seien reelle Konstanten.

Bevor wir mit der Analyse des Splitting Integrators (4.11) beginnen, erläutern wir den Hauptgrund für das Bevorzugen des Stratonovich-Formalismus:

Proposition 4.1. *Die Masse des durch (4.10) beschriebenen Systems ist pfadweise erhalten. Genauer: Nur für die Lösung der Stratonovich-Schrödinger-Gleichung gilt für alle $t \geq t_0$:*

$$\|X(t)\| = \|X_0\|.$$

Darüber hinaus ist die auf \mathcal{F}_{t_0} bedingte kinetische Energie $E_{t_0}\|DX(t)\|^2$ auf kompakten Zeitintervallen durch

$$E_{t_0}\|DX(t)\|^2 \leq \left(\|DX_0\|^2 + \frac{1}{4}(t-t_0)(2\kappa_{00} + \kappa_1^2(t-t_0))\|X_0\|^2 \right) e$$

beschränkt, sofern die Kommutatorabschätzungen (4.4) und (4.5) mit den Konstanten κ_{00}, κ_1 gelten ($e = \exp(1)$).

Beweis. Die Stratonovich-Gleichung (4.10) ist zur Itô-Gleichung

$$dX(t) = UX(t)dt + \left(V_0(t) + \frac{1}{2}V_1^2(t) \right) X(t)dt + V_1(t)X(t)dW(t), \quad X(t_0) = X_0 \quad (4.12)$$

äquivalent. Darüber hinaus gilt: Ist $X(t)$ Lösung von (4.12), so ist $X(t)^* = \overline{X(t)}^T$ eine Lösung von

$$d(X(t)^*) = -X(t)^*Udt + X(t)^* \left(-V_0(t) + \frac{1}{2}V_1^2(t) \right) dt - X(t)^*V_1(t)dW(t), \quad X(t_0)^* = X_0^*.$$

Weiter gilt aufgrund der komplexen Itô-Formel (1.19):

$$\begin{aligned} d\|X(t)\|^2 &= X(t)^*dX(t) + d(X(t)^*)X(t) + d(X(t)^*)dX(t) \\ &= 2\Re(X(t)^*dX(t)) + d(X(t)^*)dX(t). \end{aligned}$$

Dabei folgt mittels der Schiefhermiteizität der Operatoren U, V_0, V_1 und den in Lemma 1.2 benutzten Rechenregeln

$$\begin{aligned} \Re(X(t)^*dX(t)) &= \frac{1}{2}X(t)^*V_1^2(t)X(t)dt, \\ d(X(t)^*)dX(t) &= -X(t)^*V_1^2(t)X(t)dt, \end{aligned}$$

also $d\|X(t)\|^2 = 0$ und $\|X(t)\|^2$ ist konstant. Für den Beweis der zweiten Aussage benutzen wir nochmals die komplexe Itô-Formel:

$$d\|DX(t)\|^2 = X(t)^*D^2dX(t) + d(X(t)^*)D^2X(t) + d(X(t)^*)D^2dX(t).$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} d\|DX(t)\|^2 &= X(t)^* \left(D^2V_0(t) - V_0(t)D^2 + \frac{1}{2}(D^2V_1^2(t) - 2V_1(t)D^2V_1(t) + V_1^2(t)D^2) \right) X(t)dt \\ &\quad + X(t)^* (D^2V_1(t) - V_1(t)D^2) X(t)dW(t). \end{aligned}$$

Mittels Integration und Berechnung des Erwartungswertes, Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung, der Massenerhaltung und der Identität

$$[[D^2, V_1(t)], V_1(t)] = D^2V_1^2(t) - 2V_1(t)D^2V_1(t) + V_1^2(t)D^2$$

ergibt sich die Abschätzung

$$\begin{aligned}
E_{t_0} \|DX(t)\|^2 &= \|DX_0\|^2 + \int_{t_0}^t E_{t_0} \left(X(s)^* \left([D^2, V_0(s)] + \frac{1}{2} [[D^2, V_1(s)], V_1(s)] \right) X(s) \right) ds \\
&\leq \|DX_0\|^2 + \int_{t_0}^t E_{t_0} (\|X(s)\| \| [D^2, V_0(s)] X(s) \|) ds \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t E_{t_0} (\|X(s)\| \| [[D^2, V_1(s)], V_1(s)] X(s) \|) ds \\
&\leq \|DX_0\|^2 + \kappa_1 \int_{t_0}^t \|X_0\| E_{t_0} (\|DX(s)\|) ds + \frac{1}{2} (t - t_0) \kappa_{00} \|X_0\|^2.
\end{aligned}$$

Die Behauptung resultiert schließlich aus Anwendung der Young-Ungleichung

$$\|X_0\| E_{t_0} (\|DX(s)\|) \leq \frac{\varepsilon}{2} \|X_0\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon} (E_{t_0} (\|DX(s)\|))^2$$

mit der Wahl $\varepsilon = \kappa_1^2 (t - t_0) / 2$, $(E_{t_0} (\|DX(s)\|))^2 \leq E_{t_0} (\|DX(s)\|^2)$ und dem Gronwall-Lemma (1.4) (a). \square

Bemerkung 4.3. • *Da der Propagator $\Psi_k^{(s)}$ stets unitär ist, erfüllen die Iterierten X_k des Splittings (4.11) $\|X_k\| = \|X_0\|$ für $k = 0, 1, \dots$*

- *Eine, Proposition 4.1 entsprechende, Aussage kann auch für die allgemeinere Gleichung*

$$dX(t) = UX(t)dt + \sum_{j=0}^q V_j(t)X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0$$

für $q \geq 2$ mit stetigen, schiefermiteschen und paarweise kommutierenden Potentialen $V_j : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{C}^{N \times N}$ bewiesen werden.

Zur Vereinfachung der Analyse des Splittings (4.11) überführen wir (4.10) in ihr Heisenberg-Bild bzgl. der Vakuums-Lösung der gewöhnlichen Schrödinger-Gleichung (siehe [2]), um die für den beschränkten Fall ausgearbeitete Theorie anwenden zu können. Betrachte dazu für $k = 0, \dots, n$:

$$dY_k(t) = H_0(t)Y_k(t)dt + H_1(t)Y_k(t) \circ dW(t), \quad Y_k(t_k) = X(t_k). \quad (4.13)$$

Dabei bezeichnen wir

$$H_j(t) = e^{-U(t-t_k)} V_j(t) e^{U(t-t_k)}, \quad j \in \{0, 1\}$$

als Heisenberg-Operator. Diese Operatoren sind schiefermitesch und es gilt

$$\|H_j(t)\| = \|V_j(t)\| (\leq M_j < \infty).$$

Also besitzt Gleichung (4.13) Koeffizienten deren Normen unabhängig von $\|U\|$ sind. Dagegen gilt dies für die Normen der Ableitungen von H_j nicht, denn

$$\begin{aligned}
\dot{H}_j(t) &= e^{-U(t-t_k)} (\dot{V}_j(t) - [U, V_j(t)]) e^{U(t-t_k)}, \\
\ddot{H}_j(t) &= e^{-U(t-t_k)} (\ddot{V}_j(t) - 2[U, \dot{V}_j(t)] + [U, [U, V_j(t)]]) e^{U(t-t_k)}.
\end{aligned}$$

Somit gilt $\|\dot{H}_j\| = O(\|U\|)$ und $\|\ddot{H}_j\| = O(\|U^2\|)$. Wir setzen ab jetzt die Kommutatorabschätzungen (4.3)–(4.6) voraus. Damit folgt:

$$\begin{aligned}\|\dot{H}_j(t)X\| &\leq \|\dot{V}_j(t)e^{U(t-t_k)}X\| + \kappa_1\|e^{U(t-t_k)}X\|_{\mathcal{H}^1} \\ &\leq M_j\|X\| + \kappa_1\|X\|_{\mathcal{H}^1} \leq 2\max\{M_j, \kappa_1\}\|X\|_{\mathcal{H}^1} \\ \|\ddot{H}_j(t)X\| &\leq \|\ddot{V}_j(t)e^{U(t-t_k)}X\| + \kappa_1\|e^{U(t-t_k)}X\|_{\mathcal{H}^1} + \kappa_2\|e^{U(t-t_k)}X\|_{\mathcal{H}^2} \\ &\leq M_j\|X\| + \kappa_1\|X\|_{\mathcal{H}^1} + \kappa_2\|X\|_{\mathcal{H}^2} \leq 3\max\{M_j, \kappa_1, \kappa_2\}\|X\|_{\mathcal{H}^2}\end{aligned}$$

für $X \in \mathbb{C}^N$. Sind Kommutatorschranken beliebiger Ordnung gegeben, so existieren Konstanten K_r mit

$$\|H_j^{(r)}(t)X\| \leq K_r\|X\|_{\mathcal{H}^r}, \quad \text{für alle } X \in \mathbb{C}^N \quad (r = 0, 1, \dots), \quad (4.14)$$

wobei K_r von M_j den Kommutatorschranken und von r abhängt. Des Weiteren besteht zwischen den Lösungen von (4.10) und (4.13) nach Konstruktion für $t \geq t_k$ die Relation

$$Y_k(t) = e^{-U(t-t_k)}X(t)$$

und daher

$$\|Y_k(t)\| = \|X(t)\|.$$

Wir betrachten nun für ein beliebiges r die Picard-Iterierte der Gleichung (4.13) bzgl. der Menge Λ_r :

$$Y_k(t) = X_0 + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} J_\alpha[H_\alpha(\cdot)]X(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} J_\alpha[H_\alpha(\cdot)Y_k(\cdot)],$$

wobei für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_1$:

$$H_\alpha(\cdot) = H_\alpha(s_1, \dots, s_l) = H_{i_l}(s_1) \cdots H_{i_1}(s_l).$$

Beachte, dass

$$\|H_\alpha\| \leq \|V_0\|^{n(\alpha)}\|V_1\|^{e(\alpha)}.$$

Zur Approximation der Lösung von (4.13) studieren wir (lokal) den folgenden Splitting Integrator:

$$\begin{cases} Y_{k+1}^k = e^{-hU} \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1(t_k, c_j)} e^{U \theta_{2j} h} e^{a_j V_0(t_k, d_j)} e^{U \theta_{2j-1} h} \right) Y_k, \\ Y_k = Y_k(t_k) = X(t_k), \end{cases} \quad (4.15)$$

wobei $\theta_j \in \mathbb{R}$ für $j = 1, \dots, 2s$ mit $\sum_{j=1}^{2s} \theta_j = 1$ und die entsprechenden Notationen von (4.11) verwendet wurden.

