UNIVERSITÄT DORTMUND

Untersuchungen zum phänomenologischen Ansatz der Dielektrizitätsfunktion polarer amorpher Systeme

oder

Die Regularisierung eines exponentiell schlecht gestellten Problems

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung Physik
der Universität Dortmund

vorgelegt von
Magnus Frank Rosenberg

Juni 2001

Tag der mündliche Prüfung	:	20. Juli 2001
Vorsitzender und Prodekan	:	Prof. Dr. E. Reya
1. Berichterstatter	:	Prof. Dr. H. Keiter
2. Berichterstatter	:	Prof. Dr. W. Weber
Vertreter der promovierten wissenschaftlichen Mitarbeiter	:	Dr. M. Fiebig

Für Horst und Waltraud

Besser wäre es, wenn der Mensch nicht geboren werde, aber wenn er schon geboren ist, soll er sein Gewissen erforschen, nach dem Sinn seines Tuns fragen und in sich selbst den Weg suchen, den er zu gehen hat.
(Der Talmud)

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

1.1 Gläser, amorphe Systeme und schlecht gestellte Probleme 1

1.2 Zur Historie dieser Arbeit 4

1.3 Zur Gliederung der Arbeit 5

2 Die Integralgleichung der Dielektrizitätsfunktion **7**

2.1 Allgemeine Eigenschaften von ε^+ 7

2.2 Die phänomenologische Dielektrizitätsfuntion 9

2.3 Eine Plausibilitätsbetrachtung zur Integralgleichung 10

2.4 Zu den analytischen Lösungen der Integralgleichung 12

2.4.1 Vorbemerkung 12

2.4.2 Die Lösung der Integralgleichung als inverse Mellin-Transformation 12

2.4.3 Real- und Imaginärteil der Integralgleichung 16

2.4.4 Eine weitere analytische Lösung der Integralgleichung 20

2.4.5 Der Zusammenhang zwischen den analytischen Lösungen 21

2.5 Eigenschaften der Integralgleichung 23

2.5.1 Erste Zusammenfassung der Eigenschaften 28

3 Modelle **31**

3.1 Das Drudemodell 31

3.2 Ein funktionentheoretisches Modell 32

3.3 Das Cole-Davidson Modell 33

3.4 Das Havriliak-Negami Modell 36

3.5 Ein verallgemeinertes Modell 42

3.6 Das asymptotische Verhalten der Modelldichten 45

4 Inverse und schlecht gestellte Probleme **47**

4.1 Konzepte, Begriffe und Definitionen 47

4.1.1 Einige Beispiele schlecht gestellter Probleme 50
4.1.1.1 Fredholmsche Integralgleichung erster Art 50
4.1.1.2 Die analytischen Fortsetzung einer Funktion 52
4.1.1.3 Verarbeitungssysteme, optimale Prozeßkontrolle 52
4.2 Stabilisierung schlecht gestellter Probleme 52
4.2.1 Vorbetrachtungen und Vorbemerkungen 52
4.2.2 Gutgestelltheit im Sinne von TIKHONOV und die Selektionsmethode 54
4.2.3 Verallgemeinerte Inverse 55
4.2.4 Die Regularisierung 59
4.2.5 Stabilisierung durch Änderung der Topologie 62
4.3 Klassifizierung schlecht gestellter Probleme 63

5 Regularisierungsverfahren 67
5.1 Regularisierung kompakter Operatoren 67
5.2 Die Tikhonov-Phillips Regularisierung 69
5.3 Die Regularisierung von Faltungsgleichungen 71
5.3.1 Die verallgemeinerte Inverse bei Faltungsgleichungen 72
5.3.2 Das genuin auf stabilisierenden Funktionen basierende Regularisierungsverfahren . 73
5.3.3 Eigenschaften des Regularisierungsverfahrens I 77
5.4 Lineare Iterationsverfahren 81

6 Stabilisierende Funktionen I 85
6.1 Filter der Fourier-Transformation 86
6.2 Übertragbarkeit der Ergebnisse 89
6.2.1 Der ideale Tiefpaß 90
6.2.2 Das Filter der Tikhonov-Phillips Regularisierung 92

7 Stabilisierende Funktionen II 97
7.1 Vorbetrachtungen und Postulate 97
7.1.1 Eigenschaften der Lösung 100
7.2 Filter der Fourier-Laplace- und Mellin-Transformation 101
7.2.1 Filter der Fourier-Transformation 106
7.2.2 Filter der Fourier-Laplace Transformation 112
7.2.3 Filter der Mellin-Transformation 121
7.3 Bemerkungen und Eigenschaften des Verfahrens II 123

8 Zur Wahl des Regularisierungsparameters 127

8.1 Vorbetrachtungen und das „Trial and Error“-Verfahren . . . 127
8.2 Das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip . . . 129
8.2.1 Das (verallgemeinerte) Diskrepanz-Prinzip . . . 129
8.2.2 Erste Modifikation des Diskrepanz-Prinzips . . . 132
8.2.3 Zweite Modifikation des Diskrepanz-Prinzips . . . 137
8.2.4 Kritik an den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien . . . 141
8.2.5 Der Zusammenhang zwischen den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien und den Regularisierungsfehler . . . 142
8.3 Ein Konsistenzkriterium . . . 145

9 Zur konkreten Regularisierung 149
9.1 Vorbetrachtungen und Eigenschaften . . . 149
9.2 Filter der Integralgleichung . . . 152
9.2.1 Gaußfilter . . . 153
9.2.2 „Multifilter“ oder die regularisierende Folge . . . 155
9.3 Das asymptotische Verhalten der Filter . . . 157
9.3.1 Das asymptotische Verhalten von Δ_γ^r . . . 158
9.3.2 Das asymptotische Verhalten von Δ_γ^v . . . 167
9.3.3 Zusammenfassung und Resumee zum asymptotischen Verhalten . . . 173
9.4 Die regularisierenden Kerne . . . 174
9.5 Die Wahl des Regularisierungsparameters . . . 179
9.5.1 Das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip . . . 179
9.5.1.1 Die Modifikationen des Diskrepanz-Prinzips . . . 181
9.5.2 Das Konsistenzkriterium . . . 187
9.5.2.1 Zusammenfassung der Untersuchungen zum Konsistenzkriterium . . . 213

10 Zur Numerik und deren Ergebnisse 221
10.1 Zusammenfassung oder Die Ausgangsgleichungen . . . 222
10.2 Vorbetrachtungen zur Numerik . . . 223
10.3 Der numerische Einfluß des Datenfehlers . . . 229
10.4 Die Regularisierung kontinuierlicher Daten . . . 232
10.4.1 Das Drudemodell . . . 232
10.4.2 Das Cole-Davidson Modell . . . 249
10.4.3 Das Cole-Cole Modell . . . 268
10.4.4 Fazit der Numerik kontinuierlicher Daten . . . 281
10.5 Die Regularisierung diskreter Daten . . . 284

10.5.1 Das Drudemodell . . . 285
10.5.2 Das Cole-Davidson Modell . . . 298
10.5.3 Fazit der Numerik diskreter Daten . . . 306
10.6 Der Vergleich verschiedener Regularisierungsverfahren . . . 307

11 Resumee **331**
11.1 Zusammenfassung der Ergebnisse . . . 331
11.2 Kritische Schlußbemerkungen . . . 335

A Mellin-Barnes Integrale und die Fox'sche H-Funktion **339**
A.1 Definition . . . 339
A.2 Existenz, Eigenschaften und Darstellung der H-Funktion . . . 340
A.3 Zum Konvergenzverhalten und zur Asymptotik der H-Funktion . . . 341
A.4 Einige Spezialfälle der H-Funktion . . . 343

B Funktionalanalysis und Distributionen **345**
B.1 Grundbegriffe . . . 345
B.1.1 Integrale . . . 345
B.1.2 Funktionenklassen . . . 345
B.1.3 Finite Funktionen, Träger einer Funktion . . . 346
B.1.4 Vektorräume . . . 346
B.1.5 Lineare Funktionale (Linearformen) und lineare Operatoren . . . 347
B.2 Grundfunktionenräume . . . 348
B.2.1 Der Grundraum $\mathcal{D}$ . . . 349
B.2.1.1 Beispiel einer Grundfunktion . . . 349
B.2.1.2 Mittelwert von Funktionen, Generierung von Grundfunktionen auf $\mathcal{D}$ . . . 349
B.2.1.3 Konvergenzbegriff in $\mathcal{D}$ . . . 350
B.2.2 Der Grundraum $\mathcal{S}$ . . . 352
B.2.2.1 Beispiel einer Grundfunktion in $\mathcal{S}$ . . . 352
B.2.2.2 Konvergenzbegriff in $\mathcal{S}$ . . . 352
B.2.2.3 Zwei stetige Abbildungen . . . 353
B.2.2.4 Normen in $\mathcal{S}$ . . . 353
B.2.3 Der Grundraum $\mathcal{E}$ . . . 354
B.3 Distributionen . . . 354
B.3.1 Der Distributionen-Raum $\mathcal{D}'$ . . . 354
B.3.1.1 Addition und Multiplikation . . . 356

B.3.1.2 Konvergenzbegriff . . . 357
B.3.1.3 Abschätzung von Distributionen, Maximumsnorm in $\mathcal{C}_0^k$ . . . 358
B.3.1.4 Distributionen von endlicher Ordnung . . . 358
B.3.1.5 Differentiation oder die Ableitung als lineare und stetige Operation . . . 359
B.3.2 Der Distributionen-Raum $\mathcal{S}'$ . . . 360
B.4 Faltung, Approximation und Fourier-Transformation . . . 362
B.4.1 Allgemeines zur Faltung . . . 362
B.4.2 Faltung mit Grundfunktionen . . . 363
B.4.3 Approximationssatz für Distributionen oder die Regularisierung . . . 364
B.4.4 Faltung und Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ und $\mathcal{S}'$ . . . 366
B.4.4.1 Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ . . . 366
B.4.4.2 Fourier-Transformation in $\mathcal{S}'$ . . . 366
B.4.4.3 Fourier-Transformation in $\mathcal{D}$ . . . 368
B.4.4.4 Fourier-Transformation in $\mathcal{E}'$ . . . 369
B.4.4.5 Der Faltungssatz für Distributionen . . . 369

C Die Kramers-Kronig Relation im Mellin-Raum 371

D Schranken der integrierten Dichtefunktion 377

E Zum Grad der Schlechtgestelltheit 381

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Von Gläsern, amorphen Systemen und schlecht gestellten Problemen

Das Studium amorpher[1] Systeme hat in den letzten Jahrzehnten in der Physik der kondensierten Materie an Bedeutung und Interesse gewonnen. Traditionell wurde bisher mit dem Ausdruck *Festkörperphysik* die Physik der kristallinen Substanzen verbunden. Die Begriffe „Festkörper“ und „Kristall“ waren so Synonyme füreinander geworden. Ein Grund für die hauptsächliche und schwerpunktmäßige Beschäftigung der „traditionellen“ Festkörperphysik mit kristallinen Substanzen war die Möglichkeit (und die Notwendigkeit), sich bei diesen Substanzen deren Gitterstruktur, also deren Nah- und Fernordnung, mit anderen Worten deren Periodizität, zu nutze zu machen. Und so stehen zu deren Untersuchung mathematische Hilfsmittel und Konzepte wie Bloch-Zustände, reziprokes Gitter, Brillouin-Zone und Wigner-Seitz Zelle, die Gruppentheorie usw. zur Verfügung, die bei der Untersuchung amorpher Systeme offensichtlich nicht oder ohne großen Nutzen angewandt werden können [Ell83].

Es gibt nun einige Gründe für das Interesse an der Untersuchung amorpher Substanzen. Zum einen sind es materialwissenschaftliche Aspekte; eine Vielzahl unterschiedlichster Substanzen kann in amorphen Modifikationen vorkommen. Tatsächlich scheint es so zu sein, daß, jedenfalls prinzipiell, alle Substanzen in einem amorphen Zustand gebracht werden können. Dieses hat u.a. die Zunahme der technologischen Bedeutung amorpher Substanzen zur Konsequenz. So werden jene beispielsweise bereits in ultratransparenten optischen Fasern in der Telekommunikation eingesetzt, und amorphe Halbleiter werden bei der Konstruktion von Solarzellen verwendet.

Neben den materialwissenschaftlichen Aspekten und der damit direkt verbundenen technologischen und somit auch kommerziellen Interessen, sollten weitere, wenn nicht sogar die wichtigsten, Gründe für die Beschäftigung mit amorphen Substanzen für einen Naturwissenschaftler die Fragen nach den grundlegenden Eigenschaften, für einen Physiker also nach der grundlegenden Physik, den fundamentalen Prozessen und Mechanismen in den amorpher Systemen, oder kurz die Neugier[2] des Wissenschaftlers, sein.

So ist jetzt ein Schwerpunkt der Forschung, nähere Aussagen über die Bildungsmechanismen amorpher Substanzen, also über die Vorgänge bei dem sogenannten *Glasübergang* und über seiner Natur[3] treffen zu können. Ein weiterer Schwerpunkt, dessen Bedeutung für die Frage der technologischen Anwendung unmittelbar einsichtig sein dürfte, ist die Zeitabhängigkeit von Transportphänomenen und Relaxationsprozessen,

[1] Der Begriff *amorph* wir von uns in dieser Arbeit in seiner Bedeutung als Sammelbegriff aller *ungeordneter* Systeme benutzt.

[2] Gerade bezüglich der Grundlagenforschung sollte man nicht vergessen, daß jene oftmals uneigennützig begann und in einer Breiten technologischen Anwendung endete.

[3] Gemeint ist damit, inwiefern der Glasübergang in die bisherige Theorie der Phasenübergänge eingeordnet werden kann.

wobei natürlich das prinzipielle, letztliche Ziel ist, alle Vorgänge, insbesondere auch die Bewegungsprozesse in den amorphen Systemen, auf atomarer Basis und somit auf quantenmechanischer Ebene begreifen zu können.

Den Experimentalphysiker stehen, um diese Fragestellungen untersuchen zu können, mehrere spektroskopische Meßmethoden zur Verfügung, die jeweils eine entsprechende räumliche und zeitliche Auflösung bieten[4]. Zu den bedeutesten und wichtigsten Methoden, die wir nur stichpunktartig erwähnen wollen, zählen die Kernspinresonanz (NMR), die Elektronenspinresonanz (ESR), die elastische, inelastische und besonders die quasielastische Neutronenstreung, und weitere nukleare spektroskopische Methoden wie die Mößbauerspektroskopie (MS), die gestörte γ-γ-Winkel-Korrelation (PAC), die Myonenspinrotation (μSR) und die Kernrelaxationsmessung an β-aktiven Kernen (β-NMR). Für Details jener Methoden wollen wir auf die umfangreiche Literatur verweisen, da eine weitere Darstellung den bereits beträchtlichen Rahmen dieser Arbeit sprengen würde.

Aus der Vielfältigkeit der angewandten Methoden können wir bereits auf die ebensolche Vielfältigkeit der in amorphen Systemen beobachtbaren physikalischen Phänomene schließen. Aus den gleichen Grund wie eben, wollen wir nicht auf jene vielfältigen Phänomene und den stellenweise charakteristischen Verhalten bestimmter physikalischer Größen detailiert eingehen, sondern für eine Einführung in die Physik amorpher Systeme auf die Bücher von ELLIOT und ZALLEN verweisen [Ell83, Zal83], die bereits einen recht umfassenden Überblick geben. Einzig den in dieser Arbeit untersuchte Ansatz zur Beschreibung der beobachteten dielektrischen Phänomene wollen wir näher vorstellen.

In dieser Arbeit werden wir uns jetzt konkret mit der Dielektrizitätsfunktion eines amorphen Systems beschäftigen, genauer mit einer bestimmten Darstellung dieser. Die Dielektrizitätsfunktion ist übrigens eine der physikalischen Größen in amorphen Substanzen, die mit besonderen Interesse untersucht wird, da jene hier, verglichen mit kristallinen Substanzen, ein charakteristisches „anomales“ Verhalten[5] aufweist. Die Struktur der Dielektrizitätsfunktion eines amorphen Systems wird nun analog zu dem kristallinen Fall durch Relaxationsprozesse bestimmt, die jetzt jedoch auf unterschiedlichen Zeitskalen ablaufen und, experimentell und phänomenologisch interpretiert, unterschiedliche (thermale) Aktivierungsenergien aufweisen.

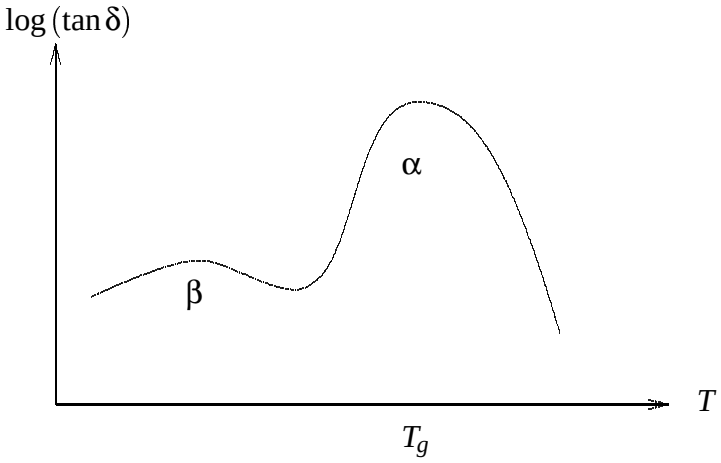

Abbildung 1.1: Relaxation in Gläsern

Im Bild 1.1 sind schematisch die sogenannten (primären) α- und die (sekundären) β-Relaxationen, die typischerweise in einigen polaren amorphen Systemen beobachtet[6] werden, insbesondere in polaren Gläsern[7],

[4] siehe beispielsweise [Bec88, Ell83, Zal83]

[5] Das „anomale Verhalten“ amorpher Substanzen ist natürlich immer auf das entsprechende kristalliner bezogen.

[6] siehe beispielsweise [Bec88, Ell83, Zal83, CC41, DC51]

[7] Als *Glas* wird zumeist die aus einer unterkühlten Flüssigkeit entstehende amorphe Substanz bezeichnet. In dieser Arbeit werden

illustriert. Hier ist $\tan\delta$, mit $\delta = \varepsilon'' / \varepsilon'$, wobei ε' der Real- und ε'' der Imaginärteil der Dielektrizitätsfunktion ε^+ ist, als Funktion der Temperatur T bei konstanter Frequenz ω aufgetragen. Die Temperatur T_g wird *Glastemperatur* oder *Glasübergangstemperatur* genannt[8]. Um diese verschiedenen Relaxationsprozesse eines amorphen Systems jetzt zu beschreiben, setzt man *phänomenologisch*, im erkenntnistheoretischen Sinne eigentlich *heuristisch*, eine *Verteilungsfunktion p von Relaxationszeiten* τ an, wobei jedes τ für sich genommen eine exponentielle Relaxation charakterisieren soll. Dieses führt auf die Darstellung (2.13) auf Seite 9 der Dielektrizitätsfunktion, die mathematisch eine *Fredholmschen Integralgleichung erster Art* ist, wobei die Verteilungsfunktion die unbekannte und interessierende Funktion ist.

Seit Formulierung[9] jenes phänomenologischen Ansatzes sind einige Untersuchungen gemacht worden, um auf der Basis der aus Meßwerten vorliegenden Funktion ε^+ die gesuchte Dichte p zu bestimmen. Dabei beschränkte man sich zumeist auf die Behandlung der Integralgleichung des Realteils, Gleichung (2.17) auf Seite 10, oder der des Imaginärteils, Gleichung (2.18) auf Seite 10, der komplexwertigen Integralgleichung (2.13). Der hauptsächliche Grund für diese Beschränkung war, daß die angewandten numerischen Algorithmen nur für *reellwertige Variablen* und *Funktionen* gelten, die so nicht auf die komplexwertige angewandt werden können. Der nächste Grund, nur die Integralgleichung des Imaginärteils zu betrachten, ist, daß diese mit Hilfe der Fourier-Transformation formal gelöst werden kann; dieses werden wir im Verlauf des Kapitels 2 detailierter darlegen. Ein Nachteil einiger dieser Ansätze ist übrigens, was nicht unerwähnt bleiben soll, daß jene numerisch genuin negative Werte für die Verteilungsfunktion p als Lösung erhalten können.

Die fundamentale Problematik bei der auf Meßwerten basierenden Lösung des phänomenologischen Ansatzes ist aber, daß Fredholmschen Integralgleichungen prinzipiell zu den *schlecht gestellten Problemen* gehören, was hier zur drastischen Konsequenz hat, daß bereits kleine Abweichungen in der Dielektrizitätsfunktion zu unkontrollierbaren großen Abweichungen in der Lösung führen. Es sind jetzt die Anstrengungen zu verstehen, die unternommen worden sind - und noch immer unternommen werden - um eine auf fehlerbehafteten Meßwerten basierende Lösung zu erhalten. Die Theorie der schlecht gestellten Probleme lehrt uns aber jetzt, daß wir bei fehlerbehafteten Dielektrizitätsfunktionen nur noch eine kontrollierte Approximation der theoretischen Lösung, die wir als Lösung bei der Kenntnis der exakten, fehlerfreien Funktion erhalten würden, erhalten können, wobei sich der Begriff „kontrollierte“ sowohl auf die Stabilität der Approximierten bezüglich der fehlerbehafteten Vorgegebenen, der Dielektrizitätsfunktion, bezieht, als auch auf die Konvergenz der Approximierten gegen die Theoretische, wenn die Fehlerbehaftete gegen die Theoretische, Exakte konvergiert. Mit anderen Worten bildet die Approximation bei sinkendem Meßfehler die theoretisch zugrundeliegende Dicht immer besser nach.

Die **Problemstellungen dieser Arbeit** sind jetzt also konkret formulierbar: Die Ziele sind die *Untersuchungen der mathematischen Eigenschaften* des als Fredholmsche Integralgleichung formulierten komplexwertigen phänomenologischen Ansatzes, was äquivalent mit den Untersuchungen der mathematischen Eigenschaften der Lösung ist, aus der die Beantwortung physikalischer Fragestellungen folgt, und die *Entwicklung oder Adaption* eines Verfahrens, das im Rahmen der Theorie der schlechtgestellten Probleme in dessen allgemeinster Form das sogenannten *Regularisierungsverfahren* ist, *zur Bestimmung approximativer Lösungen* auf der Basis von gemessenen Dielektrizitätsfunktionen. Das letztere schließt natürlich auch die fundamentalen Fragestellungen ein, die bei der Behandlung schlecht gestellter Probleme, der sogenannten *Regularisierung*, selber zu beantworten sind. Diese beiden Ziele sind eng miteinander verwoben, beinflussen doch die mathematischen Eigenschaften die Problemstellung und Eigenschaften der Regularisierung, und folgen aus der Schlechtgestelltheit eines Problems sofort einige mathematische Eigenschaften. Und so zeigt es sich, daß ohne eine genaue Untersuchung der Eigenschaften des zu behandelnden Problems die Fragestellungen der Regularisierung nur unzureichend beantwortet werden können, wozu z.B. die Frage nach der prinzipiell erreichbaren Qualität der Approximierten gehört.

Die Arbeit soll somit zur Klärung der Fragestellung bezüglich der Dichtefunktion p im speziellen und bezüglich der Regularisierung schlechtgestellter Probleme im allgemeinen beitragen. Und so ist auch die

---

wir jedoch die Begriffe „Glas“, „amorphe Substanz„ und sogar „ungeordnetes System“ als Synonyme benutzen, weil eine Unterscheidung dieser Begrifflichkeiten für das Thema dieser Arbeit nicht relevant ist.

[8] Es sei darauf hingewiesen, daß es *keine* eindeutige Definition der Glasübergangstemperatur T_g, auch nicht experimentell, gibt.

[9] siehe diesbezüglich [Bec88, DC51]

Behandlung dieses schlechtgestellten Problems ohne dessen Kontext der heuristischen Beschreibung dielektrischer Prozesse in amorphen Substanzen von Interesse, denn die Behandlung derartiger Probleme ist von einem großen allgemeinen Interesse: Schlecht gestellte Probleme sind Bestandteile einiger physikalischer Theorien, wie beispielsweise in der inversen Streutheorie, in der modernen Optik, in der Rheologie, in der Vielteilchentheorie und insbesondere in der Theorie der bildgebenden Verfahren. Damit wird sofort die praktische Relevanz der Behandlung schlechtgestellter Probleme auch jenseits der Physik deutlich, denn sämtliche modernen bildgebenden Verfahren der Medizin, also die Computertomographie, die Kernspintomographie und die zweidimensionale Bilder erzeugende Ultraschalltomographie, sind schlechtgestellte Probleme. Nun erheben wir nicht den Anspruch, mit der Behandlung des heuristischen Ansatzes gleich die Probleme der eben erwähnten mit „gelöst“ zu haben, doch können die allgemeinen Ergebnisse sicherlich übertragen und, so jene die praktische Anwendung erfassen, auch genutzt werden. Desweiteren geben die Ergebnisse Auskunft über die schlecht gestellten Probleme, die mit dem hier betrachteten enger verwandt sind, was insbesondere für die schlechtgestellten Probleme in der inversen Streutheorie und der Vielteilchentheorie gilt.

Wie wollen noch darauf hinweisen, daß der in dieser Arbeit konkret betrachtete phänomenologische Ansatz nicht nur im Kontext der Physik amorpher Systeme, sondern auch im Zusammenhang mit Problemen der Rheologie [Hon89] oder der Untersuchung viskoelastischer Eigenschaften von Materialien wie beispielsweise Polymeren [Fer70], wobei letzteres mit ersterem in einen gemeinsamen Kontext gebracht werden kann, angesetzt wird. Generell wird man auf den Ansatz (2.13) für eine beobachtbare Größe in der Frequenzdomäne geführt, wenn die zu jener in der Zeitdomäne korrespondierenden Größe durch eine Mittelung über exponentielle Zerfälle dargestellt wird. Es ist jetzt natürlich diskussionswürdig, inwiefern diese Darstellung überhaupt sinnvoll ist, sowohl von physikalischer als auch von heuristischer und erkenntnistheoretischer Seite her. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden auch diesbezüglich einen Diskussionsbeitrag liefern.