4.3 Rückführung des lokalen Fehlers auf Quadraturfehler

Die entscheidende Idee ist die ausschließliche Entwicklung des beschränkten Anteils des Splitting Integrators (4.15)

$$Y_{k+1}^k = Y_k + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} \tilde{c}_{\alpha, s} Y_k + R_s Y_k, \quad (4.16)$$

um den lokalen Fehler herzuleiten. Dazu wurde, ähnlich wie zu Beginn von Kapitel 3.4, die Notation

$$\tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s} = \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} \mathfrak{c}_s^\gamma$$

eingeführt, wobei für $\gamma = (m_{01}, m_{11}, \dots, m_{0s}, m_{1s}) \in \mathcal{T}_{\alpha,s}$:

$$\mathfrak{c}_s^\gamma = e^{-Uh} \prod_{j=1}^s (b_j V_1(t_{k,c_j}))^{m_{1j}} e^{Uh\theta_{2j}} (a_j V_0(t_{k,d_j}))^{m_{0j}} e^{\theta_{2j-1}hU}. \quad (4.17)$$

Der Restterm R_s wird später diskutiert. Außerdem definiert

$$\begin{aligned} X_{k+1}^k &= e^{Uh} Y_{k+1}^k = e^{Uh} e^{-Uh} \Psi_k^{(s)} X(t_k) \\ &= \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1(t_{k,c_j})} e^{U\theta_{2j}h} e^{a_j V_0(t_{k,d_j})} e^{U\theta_{2j-1}h} \right) X(t_k) \end{aligned}$$

lokal das entsprechende Splitting zur Gleichung (4.10). Damit lässt sich der lokale Fehler formal zu

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k = e^{Uh} (Y_k(t_{k+1}) - Y_{k+1}^k) \\ &= e^{Uh} \left(\sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} (J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s}) X(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} J_\alpha[H_\alpha(\cdot) Y_k(\cdot)] - R_s X(t_k) \right) \end{aligned}$$

umschreiben. Für jedes $\alpha \in \Lambda_r$ ist die Differenz

$$J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s} = J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} \mathfrak{c}_s^\gamma$$

zu untersuchen. Hierzu brauchen wir für $\tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s}$ eine Darstellung der Form

$$\tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s} = \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} \mathfrak{c}_s^\gamma H_\alpha(t_k(\gamma)), \quad (4.18)$$

um den Fehler auf Quadraturfehler zurück zu führen. Hierbei ist

$$t_k(\gamma) = (t_{k,c_s}, \dots, t_{k,c_s}, t_{k,d_s}, \dots, t_{k,d_s}, \dots, t_{k,c_1}, \dots, t_{k,c_1}, t_{k,d_1}, \dots, t_{k,d_1}),$$

wobei die Länge jedes t_{k,d_j} - bzw. t_{k,c_j} -Blocks m_{0j} bzw. m_{1j} beträgt. Außerdem sind die \mathfrak{c}_s^γ durch (3.13) gegeben. Durch diesen Ansatz werden die, im Splitting auftretenden, Koeffizienten θ_m ($m = 1, \dots, 2s$) bereits zur Hälfte determiniert. Denn die Formel (4.18) lässt sich bzgl. $\alpha = (1)$ nur dann in der Form

$$\tilde{\mathfrak{c}}_{(1),s} = \sum_{j=1}^s b_j H_1(t_{k,c_j}) \quad (4.19)$$

schreiben, sofern

$$t_{k,c_j} = t_k + hc_j = t_k + h \sum_{m=1}^{2j} \theta_m \quad (4.20)$$

für $j = 1, \dots, s$ gilt. Des Weiteren folgt aus der Konsistenzbedingung $\sum_{j=1}^{2s} \theta_j = 1$ und (4.20), dass $c_s = 1$ ist. Zudem gelangen wir über (4.19) zu einem stochastischen Quadraturproblem auf dem Intervall $[t_k, t_{k+1}]$:

$$\text{sqerr}_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} H_1(t) dW(t) - \sum_{j=1}^s b_j H_1(t_{k,c_j}). \quad (4.21)$$

Dabei ist s die Anzahl der Stufen, b_j ein *stochastisches Gewicht* mit

$$E_k |b_j|^2 = O(h) \quad (4.22)$$

und c_j entspricht einem Knoten ($j = 1, \dots, s$). In Analogie zu klassischen Quadraturformeln definieren wir:

Definition 4.1. Eine stochastische Quadraturformel $(b_j, c_j)_{j=1}^s$ ist von der Ordnung r , wenn sie alle Polynome vom Grad $\leq r-1$ exakt integriert, oder gleichbedeutend, für $m = 0, \dots, r-1$ gilt

$$\frac{m!}{h^m} I_{\alpha_m} = \frac{m!}{h^m} J_{\alpha_m} = \sum_{j=1}^s b_j c_j^m,$$

wobei $\alpha_0 = (1)$ und $\alpha_{m+1} = (0, \alpha_m)$.

Mit Hilfe der Itô-Isometrie kann eingesehen werden, dass nicht die Möglichkeit besteht, via orthogonaler Polynome, eine stochastische Quadraturformel der Ordnung $r > s$ zu konstruieren. Aber immerhin existiert eine Quadraturformel vom Interpolationstyp mit $r = s$. Dazu benutzen wir die *Lagrange-Interpolante*

$$\hat{H}_1(t) = \sum_{j=1}^s H_1(t_{k,c_j}) l_j(t), \quad (4.23)$$

wobei l_j das j -te Lagrange-Polynom zu den Knoten $t_{k,c_1}, \dots, t_{k,c_s}$ ist. Via Anwendung von (4.23) auf (4.21) ergibt sich

$$\text{sqerr}_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} (H_1(t) - \hat{H}_1(t)) dW(t) + \sum_{j=1}^s H_1(t_{k,c_j}) \left(\int_{t_k}^{t_{k+1}} l_j(t) dW(t) - b_j \right) \quad (4.24)$$

Die Formel (4.24) führt auf die folgende Aussage:

Proposition 4.2. Sei H_1 s -mal stetig differenzierbar und X eine Lösung von (4.10). Weiter sei

$$b_j = \int_{t_k}^{t_{k+1}} l_j(t) dW(t), \quad \text{wobei} \quad l_j(t) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \frac{t - t_{k,c_i}}{t_{k,c_j} - t_{k,c_i}}$$

für $j = 1, \dots, s$. Dann gilt

$$E \|\text{sqerr}_k X(t_k)\|^2 \leq \frac{h^{2s+1}}{s!^2} \left(\int_0^1 \prod_{j=1}^s (\tau - c_j)^2 d\tau \right) \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E \|H_1^{(s)}(t) X(t_k)\|^2.$$

Beweis. Die Behauptung folgt sofort aus Anwendung der Itô-Isometrie und der Fehlerformel der klassischen Polynominterpolation. \square

Wir wollen aber auch Quadraturformeln der Ordnung $r < s$ zulassen und deren Fehler untersuchen.

Lemma 4.1. *Die Quadraturformel $(b_j, c_j)_{j=1}^s$ sei von der Ordnung r . Weiter sei die Funktion H_1 r -mal stetig differenzierbar und X eine Lösung von (4.10). Dann gilt für den Quadraturfehler*

$$E\|\text{sqerr}_k X(t_k)\|^2 \leq \frac{h^{2r+1}(s+1)}{(r-1)!(2r-1)} \left(\frac{1}{2r} + \sum_{j=1}^s \tilde{K}_j c_j^{2r-1} \right) \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E\|H_1^{(r)}(t)X(t_k)\|^2, \quad (4.25)$$

wobei die Konstanten \tilde{K}_j von den Abschätzungen $E_k|b_j|^2 \leq \tilde{K}_j h$ für $j = 1, \dots, s$ (siehe (4.22)) herrühren.

Beweis. Wir betrachten die Taylor-Entwicklung von H_1 um t_k bis einschließlich zur Ordnung $r-1$:

$$H_1(t) = \sum_{m=0}^{r-1} (t-t_k)^m H_1^{(m)}(t_k) + \int_{t_k}^t \frac{(t-\tau)^{r-1}}{(r-1)!} H_1^{(r)}(\tau) d\tau.$$

Da die gegebene Quadraturformel alle Polynome vom Grad $\leq r-1$ exakt integriert folgt zunächst für den Quadraturfehler eines einzelnen Pfades:

$$\begin{aligned} \text{sqerr}_k &= \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t \frac{(t-\tau)^{r-1}}{(r-1)!} H_1^{(r)}(\tau) d\tau dW(t) - \sum_{j=1}^s b_j \int_{t_k}^{t_{k,c_j}} \frac{(t_{k,c_j}-\tau)^{r-1}}{(r-1)!} H_1^{(r)}(\tau) d\tau \\ &= \int_{t_k}^{t_{k+1}} P_{(1),r}(\tau) H_1^{(r)}(\tau) d\tau, \end{aligned}$$

wobei

$$P_{(1),r}(\tau) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{(t-\tau)_+^{r-1}}{(r-1)!} dW(t) - \sum_{j=1}^s b_j \frac{(t_{k,c_j}-\tau)_+^{r-1}}{(r-1)!}$$

eine stochastische Version des r -ten Peano-Kernes darstellt. Dabei haben wir die Abschneidefunktion $z_+ = 0$, falls $z \leq 0$ und $z_+ = z$ sonst benutzt. Zunächst führt die Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung auf den starken lokalen Fehler zu

$$E\|\text{err}_k X(t_k)\|^2 \leq h \left(\int_{t_k}^{t_{k+1}} E_k \|P_{(1),r}(\tau)\|^2 d\tau \right) \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E\|H_1^{(r)}(t)X(t_k)\|^2.$$

Nochmaliges Benutzen der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und zusätzlich der Itô-Isometrie führt auf eine Abschätzung des Peano-Kernes:

$$\begin{aligned} E_k \|P_{(1),r}(\tau)\|^2 &\leq \frac{(s+1)}{(r-1)!^2} \left(\int_{t_k}^{t_{k+1}} (t-\tau)_+^{2r-2} dt + \sum_{j=1}^s E_k (b_j^2) (t_{k,c_j} - \tau)_+^{2r-2} \right) \\ &\leq \frac{(s+1)}{(r-1)!^2} \left(\frac{(t_{k+1}-\tau)^{2r-1}}{2r-1} + \sum_{j=1}^s \tilde{K}_j h (t_{k,c_j} - \tau)_+^{2r-2} \right) \end{aligned}$$

und die Behauptung folgt aus der Integration letzterer Ungleichung über $[t_k, t_{k+1}]$ bzgl. τ . \square

Bemerkung 4.4. Der bedingte Erwartungswert des Fehlers $sqerr_k$ in (4.21) verschwindet, wenn $E_k(b_j) = 0$ für $j = 1, \dots, s$.

Als Nächstes untersuchen wir unter welchen Bedingungen für $\alpha = (0)$ eine Darstellung von $\tilde{c}_{\alpha,s}$ der Form

$$\tilde{c}_{(0),s} = \sum_{j=1}^s a_j H_0(t_{k,d_j})$$

existiert. Tatsächlich existiert diese nur dann, wenn

$$t_{k,d_j} = t_k + h d_j = t_k + h \sum_{m=1}^{2j-1} \theta_m \quad (4.26)$$

für $j = 1, \dots, s$. Durch die Bedingungen (4.20) und (4.26) sind die Koeffizienten θ_m bereits eindeutig festgelegt, denn durch passende Subtraktion von (4.20) von (4.26) ergibt sich

$$\begin{cases} \theta_{2j-1} = d_j - c_{j-1}, \\ \theta_{2j} = c_j - d_j \end{cases} \quad (4.27)$$

für $j = 1, \dots, s$.

Wir kehren zum Problem der Existenz einer Darstellung (4.18) für ein beliebiges α zurück:

Lemma 4.2. Die Koeffizienten $\tilde{c}_{\alpha,s}$ besitzen für jedes $\alpha \in \mathcal{M}_1$ eine Darstellung der Form (4.18), sofern die Koeffizienten θ_j ($j = 1, \dots, 2s$) durch (4.27) gegeben sind. Folglich ist $c_s = 1$ ($t_{k,c_s} = t_{k+1}$) und der Splitting Integrator (4.11) ist von der Form

$$\begin{aligned} X_{k+1} &= \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j V_1(t_{k,c_j})} e^{U h (c_j - d_j)} e^{a_j V_0(t_{k,d_j})} e^{(d_j - c_{j-1}) h U} \right) X_k \\ &= e^{-U h} \left(\prod_{j=1}^s e^{b_j H_1(t_{k,c_j})} e^{a_j H_0(t_{k,d_j})} \right) X_k, \end{aligned} \quad (4.28)$$

wobei $c_0 := 0$ ist.

Beweis. Es ist zu zeigen, dass für $\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}$

$$\mathfrak{C}_s^\gamma = \mathfrak{C}_s^\gamma H_\alpha(t_k(\gamma))$$

für einen passenden Vektor $t_k(\gamma)$ gilt. Nach (4.17) ergibt sich für $\gamma = (m_{01}, m_{11}, \dots, m_{0s}, m_{1s})$:

$$\mathfrak{C}_s^\gamma = e^{-U h} \prod_{j=1}^s (b_j V_1(t_{k,c_j}))^{m_{1j}} e^{U h \theta_{2j}} (a_j V_0(t_{k,d_j}))^{m_{0j}} e^{\theta_{2j-1} h U}.$$

Da $H_j(t)$ ($j = 0, 1$) via Konjugation eines Automorphismus aus $V_j(t)$ hervorgeht, gilt für $i_j \in \mathbb{N}$:

$$H_j(t)^{i_j} = e^{-U(t-t_k)} V_j(t)^{i_j} e^{U(t-t_k)}.$$

Wegen (4.27) resultiert:

$$\begin{aligned} & (b_j V_1(t_{k,c_j}))^{i_1} e^{U h \theta_{2j}} (a_j V_0(t_{k,d_j}))^{i_0} e^{\theta_{2j-1} h U} \\ &= e^{U(t_{k,c_j} - t_k)} \left(e^{-U(t_{k,c_j} - t_k)} V_1(t_{k,c_j})^{i_1} e^{U(t_{k,c_j} - t_k)} \right) \\ & \quad \cdot \left(e^{-U(t_{k,d_j} - t_k)} V_0(t_{k,d_j})^{i_0} e^{U(t_{k,d_j} - t_k)} \right) e^{-U(t_{k,c_{j-1}} - t_k)} \\ &= e^{U(t_{k,c_j} - t_k)} H_1(t_{k,c_j})^{i_1} H_0(t_{k,d_j})^{i_0} e^{-U(t_{k,c_{j-1}} - t_k)}. \end{aligned}$$

Mittels obiger Überlegungen folgt schließlich:

$$\begin{aligned} \mathfrak{C}_s^\gamma &= e^{-Uh} \prod_{j=1}^s e^{U(t_k, c_j - t_k)} (b_j H_1(t_k, c_j))^{m_{1j}} (a_j H_0(t_k, c_j))^{m_{0j}} e^{-U(t_k, c_{j-1} - t_k)} \\ &= e^{-Uh} e^{U(t_k, c_s - t_k)} \mathfrak{C}_s^\gamma H_\alpha(t_k(\gamma)) e^{-U(t_k, c_0 - t_k)}, \end{aligned}$$

wobei

$$t_k(\gamma) = (t_k, c_s, \dots, t_k, c_s, t_k, d_s, \dots, t_k, d_s, \dots, t_k, c_1, \dots, t_k, c_1, t_k, d_1, \dots, t_k, d_1).$$

Die Länge jedes t_k, d_j - bzw. t_k, c_j -Blocks beträgt m_{0j} bzw. m_{1j} . Die Behauptung folgt nun aus den Vorgaben $c_s = 1$ und $c_0 = 0$. Das zweite Gleichheitszeichen in (4.28) resultiert aus der Beziehung

$$e^{b_j H_1(t_k, c_j)} = e^{-Uhc_j} e^{b_j V_1(t_k, c_j)} e^{Uhc_j},$$

und aus der Entsprechenden für $a_j H_0(t_k, d_j)$. \square

Aus Lemma 4.2 schließen wir:

Korollar 4.1. *Es sei die Situation von Lemma 4.2 gegeben. Ist $J_\alpha = \mathfrak{C}_{\alpha, s}$ ($\mathfrak{C}_{\alpha, s}$ sei wie in Kapitel 3 definiert) und $t_k(\gamma) = (t_k, \dots, t_k)$ für alle $\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, s}$, so gilt*

$$J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{C}}_{\alpha, s} = J_\alpha[H_\alpha(\cdot) - H_\alpha(t_k(\alpha))].$$

Folglich entsprechen die Konsistenzbedingungen für das Splitting (4.28) genau den starken Ordnungsbedingungen für den beschränkten zeitunabhängigen Fall. Außerdem ist der lokale Fehler auf (stochastische) Quadraturfehler zurückführbar.

Letztere Aussage legt wiederum nahe, ähnlich wie in Abschnitt 3.5, mit der Taylor-Entwicklung bzw. dem Hauptsatz der Integralrechnung zu arbeiten. Denn zunächst gilt für $\alpha = (i_1, \dots, i_l) \in \mathcal{M}_1$ unter den Voraussetzungen des Korollars 4.1:

$$\begin{aligned} J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{C}}_{\alpha, s} &= J_\alpha[H_\alpha(s_1, \dots, s_l) - H_\alpha(t_k, \dots, t_k)] \\ &\quad - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha, s}} \frac{1}{\gamma!} \mathfrak{C}_s^\gamma (H_\alpha(t_k(\gamma)) - H_\alpha(t_k, \dots, t_k)). \end{aligned}$$

Mittels der Formel

$$\begin{aligned} H_\alpha(s_1, \dots, s_l) - H_\alpha(t_k, \dots, t_k) &= \sum_{j=1}^l \int_{t_k}^{s_j} \partial_{\sigma_j} H_\alpha(t_k, \dots, t_k, \sigma_j, s_{j+1}, \dots, s_l) d\sigma_j \\ &= \sum_{j=1}^l \int_{t_k}^{s_j} H_{\alpha_{j>}}(t_k, \dots, t_k) \dot{H}_{i_j}(\sigma_j) H_{\alpha_{j<}}(s_{j+1}, \dots, s_l) d\sigma_j, \end{aligned} \quad (4.29)$$

die aus wiederholter Anwendung des Hauptsatzes der Integralrechnung folgt, wobei

$$\alpha_{j<} := \begin{cases} (\emptyset), & \text{falls } j = 1, \\ (i_1, \dots, i_{j-1}), & \text{falls } 2 \leq j \leq l, \end{cases}$$

$$\alpha_{j>} := \begin{cases} (i_{j+1}, \dots, i_l), & \text{falls } 1 \leq j \leq l-1, \\ (\emptyset), & \text{falls } j = l \end{cases}$$

ist, folgt:

Korollar 4.2. *Unter den Voraussetzungen von Lemma 4.2 gilt:*

$$J_\alpha[H_\alpha(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{c}}_{\alpha,s} = \sum_{j=1}^l H_{\alpha_{j>}}(t_k, \dots, t_k) \left(J_\alpha[J_{(0)}[\dot{H}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_j} H_{\alpha_{j<}}(s_{j+1}, \dots, s_l)] \right. \\ \left. - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} c_s^\gamma J_{(0)}[\dot{H}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_j} H_{\alpha_{j<}}(t_{k,j+1}, \dots, t_{k,l}) \right),$$

wobei $t_{k,j}$ dem j -ten Eintrag in $t_k(\gamma)$ entspricht.

Wir geben das einfachste nicht triviale Beispiel an:

Beispiel 4.1. *Sei $\alpha = (11)$, dann gilt*

$$J_{(11)}[H_{(11)}(\cdot)] - \tilde{\mathfrak{c}}_{(11),s} = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{s_1} \int_{t_k}^{s_1} \dot{H}_1(\sigma_1) H_1(s_2) d\sigma_1 \circ dW(s_2) \circ dW(s_1) \\ + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^{s_1} \int_{t_k}^{s_2} H_1(t_k) \dot{H}_1(\sigma_2) d\sigma_2 \circ dW(s_2) \circ dW(s_1) \\ - \sum_{\gamma \in \mathcal{T}_{\alpha,s}} \frac{1}{\gamma!} c_s^\gamma \left(\int_{t_k}^{t_{k,c_1}} \dot{H}_1(\sigma_1) H_1(t_{k,c_2}) d\sigma_1 + \int_{t_k}^{t_{k,c_2}} H_1(t_k) \dot{H}_1(\sigma_2) d\sigma_2 \right).$$

4.3.1 Der starke lokale Fehler des θ -Splittings

Im Laufe des letzten Abschnittes wurden beinahe alle Hilfsmittel für eine allgemeine Theorie zur Abschätzung des lokalen Fehlers bereitgestellt. Tatsächlich sind für die Abschätzung des Restterms R_s , der in der Entwicklung (4.16) auftaucht, noch kompliziertere Rechnungen und Abschätzungen als im Beweis zu Lemma 3.3 (Kapitel 3) erforderlich. Stattdessen wird eine alternative Beweistechnik vorgestellt, die zumindest auf spezielle Klassen von Splitting Integratoren angewendet werden kann, um starke lokale Fehlerabschätzungen ohne Schrittweineinschränkungen zu erhalten. Dazu betrachten wir für einen Parameter $\theta \in [0, 1]$ das Splitting (4.28) für $s = 2$, $b_1 = J_{(1)}$, $b_2 = 0$, $c_1 = \theta$, $c_2 = 1$, $a_1 + a_2 = J_{(0)}$, $d_1 = \theta = d_2$:

$$X_{k+1} = e^{Uh(1-\theta)} e^{J_{(1)}V_1(t_{k,\theta}) + J_{(0)}V_0(t_{k,\theta})} e^{Uh\theta} X_k, \quad (4.30)$$

hierbei ist $t_{k,\theta} = t_k + h\theta$. Wir bezeichnen (4.30) als (*stochastisches*) θ -*Splitting* (siehe auch Kapitel 3). Dabei ergibt sich für $\theta = 1$ das (*stochastische*) *Trotter-Splitting* und für $\theta = 1/2$ das (*stochastische*) *Strang-Splitting* (siehe auch (3.32)). Durch die einfache Struktur des θ -Splittings ergibt sich eine ebenfalls einfache Darstellung für den Restterm R_s . Denn wir können lokal bzw. für jeden Zeitschritt den Faktor

$$e^{J_{(1),t_k,t}V_1(t_{k,\theta}) + J_{(0),t_k,t}V_0(t_{k,\theta})} \quad (4.31)$$

als Fluss einer Stratonovich-Gleichung mit zeitunabhängigen beschränkten Koeffizienten auffassen. Genauer: (4.31) ist ein Fluss zur Gleichung

$$\begin{cases} dZ_k(t) = V_0(t_{k,\theta})Z_k(t)dt + V_1(t_{k,\theta})Z_k(t) \circ dW(t), \\ Z_k(t_k) = e^{Uh\theta} Y_k(t_k) = e^{Uh\theta} X(t_k). \end{cases}$$