1.2 Zur Historie dieser Arbeit

Bevor wir die Gliederung dieser Arbeit vorstellen und mit Untersuchungen beginnen werden, wollen wir noch kurz auf die Historie[10] dieser Arbeit zu sprechen kommen, genauer wie wir Interesse an der Behandlung des phänomenologischen Ansatzes gewonnen haben.

Im Jahr 1994/1995 hat C. Z. TAN am Lehrstuhl für experimentelle Physik III der Universität Dortmund NMR-Untersuchungen an verschiedenen polaren Gläsern durchgeführt. Im Rahmen des zu dieser Zeit existierenden Graduiertenkollegs „Festkörperspektroskopie“ hat er den Theoretiker M. URBANEK, der am Lehrstuhl für Theoretische Physik I arbeitete, kennengelernt. Nach einem Gespräch habe beide entschlossen, die Möglichkeiten der Auswertung der phänomenologischen Integralgleichung zu untersuchen, und so haben URBANEK und TAN eine bisher noch nicht verwendete Methode auf die Integralgleichung angewandt, die Berechnung rigoroser oberer und unterer Schranken für die integrierte Dichtefunktion [UT95]. Auf diese Methode werden wir im Laufe der Arbeit noch zu sprechen kommen. Ein wesentlicher Vorteil dieser Methode ist übrigens, daß die Normierung und insbesondere die Nichtnegativität explizit berücksichtigt wird. Nach URBANEK Weggang verblieb sowohl das Programm zur Berechnung der Schranken am Lehrstuhl TI als auch die Frage, ob die Integralgleichung nicht analytisch lösbar sein würde, denn in der Literatur war diesbezüglich nichts zu finden, ja einige Autoren hatten sogar behauptet, daß eine (analytische) Lösung aufgrund der Schlechtgestelltheit nicht möglich sei. Und so ist es uns bereits in [Ros95] gelungen, diese Frage positiv zu beantworten und die Lösung durch die komplexe Umkehrformel der Mellin-Transformation darzustellen. Euphorie über dieses Ergebnis verspürend, wollten wir nun diese Lösung benutzen, um die gemessenen Dielektrizitätsfunktionen auszuwerten, wobei uns natürlich sofort klar war, daß dieses aufgrund der Schlechtgestelltheit direkt respektive ohne Modifikationen nicht möglich war. So war das Ziel geboren, auf diese analytische Lösung basierende Regularisierungsverfahren zu entwickeln respektive schon bekannte unter jener Prämisse zu adaptieren.

[10] Auch wenn die Historie des Autors in diese Arbeit mit eingeflossen ist, ist jene nicht Bestandteil dieser Betrachtungen.

1.3 Zur Gliederung der Arbeit

Ein Ziel der Präsentation in dieser Arbeit war es sie so zu gestalten, daß ein sofortiger Rückgriff auf die Literatur für ein erstes Verständnis nicht notwendig ist. Entsprechend wurden die einzelnen Kapitel so gestaltet, daß die wichtigsten Ergebnisse aus den vorhergegangenen wiederholt wurden. So entstand zwar stellenweise ein gewisser Grad an Redundanz, doch sollte es nun möglich sein, die Kapitel nicht zwingend in ihrer chronologischen Abfolge lesen und verstehen zu können.

Die Arbeit ist nun wie folgt gegliedert: Nach dieser Einleitung sollen im Kapitel 2 nach einer kurzen Wiederholung der wichtigsten, und für diese Arbeit relevanten, Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion die Eigenschaften des phänomenologischen Ansatzes und dessen Lösung untersucht werden. Dabei werden wir zeigen, daß der Grad der Schlechtgestelltheit der Phänomenologischen, der scheinbar in der Literatur noch nicht untersucht worden ist, exponentiell ist, im Gegensatz beispielsweise zu den mäßig schlechtgestellten der bildgebenden Verfahren. Anschließend werden wir im Kapitel 3 bekannte Modelldichten auf der Basis des vorangegangenen Kapitels reproduzieren und die Lösung des *Havriliak-Negami Modells*, die bisher nicht bekannt war, präsentieren. Im Rahmen dieses Kapitels werden wir, durch die dort erhaltenen Ergebnisse motiviert, eine „verallgemeinerte Modellösung“ der Phänomenologischen präsentieren.

Nach diesen Betrachtungen werden wir in den Kapiteln 4 und 5 die allgemeinen Konzepte und Begriffe der Theorie schlecht gestellter Probleme und die Konzepte der wichtigsten Regularisierungsverfahren vorstellen, um dann in den Kapiteln 6 und 7 die Möglichkeiten und Grenzen der Adaption der vorgestellten Konzepte auf und die Entwicklung eines Regularisierungsverfahrens für unsere Problemstellung vorzustellen. Im Kapitel 8 werden wir neue theoretische Beiträge zur Wahl[11] des *Regularisierungsparameters*, von dem jegliche Regularisierungsverfahren per definitionem abhängen werden, vorstellen. Da jene Wahl bezüglich unserer Problemstellung, wie im Laufe der Arbeit deutlich werden wird, ein untergeordnetes Problem darstellt, werden wir die tatsächliche (numerische) Anwendung der dort vorgestellten Beiträge nur am Rande der Kapitel 9 und 10 behandeln, in denen wir die konkrete Regularisierung und deren numerische Ergebnisse präsentieren und diskutieren werden. Abgeschlossen wird die Arbeit mit dem Kapitel 11, in den die Ergebnisse zusammenfassend diskutieren werden.

Zusätzlich haben wir die uns wichtig zu erwähnen scheinenden, hier explizit angewandten mathematischen Theorien und deren Ergebnisse und weitere erwähnenswerte interessante Ergebnisse und Eigenschaften dieser Untersuchungen in den Anhängen A bis E aufgenommen.

[11] Neben der Frage nach der Wahl des Regularisierungsverfahrens, muß bei der Behandlung schlechtgestellter Probleme die Frage nach einer geeigneten Wahl des Regularisierungsparameters beantwortet werden. ARSENIN und TIKHONOV haben gezeigt, daß es prinzipiell beliebig viel Möglichkeiten zur Wahl gibt, was zur Konsequenz hat, daß jene Frage eine noch immer aktuelle ist.

Kapitel 2

Die Integralgleichung der Dielektrizitätsfunktion

In den folgenden Kapiteln sollen, nachdem kurz auf die allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion eingagen sein wird, der phänomenologische Ansatz zur Beschreibung der Dielektrizitätsfunktion einer amorphen Substanz vorgestellt und einige Betrachtungen zu dessen Plausibilität aufgestellt werden. Anschließend sollen deren analytische Lösungen und deren, gerade auch aus den analytischen Lösungen ablesbaren, wesentlichen Eigenschaften besprochen werden.

2.1 Allgemeine Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion

Die dielektrischen Eigenschaften von Isolatoren, die vermutlich (teilweise) bereits an Bernstein (Amber) im klassischen griechischen Altertum[1] entdeckt worden sind, markieren den Anfang der Elektrostatik. Nach der Entdeckung und dem Verständnis elektromagnetischer Wellen, zeigte sich die Notwendigkeit, die dielektrischen Eigenschaften der Materie durch die *Dielektrizitätsfunktion* ε^+ zu beschreiben. Es soll nun kurz, ehe wir uns dem phänomenologischen Ansatz der Dielektrizitätsfunktion eines amorphen Systems zuwenden, einige ihrer wesentlichen Eigenschaften wiedergegeben und in Erinnerung gebracht werden. Da diese in den Lehrbüchern ausführlich dargestellt werden, und die Eigenschaften der Funktion ε^+ hinlänglich gut bekannt sind, soll dies ohne Anspruch auf Vollständigkeit und ohne Beweise aller der hier aufgeführten Eigenschaften gemacht werden[2].

Unter der Voraussetzung, daß der funktionale Zusammenhang zwischen dem elektrischen Feld $\vec{E}$ und der durch das Feld induzierte Polarisation $\vec{P}$ linear ist, wird die *dielektrische Konstante* bzw. die *Dielektrizitätsfunktion* ε^+ durch

$$\vec{P}(\omega) = \varepsilon_0 (\varepsilon^+(\omega) - 1) \vec{E}(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) \vec{E}(\omega) \tag{2.1}$$

bzw. durch den (vorausgesetzten) linearen funktionalen Zusammenhang zwischen dielektrischer Verschiebung $\vec{D}$ und dem elektrischen Feld $\vec{E}$

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon^+(\omega) \vec{E}(\omega) \tag{2.2}$$

definiert. Die Größe ε_0 ist hier die Permeabilität des Vakuums.

[1] Dieses legen die Ausführungen zur Wissenschaft und deren Bedeutung in der hellinistischen Welt, insbesondere zur Physik, in beispielsweise [Wel62, Gig62] nahe, obwohl die Bezeichnung „dielektrische Eigenschaften“ dort natürlich nicht explizit erwähnt wird.

[2] Es sei deswegen auf allgemeine Lehrbücher der Elektrodynamik, wie beispielsweise [Jac75], und der Festkörperphysik, wie beispielsweise [AM76], verwiesen.

Eine der hervorstechensten Eigenschaft der Dielektrizitätsfunktion ε^+ ist, daß sie aufgrund der Kausalität in der oberen komplexen Halbebenen eine *analytische* Funktion ist[3].

Wichtige Eigenschaften des Real- und Imaginärteils sind:

- Der Realteil ε' ist eine *gerade* Funktion: $\varepsilon'(-\omega) = \varepsilon'(\omega)$.
- Der Imaginärteil ε'' ist eine *ungerade* Funktion: $\varepsilon''(-\omega) = -\varepsilon''(\omega)$.

Desweiteren gelten für deren Realteil ε' und Imaginärteil ε'' die *Kramers-Kronig Relationen* [AM76, Jac75, Roo69], also konkret[4]:

$$\begin{aligned}
\varepsilon'(\omega) - 1 &= \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon''(x)}{x-\omega}\,dx \\
&= \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\frac{\varepsilon''(x)}{x-\omega}\,dx + \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{0}\frac{\varepsilon''(x)}{x-\omega}\,dx \\
&= \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\frac{\varepsilon''(x)}{x-\omega}\,dx - \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\frac{\varepsilon''(x)}{-x-\omega}\,dx \\
&= \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\frac{x\varepsilon''(x)}{x^2-\omega^2}\,dx
\end{aligned} \tag{2.3}$$

für den Real- und

$$\begin{aligned}
\varepsilon''(\omega) &= -\frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon'(x)-1}{x-\omega}\,dx \\
&= -\frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\frac{\varepsilon'(x)-1}{x-\omega}\,dx - \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{0}\frac{\varepsilon'(x)-1}{x-\omega}\,dx \\
&= -\frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{0}^{\infty}\omega\,\frac{\varepsilon'(x)-1}{x^2-\omega^2}\,dx
\end{aligned} \tag{2.4}$$

für den Imaginärteil von ε^+.

Ferner kann gezeigt werden, daß der Ausdruck

$$\varepsilon(i\omega) - 1 = \frac{2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x\varepsilon''(x)}{x^2+\omega^2}\,dx \quad , \tag{2.5}$$

wobei $i\omega$ Werte auf der positiven Imaginärachse sind, eine reelle Größe ist. Dieses kann entweder durch das Einsetzen von $\omega \to i\omega$ in die Kramers-Kronig Relationen (2.3) (2.4) oder durch das Auswerten des Integrales

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x\varepsilon''(\omega)}{x^2+\omega^2}\,dx \quad , \tag{2.6}$$

einschließlich des unendlichen Halbkreises, bewiesen werden.

[3] siehe [Roo69, Jac75] und den Bemerkungen im Anhang C

[4] Mit V.P. sei in dieser Arbeit, so nicht anders angegeben, der *Chauchysche Hauptwert* (valor principalis) bezeichnet.

Die Größe $\varepsilon'(\omega) - 1$, die mit der Suszeptibilität $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ durch $\chi'(\omega) = \varepsilon'(\omega) - 1$ verknüpft ist, wird *dispersiver Anteil*, die Größe ε'', also der Imaginärteil von ε^+, wird *absorptiver Anteil* oder auch *dielektrischer Verlust* genannt [Jac75, Roo69, Ell83].

Es sei noch die nicht ganz unwichtige Eigenschaften erwähnt, daß für $\omega \to 0$ und $\omega \to \infty$ sowohl ε' als auch ε'' konvergieren. Mit ε_0 und ε_∞ seien im folgenden die Null- und Hochfrequenzlimites der Dielektrizitätsfunktion bezeichnet:

$$\lim_{\omega\to 0} \varepsilon^+(\omega) = \varepsilon_0 \tag{2.7}$$

$$\lim_{\omega\to \infty} \varepsilon^+(\omega) = \varepsilon_\infty \quad . \tag{2.8}$$

Mit diesen und der (dimensionslosen) komplexen Funktion E^+ kann jede beliebige Dielektrizitätsfunktion durch

$$\varepsilon^+ = \varepsilon_\infty + (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) E^+(\omega) \quad , \tag{2.9}$$

also

$$E^+(\omega) = \frac{\varepsilon^+(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} \tag{2.10}$$

dargestellt werden, wobei, der Vollständigkeit halber, bezüglich E^+ offensichtlich die Limites

$$\lim_{\omega\to 0} E^+(\omega) = 1 \tag{2.11}$$

$$\lim_{\omega\to \infty} E^+(\omega) = 0 \tag{2.12}$$

gelten.