Wir bemerken zunächst, dass

$$\|Z_k(t)\| = \|Z_k(t_k)\| = \|Y_k(t_k)\| = \|X(t_k)\| \quad (4.32)$$

gilt. Außerdem besitzt die Lösung $Z_k(t)$ die Picard-Iterierte

$$\begin{aligned} Z_k(t) &= Z_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}} J_{\alpha, t_k, t} V_{\alpha, k, \theta} Z_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} V_{\alpha, k, \theta} J_{\alpha} [Z_k(\cdot)]_{t_k, t} \\ &= e^{Uh\theta} Y_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}} J_{\alpha, t_k, t} V_{\alpha, k, \theta} e^{Uh\theta} Y_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} V_{\alpha, k, \theta} J_{\alpha} [Z_k(\cdot)]_{t_k, t}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

wobei die Notation $V_{\alpha, k, \theta} = V_{i_1}(t_k, \theta) \cdots V_{i_l}(t_k, \theta)$ für $\alpha = (i_1, \dots, i_l)$ benutzt wurde. Es gilt die folgende Aussage:

Theorem 4.3. Für das θ -Splitting (4.30) angewandt auf die Stratonovich-Schrödinger-Gleichung (4.10) gilt unter Voraussetzung der Kommutatorabschätzungen (4.3), (4.5) die lokale Fehlerabschätzung

$$\left(E \|X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k\|^2 \right)^{1/2} \leq Kh^{3/2} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} (E \|X(t_k)\|_{\mathcal{H}^1}^2)^{1/2},$$

wobei K von $M_j, \kappa_j, (j = 0, 1), T - t_0$, aber nicht von $\|U\|$ und N abhängt.

Beweis. Mittels der Beziehung

$$V_{\alpha, k, \theta} = e^{Uh\theta} H_{\alpha, k, \theta} e^{-Uh\theta}$$

folgt für $t = t_{k+1}$ in (4.33):

$$Z_k(t_{k+1}) = e^{Uh\theta} \left(Y_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}} J_{\alpha} H_{\alpha, k, \theta} Y_k(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} H_{\alpha, k, \theta} e^{-Uh\theta} J_{\alpha} [Z_k(\cdot)] \right).$$

Da aber das lokale Splitting bzgl. $Y_k(\cdot)$ durch

$$Y_{k+1}^k = e^{-Uh\theta} e^{J_{(1)} V_1(t_k, \theta) + J_{(0)} V_0(t_k, \theta)} e^{Uh\theta} Y_k(t_k)$$

gegeben ist, folgt zunächst nach Konstruktion

$$Y_{k+1}^k = e^{-Uh\theta} Z_k(t_{k+1}),$$

und somit zusammen mit $Y_k(t_k) = X(t_k)$:

$$Y_{k+1}^k = X(t_k) + \sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}} J_{\alpha} H_{\alpha, k, \theta} X(t_k) + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} H_{\alpha, k, \theta} e^{-Uh\theta} J_{\alpha} [Z_k(\cdot)].$$

Daraus erhalten wir die lokale Fehlerformel für die Pfade:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= e^{Uh} (Y_k(t_{k+1}) - Y_{k+1}^k) \\ &= e^{Uh} \left(\sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{(\emptyset)\}} J_{\alpha} [H_{\alpha}(\cdot) - H_{\alpha, k, \theta}] X(t_k) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} (J_{\alpha} [H_{\alpha}(\cdot) Y_k(\cdot)] - H_{\alpha, k, \theta} e^{-Uh\theta} J_{\alpha} [Z_k(\cdot)]) \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Also folgt mit Hilfe der diskreten Cauchy-Schwarz-Ungleichung (1.13):

$$E\|\varepsilon_k\|^2 \leq (|\Lambda_r| + 2|\mathcal{B}(\Lambda_r)| - 1) \left(\sum_{\alpha \in \Lambda_r \setminus \{\emptyset\}} E\|J_\alpha[H_\alpha(\cdot) - H_{\alpha,k,\theta}]X(t_k)\|^2 \right. \\ \left. + \sum_{\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_r)} (E\|J_\alpha[H_\alpha(\cdot)Y_k(\cdot)]\|^2 + M_0^{n(\alpha)} M_1^{e(\alpha)} E\|J_\alpha[Z_k(\cdot)]\|^2) \right). \quad (4.35)$$

In Kapitel 3 wurde gezeigt, dass das θ -Splitting bestenfalls von starker lokaler Ordnung 1.5 ist. Somit ist das Studium der starken Fehler für $(\emptyset) \neq \alpha \in \Lambda_2 = \{(\emptyset), (1), (0), (11)\}$ ausreichend. Aber zuvor schätzen wir die Restterme für $\alpha \in \mathcal{B}(\Lambda_2)$ ab. Wir beachten dazu, dass in diesem Fall $\ell(\alpha) + n(\alpha) \in \{3, 4\}$ ist. Mittels $\|Y_k(\cdot)\| = \|X(\cdot)\|$ und Lemma 3.1 (ii) bzgl. $H_\alpha(\cdot)Y_k(\cdot)$ bzw. $Z_k(\cdot)$ und (4.32) folgt:

$$E\|J_\alpha[H_\alpha(\cdot)Y_k(\cdot)]\|^2 \leq K_1 \frac{h^{2o(\alpha)}}{(2o(\alpha))!} E\|X(t_k)\|^2, \quad (4.36)$$

$$E\|J_\alpha[Z_k(\cdot)]\|^2 \leq K_2 \frac{h^{2o(\alpha)}}{(2o(\alpha))!} E\|X(t_k)\|^2, \quad (4.37)$$

wobei die Konstanten K_1, K_2 nur von M_j ($j = 0, 1$), $T - t_0$ und k_α abhängen. Jetzt betrachten wir den Fall $\alpha = (1)$. Aus der Quadraturfehlerformel (4.25) und der Abschätzung (4.14) für $r = 1$ folgt:

$$E\|J_{(1)}[H_1(\cdot) - H_1(t_k, \theta)]X(t_k)\|^2 \leq 3h^3 K_1^2 E\|X(t_k)\|_{\mathcal{H}^1}^2. \quad (4.38)$$

Durch die Diskussion über Splitting Integratoren für den deterministischen Fall ist klar, dass

$$E\|J_{(0)}[H_0(\cdot) - H_0(t_k, \theta)]X(t_k)\|^2 \leq 2h^4 \left(\frac{1}{3} - \theta + \theta^2 \right) K_1^2 E\|X(t_k)\|_{\mathcal{H}^1}^2 \quad (4.39)$$

gilt. Zuletzt behandeln wir den Fall $\alpha = (11)$. Hierzu benutzen wir zunächst, dass für beliebiges $\alpha \in \mathcal{M}_1$

$$J_\alpha[H_\alpha(\cdot) - H_{\alpha,k,\theta}] = J_\alpha[H_\alpha(\cdot) - H_\alpha(t_k, \dots, t_k)] - J_\alpha[H_{\alpha,k,\theta} - H_\alpha(t_k, \dots, t_k)]$$

gilt, um die Formel (4.29) verwenden zu können. Es resultiert:

$$J_\alpha[H_\alpha(\cdot) - H_{\alpha,k,\theta}] = \sum_{j=1}^l \left(J_\alpha[H_{\alpha_j >} (t_k, \dots, t_k) J_{(0)}[\dot{H}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, s_j} H_{\alpha_j <} (s_{j+1}, \dots, s_l)] \right. \\ \left. - J_\alpha[H_{\alpha_j >} (t_k, \dots, t_k) J_{(0)}[\dot{H}_{i_j}(\cdot)]_{t_k, t_k, \theta} H_{\alpha_j <} (t_k, \theta, \dots, t_k, \theta)] \right).$$

Außerdem benötigen wir für $X \in \mathbb{C}^N$ die Abschätzung

$$\|\dot{H}_1(t)H_1(s)X\| \leq \|[\dot{H}_1(t), H_1(s)]X\| + \|H_1(s)\dot{H}_1(t)X\| \\ \leq K(\|X\| + \|V_1(s)e^{U(s-t_k)}X\|_{\mathcal{H}^1} + \|X\| + \|X\|_{\mathcal{H}^1}) \\ \leq K(2\|X\| + 2\|X\|_{\mathcal{H}^1} + \|[D, V]e^{U(s-t_k)}X\|) \\ \leq K\|X\|_{\mathcal{H}^1},$$

wobei die generische Konstante K schlimmstenfalls von M_1, κ_0, κ_1 abhängt. Zusammen mit Lemma 3.1 ergibt sich

$$\begin{aligned} & E\|J_{(11)}[H_{(11)}(\cdot) - H_{(11),k,\theta}]X(t_k)\|^2 \\ & \leq 4K_1 \frac{h^4}{4!} \max_{s,t \in [t_k, t_{k+1}]} \left(E\|\dot{H}_1(s)H_1(t)X(t_k)\|^2 + E\|H_1(s)\dot{H}_1(t)X(t_k)\|^2 \right) \\ & \leq K_1 \frac{h^4}{6} KE\|X(t_k)\|_{\mathcal{H}^1}^2. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Nach Einsetzen der Abschätzungen (4.36)–(4.40) in die Formel (4.35) für den lokalen Fehler folgt die Behauptung. \square

4.4 Ein Kriterium zur globalen Ordnung eines Splitting Integrators im unbeschränkten Fall

Der Beweis zum Theorem 1.4 basiert auf der Entwicklung aller im Splitting auftretenden Exponentialfunktionen, um eine Darstellung der Form $\Psi_k^{(s)} = Id + \Phi_k$ zu erhalten (siehe Kapitel 1.4). Wie bereits erläutert ist dies nicht möglich, wenn Schrittweiteinschränkungen wie $h\|U\| \leq K$ vermieden werden sollen. Diese würden nämlich durch die Entwicklung

$$e^{Uh\theta_j} = Id + Uh\theta_j r_1(Uh\theta_j)$$

entstehen, wobei r_1 durch (1.53) gegeben ist (vergleiche Beweis zu Lemma 1.6).