2.2 Die phänomenologische Dielektrizitätsfunktion amorpher Substanzen

Im Jahr 1900 schlug Drude seine berühmte Theorie der dielektrischen Festkörper vor, welche kurze Zeit später auf Metalle ausgeweitet worden ist [Dru00a, Dru00b]. Amorphe Substanzen respektive Gläser ihrerseits sind nun durch das Vorhandensein verschiedener Relaxationszeiten charakterisiert, die ihrerseits zu den verschiedensten Relaxationsprozessen korrespondieren können [Ell83, Zal83]. Dieses legt nun den auf dem allgemeinen Ausdruck (2.9) basierenden *phänomenologischen Ansatz* zur Verallgemeinerung der Drude-Lenz Theorie nahe, die Dielektrizitätsfunktion amorpher Substanzen, insbesondere *polarer Gläser*, durch eine *Verteilungsdichte p der Relaxationszeiten* τ durch die folgenden Intergralrelation darzustellen:

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, p(\tau)\, d\tau \quad . \tag{2.13}$$

Die Verteilungsichte p möge die üblichen, an Dichtefunktionen gestellten Vorausetzungen und Eigenschaften erfüllen, die da wären[5]:

1. Es gelte:
$$p(\tau) \geq 0 \quad \forall\, \tau \in \mathbb{R} \quad . \tag{2.14}$$
2. $p \in L^1_{LOC}$
3. $p(\tau) \in L^1(0, \infty)$

[5] Bezüglich den Eigenschaften einer Verteilungsdichte, auch Wahrscheinlichkeitsdichte genannt, sei beispielweise auf [Str63a] verwiesen.

Aus der ersten Bedingung folgt sofort, daß $|p(\tau)| = p(\tau)$ gilt, und aus den zwei folgenden Bedingungen folgt die Normierbarkeit von p, deren Norm, im Sinne einer Wahrscheinlichkeitsinterpretation, sinnvollerweise Eins betragen soll:

$$\int_0^\infty p(\tau)\, d\tau = 1 \quad . \tag{2.15}$$

Die Normierungsbedingung ist hier erfüllt, denn setzen wir in den phänomenologischen Ansatz (2.13) $\omega = 0$ und berücksichtigen noch (2.11) - letzteres erhalten wir auch unmittelbar durch die Einsetzung - so sehen wir sofort:

$$E^+(0) = 1 = \int_0^\infty p(\tau)\, d\tau \quad . \tag{2.16}$$

Weiter werden, wie man aus den Bedingungen schon ablesen kann, $p(\tau)$ und τ als reelle Größen vorausgesetzt.

Oftmals trifft man jedoch in Untersuchungen der Dielektrizitätsfunktion nicht die Gleichung (2.13) an, sondern diese in ihre Real- und Imaginärteile aufgespallten [Ell83], wobei offensichtlich $E^+ = E_1 + iE_2$ sei:

$$E_1(\omega) = \int_0^\infty p(\tau)\, \frac{1}{1+(\omega\tau)^2}\, d\tau \tag{2.17}$$

$$E_2(\omega) = \int_0^\infty p(\tau)\, \frac{\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\, d\tau \quad . \tag{2.18}$$

Alternativ wird auch manchmal die Gleichung des Realteils (2.17) in der zu der des Imaginärteils (2.18) analogen Form

$$E_1(\omega) - 1 = \tilde{E}_1(\omega) = -\int_0^\infty p(\tau)\, \frac{\omega^2\tau^2}{1+(\omega\tau)^2}\, d\tau \tag{2.19}$$

angegeben [Ell83, UT95]. Der Grund für die Zerlegung der Gleichung (2.13) in deren Real- und Imaginärteil ist hauptsächlich der, daß nur eine der beiden Gleichungen (2.17) oder (2.18) numerisch oder analytisch behandelt wird [CC41, DC51, Ell83, UT95].

2.3 Eine Plausibilitätsbetrachtung zur Integralgleichung

Nehmen wir an, die dielektrische Antwort des Systems auf das einwirkende elektrische Feld der Form $\vec{E} = \vec{E}_0\, e^{i\omega t}$ sei exponentiell, d.h. nach Abschalten des elektrischen Felds $\vec{E}$ zerfällt die durch dieses erzeugte Polarisation[6] $\vec{P}(t)$ nach den Zerfallsgesetz der Gestalt

$$\frac{d\vec{P}(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}\vec{P}(t) \quad , \tag{2.20}$$

woraus unmittelbar

$$\vec{P}(t) = \vec{P}_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad , \tag{2.21}$$

also ein exponentieller Zerfall, folgt.

[6] Die Polarisation kann z.B durch Ladungsübergang zwischen zwei Zuständen erzeugt werden.

Aus der Gleichung (2.1) folgt nun, nach Ausführung der Fourier-Laplace Transformation[7], für die, zu dem Polarisationszerfall (2.21) korrespondierende, Dielektrizitätsfunktion die bekannte Drudeform[8] [Jac75, Roo69]:

$$1 - \varepsilon^+(\omega) = \frac{1}{1 - i\omega\tau} \quad . \tag{2.23}$$

In amorphen Substanzen beobachtet man aber einen Zerfall der Polarisation $\vec{P}(t)$, der von der exponentiellen Form (2.21) stark abweicht[9]. Es wird nun gesagt, daß sich der beobachtete nicht-exponentielle Zerfall durch eine Mittelung über einzelne Bereiche des amorphen Systems darstellen läßt, die für sich genommen exponentiell zerfallen würden, bzw. daß der nicht-exponentielle Zerfall der beobachteten physikalischen Größe aus einer Superposition verschiedener Prozesse, die mit einer charakteristischen Zeit τ separat für sich exponentiell zerfallen, dargestellt werden kann. Beispielsweise wird im Fall eines amorphen Halbleiters oder Isolators argumentiert, die dielektrische Verluste werden durch das Hin- und Zurückhüpfen der Elektronen zwischen zwei lokalisierten Störstellen bewirkt, wobei letztere räumlich und energetisch zufällig verteilt sind [Ell83]. Oder im Fall eines polaren Glases wird die dielektrische Relaxation durch Diffusion der Ionen und durch Dipolumorientierungen (von Molekülgruppen) verursacht, wobei beide Prozesse aufgrund unterschiedlicher (thermaler) Aktivierungsenergien auf verschiedenen Zeitskalen ablaufen. Dieses führt unmittelbar auf das im vorangegangenen Kapitel (2.2) eingeführte Konzept der *Verteilungsfunktion* $p(\tau)$ *von Relaxationszeiten* (bzw. Korrelationszeiten). Der allgemeine Ansatz für die Dielektrizitätsfunktion ist somit:

$$1 - \varepsilon^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, p(\tau)\, d\tau \quad , \tag{2.24}$$

bzw. im Fall einer allgemeineren Normierung der Dielektrizitätsfunktion die Gleichung (2.13).

Das Konzept der Verteilungsfunktion von Relaxationszeiten bzw. von Korrelationszeiten wird gemäß den obigen Ausführungen selbstverständlich nicht nur im Fall der Dielektrizitätsfunktion angesetzt. Allgemein ist diese bei der Untersuchung amorpher, aber nicht nur amorpher, Substanzen eine oft angewandte Methode zur Beschreibung der physikalischen Prozesse des Systems. Der allgemeinste Fall einer *Korrelationsfunktion* $\mathfrak{K}(t)$ wird dementsprechend als

$$\mathfrak{K}(t; \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) = \int_0^\infty p(\tau; \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)\, \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) d\tau \quad , \tag{2.25}$$

wobei $\{\alpha_i\}$ ein Satz von n Parametern sei, die die Verteilungsfunktion charakterisieren, angesetzt[10].

Eine weitere vermeintlich unterstreichende Begründung für die Einführung einer Verteilungsfunktion $p(\tau)$ ist die, daß gesagt wird, von einem *formalen Standpunkt* aus könne man nicht den Fall einer Verteilungs-

[7] Als *Fourier-Laplace Transformation* wird die Integraltransformation der Form

$$\tilde{f}(y) = \int_{-\infty}^\infty f(x) e^{-ixy}\, dx \quad , \tag{2.22}$$

mit $x \in \mathbb{R}$ und $y \in \mathbb{C}$ bezeichnet, die mit der Variablensubstitution $s = iy$ mit der *zweiseitigen Laplace-Transformation* identisch ist. Bei $y \in \mathbb{R}$ ist jene offensichtlich mit der (herkömmlichen) Fourier-Transformation identisch, die somit immer implizit im Begriff „Fourier-Laplace Transformation“ enthalten sein möge, wobei wir aber explizit darauf hinweisen werden, wenn wir uns auf die „herkömmliche“ Fourier-Transformation mit den reellen Variablen beschränken wollen. In dieser Arbeit wollen wir deswegen, soweit nicht anders erwähnt, die Begriffe „Fourier-Laplace Transformation“ und „zweiseitige Laplace-Transformation“ im wesentlichen als Synonyme verwenden; siehe auch Anhang B.4.4.3.

[8] Wir haben hier $\lim_{\omega\to 0} \varepsilon^+(\omega) = 0$ und $\lim_{\omega\to\infty} \varepsilon^+(\omega) = 1$ gesetzt; man beachte dazu auch Gl. (2.10)

[9] Der nichtexponentielle Zerfall physikalischer Größen ist generell in amorphen Substanzen zu beobachten und gilt selbstverständlich nicht nur für die Polarisation. Ein weiteres wichtiges Beispiel eines intensiv untersuchten nicht-exponentiellen Zerfalls in amorphen Substanz ist die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion [Ell83, Zal83].

[10] In Kapitel 3.5 werden wir als Verallgemeinerung der bisher üblichen Modelle ein Modell aus der Statistik für p vorstellen, das man zu den allgemeinsten Modellen, wenn nicht sogar das allgemeinste, für Dichtefunktionen zählen muß.

dichte $p(\tau)$, bei der jedes τ für sich einen exponentiellen Zerfall charakterisiert, von den eines nicht-exponentiellen Zerfalls unterscheiden [Bec88, Ell83]. Nun ist aber gerade diese formale Begründung von den bisher genannten am größten anzweifel- und angreiffbar, da es gerade für eine formale, mathematische Betrachtung, neben den inhärenten Komplikationen, die der Ansatz über eine Dichtefunktion mit sich bringt und in folgendem noch näher diskutiert wird, von vornherein nicht gegeben ist, ob man tatsächlich sämtliche nicht-exponentiellen Zerfälle als eine Mittelung über exponentielle Zerfälle darstellen kann. Der Beweis dafür steht, unseres Wissens zumindest nach, noch aus. Es sei aber auch betohnt, daß trotz des letzten Kritikpunktes noch nichts über die Praktikabilität, und schon gar nicht über den heuristischen Nutzen des Ansatzes ausgesagt wird.

Trotz der obigen Plausibilitätsbetrachtungen und gerade in Hinblick auf mögliche Kritikpunkte, soll jedoch nicht vergessen und deutlich darauf hingewiesen werden, daß es sich bei der Integralgleichung der Dielektrizitätsfunktion (2.13) um einen *rein phänomenologischen*, oder sollte man nicht besser sagen, um einen *rein heuristischen*, Ansatz handelt.

2.4 Zu den analytischen Lösungen der Integralgleichung

2.4.1 Vorbemerkung

Bei der (phänomenologischen) Integralrelation (2.13)

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, p(\tau)\, d\tau$$

handelt es sich um eine *lineare* Integralgleichung, konkret um eine *Fredholmsche Integralgleichung erster Art*[11] Man kann bei manchen Autoren, die die Integralgleichung (2.13) behandeln, den Eindruck gewinnen, daß diese nicht analytisch lösbar sei. Wie wir aber bereits in [Ros95] und später in [KR98] gezeigt haben, ist dem jedoch nicht so. Weiter wollen wir uns im folgenden hauptsächlich mit der komplexwertigen Dielektrizitätsfunktion, und somit mit der Gleichung (2.13) beschäftigen, wohingegen ansonsten, wie bereits erwähnt, zumeist nur der Real- oder Imaginärteil, also die Gleichungen (2.17) und (2.18) betrachtet werden[12]. Der unbestreitbare Vorteil der Behandlung der „gesamten“ Gleichung (2.13) liegt in ihrer, aufgrund der Möglichkeit des Heranziehens der Funktionentheorie, besseren analytischen Handhabbarkeit.

2.4.2 Die Lösung der Integralgleichung als inverse Mellin-Transformation

Wie wir also bereits in [Ros95, KR98] gezeigt haben, ist es möglich, die Integralgleichung (2.13) formal unter Anwendung der *Mellin-Transformation* zu lösen, d.h. die Lösung als inverse Mellin-Transformation darzustellen. Im folgendem soll dieses nochmal kurz dargelegt werden.