Im Folgenden wird gezeigt unter welchen Umständen ein zu Theorem 1.4 ähnliches Ergebnis gilt. Wir nehmen dazu für einen gegebenen Splitting Integrator die folgenden lokalen Fehlerabschätzungen für $k = 0, \dots, n - 1$ und ein festes $r \in \mathbb{N}$ als gegeben an:

$$\|E_k(X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k)\| \leq K_2 h^{p_1} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} (E_k\|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2)^{1/2}, \tag{4.41}$$

$$\left(E\|X(t_{k+1}) - X_{k+1}^k\|^2 \right)^{1/2} \leq K_1 h^{p_2} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} (E\|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2)^{1/2}, \tag{4.42}$$

wobei

$$p_2 \geq 1/2, \quad p_1 \geq p_2 + 1/2, \tag{4.43}$$

und die Konstanten K_i ($i = 1, 2$) nur von $T - t_0, M_m$ ($m = 0, 1$) und den Kommutatorschranken κ_j ($j = 0, \dots, r$) abhängen. Zur Vereinfachung der folgenden Ausführungen setzen wir für $j = 1, \dots, s$ und $k = 0, \dots, n - 1$:

$$\mathfrak{B}_{k,j} = b_j V_1(t_{k,c_j}). \tag{4.44}$$

Mittels der Annahmen (4.42)–(4.43) können wir ein Kriterium für die globale Ordnung eines Splitting Integrators für den unbeschränkten Fall etablieren:

Theorem 4.4. *Der Splitting Integrator (4.28) angewandt auf die Gleichung (4.10) erfülle die Bedingungen (4.42)–(4.43). Weiter gelte die Momentenbedingung (3.6). Zusätzlich sei für $k = 0, \dots, n - 1$*

$$E_k(\mathfrak{B}_{m,j}) = 0 \tag{4.45}$$

für $j = 1, \dots, s$. Es gilt dann

$$(E\|X(t_n) - X_n\|^2)^{1/2} \leq Kh^{p_2-1/2} \max_{t \in [t_0, t_n]} (E\|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2)^{1/2}.$$

Das Verfahren ist von starker globaler Ordnung $p = p_2 - 1/2$. Es ist keine Schrittweiteinschränkung erforderlich.

Beweis. Offensichtlich kann (4.11) zu

$$X(t_n) = \Psi_{n-1}^{(s)} X(t_{n-1}) + \varepsilon_{n-1}$$

umformuliert werden, wobei $\varepsilon_{n-1} = X(t_n) - X_n^{n-1}$ dem lokalen pfadweisen Fehler zum Startwert $X(t_{n-1})$ entspricht. Hieraus ergibt sich eine erste Formel für den pfadweisen globalen Fehler:

$$X(t_n) - X_n = \Psi_{n-1}^{(s)} (X(t_{n-1}) - X_{n-1}) + \varepsilon_{n-1},$$

oder mit Verwendung der Abkürzungen $e_n := X(t_n) - X_n$ eine Rekursionsformel für den globalen Fehler:

$$e_n = \Psi_{n-1}^{(s)} e_{n-1} + \varepsilon_{n-1}. \quad (4.46)$$

Es stellt sich heraus (siehe Bemerkung im Anschluss), dass alle Terme $e^{b_j V_1(t_{n-1}, c_j)}$ ($j = 1, \dots, s$), die in $\Psi_{n-1}^{(s)}$ auftreten, entwickelt werden müssen, um

$$\Psi_{n-1}^{(s)} = \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} + R_{n-1, s} \quad (4.47)$$

zu erhalten. Dabei ist der unitäre und als Zufallsvariable betrachtet konstante Operator $\tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)}$ rekursiv durch

$$\tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} = \mathfrak{A}_{n-1, s} \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s-1)}, \quad \tilde{\Psi}_{n-1}^{(0)} = Id$$

definiert, wobei für $j = 1, \dots, s$:

$$\mathfrak{A}_{n-1, j} = e^{Uh\theta_{2j}} e^{a_j V_0(t_{n-1}, d_j)} e^{Uh\theta_{2j-1}}.$$

Zur Berechnung der Restterme bedienen wir uns der Funktion r_2 in (1.53) und der Produktformel (1.56) mit

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}_j &= (Id + \mathfrak{B}_{n-1, j}) \mathfrak{A}_{n-1, j}, \\ \mathfrak{L}_j &= \frac{1}{2} (\mathfrak{B}_{n-1, j})^2 r_2(\mathfrak{B}_{n-1, j}) \mathfrak{A}_{n-1, j} \end{aligned}$$

für $j = 1, \dots, s$. Denn damit folgt

$$\Psi_{n-1}^{(s)} = \prod_{j=1}^s (\mathfrak{K}_j + \mathfrak{L}_j) = \prod_{j=1}^s (Id + \mathfrak{B}_{n-1, j}) \mathfrak{A}_{n-1, j} + \hat{R}_{n-1, s},$$

wobei

$$\hat{R}_{n-1, s} = \sum_{j=1}^s \left(\prod_{l=j+1}^s (Id + \mathfrak{B}_{n-1, l}) \mathfrak{A}_{n-1, l} \right) \frac{1}{2} (\mathfrak{B}_{n-1, j})^2 r_2(\mathfrak{B}_{n-1, j}) \mathfrak{A}_{n-1, j} \Psi_{n-1}^{(j-1)}.$$

Wiederholtes Anwenden der Produktformel (1.56) mit $\mathfrak{K}_j = \mathfrak{A}_{n-1,j}$, $\mathfrak{L}_j = \mathfrak{B}_{n-1,j}\mathfrak{A}_{n-1,j}$ ergibt

$$\tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} = \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} + \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} \sum_{j=1}^s \left(\tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{n-1,j} \tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} + \tilde{R}_{n-1,s} + \hat{R}_{n-1,s}, \quad (4.48)$$

wobei die Beziehung

$$\tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} \left(\tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} \right)^{-1} = \prod_{l=j+1}^s \mathfrak{A}_{n-1,l}$$

ausgenutzt und

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{n-1,s} = & \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} \sum_{j=1}^s \left(\tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{n-1,j} \tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} \\ & \cdot \left(\sum_{m=1}^{j-1} \left(\tilde{\Psi}_{n-1}^{(m)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{n-1,m} \mathfrak{A}_{n-1,m} \prod_{l=1}^{m-1} (Id + \mathfrak{B}_{n-1,l}) \mathfrak{A}_{n-1,l} \right) \end{aligned}$$

gesetzt wurde. Aus Koeffizientenvergleich von (4.47) mit (4.48) erhalten wir

$$R_{n-1,s} = \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} \sum_{j=1}^s \left(\tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{n-1,j} \tilde{\Psi}_{n-1}^{(j)} + \tilde{R}_{n-1,s} + \hat{R}_{n-1,s} \quad (4.49)$$

Für die Restterme gilt folglich nach (4.44): $\hat{R}_{n-1,s} = O(b_j^2)$ und $\tilde{R}_{n-1,s} = O(b_j b_m)$ ($j, m = 1, \dots, s$). Daher gilt wegen (3.6)

$$E_{n-1} \|\hat{R}_{n-1,s}\|^2 \leq \hat{K} h^2, \quad E_{n-1} \|\tilde{R}_{n-1,s}\|^2 \leq \tilde{K} h^2 \quad (4.50)$$

wobei die Konstanten \hat{K} , \tilde{K} nur von M_1 und $T - t_0$ abhängen. Durch selbige Vorgehensweise erhalten wir analoge Aussagen über $R_{k,s}$, $\tilde{R}_{k,s}$, $\hat{R}_{k,s}$ für alle $k = 0, \dots, n-1$. Durch Kombination der Formeln (4.47) und (4.46) lässt sich eine Situation herstellen, die die Anwendung einer diskreten Gronwall-Ungleichung ermöglicht:

$$\begin{aligned} e_n &= \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} e_{n-1} + R_{n-1,s} e_{n-1} + \varepsilon_{n-1} \\ &= \tilde{\Psi}_{n-1}^{(s)} (\tilde{\Psi}_{n-2}^{(s)} e_{n-2} + R_{n-2,s} e_{n-2} + \varepsilon_{n-2}) + R_{n-1,s} e_{n-1} + \varepsilon_{n-1} \\ &\quad \vdots \\ &= \prod_{k=0}^{n-1} \tilde{\Psi}_k^{(s)} e_0 + \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) R_{k,s} e_k + \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) R_{k,s} e_k + \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k, \end{aligned}$$

wobei letztere Gleichheit wegen $e_0 = 0$ gilt. Daraus ergibt sich nach Einsetzen der Gleichung (4.49) und Benutzung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\begin{aligned} E \|e_n\|^2 &\leq 3E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \sum_{j=1}^s \left(\tilde{\Psi}_k^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{k,j} \tilde{\Psi}_k^{(j)} e_k \right\|^2 \\ &\quad + 3E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) (\tilde{R}_{k,s} + \hat{R}_{k,s}) e_k \right\|^2 + 3E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k \right\|^2 \\ &=: 3(A_1 + A_2 + A_3). \end{aligned}$$

Um nach Anwendung einer diskreten Gronwall-Ungleichung eine sinnvolle Abschätzung zu erhalten, benötigen wir eine Ungleichung der Form

$$E\|e_n\|^2 \leq Kh \sum_{k=0}^{n-1} E\|e_k\|^2 + 3E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k \right\|^2,$$

wobei $K = K(T - t_0, M_1)$ ist, denn dann gilt

$$E\|e_n\|^2 \leq 3E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k \right\|^2 \exp(K(t_n - t_0)).$$

Abschließend muss noch

$$A_3 = E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \varepsilon_k \right\|^2 \leq K_{A_3} h^{2p_2-1} \max_{t \in [t_0, t_n]} E\|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2$$

für $K_{A_3} = K_{A_3}(M_1, T - t_0, K_j (j = 1, 2))$ gezeigt werden, um insgesamt

$$E\|e_n\|^2 \leq 3 \exp(K(t_n - t_0)) K_{A_3} h^{2p_2-1} \max_{t \in [t_0, t_n]} E\|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2$$

zu erhalten. Abschätzung von A_1 : Nach Vertauschung der Summen und Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung folgt:

$$\begin{aligned} A_1 &\leq s \sum_{j=1}^s E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{l=k}^{n-1} \tilde{\Psi}_l^{(s)} \right) \left(\tilde{\Psi}_k^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{k,j} \tilde{\Psi}_k^{(j)} e_k \right\|^2 \\ &\leq s M_1^2 \sum_{j=1}^s \sum_{k=0}^{n-1} E(E_k(b_j^2) \|e_k\|^2) \leq s^2 K_b M_1^2 h \sum_{k=0}^{n-1} E\|e_k\|^2, \end{aligned}$$

wobei die Konstante K_b nur von den L^2 -Normen der Koeffizienten b_j aber nicht von n, h abhängt. Wir haben noch das Verschwinden der gemischten Terme zu erklären. Dies resultiert aus der Forderung (4.45), denn

$$\begin{aligned} &\sum_{0 \leq l < k \leq n-1} \Re \left(E \left\langle \left(\prod_{m=k}^{n-1} \tilde{\Psi}_m^{(s)} \right) \left(\tilde{\Psi}_k^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{k,j} \tilde{\Psi}_k^{(j)} e_k, \left(\prod_{m=l}^{n-1} \tilde{\Psi}_m^{(s)} \right) \left(\tilde{\Psi}_l^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{l,j} \tilde{\Psi}_l^{(j)} e_l \right\rangle \right) \\ &= \sum_{0 \leq l < k \leq n-1} \Re \left(E \left\langle \left(\tilde{\Psi}_k^{(j)} \right)^{-1} E_k(\mathfrak{B}_{k,j}) \tilde{\Psi}_k^{(j)} e_k, \left(\prod_{m=l}^{k-1} \tilde{\Psi}_m^{(s)} \right) \left(\tilde{\Psi}_l^{(j)} \right)^{-1} \mathfrak{B}_{l,j} \tilde{\Psi}_l^{(j)} e_l \right\rangle \right) = 0, \end{aligned}$$

da e_k \mathcal{F}_{t_k} -messbar ist. Weiter folgt mittels der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und (4.50):

$$\begin{aligned} A_2 &\leq 2n \sum_{k=0}^{n-1} \left(E\|\tilde{R}_{k,s} e_k\|^2 + E\|\hat{R}_{k,s} e_k\|^2 \right) \\ &\leq 2n \sum_{k=0}^{n-1} \left(E \left(E_k(\|\tilde{R}_{k,s}\|^2) \|e_k\|^2 \right) + E \left(E_k(\|\hat{R}_{k,s}\|^2) \|e_k\|^2 \right) \right) \\ &\leq 2(\tilde{K} + \hat{K})(t_n - t_0) h \sum_{k=0}^{n-1} E\|e_k\|^2. \end{aligned}$$

Um die erwünschte Abschätzung für A_3 zu finden, zerlegen wir die lokalen Fehler ε_k ($k = 0, \dots, n-1$) in einen Anteil mit verschwindender Kovarianz $\varepsilon_k - E_k(\varepsilon_k)$ und den Anteil $E_k(\varepsilon_k)$, der nach (4.41) von der Größenordnung $O(h^{p_1})$ ist. Damit folgt mit Hilfe von (4.42) und (4.41):

$$\begin{aligned} A_3 &\leq E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{m=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_m^{(s)} \right) (\varepsilon_k - E_k(\varepsilon_k)) \right\|^2 + E \left\| \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{m=k+1}^{n-1} \tilde{\Psi}_m^{(s)} \right) E_k(\varepsilon_k) \right\|^2 \\ &\leq \sum_{k=0}^{n-1} E \|\varepsilon_k - E_k(\varepsilon_k)\|^2 + n \sum_{k=0}^{n-1} E \|E_k(\varepsilon_k)\|^2 \\ &\leq \sum_{k=0}^{n-1} K_1^2 h^{2p_2} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E \|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2 + n \sum_{k=0}^{n-1} K_2^2 h^{2p_1} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E \|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2 \\ &\leq \left(K_1^2 + K_2^2 h^{2(p_1-p_2)-1} (t_n - t_0) \right) (t_n - t_0) h^{2p_2-1} \max_{t \in [t_0, t_n]} E \|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2. \end{aligned}$$

Via (4.43) folgt $2(p_1 - p_2) - 1 \geq 2(p_2 + 1/2 - p_2) - 1 = 0$, also insgesamt die Behauptung. \square

Bemerkung 4.5. • *Das direkte Abschätzen der einfacheren Darstellung des globalen Fehlers*

$$e_n = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\prod_{m=k+1}^{n-1} \Psi_m^{(s)} \right) \varepsilon_k,$$

führt aufgrund der Abhängigkeit der $\Psi_m^{(s)}$ von den b_j nach Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung und (4.42) auf:

$$E \|e_n\|^2 \leq n \sum_{k=0}^{n-1} E \|\varepsilon_k\|^2 \leq K_1^2 (t_n - t_0)^2 h^{2p_1-2} \max_{t \in [t_0, t_n]} E \|X(t)\|_{\mathcal{H}^r}^2.$$

Daher kann nur die globale Ordnung $p = p_2 - 1$ gefolgert werden. Dafür wird die zusätzliche Bedingung (4.45) vermieden.

- Der im Beweis zu Theorem 4.4 behandelte Ausdruck A_1 enthält folgende Terme

$$\mathcal{D}_k := \sum_{j=1}^s \left(\tilde{\Psi}_k^{(j)} \right)^{-1} b_j V_1(t_{k,c_j}) \tilde{\Psi}_k^{(j)}, \quad (4.51)$$

wobei

$$\tilde{\Psi}_k^{(j)} = \prod_{m=1}^j e^{Uh\theta_{2m}} e^{a_m V_0(t_{k,d_m})} e^{Uh\theta_{2m-1}} \quad (4.52)$$

für $k = 0, \dots, n-1$. Entwickelten wir alle in $\tilde{\Psi}_k^{(j)}$ involvierten Exponentialfunktionen und nutzten die Produktformel (1.56)

$$\mathcal{D}_k = \sum_{j=1}^s b_j V_1(t_{k,c_j}) + O(hb_j U),$$

so gelangten wir zwar zur Situation des Lemmas 1.6, aber dafür würden Schrittweitereinschränkungen von der Form $h\|U\| \leq K$ resultieren. Auch bloßes Entwickeln der $e^{a_m V_0(t_{k,d_m})}$ in (4.52) und Benutzen der Annahme (4.20) würde nicht zum gewünschten Ziel führen. Einerseits entspräche (4.51) nach passender Anwendung der Produktformel (1.56)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_k &= \sum_{j=1}^s e^{-Uh \sum_{l=1}^{2j} \theta_l} b_j V_1(t_{k,c_j}) e^{Uh \sum_{l=1}^{2j} \theta_l} + O(hb_j) \\ &= \sum_{j=1}^s b_j e^{-U(t_{k,c_j} - t_k)} V_1(t_{k,c_j}) e^{U(t_{k,c_j} - t_k)} + O(hb_j) = \sum_{j=1}^s b_j H_1(t_{k,c_j}) + O(hb_j), \end{aligned}$$

und lieferte somit zunächst keine Schrittweitereinschränkung. Andererseits hängt die in Theorem 1.4 benötigte Hölder-Konstante von $\|U\|$ ab, denn

$$\begin{aligned} \|H_1(t_{k,c_j}) - H_1(t_k)\| &\leq \|V_1(t_{k,c_j}) - V_1(t_k)\| + \|[V_1(t_k), e^{U(t_{k,c_j}-t_k)}]\| \\ &\leq h|c_j| (M_1 + \|[V_1(t_k), Ur_1(U(t_{k,c_j} - t_k))]\|). \end{aligned}$$

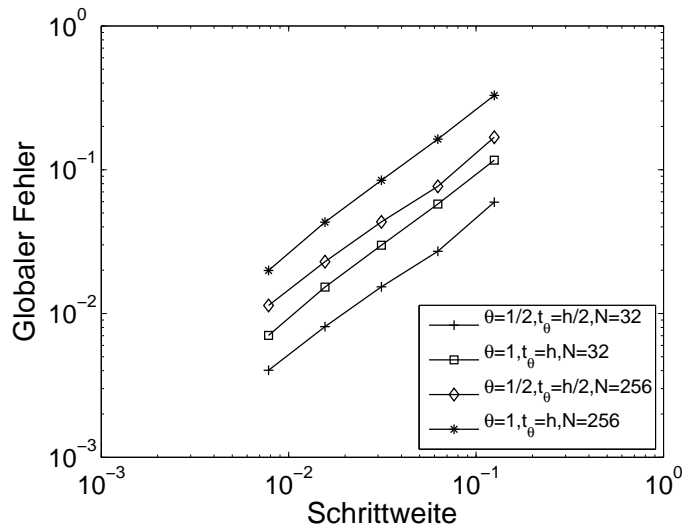


Abbildung 4.3: Die Graphik zeigt das Fehlerverhalten des θ -Splittings für $\theta = 1/2, 1$ für $N = 32, 256$ im doppeltlogarithmischen Maßstab.

4.4.1 Globale Fehlerabschätzungen für das θ -Splitting

Wir folgern jetzt aus den Theoremen 4.3 und 4.4 das Hauptresultat dieses Kapitels. Auch hier sei bemerkt, dass wir nicht die Beweistechniken aus Kapitel 3 benutzen.

Theorem 4.5. Für das θ -Splitting (4.30), angewandt auf die Stratonovich-Schrödinger-Gleichung (4.10), gilt unter Voraussetzung der Kommutatorabschätzungen (4.3), (4.5) die globale Fehlerabschätzung

$$(E\|X(t_n) - X_n\|^2)^{1/2} \leq Kh \max_{t \in [t_0, t_n]} (E\|X(t)\|_{\mathcal{H}^1}^2)^{1/2},$$

wobei K von $M_j, \kappa_j, (j = 0, 1), T - t_0$, aber nicht von $\|U\|$ abhängt.

Beweis. Nach Theorem 4.4 genügt es die Bedingungen (4.42)–(4.43) und (4.45) zu prüfen. Dabei ist (4.45) offensichtlich erfüllt. Des Weiteren folgt aus Theorem 4.3 die starke lokale Fehlerabschätzung (4.42). Es bleibt daher noch die schwache lokale Fehlerabschätzung (4.41) mit $p_1 \geq 2$ zu zeigen. Zunächst gilt wegen (4.34):

$$E_k(\varepsilon_k) = e^{Uh}(E_k(Y_k(t_{k+1})) - E_k(Y_{k+1}^k)).$$

Dabei finden wir nach Umrechnung der Stratonovich-Gleichungen bzgl. $Y_k(t_{k+1})$ und Y_{k+1}^k in die entsprechenden Itô-Gleichungen und Ausnutzen des Verschwindens des Erwartungswertes

des Itô-Integrals folgende Formeln:

$$E_k(Y_k(t_{k+1})) = E_k(Y_k(t_k)) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(H_0(t) + \frac{1}{2} H_1^2(t) \right) E_k(Y_k(t)) dt, \quad (4.53)$$

$$E_k(Y_{k+1}^k) = E_k(Y_k(t_k)) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(H_0(t_{k,\theta}) + \frac{1}{2} H_1^2(t_{k,\theta}) \right) e^{-Uh\theta} E_k(Z_k(t)) dt, \quad (4.54)$$

wobei $H_j(t) = e^{-U(t-t_k)} V_j(t) e^{U(t-t_k)}$ ($j = 0, 1$). Hierbei erfüllt $E_k(Z_k(t))$ die Integralgleichung

$$E_k(Z_k(t)) = E_k(Z_k(t_k)) + \int_{t_k}^t \left(V_0(t_{k,\theta}) + \frac{1}{2} V_1^2(t_{k,\theta}) \right) E_k(Z_k(s)) ds$$

mit $Z_k(t_k) = e^{Uh\theta} Y_k(t_k)$. Nach Anwendung eines Picard-Iterationsschrittes auf die Gleichungen (4.53) und (4.54) ergibt sich für den lokalen Fehler:

$$\begin{aligned} E_k(\varepsilon_k) &= \left(\int_{t_k}^{t_{k+1}} (H_0(t) - H_0(t_{k,\theta})) dt \right) X(t_k) + \frac{1}{2} \left(\int_{t_k}^{t_{k+1}} (H_1^2(t) - H_1^2(t_{k,\theta})) dt \right) X(t_k) \\ &\quad + \left(H_0(t_{k,\theta}) + \frac{1}{2} H_1^2(t_{k,\theta}) \right)^2 e^{-Uh\theta} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{t_k}^t E_k(Z_k(s)) ds dt \\ &\quad + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(H_0(t) + \frac{1}{2} H_1^2(t) \right) \int_{t_k}^t \left(H_0(s) + \frac{1}{2} H_1^2(s) \right) E_k(Y_k(s)) ds dt \\ &=: Q_1 + Q_2 + R_1 + R_2. \end{aligned}$$