Die generelle Struktur der Gleichung (2.13)

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, p(\tau)\, d\tau$$

können wir in der Form

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty k(\omega,\tau)\; p(\tau)\; d\tau = \int_0^\infty k(\omega\tau)\; p(\tau)\; d\tau \tag{2.26}$$

[11] Kurze Einführungen in die Theorie linearer Integralgleichungen finden sich beispielsweise in [CH68a, Smi88]; für die Theorie singulärer Integralgleichungen sein insbesondere noch auf [Mus65] hingewiesen.

[12] siehe dazu auch [Ell83, UT95] und die dortigen Referenzen

schreiben. Mit anderen Worten, der *Integralkern* $k(\omega,\tau)$ der Integralgleichung (2.13),

$$k(\omega,\tau) = \frac{1}{1-i\tau\omega} \quad , \tag{2.27}$$

hängt von dem Produkt der Variablen ω und τ ab: $k(\omega,\tau) = k(\omega\cdot\tau)$.

Integralgleichungen des Typuses

$$g(x) = \int_0^\infty k(xy)\ f(y)\ dy \quad , \tag{2.28}$$

wie wir sie hier vorliegen haben, können nun formal durch die Anwendung der *Mellin-Transformation* $\mathfrak{M}$ gelöst werden [Tit67].

Die *Mellin-Transformation* ist definiert durch [Doe71, Tit67]:

$$\tilde{f}(s) = \int_0^\infty x^{s-1}\ f(x)\ dx \equiv \mathfrak{M}\{f\} \quad , \tag{2.29}$$

wobei $s \in \mathbb{C}$ gilt. Sie hängt eng mit der *zweiseitigen Laplace-Transformation* $\mathfrak{L}_{II}$ zusammen. Durch die Variablensubstitution $x = e^{-t}$ erhält man unmittelbar[13]:

$$\tilde{f}(s) = \int_{-\infty}^\infty e^{-st}\ f(e^{-t})\ dt = \int_{-\infty}^\infty e^{-st}\ F(t)\ dt \equiv \mathfrak{L}_{II}\{F\} \tag{2.30}$$

Unter analogen Bedingungen wie bei der zweiseitigen Laplace-Transformation, gilt die komplexe Umkehrformel

$$\mathfrak{M}^{-1}\{\tilde{f}\} = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{f}(s)\ x^{-s}\ ds = f(x) \tag{2.31}$$

Wenden wir die Mellin-Transformation auf die Integralgleichung[14] (2.28) an, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(s) &= \int_0^\infty x^{s-1}\ dx \int_0^\infty k(xy)\ f(y)\ dy \\
&= \int_0^\infty f(y)\ dy \int_0^\infty k(xy)\ x^{s-1}\ dx \\
&= \int_0^\infty f(y)\, y^{-s}\ dy \int_0^\infty k(u)\ u^{s-1}\ du \\
&= \tilde{f}(1-s)\ K(s) \quad .
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Es ist also $\tilde{g}$ die Mellin-Transformierte der Funktion g, $\tilde{f}$ die Mellin-Transformierte von f und K die Mellin-Transformierte des Kerns $k(xy) = K(u)$.

---

[13] Wir haben $f(e^{-t}) = F(t)$ gesetzt.

[14] Die obige Gleichung (2.28) ist ein Spezialfall einer allgemeineren Relation. Ist eine Funktion f durch

$$f(x) = x^\alpha \int_0^\infty \xi^\beta\ f_1(x\xi)\, f_2(\xi)\ d\xi \tag{2.32}$$

dargestellt und existieren die Mellin-Transformationen der beteiligten Funktionen, so gilt für die Mellintransformierten:

$$g(s) = g_1(s+\alpha)\ g_2(1-s-\alpha+\beta) \quad . \tag{2.33}$$

Für den Beweis sei auf [Doe71, Tit67, Ros95] verwiesen.

Die Mellintransformierte der Lösung ist also durch

$$\tilde{f}(s) = \frac{\tilde{g}(1-s)}{K(1-s)} \tag{2.35}$$

gegeben und die Lösung der Integralgleichung (2.28) wird damit zu:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \, \frac{\tilde{g}(1-s)}{K(1-s)} \, ds \quad . \tag{2.36}$$

In unserem Fall der Integralgleichung (2.13) gilt jetzt[15]

$$E^+(x) = \int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{1-ixy}}_{k(xy)} \underbrace{p(y)}_{f(y)} \, dy \quad . \tag{2.38}$$

Wenden wir jetzt das eben Hergeleitete an, so erhalten wir sofort:

$$\tilde{E^+}(s) = \int_0^\infty E^+(x) \, x^{s-1} \, dx = \tilde{p}(1-s) K(s) \quad , \tag{2.39}$$

wobei die Mellintransformierte des Integralkerns k sich analytisch zu

$$K(s) = \int_0^\infty \frac{1}{1-ix} \, x^{s-1} \, dx = \frac{\pi (i)^s}{\sin\{\pi s\}} = (i)^s \, \Gamma(s) \, \Gamma(1-s) \quad , \quad \text{mit} \quad 0 < \mathfrak{Re}\, s < 1 \tag{2.40}$$

berechnen läßt[16]. Hierbei bezeichnet Γ die Eulersche Gammafunktion[17]. [AS68, EMOT53].

Die Mellin-Transformierte $\tilde{p}$ der Verteilungsfunktion p,

$$\tilde{p}(s) = \int_0^\infty p(x) \, x^{s-1} \, dx \quad . \tag{2.42}$$

ist also durch

$$\tilde{p}(s) = \frac{\tilde{E^+}(1-s)}{K(1-s)} \tag{2.43}$$

---

[15] Übetragen auf die allgemeinere Form (2.32):

$$E^+(x) = \int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{1-ix\xi}}_{f_1(x\xi)} \underbrace{p(\xi)}_{f_2(\xi)} \, d\xi \quad , \tag{2.37}$$

wobei hier $\alpha = \beta = 0$ gilt.

[16] Für die explizite Berechnung der Mellintransformierte des Intgralkerns (2.27) und dessen Zusammenhang mit der Gammafunktion sei auf [AS68, Doe71, EMOT53, EMOT54, Tit86, Tit67, Ros95] verwiesen.

[17] Zur Erinnerung: Die Gammafunktion Γ ist durch:

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty t^{s-1} e^{-t} \, dt \quad \mathfrak{Re}\, s > 0 \tag{2.41}$$

definiert und so per definitionem die Mellintransformierte von e^{-t}.

gegeben. Letztendlich können wir die Lösung der Integralgleichung (2.13) schreiben als:

$$p(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \frac{\tilde{E^+}(1-s)}{K(1-s)}\, ds \tag{2.44}$$

$$p(x) = \frac{1}{2\pi i x} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{i}{x}\right)^{-s} \frac{\sin(\pi s)}{\pi}\, \tilde{E^+}(s)\, ds \quad . \tag{2.45}$$

Der tiefere Grund für die Anwendbarkeit der Mellin-Transformation bei der Lösung der Integralgleichung ist der, daß es sich bei dieser bezüglich dieser Integraltransformation, wie man deutlich bereits an der Gleichung (2.34) erkennen kann, um eine *Faltungsgleichung* handelt [Doe71, Tit67]. Diese Faltungsstruktur des phänomenologischen Ansatzes werden wir ausnutzen, wenn wir in den späteren Kapiteln 4 ff die Methoden zur approximativen Lösung diskutieren werden.

Die Dichtefunktion *w*

Als nächstes wollen wir, durch die obige Lösung (2.45) der Integralgleichung nahegelegt, den phänomenologischen Ansatz etwas umschreiben, wodurch wir bezüglich des Variablen *s* „elegantere“ Ausdrücke erhalten werden; konkret führen wir also die Funktion *w* als

$$p(\tau) = \frac{w(\tau)}{\tau} \tag{2.46}$$

ein, wodurch die Integralgleichung nun die Form

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1-i\tau\omega} \frac{w(\tau)}{\tau}\, d\tau \tag{2.47}$$

annimmt.

Bevor wir uns der Lösung widmen - die Integralgleichung können wir selbstverständlich wieder mit der Mellin-Transformation lösen - sei das folgende, nicht ganz unwichtige bezüglich der Funktion *w* und deren Zusammenhang mit der Funktion *p*, erwähnt:

- Aus der Definition (2.29) und den Eigenschaften der Mellin-Transformation[18] folgt mit der Definition (2.46) von *w* bezüglich deren Mellinttransformierten $\tilde{w}$:

$$\tilde{w}(s) = \int_0^\infty x^{s-1}\, w(x)\, dx = \int_0^\infty x^{s-1}\, x p(x)\, dx = \tilde{p}(s+1) \quad . \tag{2.48}$$

  Die Transformierten unterscheiden sich also nur bezüglich ihres Argumentes und nicht in ihrer grundlegenden funktionalen Form[19]; *p* und *w* sind also bezüglich der Mellin-Transformation identische Funktionen, was wir auch direkt an den Lösungen (2.44) respektive (2.45) und vorweggenommen (2.50) ablesen können.

- Ist *p* eine Dichtefunktion, so ist (offensichtlich) *w* eine auf einer logarithmischen Skalar messende Dichtefunktion, denn es gilt:

$$\int_0^\infty p(\tau)\, d\tau = \int_0^\infty \frac{w(\tau)}{\tau}\, d\tau = \int_{-\infty}^\infty w(\tau)\, d\ln\tau = 1$$

[18] siehe [Doe71, Tit67]

[19] Es gilt allgemein: $\int_0^\infty x^{s-1}\, x^a\, f(x)\, dx = \tilde{f}(s+a)$.

Der zur Integralgleichung (2.47) im Fourier-Laplace- respektive Mellin-Raum[20] korrespondierende Ausdruck ist nun, analog zur Gleichung (2.39),

$$\tilde{E^+}(s) = \tilde{w}(-s)\, K(s) \quad , \tag{2.49}$$

woraus als Lösung somit unmittelbar

$$w(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tau^{-s}\, \frac{\tilde{E^+}(-s)}{K(-s)}\, ds \quad , \tag{2.50}$$

oder wenn wir den Ausdruck (2.40) für K einsetzen,

$$w(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{i}{\tau}\right)^{-s} \frac{\sin(\pi s)}{\pi}\, \tilde{E^+}(s)\, ds \quad , \tag{2.51}$$

folgt. Wir sehen hier nochmal deutlich: Die (approximative) Bestimmung der Funktion w ist also völlig äquivalent zur Bestimmung der Dichte p.

An den Gleichungen (2.45) und (2.51) können wir übrigens den eigentlichen Grund für die Einführung der Funktion w ablesen: die inverse Mellin-Transformation können wir bezüglich deren Variablen s in der für diese gebräuchlichen, symmetrischen Form schreiben, im Gegensatz zu den entsprechenden Darstellungen für p. Substituieren wir noch $\bar{\tau} = 1/\tau$ und schreiben $\bar{w}(\bar{\tau})$, so erhalten wir demzufolge den Ausdruck:

$$\bar{w}(\bar{\tau}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \bar{\tau}^{-s}\, \frac{\tilde{E^+}(s)}{K(s)}\, ds \tag{2.52}$$

also den für die inverse Mellin-Transformation üblichen.

Im weiteren dieser Arbeit werden wir sowohl die Funktion p als auch w verwenden, je nach dem, welche dem Gegenstand der Betrachtungen angemessener erscheint.

2.4.3 Real- und Imaginärteil der Integralgleichung

Wie wir bereits am Anfang im Abschnitt 2.2 erwähnt haben, wird oftmals in der Literatur nicht die komplexwertige Integralgleichung (2.13) der reellen Variablen ω und τ eingeführt und behandelt, sondern deren Real- (2.17) und deren Imaginärteil (2.18) werden als eingenständige Integralgleichung aufgefaßt und entsprechnd untersucht. Es ist nun sowohl von theoretischer als auch von praktischer Seite her nützlich, diese beiden Integralgleichungen zu betrachten. Schreiben wir diese mit der Funktion w nochmals auf, wobei natürlich $E^+ = E_1 + iE_2$ sei:

$$E_1(\omega) = \int_0^\infty k_1(\omega\tau)\, w(\tau)\, \frac{d\tau}{\tau} \tag{2.53}$$

$$E_2(\omega) = \int_0^\infty k_2(\omega\tau)\, w(\tau)\, \frac{d\tau}{\tau} \quad , \tag{2.54}$$

$$\tag{2.55}$$

[20] Tatsächlich handelt es sich vorweggenommen bei den Fourier-Laplace- und den Mellin-Raum um die gleichen Räume; siehe [Doe71, Tit67].

mit den Integralkernen

$$k_1(\omega\tau) = \frac{1}{1+(\omega\tau)^2} \tag{2.56}$$

$$\text{und} \quad k_2(\omega\tau) = \frac{\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2} \quad . \tag{2.57}$$

Wir sehen sofort:

$$k_2(x) = x\, k_1(x) \quad , \tag{2.58}$$

eine bezüglich der Mellin-Transformation sehr wichtige Eigenschaft, deren tieferer Grund in den Kramers-Kronig Relationen liegt, die die Integralkerne erfüllen[21].

Die Integralgleichungen (2.53) und (2.55) lassen sich jetzt formal analog zur Integralgleichung (2.13) respektive (2.47) mit Hilfe der Mellin-Transformation lösen, und die zu diesen im Mellin-Raum korrespondierenden Gleichungen lauten jetzt:

$$\tilde{E}_1(s) = K_1(s)\, \tilde{w}(-s) \tag{2.59}$$

$$\text{und} \quad \tilde{E}_2(s) = K_2(s)\, \tilde{w}(-s) \quad , \tag{2.60}$$

womit wir die Lösungen (formal) sofort zu

$$w(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\, \frac{\tilde{E}_1(-s)}{K_1(-s)}\, ds \tag{2.61}$$

$$\text{und} \quad w(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\, \frac{\tilde{E}_2(-s)}{K_2(-s)}\, ds \tag{2.62}$$

angeben können.

Zwischen den Mellintransformierten der Integralkerne gilt nun, analog zu den Dichten p und w, aufgrund der Beziehung (2.58) der folgende Zusammenhang:

$$\begin{aligned} K_2(s) &= \int_0^\infty x^{s-1}\, k_2(x)\, dx \\ &= \int_0^\infty x^{s-1}\, x k_1(x)\, dx \quad , \end{aligned}$$

also

$$K_2(s) = K_1(s+1) \quad . \tag{2.63}$$

Die Mellintransformierten der Integralkerne der Real- und Imaginärteilintegralgleichungen sind bezüglich ihrer grundlegenden funktionalen Form identisch, sie unterscheiden sich „nur“ in ihren Argumenten. Diese können jetzt, analog zum Integralkern (2.27), analytisch berechnet werden zu[22]:

$$K_1(s) = \frac{1}{2}\, \frac{\pi}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \quad 0 < \mathfrak{Re}\, s < 2 \tag{2.64}$$

$$K_2(s) = \frac{1}{2}\, \frac{\pi}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi(s+1)\right)} \quad -1 < \mathfrak{Re}\, s < 1 \quad . \tag{2.65}$$

[21] siehe Gleichungen (2.3) und (2.4) und die allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktionunktion, beispielsweise in [AM76, Jac75] dargestellt.

[22] Für Details der Rechnungen, die übrigens methodisch identisch mit der Berechnung der Mellintransformierten des komplexne Integralkerns ist, sei wieder auf [Doe71, Tit67, EMOT53] verwiesen.

Wie aus den Gleichungen (2.59) und (2.58) unmittelbar abzulesen ist, gilt:

$$\frac{K_1(s)}{K_2(s)} = \frac{\tilde{E}_1(s)}{\tilde{E}_2(s)} \quad . \tag{2.66}$$

Mit den obigen expliziten Ausdrücken für K_1 und K_2 können wir dieses Verhältnis bestimmen, und wir erhalten:

$$\frac{K_1(s)}{K_2(s)} = \frac{K_1(s)}{K_1(s+1)} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\pi(s+1)\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} = \frac{\cos\left(\frac{1}{2}\pi s\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \quad ,$$

also abschließend

$$\frac{K_1(s)}{K_2(s)} = \frac{\tilde{E}_1(s)}{\tilde{E}_2(s)} = \cot\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \tag{2.67}$$

$$\text{bzw.} \quad \frac{K_2(s)}{K_1(s)} = \frac{\tilde{E}_2(s)}{\tilde{E}_1(s)} = \tan\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \tag{2.68}$$

mit $0 < \Re\mathrm{e}\, s < 1$.

Auch wenn es aus der bisherigen Ableitung des Verhältnisses (2.67) respektive (2.68), nicht abzulesen ist, so ist dieses eine direkte Konsequenz der Kramers-Kronig Relationen und somit letztlich der Kausalität[23]. Mit anderen Worten bedeutet dieses, daß das Verhältnis der Mellintransformierten von Funktionen, die den Kramers-Kronig Relationen genügen, durch den Ausdruck (2.67) respektive (2.68) gegeben ist; dieses ist in diesem Sinne eine „universelle“ Eigenschaft solcher Funktionen, die wir im Anhang C beweisen werden.

Es ist auch nicht verwunderlich, daß die Mellintransformierten der den Kramers-Kronig Relationen genügenden Funktionen einem „universellen“ Verhältnis genügen. Zum einen können wir, in einem bestimmten Sinn, (2.67) und (2.68) als die Mellintransformierte der Kerne der Kramers-Kronig Relationen (2.3) und (2.4) interpretieren und zwar insofern, als daß diese beiden Gleichungen die in den Mellin-Raum übersetzten Kramers-Kronig Relationen sind. Zum anderen ist eine wichtige Interpretation der Kramers-Kronig Relationen gerade die, wenn wir entweder den Real- oder den Imaginärteil dieser Funktionen *vollständig* kennen, daß wir dann die *gesamte* komplexe Funktion kennen. Mit der vollständigen Kenntnis des Real- oder des Imaginärteils der Dielektrizitätsfunktion würden wir also die gesamte Funktion kennen. Dieses muß sich im Mellin-Raum entsprechend in ein „universelles“ Verhältnis der Transformierten ausdrücken: kennen wir die Mellintransformierte des Real- oder des Imaginärteils exakt, so kennen wir ebenso die andere Transformierte bzw. als Konsequenz die Transformierte der gesamten, komplexen Funktion. Dieses bedeutet nun bei einer nur approximativen Kenntnis von Real- und Imaginärteil einer derartigen Funktion theoretisch[24], daß die Abweichung von dem Verhältnis (2.67) respektive (2.68) der Mellintransformierten als Maß der approximativen Kenntnis genommen werden kann.

Betrachten wir jetzt, bevor wir die Untersuchungen zur komplexwertigen Intergralgleichung (2.13) weiterführen, die **Integralgleichung des Imaginärteils**, Gleichung (2.55), etwas genauer. Deren, als inverse Mellin-Transformation dargestellte, Lösung ist, nochmals zusammengefaßt:

$$w(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \, \frac{\tilde{E}_2(-s)}{K_2(-s)} \, ds \tag{2.69}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \, \frac{2}{\pi} \cos\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \tilde{E}_2(s) \, ds \quad \text{mit} \quad -1 < \Re\mathrm{e}\, s < 1 \quad . \tag{2.70}$$

[23] Kausalität muß hier richtig als Ausdruck eines Konnex zwischen einem steuerbaren Faktor und seinem Effekt verstanden werden; siehe auch Anhang C

[24] Es ist aufgrund der numerischen Artefakte nicht sinnvoll, die Mellin-Transformation approximativ bekannter Funktionen numerisch auszuführen und anschließend das Verhältnis der Transformierten zu bilden [Doe71].

Aus der Theorie der zweiseitigen (Fourier-)Laplace- und der Mellin-Tranformation[25] folgt jetzt: Existiert das komplexe Integral (2.69) bzw. (2.70) im Sinne der komplexen Umkehrformel der Mellin-Transformation, so ist w unabhängig von $c = \mathfrak{Re}\, s$. Daraus folgt dann sofort, daß wir in (2.69) bzw. (2.70) auch von vornherein $\mathfrak{Re}\, s = 0$ setzen dürfen, die Funktion w also entsprechend ebenso durch

$$w(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\pi} \cos\left(\frac{1}{2}\pi i\omega\right) \tilde{E}_2(-i\omega)\, x^{-i\omega}\, d\omega \quad , \tag{2.71}$$

mit $s = c + i\omega$, darstellbar ist. Führen wir nun in (2.71) die Substitutionen $x = e^{-t}$, $w(e^{-t}) = W(t)$ und $\tilde{E}_2(i\omega) \to \tilde{E}_2(\omega)$ durch und erinnern uns an die Formel $\cos(iz) = \cosh(z)$, so erhalten wir letztendlich:

$$W(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\pi} \cosh\left(\frac{1}{2}\pi\omega\right) \tilde{E}_2(-\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega \quad . \tag{2.72}$$

Offensichtlich haben wir die Lösung der Integralgleichung (2.55) jetzt als inverse Fourier-Transformation, $\tilde{E}_2$ ist nichts weiter als die Fouriertranformierte bezüglich der Variablen t der Funktion $E_2(e^{-t})$, ausdrücken können. Mit anderen Worten bedeutet dieses, daß wir die *Integralgleichung des Imaginärteils ebenso durch die Anwendung der Fourier-Transfortmation lösen können*.

Die Lösbarkeit der Integralgleichung (2.55) durch Anwendung der Fourier-Transformation läßt sich natürlich schon an jener selbst zeigen[26]. Wir erkennen dieses sofort, indem wir die Variablensubstitutionen $\omega = e^{-t}$ und $\tau = e^{-t_0}$ in (2.55) durchführen und dementsprechend die Funktionen w, k_2 und E_2 tranformieren, also $E_2(e^{-t}) \to \bar{E}_2(t)$, $w(e^{-t}) \to W(t)$ und $k_2(e^{-t}) \to K(t)$, so daß wir den Ausdruck

$$\bar{E}_2(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} W(t)\, K(t + t_0)\, dt \tag{2.73}$$

erhalten. Wenden wir auf (2.73) jetzt anschließend die Fourier-Transformation und einen derer Faltungssätze[27] an, so erhalten wir unmittelbar wieder den Ausdruck (2.72).

Wir wollen aber darauf hinweisen, daß sich nur die Lösung der Interalgleichung des Imaginärteils auch als inverse Fourier-Transformation darstellen läßt, denn nur für den entsprechend transformierten Integralkern dieser Gleichung exisitiert die Fourier-Transformation. Würden wir in der komplexwertigen Integralgleichung (2.47) und in der Integralgleichung des Realteils, Gleichung (2.53), die analoge Variablensubstitutionen, und die entsprechenden Transformationen der Funktionen, durchführen, so werde wir feststellen, daß die Fourier-Transformation der so transformierten Integralkerne nur für komplexe ω-Werte, also wenn in der Fourier-Transformation $i\omega \to iz = s \in \mathbb{C}$ gesetzt wird, konvergiert, wobei dann $0 < \mathfrak{Re}\, s < 1$ für die Transformierte des Kerns der komplexwertigen und $0 < \mathfrak{Re}\, s < 2$ für die Transformierte des Kerns der Realteilgleichung gilt. Wir hätten dann letztlich sogar nur die Lösung, dargestellt durch die komplexe Umkehrformel, also die Mellintransformierte (2.40) und (2.65) der betreffenden originalen Integralkerne, reproduziert[28].

Wir werden im weiteren, insbesondere bezüglich allgemeiner Eigenschaften, natürlich hauptsächlich nur die komplexwertige Integralgleichung (2.13) bzw. (2.47) betrachten - die Real- und Imaginärteilgleichungen können schon allein aufgrund deren Zusammenhanges über die Kramers-Kronig Relationen nur die

[25] siehe [Doe71, Tit67]

[26] Historisch war es auch so, daß COLE und DAVIDSON in [DC51] die nach ihnen benannte Dichte auf der Basis der Integralgleichung des Imaginärteils durch die Anwendung der Fourier-Transformation berechnet haben - also bereits eine des Ausdrucks (2.72) entsprechenden Darstellung der Lösung als inverse Fourier-Tranformation angewandt habe; siehe auch die Bemerkung im Abschnitt 3.3 auf Seite 35.

[27] siehe wiederum [Doe71, Tit67]

[28] Tatsächlich bedeutet, wie bereits erwähnt, in der Mellin-Transformation die Variablensubstitution der Form $x = e^{-t}$ eine Transformation auf die zweiseitige Laplace-Transformation, die aus nun offensichtlichen Gründen auch als Fourrier-Laplace Transformation bezeichnet wird; siehe dazu auch die Bemerkungen auf Seite 13f und [Doe71, Tit67].

selben Eigenschaften wie die gesamte, komplexwertige Gleichung besitzen - und erst bei der numerischen Behandlung explizit auf die Integralgleichungen des Real- und des Imaginärteils zurückkommen[29].

2.4.4 Eine weitere analytische Lösung der Integralgleichung

Neben der analytischen, formalen Lösung (2.44) bzw. (2.45) der Integralgleichung (2.13) in Termen der Mellin-Transformation, können wir eine weiter Lösung angeben [KR98, Ros95], die eine der wichtigsten Eigenschaften der Integralgleichung offenbart. Aufgrund der analytischen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion[30] ε^+ können wir die anfängliche Integralgleichung (2.13) umschreiben zu:

$$\frac{1}{\omega} E^+\left(\frac{i}{\omega}\right) = \int_0^\infty p(\tau)\ \frac{1}{\tau+\omega}\, d\tau \quad , \tag{2.74}$$

also auf eine Gleichung der Form[31]:

$$g(x) = \int_0^\infty f(y)\ \frac{1}{x+y}\, dy \quad . \tag{2.75}$$

Setzen wir $x = e^\xi$, $y = e^\eta$ und weiter $\psi(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi} g(e^\xi)$, $\phi(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi} f(e^\xi)$, so geht die Gleichung (2.75) über in:

$$\psi(\xi) = \int_{-\infty}^\infty \frac{\phi(\eta)}{2\cosh\left\{\frac{1}{2}(\xi-\eta)\right\}}\, d\eta \tag{2.76}$$

$$\psi(\xi) = \int_{-\infty}^\infty \phi(\eta)\ k(\xi-\eta)\, d\eta \quad . \tag{2.77}$$

Wie nun wohlbekannt ist, können Integralgleichungen vom Faltungstyp der Form (2.75) bzw. (2.77) mit Hilfe der Fourier-Transformation gelöst werden [Tit67]. Die formal analytische Lösung ist durch[32]

$$\begin{aligned}
\phi(\xi) &= \frac{1}{\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty \Psi(u)\ \cosh \pi u\, e^{i\xi u}\, du \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^\infty \Psi(u)\ \left(e^{i(\xi+i\pi)u} + e^{i(\xi-i\pi)u}\right)\, du \\
&= \frac{1}{2\pi}\left\{\psi(\xi+i\pi) + \psi(\xi-i\pi)\right\} \quad ,
\end{aligned} \tag{2.78}$$

oder umgeschrieben auf die ursprünglichen Funktionen

$$f(x) = \frac{i}{2\pi}\left\{g(xe^{i\pi}) - g(xe^{-i\pi})\right\} \quad , \tag{2.79}$$

gegeben. Daraus folgt für die Lösung der Integralgleichung (2.74):

$$p(x) = \frac{i}{2\pi x}\left\{E^+\left(\frac{i}{x}e^{i\pi}\right) - E^+\left(\frac{i}{x}e^{-i\pi}\right)\right\} \quad . \tag{2.80}$$

[29] Nachdem wir die Integralgleichung (2.13) respektive (2.47) gelöst haben, können es nur numerische Gründe sein, die eine getrennte Untersuchung von Real- und Imaginärteil rechtfertigen.