Wir müssen zwei Quadraturfehler Q_1, Q_2 bzw. zwei Restterme R_1, R_2 untersuchen. Wir schätzen die Restterme mit Hilfe der Cauchy-Schwarz-Ungleichung ab:

$$\begin{aligned} \|R_1\|^2 &\leq \left(M_0 + \frac{1}{2} M_1^2 \right)^4 \frac{h^4}{3} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} \|E_k(Z_k(t))\|^2, \\ \|R_2\|^2 &\leq \left(M_0 + \frac{1}{2} M_1^2 \right)^4 \frac{h^4}{3} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} \|E_k(Y_k(t))\|^2. \end{aligned}$$

Für Q_1 bzw. Q_2 ergibt sich ähnlich wie in (4.39) bzw. (4.40):

$$\begin{aligned} \|Q_1\|^2 &\leq \frac{2}{3} h^4 (1 - 3\theta + 3\theta^2) K_0^2 \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} \|\dot{H}_0(t) X(t_k)\|^2, \\ \|Q_2\|^2 &\leq \frac{h^4}{2} \max_{s, t \in [t_k, t_{k+1}]} \left(\|\dot{H}_1(s) H_1(t) X(t_k)\|^2 + \|H_1(t_{k,\theta}) \dot{H}_1(s) X(t_k)\|^2 \right). \end{aligned}$$

Die Behauptung resultiert nun aus der Ungleichung $\|E_k(X)\|^2 \leq E_k \|X\|^2$ (für eine Zufallsvariable X) und den bereits im Beweis zu Theorem 4.3 gezeigten Abschätzungen, denn

$$\begin{aligned} \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} \|E_k(Z_k(t))\|^2 &\leq \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E_k \|Z_k(t)\|^2 \leq \|X(t_k)\|^2, \\ \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} \|E_k(Y_k(t))\|^2 &\leq \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E_k \|Y_k(t)\|^2 = \max_{t \in [t_k, t_{k+1}]} E_k \|X(t)\|^2. \end{aligned}$$

□

Abschließend stellen wir die Frage: Unter welchen Voraussetzungen gelten ähnliche Aussagen wie in Theorem 4.3 und 4.5, wenn mehrere unabhängige stochastische Potentiale in der Ausgangsgleichung vorkommen? Eine Antwort gibt die folgende Bemerkung:

Bemerkung 4.6. Die Ausgangsgleichung werde von mehreren unabhängigen Wiener-Prozessen getrieben, genauer

$$dX(t) = UX(t)dt + \sum_{j=0}^q V_j(t)X(t) \circ dW^j(t), \quad X(t_0) = X_0$$

mit $q \geq 2$. Die V_j ($j = 0, \dots, q$) seien ausreichend glatte, paarweise vertauschende Potentiale (Letzteres trifft z.B. zu, wenn die Potentiale räumliche Diskretisierungen von Multiplikationsoperatoren sind). Es können den Theoremen 4.3 und 4.5 entsprechende Aussagen für das Verfahren

$$X_{k+1} = e^{Uh(1-\theta)} e^{\sum_{j=0}^q J_{(j)} V_j(t_k, \theta)} e^{Uh\theta} X_k$$

gezeigt werden.

4.5 Numerische Experimente

Für die numerischen Experimente zu Theorem 4.5 wurden folgende Wahlen für die Potentiale in Gleichung (4.10) getroffen: Für das stochastische Potential wird die Funktion (3.60)

$$v(x, t) = \frac{1}{2}(1 - \cos(x)) + \sin^2(t) \sin(x)$$

und für das deterministische Potential eine räumliche Diskretisierung der Funktion

$$v_0(x, t) = e^{-(2x)^2} \sin(t)$$

benutzt. Das θ -Splitting wird auf die Gleichung

$$d\hat{U}^N(t) = -\frac{i}{2}(D^N)^2 + V_0^N(t)\hat{U}^N dt + V_1^N(t)\hat{U}^N \circ dW(t), \quad U^N(t_0) = U_0^N = F_N X_0$$

angewendet:

$$U_{k+1}^N = e^{Uh(1-\theta)} e^{hV_0(t_k, \theta) + \Delta W_k V_1(t_k, \theta)} e^{Uh\theta} U_k^N$$

mit $h = J_{(0), t_k, t_{k+1}}$ und $\Delta W_k = J_{(1), t_k, t_{k+1}}$. Zudem sind D^N , $V_1^N(t)$, X_0 wie in Kapitel 3.5 definiert und

$$V_0^N(t) = -iF_N \text{diag}(v_0(x_l, t))F_N^{-1}.$$

Des Weiteren verwenden wir das Anfangsdatum $X_0(x) = e^{-x^2/2}$. Es wird wie in Kapitel 3.5 der starke globale Fehler zur Zeit $T = 1$ zu fünf verschiedenen Zeitschrittweiten $h \in \{2^{-3}, \dots, 2^{-7}\}$ durch Mittelung über 200 Pfade berechnet. Die Referenzlösung an der Stelle $T = 1$ wird mit der gleichen Methode zur kleinsten Schrittweite $h = 2^{-10}$ näherungsweise bestimmt.

Die Abbildung 4.3 zeigt den globalen Fehler des θ -Splittings für $\theta = 1/2, 1$ zu verschiedenen Werten des Raumgitterparameters ($N = 32, 256$). Es sind keine Schrittweitereinschränkungen abzulesen. Außerdem entspricht das Verhalten des globalen Fehlers genau den theoretischen Vorhersagen, nämlich Ordnung 1, auch für $\theta = 1/2$.

Anhang A

Die Matlab Routinen SHPR, MOPS und SUMRG

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Funktion SHPR
%
% berechnet das Shuffle-Produkt zweier Woerter AL und BE
% mit Eintraegen aus Vektoren ueber {0,1,...,m} fuer
% eine natuerliche Zahl m
%
% Eingabe: AL, BE Matrizen, dabei steht
%          AL fuer sum_{i} AL_i1*(AL_i2,AL_i3,...,AL_is)
%          entsprechendes gilt fuer be
%
% Ausgabe: Matrix ERG im selben Format wie die Eingabe
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function erg = shpr(al,be)
    % Vielfachheiten der Vektoren im Wort al bzw. be
    val = al(:,1); vbe = be(:,1);
    % Vielfachheiten aus al bzw. be rausnehmen
    al = al(:,2:length(al(1,:)));
    be = be(:,2:length(be(1,:)));
    n = length(al(1,:)) + length(be(1,:));
    d = max(max(max(al)),max(max(be))) + 1;
    % distributives shuffle
    % ergind(x)=y bedeutet, dass der Vektor, dessen Wert als Zahl zur Basis d
    % gerade x ist, im Shuffle-Produkt von al und be y-mal vorkommt
    ergind = sparse(zeros(1,d^n));
    for r=1:length(val)
        for s=1:length(vbe)
            ergind = ergind + val(r)*vbe(s)...
                    *mainshuffle(0,n,d,al(r,:),be(s,:));
        end
    end
    end
    % nur noch Formatierung der Ausgabe
    [spalte,zeile,v] = find(ergind);
    erg = zeros(length(v),n+1);
```