[30] siehe Kapitel 2.1

[31] Integralgleichungen der Gestalt (2.75) werden *Stieltjes'sche Integralgleichung* genannt.

[32] Mit $\Psi(u)$ ist die Fouriertransformierte der Funktion $\psi(\xi)$ bezeichnet.

Die Lösung (2.80) der Integralgleichung (2.74) stellt p als *Sprung des längs der negativen imaginären Achse liegenden Verzweigungsschnitts der Funktion* E^+ dar. Offensichtlich beinhaltet die Lösung (2.80) die Notwendigkeit einer *analytischen Fortsetzung* bzw. *Fortsetzbarkeit* der vorgegebenen Funktion E^+[33]. Nach dem Chauchyschen Integralsatz [BS76, Tit86] können wir bekanntlich die Funktion E^+ analytisch in die komplexe, und insbesondere in die untere, Zahlenebene z fortsetzen, indem wir das (komplexe) Kurvenintegral

$$E^+(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{E^+(\omega)}{\omega - z}\, d\omega \tag{2.81}$$

längs der Kurve Γ, die die negative imaginäre Achse ausschließt, auswerten. Im Fall einer analytischen Darstellung der Funktion E^+ wäre dieses sicherlich prinzipiel möglich, doch wenn sie uns durch Messungen bekannt ist, dann *kennen wir die Funktion* E^+ *nur numerisch diskret auf der positiven reellen Achse*! Selbst wenn wir aufgrund der Symmetrieeigenschaften der Dielektrizitätsfunktion[34] ε^+ diese auf die negative reellen Achse erweitern, könnten wir die Funktion E^+ höchstens in die obere komplexe Halbeben approximativ analytisch fortsetzen. Desweiteren gehört die (numerische) analytische Fortsetzung einer Funktion, die nur an diskreten Stellen der komplexen Zahlenebene bekannt ist, zu den bis heute nicht zufriedenstellend gelösten Problemen[35], denn das Problem der analytische Fortsetzung einer Funktion, ebenso wie Fredholmsche Integralgleichungen erster Art, gehört zu den sogenannten *schlecht gestellten Problemen*[36]. Für eine auf Meßdaten basierende numerische Auswertung zur Bestimmung der Verteilungsfunktion p ist die Lösung (2.80) der Integralgleichung (2.74) somit nicht anwendbar, weist aber, wie wir soeben gesehen haben, eine *fundamentale Eigenschaft* des phänomenologischen Ansatzes auf:

In die Lösung der Integralgleichung (2.13) ist die analytsiche Fortsetzung respektive die analytische Fortsetzbarkeit der Funktion E^+ involviert!

2.4.5 Der Zusammenhang zwischen den analytischen Lösungen

Im folgenden soll die Beziehung, in der die formal analytischen Lösungen (2.44) und (2.80) der Integralgleichung (2.13) zueinander stehen, kurz aufgezeigt werden. Da wir dieses bereits in [KR98, Ros95] durchgeführt haben, soll hier eine kurze Skizzierung folgen.

Betrachten wir dazu die Lösung, dargestellt als inverse Mellin-Transformation (2.45):

$$p(x) = \frac{1}{2\pi i x} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{i}{x}\right)^{-s} \frac{\sin(\pi s)}{\pi}\, \tilde{E^+}(s)\, ds \quad . \tag{2.82}$$

Wie wir später im Kapitel 2.5 kurz erwähnen werden, dürfen wir, wenn wir hier

$$\tilde{E^+}(s) = \int_0^{\infty} E^+(\omega)\, \omega^{s-1}\, ds \tag{2.83}$$

in die Lösung (2.82) einsetzen, aufgrund der Nicht-Existenz der inversen Mellin-Transformation der Funktion $K(s)^{-1}$ die Integrationsreihenfolge *nicht* vertauschen. Um die inverse Mellin-Transformation trotzdem durchführen zu können, brauchen wir die analytischen Eigenschaften der Funktion

[33] siehe dazu auch Kapitel 2.4.5 und die Ausführungen und Bemerkungen in [Tit67].

[34] siehe Kapitel 2.1

[35] Aus der Funktionentheorie folgt, daß dieses eindeutig *nicht* möglich ist [BS76, Lav67, Tit86]. Wenn von der analytischen Fortsetzung einer nur an diskreten Punkten bekannten Funktion die Rede ist, so ist damit eine kontrollierte Approximation an die theoretisch analytisch Fortgesetzten gedacht, die man erhalten würde, wenn die fortzusetzende Funktion theoretisch, exakt bekannt sein würde. Das Probleme der analytischen Fortsetzung wird beispielsweise in den Buch von LAVRENTIEV [Lav67] ausführlicher behandelt.

[36] Das Konzept des „gut gestellten" Problems, die „schlecht gestellten" Probleme sind über dieses negativ definiert, und die Behandlung „schlecht gestellter" Probleme sollen ausführlich im Kapitel 4 behandelt werden.

$\tilde{E^+}$. Die analytische Fortsetzung der Funktion E^+ in die komplexe Ebene unter der Ausnahme der negativen imaginären Achse ist durch

$$E^+(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{E^+(\omega')}{\omega' - z}\, d\omega' \tag{2.84}$$

gegeben [BS76, Tit86]. Für den Weg links um die negative imaginären Achse herum, Γ möge diese gegen den Uhrzeigersinn umlaufen, erhalten wir $\omega' = e^{i\frac{3\pi}{2}} y$, für den Weg rechts herum entsprechend $\omega' = e^{-i\frac{\pi}{2}} y$. Auf der reellen Achse ist $z = \omega$ und weiter $\omega' = -iy$, woraus also $\omega' = -i\infty \mathrel{\hat{=}} y = \infty$ folgt. Für E^+ erhalten wir dadurch die Darstellung:

$$E^+(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_\infty^0 dy\, \frac{E^+\left(ye^{i\frac{3\pi}{2}}\right) - E^+\left(ye^{-i\frac{\pi}{2}}\right)}{iy + \omega} \quad . \tag{2.85}$$

Für die Mellintransformierte $\tilde{E^+}$ ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned} \tilde{E^+}(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_\infty^0 dy\, \left(E_l^+(y) - E_r^+(y)\right) \int_0^\infty d\omega\, \omega^{s-1}\, \frac{1}{iy+\omega} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_\infty^0 dy\, \left(E_l^+(y) - E_r^+(y)\right)\, \pi (iy)^{s-1}\, \frac{1}{\sin\{\pi s\}} \,. \end{aligned} \tag{2.86}$$

Hierbei bezeichnen $E_l^+(y)$ die Funktion links und $E_r^+(y)$ die Funktion rechts vom Verzweigungsschnitt. Setzen wir dieses Ergebnis in (2.82) ein, erhalten wir:

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \int_\infty^0 dy\, \left(E_l^+(y) - E_r^+(y)\right)\, (yx)^{(s-1)} \quad . \tag{2.87}$$

Erst jetzt dürfen wir die inverse Mellin-Transformation durchführen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\, (xy)^{s-1} &= (xy)^{c-1} \delta(\ln(xy)) \\ &= \frac{1}{\left|\frac{\partial \ln(xy)}{\partial y}\right|_{y=\frac{1}{x}}} \delta\left(y - \frac{1}{x}\right) \\ &= y\,\delta\left(y - \frac{1}{x}\right) = \frac{1}{x}\,\delta\left(y - \frac{1}{x}\right) \end{aligned}$$

Aus all dem folgt letztlich für p:

$$p(x) = \frac{i}{2\pi x} \left\{ E^+\left(\frac{i}{x} e^{i\pi}\right) - E^+\left(\frac{i}{x} e^{-i\pi}\right) \right\} \tag{2.88}$$

Wir haben somit die Äquivalenz der Lösung (2.44) mit der Lösung (2.80) gezeigt.

Aufgrund jener Äquivalenz können wir jetzt notwendige und hinreichende Bedingungen für die Existenz einer Lösung in $L_2(-\infty, \infty)$ der Integralgleichung (2.74) bzw. (2.75), und somit auch der Gleichung (2.13), angeben. Es gilt der[37]

[37] Der Beweis des Satzes ist in [Tit67] zu finden und gilt ursprünglich für Stieltjes'sche Integralgleichungen (2.75). Somit hätten wir ihn schon im Kapitel 2.4.4 angeben können.

Satz 2.1
Es sei $\psi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi}\, E^+\left(ie^{-\xi}\right)$. *Notwendige und hinreichende Bedingung dafür, daß die Lösung der Gleichung (2.80) zu* $L_2(-\infty,\infty)$ *gehört, ist, daß* $\psi(z)$ *eine für* $-\pi < y < \pi$ *analytische Funktion ist und daß*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x+iy)|^2\, dy < K \tag{2.89}$$

gilt.

Den Zusammenhang zwischen den Lösungen abschließend, wollen wir darauf hinweisen, daß die Äquivalenz der Lösungen (direkte) Konsequenzen bezüglich den Eigenschaften der Integralgleichung zur Folge hat. Diese werden wir im nun nachfolgenden Abschnitt 2.5 näher betrachten.

2.5 Eigenschaften der Integralgleichung

Wenden wir uns, bevor wir einige der geläufigsten Modelle für E^+ und deren Dichten p diskutieren, nun den generellen Eigenschaften der Integralgleichung (2.13) der Dielektrizitätsfunktion eines amorphen Systems und deren Lösung (2.44) bzw. (2.45) repsektive (2.80) zu. Wie wir bereits im Kapitel 2.4.2 erwähnt haben, handelt es sich bei der grundlegenden Struktur der Integralgleichung (2.13) um die eines Faltungsintegrals[38]. Geläufiger und bekannter sind Fredholmschen Integralgleichung erster Art vom Faltungstyp der allgemeinen Form

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} k(x-y)\, f(y)\, dy \quad , \tag{2.90}$$

die unter Anwendung der Fourier-Transformation gelöst werden kann. Nach dem Faltungssatz der Fourier-Transformation [Doe71, Smi88] gilt für die im Fourierraum zum Faltungsintegral korrespondierende Gleichung:

$$\tilde{g}(\omega) = \tilde{k}(\omega)\, \tilde{f}(\omega) \quad , \tag{2.91}$$

die Lösung (im ursprünglichen Raum) also unmittelbar via Rücktransformation darstellbar ist:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{g}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\, e^{i\omega x}\, d\omega \quad . \tag{2.92}$$

Im vorliegenden Fall der Integralgleichung (2.13) können wir deren Lösung im Mellin-Raum (2.43) bzw. (2.39) analog zu oben angeben:

$$\tilde{f}(s) = \frac{\tilde{g}(1-s)}{K(1-s)} \quad \text{bzw.} \quad \tilde{g}(s) = \tilde{f}(1-s)\, K(s) \quad . \tag{2.93}$$

Daraus folgt eine schon erwähnte wichtige Eigenschaft[39] :

Bezüglich der Mellin-Transformation handelt es sich bei dem phänomenologischen Ansatz (2.13) um eine (spezielle Form) der Mellinschen Faltungsgleichung!

[38] siehe auch die Ausführungen im Kapitel 5.3 und die Darstellungen zu Faltungsintegralen und Integraltransformationen in [Doe71, Smi88, Tit67]

[39] Der Faltungscharakter läßt sich auch direkt an der Integralgleichung (2.13) erkennen, indem man die Variablensubstitution $\omega = e^{-t}$ und $\tau = e^{t_0}$ durchführt und somit von der Anwendbarkeit der Mellin- auf die der (zweiseitigen) Fourier-Laplace Transformation umschreibt. Man erhält dann die geläufigere Form (2.92) eines Faltungsintegrales. Bezüglich des Begriffs des „Mellinschen Faltungsintegrals“ sei jetzt schon einmal auf [Doe71, Tit67] verwiesen.