```

for i=1:length(v)
    % Vielfachheit
    erg(i,1) = v(i);
    % Umrechnung der Zahl in Vektor
    temp = zeile(i)-1;
    c = 0;
    while (temp ~= 0)
        erg(i,1+n-c) = mod(temp,d);
        temp = (temp - mod(temp,d))/d;
        c = c + 1;
    end
end
end
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function erg = mainshuffle(anfang,n,d,al,be)
    erg = sparse(zeros(1,d^n));
    if (not(isempty(al)))
        erg = erg + mainshuffle(anfang + al(1)*d^(length(al)...
            +length(be)-1), n, d, al(2:length(al)), be);
    end
    if (not(isempty(be)))
        erg = erg + mainshuffle(anfang + be(1)*d^(length(al)...
            +length(be)-1), n, d, al, be(2:length(be)));
    end
    if (isempty(al) && isempty(be))
        erg(anfang+1)=1;
    end
end
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Funktion MOPS (mops(A,N)) berechnet den
%Erwartungswertfaktor des Produktes von k=length(N)
%iterierter Stratonovich-Integrale mittels des Shuffle Produktes.
%
%Input: N = Zeilenvektor mit natuerlichen Eintraegen,
%       A = Matrix mit Eintraegen 0,1,2,...,
%       wobei a_{i}=A(i,1:N(i)) fuer einen
%       Multiindex der Laenge N(i) steht, der Rest von A muss
%       mit Nullen aufgefuellt werden.
%
%Output: ORDER = sum_{i} o(a_i) = Ordnung von a_1,...,a_k,
%       E = sum_{i} e(a_i)/2= Halbe Anzahl der Nicht-Nullen in a_1,...,a_k
%       MEANVALUE = Erwartungswertfaktor,
%       PSHUFFLES = sortiert die Shuffles nach paarweise auftretenden
%       Nicht-Nullen aus,
%       SUMRG = Summe ueber P von r_{gamma},
%       MULTIPL = Vielfachheitenvektor,
%       X = Shuffles von a_1,...,a_k mit Vielfachheiten in
%       erster Spalte.

```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function [order,meanvalue,e,sumrg,multipl,pshuffles,X] = mops(A,N)
```

```
ii = length(find(A)); %Pruefe ob e(a_1,...,a_k) gerade ist
if mod(ii,2) == 0
    %Shuffles von a_1 und a_2 mit Vielfachheiten in erster Spalte
    X = shpr([1,A(1,1:N(1))],[1,A(2,1:N(2))]);
    %Shuffles von a_1,...,a_k
    F = length(A(1:end,1));
    for f = 3:F
        X = shpr(X,[1,A(f,1:N(f))]);
    end

    m = length(X(:,1));
    pshuffles = zeros(1,m);

    %Prozedur zur Bestimmung der Menge P_{gamma}
    for k = 1:m
        x = X(k,2:end);
        n = length(x);
        z = 0;
        for j = n:-1:2
            if x(j-1) == x(j) && x(j) > 0
                x(j-1:j) = 0;
            end
        end
        if x == zeros(1,n)
            z = 1;
        end
        pshuffles(k) = z;
    end

    %Berechnung von Summe ueber P_{gamma} von r_{gamma}
    multipl = pshuffles .* (X(:,1)');
    sumrg = sum(multipl);

    g = zeros(1,n);
    %Zur Berechnung von e muessen alle Nicht-Nullen auf 1
    %gesetzt und im Vektor g gespeichert werden
    g = 1 <= X(1,2:end);
    e = sum(g)/2; %Berechnung von e
    order = n-e; %Ordnung von a_1,...,a_k
    meanvalue = u/(prod(1:o)*(2^e)); %Erwartungswertfaktor
else
    disp('meanvalue = 0');
end

if nargout == 2
    order;
```

```

    meanvalue;
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Die Funktion SUMRG berechnet zu gegebenen Multiindizes (Vektoren)
%AL, BE mit Eintraegen 0, 1, 2, ... den Wert ERG der Summe der Vielfachheiten
%der Shuffles von AL mit BE bzgl. der Menge \mathcal{P}_{AL,BE}
%ohne Verwendung des Shuffle Produktes. Stattdessen werden die
%Mengen \mathcal{E}_{AL} und \mathcal{E}_{BE} berechnet.
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function erg = sumrg(al,be)

eal = length(find(al));
ebe = length(find(be));
e21 = (eal-ebe)/2;
erg = 2^(min(eal,ebe)) * hilfsfunktion(al,be,1,0,0,e21);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%HILFSFUNKTION berechnet zuerst die Mengen \mathcal{E}_{AL} und
%\mathcal{E}_{BE} und anschliessend mittels BERECHNEPRODUKT
%den Wert ERG.
function erg = hilfsfunktion(al,be,laenge,k1,k2,e21)
if (laenge >= length(al)+length(be))
    erg = 0;
    e12 = max(0,-e21);
    e21 = max(0,e21);
    alplus = al(find(al));
    beplus = be(find(be));
    if k1+e12 == k2+e21 && all(alplus == beplus)
        al;be;
        erg = berechneProdukt(al,be,min(k1,k2));
    end
else
    if (laenge>length(al))
        laenge = laenge-length(al);
        erg = hilfsfunktion(al,be,length(al)+laenge+1,k1,k2,e21);
        if (laenge<length(be)) && (be(laenge) == be(laenge+1)) && ...
            (be(laenge) > 0)
            erg = erg + hilfsfunktion(al,[be(1:laenge-1), 0, ...
                be(laenge+2:length(be))],length(al)+laenge+1,k1,k2+1,e21);
        end
    else
        erg = hilfsfunktion(al,be,laenge+1,k1,k2,e21);
        if (laenge<length(al)) && (al(laenge) == al(laenge+1)) && ...
            (al(laenge) > 0)
            erg = erg + hilfsfunktion([al(1:laenge-1), 0, ...
                al(laenge+2:length(al))],be,laenge+1,k1+1,k2,e21);
        end;
    end
end
end

```


Literaturverzeichnis

- [1] BEN AROUS, G. (1989) Flots et series de Taylor stochastiques, *Probab. Th. Rel. Fields*, **81**, 29–77.
- [2] BREUER, H.-P. & PETRUCCIONE, F. (2002) *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press.
- [3] BURRAGE, P.M. (1996) *Runge-Kutta Methods for Stochastic Differential Equations*, Thesis (PhD), University of Queensland, Australia.
- [4] BURRAGE, K. & BURRAGE, P.M. (1999) High strong order methods for non-commutative stochastic ordinary differential equation systems and the Magnus formula, *Physica D*, **133**, 34–48.
- [5] BURRAGE, K. & BURRAGE, P.M. (2000) Order conditions of stochastic Runge-Kutta methods by *B*-Series, *SIAM J. Numer. Anal.*, **38**, 1626–1646.
- [6] CASTELL, F. (1993) Asymptotic expansion of stochastic flows, *Prob. Theory Relat. Fields*, **96**, 225–239.
- [7] CASTELL, F. & GAINES, J.G. (1996) The ordinary differential equation approach to asymptotically efficient schemes for solution of stochastic differential equations, *Ann. de l'I.H.P. (B) Prob. et Statist.*, **32**, (2), 231–250.
- [8] CLARK, J.M.C. & CAMERON, R.J. (1980) *The maximum rate of convergence of discrete approximations for stochastic differential equations*, in Stochastic Differential Systems, B. Grigelionis, ed., no. 25 in Lecture Notes in Control and Information Sciences, Berlin: Springer-Verlag.
- [9] GAINES, J.G. (1994) The algebra of iterated stochastic integrals, *Stochastics and Stochastic Reports*, **49**, 169–179.
- [10] GAINES J.G. & LYONS, T.J. (1997) Variable step size control in the numerical solution of stochastic differential equations, *SIAM J. Appl. Math.* **57**, (5), 1455–1484.
- [11] HAIRER, E. & LUBICH, C. & WANNER, G. (2006) *Geometric Numerical Integration*, Springer Series in Computational Mathematics, 31, 2. ed., Berlin, Heidelberg, New York: Springer.
- [12] HIGHAM, D.J. (2001) An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations, *SIAM Review, Education Section*, **43**, 525–546.
- [13] HOCHBRUCK, M. & LUBICH, C. (2003) On Magnus integrators for time-dependent Schrödinger equations, *SIAM J. Num. Analysis*, **41**, 945–963.

- [14] ISERLES, A. & MUNTHER-KAAS, H.Z. & NØRSETT, S.P. & ZANNA, A. (2000) Lie-group methods, *Acta Numerica*, **9**, 215–365.
- [15] ITÔ, K. (1951) On stochastic differential equations, *Memoirs of the American Mathematical Society*, no. 4.
- [16] JAHNKE, T. & LUBICH, C. (2000) Error bounds for exponential operator splittings, *BIT*, **40**, 735–744.
- [17] KLOEDEN, P.E. & PLATEN, E. (1999) *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Springer-Verlag, 2.ed.
- [18] KUNITA, H. (1980) *On the representation of solutions of stochastic differential equations*, Séminaire de probabilités (Strasbourg), Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.
- [19] LI, C.W. & LIU, X.Q. (1997) Approximation of Multiple Stochastic Integrals and its application to Stochastic Differential Equations, *Nonlinear Analysis, Theory, Meth. & Appl.*, **30**, (2), 697–708.
- [20] LINDSTRØM, T. & ØKSENDAL, B. & UBØE, J. (1991) Stochastic differential equations involving positive noise, in *Stochastic Analysis*, Barlow, M.T., Bingham, N.H., eds., Cambridge Univ. Press, 261–303.
- [21] LORD, G. & MALHAM, S.J.A & WIESE, A. (to appear) Efficient strong integrators for linear stochastic systems.
- [22] MAGNUS, W. (1954) On the exponential solution of differential equations for a linear operator, *Comm. Pure Appl. Math.* **VII**, 649–673.
- [23] MALHAM, S.J.A. & WIESE, A. (to appear) Stochastic Lie group integrators.
- [24] MARUYAMA, G. (1955) Continuous Markov processes and stochastic equations, *Rend. Circ. Mat. Palermo*, **4**, 48–90.
- [25] MELANÇON, G. & REUTENAUER, C. (1989) Lyndon words, free algebras and shuffles, *Canad. J. Math.*, **41**, 577–591.
- [26] MILSTEIN, G.N. (1974) Approximate integration of stochastic differential equations, *Theory Probab. Appl.*, **19**, 557–562.
- [27] MILSTEIN, G.N. (1995) *Numerical Integration of Stochastic Differential Equations*, Mathematics and its Application, Dordrecht, Boston, London: Kluwer Academic Publishers.
- [28] MILSTEIN, G.N. & TRETYAKOV, M.V. (2004) *Stochastic Numerics for Mathematical Physics*, Scientific Computing, Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.
- [29] MISAWA, T. (2001) A Lie algebraic approach to numerical integration of stochastic differential equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, **23**, (3), 866–890.
- [30] MORA, C.M. (2005) Numerical solution of conservative finite dimensional stochastic Schrödinger equations, *The Ann. Appl. Prob.*, **15**, (3), 2144–2171.
- [31] MORA, C.M. (2005) Weak exponential schemes for stochastic differential equations with additive noise, *IMA J. Num. Anal.*, **25**, 486–506.

- [32] ØKSENDAL, B. (1995) *Stochastic Differential Equations, An Introduction with Applications*, 4. ed., Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag.
- [33] RADFORD, D.E. (1979) A natural ring basis for the shuffle algebra and an application to group schemes, *J. Algebra*, **85**, 432–453.
- [34] REUTENAUER, C. (1993) *Free Lie Algebras*, London Math. Soc. Monographs, Oxford University Press.
- [35] SUSSMAN, H.J. (1988) Product expansions of exponential Lie series and the discretization of stochastic differential equations, *The IMA vol. in math. and its appl.*, **10**, 563–582.
- [36] STRATONOVICH, R.L. (1966) A new representation for stochastic integrals and equations, *SIAM J. Control*, **4**, 362–371.
- [37] THALHAMMER, M. (to appear in SIAM J. Numer. Anal.) High-order exponential operator splitting methods for time-dependent Schrödinger equations.
- [38] UBØE, J. (1987) Conformal Martingales and analytic functions, *Math. Scand.*, **60**, 292–309.
- [39] YOSHIDA, H. (1990) Construction of higher order symplectic integrators, *Physics Let. A*, **150**, (5,6,7), 262–268.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Prof. Dr. Christian Lubich für eine hervorragende Betreuung und seine große Geduld bedanken. Außerdem habe ich sehr von den Diskussionen und der Zusammenarbeit mit Ludwig Gauckler profitiert, der die wesentlichen Beiträge zur Entstehung der Matlab Programme im Anhang A und zum Beweis des Lemmas 3.4 beigesteuert hat. Mein besonderer Dank gilt den Mitarbeitern Dr. David Cohen, Dr. Katina Lorenz und Dr. Vasile Gradinaru, die mich in schweren Zeiten sehr unterstützt und mir Kraft gegeben haben. Auch ohne die finanzielle und initiale fachliche Unterstützung des SFB 382 (C8) hätte diese Arbeit nicht entstehen können. Aber mein liebster Dank gilt meiner Familie und Freundin Gabriele.

Lebenslauf

- 20.01.1977 geboren in Göppingen
- 1983–1987 Grundschule Dürnau
- 1987–1993 Schiller-Realschule Göppingen
- 1993–1996 technisches Gymnasium Göppingen
- 02.07.1996 Abitur
- 1996–1997 Zivildienst beim DRK Göppingen
- 1997–2003 Studium der Mathematik an der
Eberhard-Karls-Universität in Tübingen
- 13.08.2003 Diplomprüfung Mathematik
- seit 01.01.2004 Doktorand und wissenschaftlicher Angestellter
an der Universität Tübingen