Betrachten wir weiter die Lösung (2.44). Setzen wir in diese den Ausdruck für die Mellin-Transformierte $\tilde{E}$, so erhalten wir sofort:

$$\tau p(\tau) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} E^+(\omega) \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \left(\frac{i}{\omega\tau}\right)^{-s} K^{-1}(s) \quad . \tag{2.94}$$

Aus der Gleichung (2.94) können wir zwar wiederum den Faltungscharakter der Integralgleichung (2.13) ablesen und man ist jetzt geneigt zu sagen, zur Berechnung der Lösung der Integralgleichung (2.13) brauchen wir nur das „Faltungsintegral“ (2.94) auszuwerten, doch man darf nicht vergessen die Fragen zu prüfen, ob zum einen die Vertauschung der Integrationsreihenfolgen, wie sie vorgenommen worden ist um auf die Gleichung (2.94) zu kommen, überhaupt nach den Satz von FUBINI gerechtfertigt ist und ob zum anderen bei einer Konvergenz der jeweils auftretenden Integrale, die eine inversen Transformationen repräsentieren sollen, diese überhaupt als inverse Transformationen anzusehen sind[40]. Betrachten wir zu diesem Zweck das *asymptotische Verhalten* der Mellintransformierten $K(s)$ (2.40) des Integralkerns $k(\omega\tau)$.

$$\begin{aligned} K(s) &= \frac{\pi i^s}{\sin\{\pi s\}} \\ &= 2\pi i\, e^{i\frac{\pi}{2}s} \frac{1}{e^{i\pi s} - e^{-i\pi s}} \quad . \end{aligned} \tag{2.95}$$

Für die obere Grenze der inversen Mellintransformation (2.31) $s \to i\infty$, welche mit dem Grenzfall $is \to -\infty$ in (2.95) äquivalent ist, erhalten wir:

$$K(s) \to 2\pi i \frac{e^{-\frac{\Delta}{2}}}{e^{-\Delta} - e^{\Delta}} \to e^{-\frac{3}{2}\Delta} \quad \text{mit} \quad \Delta \to \infty\,; \tag{2.96}$$

für die untere Grenze $s \to -i\infty$, die äquivalent ist mit $is \to \infty$, erhalten wir entsprechend:

$$K(s) \to 2\pi i \frac{e^{\frac{\Delta}{2}}}{e^{\Delta} - e^{-\Delta}} \to e^{-\frac{\Delta}{2}} \quad . \tag{2.97}$$

Daraus folgt eine weiter wesentliche Eigenschaft des phänomenologischen Ansatzes (2.13):

Die reziproke Funktion $K^{-1}(s)$ der Mellintransformierten des Integralkerns weist eine *exponentille Divergenz* an den Grenzen der inversen Mellintransformation (2.31) auf[41]!

$$\frac{1}{K(s)} \to \begin{cases} e^{\frac{3}{2}\Delta} & \text{für} \quad s \to i\infty \\ e^{\frac{\Delta}{2}} & \text{für} \quad s \to -i\infty \end{cases} \quad . \tag{2.98}$$

Aufgrund dieses asymptotischen Verhaltens (2.98) der Mellintransformierten $K(s)$ (2.40) des Integralkerns ist es nicht möglich, die Lösung der Integralgleichung (2.13) nach dem „Faltungsintegral“ (2.94) zu bestimmen. Wie sich jedoch zeigen wird, kann diese Gleichung prinzipiell in einer modifizierten Form zur Bestimmung einer approximativen Lösung der Integralgleichung herangezogen werden[42].

---

[40] Die letzte Frage ist selbst bei einer Vertauschbarkeit der Integrationsreihenfolge aufgrund der Konvergenz beider Integrale noch nicht unbedingt geklärt. Denn selbst wenn ein Integral, das formal eine inverse Integraltransformation darstellt, existiert, so bedeutet dies jedoch nicht, das das Ergebnis tatsächlich als eine Inversion der Integraltransformierten betrachtet werden kann, also die zu (invers-)transformierende Funktion und das erhaltene Ergebnis nicht durch die Integraltransformation reziprok verknüpft sind [Doe71, Tit67].

[41] Wie DOETSCH in [Doe71] und TITCHMARSH in [Tit67] beispielsweise sehr schön darlegen, muß die Reziproke einer Fourier-Laplace Transformierten respektive einer Mellintransformierten an den Integralgrenzen der inversen Transformation ein divergentes Verhalten aufweisen. Dieses ist übrigens, im Fall der Fourier-Transformation, eine direkte Konsequenz des RIEMANN-LEBESGUEN Lemmas.

[42] siehe Abschnitt 5.3

Als nächstes soll, obwohl wir dieses schon in [Ros95] ausführlich dagelegt haben, es aber für die nachfolgenden Untersuchungen von größter Bedeutung ist, die Frage geklärt werden, welche Eigenschaften die gesuchte Funktion p bzw. deren Mellin-Transformierten $\tilde{p}(s) = \tilde{E^+}(1-s)/K(1-s)$, und somit auch implizit die Funktionen k und E^+ respektive deren Mellintransformierten, besitzen muß, damit das Integral der Gleichung (2.44) bzw. (2.45) tatsächlich eine inverse Mellin-Transformation und somit auch eine (analytische) Lösung der Integralgleichung (2.13) darstellt. Wir geben jetzt nocheinmal weitestgehend die Darlegungen aus [Ros95] wieder.

Es seien folgende Annahmen bezüglich der Verteilungsfunktion p gemacht: Die in die komplexe Ebene fortgesetzte Funktion $p(\tau) \to p(z)$ $(z = \rho e^{i\vartheta})$ sei in einem Winkelraum $\vartheta_1 \leq \vartheta \leq \vartheta_2$ mit eventuellem Ausschluß des Nullpunktes analytisch. Da für die Funktion p aufgrund ihrer Eigenschaften als Verteilungsfunktion

$$p \in L^1 \quad \text{und} \qquad p \in L^1_{LOC}$$

gelte[43], sollte die folgende Abschätzung gültig sein:

$$\begin{aligned} |p(z)| &\leq C\rho^{-x_1} \quad \text{für} \quad \rho \leq 1 \\ |p(z)| &\leq C\rho^{-x_2} \quad \text{für} \quad \rho > 1 \end{aligned} \tag{2.99}$$

mit $x_1 < x_2$ und einer (im wesentlichen) beliebigen Konstanten C. Im Fall der Verteilungsdichte p sollte also ebenso $x_1 < 1$ und $x_2 > 1$ gelten. Gilt die Abschätzung (2.99), dann gehört die Funktion $p(z)$ zu der Klasse $\mathfrak{B}$ von Funktionen, die via Mellin-Transformation wechselseitig mit der Klasse $\mathfrak{b}$ von Funktionen in einer *eineindeutigen* Weise verbunden ist[44]. Für die Funktionen der Klasse $\mathfrak{b}$ bzw. für die Klasse gilt:

> Die Funktionen $\tilde{g}$ der Klasse $\mathfrak{b}$, $\tilde{g} \in \mathfrak{b}$, sind in einem Vertikalstreifen $x_1 \leq x \leq x_2$ analytische Funktionen und es gilt die Exponentialabschätzung $(s = x + iy)$:
>
> $$\begin{aligned} |\tilde{g}(s)| &\leq Ce^{-\vartheta_2 y} \quad \text{für} \quad y \geq 0 \\ |\tilde{g}(s)| &\leq Ce^{-\vartheta_1 y} \quad \text{für} \quad y < 0 \quad , \end{aligned} \tag{2.100}$$
>
> mit $\vartheta_1 < \vartheta_2$.

Das heißt also, wenn die Funktion p den Abschätzungen (2.99) genügt, so existiert deren Mellintransformierte $\tilde{p}$, die einer Exponentialabschätzung der obigen Form genügt, und die (komplexe) inverse Transformation (2.31) liefert wieder die Funktion p.

Natürlich erhebt das eben gesagte nicht den Anspruch eines Existenzbeweises der Darstellbarkeit der Lösung der Integralgleichung als inverse Mellin-Transformation gemäß Gleichung (2.44). Wenn es sich bei der Funktion p um eine nicht gerade allzu pathologischen Funktion handelt, so sollte die Wahrscheinlichkeit, daß diese den Abschätzungen (2.99) genügt und somit das Integral (2.44) eine Lösung im Sinne einer inversen Transformation darstellt, doch gegeben sein[45]. Desweiteren sei darauf hingewiesen, daß die Mellintransformierte einer Dichtefunktion als eine *Verallgemeinerung derer Momente* interpretiert werden kann [Str63a, Str63b, MS78], wodurch die Arbeitshypothese der Existens der Mellintransformierten der gesuchten Dichtefunktion plausibler wird[46].

Aus dem Darstellungsproblem der Laplace-Transformation, und somit auch der Mellin-Transformation, kann eine hinreichende Bedingung für die Existenz des Integrales (2.44) als inverse Mellin-Transformation angegeben werden[47]. Es gilt:

---

[43] siehe Eigenschaften (2) bis (3) und [Str63a]

[44] Der Beweis dafür ist in [Doe71] zu finden.

[45] Tatsächlich kann gezeigt werden, daß die Darstellung (2.44), zwar in einem verallgemeinerten Sinne, auch dann gilt, wenn es sich bei p um eine *Distribution*, auch *verallgemeinerte Funtkion* genannt [BB93, Lig66, Roo69], handelt. Diese Eigenschaft wurde schon implizit bei der Herleitung der Äquivalenz der Darstellungen (2.44) und (2.80) der Funktion p ausgenutzt.

[46] Die *Lorentz-Dichte* ist übrigens, wie man schon bemerkt haben könnte, ein Beispiel für eine (Wahrscheinlichkeits-)Dichte, deren Momente zwar nicht existieren, dafür aber deren Mellintranformierte.

[47] siehe dazu auch [Doe71, Tit67]

Satz 2.2
$\phi(s) = \frac{\tilde{E^+}(s)}{K(s)}$ sei in dem Streifen $x_1 < \mathfrak{Re}\, s < x_2$ analytisch und strebe für $|y| \to \infty$ ($s = c + iy$) gleichmäßig in $x_1 + \delta \leq \mathfrak{Re}\, s \leq x_2 + \delta$ bei beliebig kleinen $\delta > 0$ gegen 0. Ferner konvergiere

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(c+iy)|\, dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\tilde{E^+}(c+iy)}{K(c+iy)} \right| dy \tag{2.101}$$

für $x_1 < c < x_2$. Dann ist $\phi(s) = \frac{\tilde{E^+}(s)}{K(s)}$ als Mellin-Transformierte

$$\phi(s) = V.P. \int_0^{\infty} z^{s-1}\, p(z)\, dz = \lim_{\omega \to \infty} \int_{\omega^{-1}}^{\omega} z^{s-1}\, p(z)\, dz \tag{2.102}$$

der Funktion

$$\begin{aligned} p(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s}\, \phi(s)\, ds \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s}\, \frac{\tilde{E^+}(s)}{K(s)}\, ds \quad (x_1 < c < x_2) \end{aligned} \tag{2.103}$$

die von c unabhängig ist, darstellbar.

Aus der Theorie der Fourier-Laplace- und der Mellin-Transformation [Doe71, Tit67] folgt nun, als Konsequenz des bisher Dargestellten: Ist die Funktion E^+ bzw. g ursprünglich auf der reellen ω- bzw. x-Achse gegeben, so ist in der Lösung eine analytische Fortsetzung der Funktion E^+ bzw. g involviert, d.h. die Gleichung kann nur dann im Sinne dieser Integraltransformationen gelöst werden, wenn die Werte von $E^+(\omega)$ bzw. $g(x)$ auf der reellen Achse zu einer Funktion $E^+(z)$ bzw. $g(z)$ gehören, die (zumindest) analytisch für $x > 0$ ist. Bereits allein aus der Tatsache der Darstellbarkeit der Lösung als inverse Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transfomation folgt also, aus den Eigenschaften dieser Integraltransformationen, die Involvierung der funktionentheoretischen Eigenschaften der gegebenen Funktion (den Eigenschaften als komplexe Funktion $E^+(z)$ bzw. $g(z)$) und somit auch eine Involvierung der analytischen Fortsetzbarkeit der Gegebenen E^+ bzw. g. In den vorangegangenen Kapitel 2.4.4 und 2.4.5 haben wir bereits gezeigt, es nur noch nicht in dieser Deutlichkeit formuliert, daß im Fall des phänomenologischen Ansatzes (2.13) dieses sogar aufgrund der Äquivalenz der Lösungen (2.44) und (2.80) noch dahingehend verschärft werden kann, daß zur Lösung eine *analytische Fortsetzung* der Funktion E^+ *implizit* enthalten ist!

An dieser Stelle soll eine Bemerkung zur *Eindeutigkeit der Lösung* der Integralgleichung (2.13), dargestellt als Mellintransformierte (2.39) respektive als inverse Mellin-Transformation (2.44), gemacht werden. Da die Mellin-Transformation eng mit der zweiseitigen Laplace-Transformation verbunden ist[48], gelten analoge Sätze zur im wesentlichen Eindeutigkeit der Bestimmung der Originalfunktion f durch die Transformierte $\tilde{f}$ [Doe71, Tit67]. Die Transformierten sind bis auf eine Funktion, die bis auf eine Menge von (Lebesgues) Maß Null gleich Null sind, definiert; d.h., man kann zur jeder Funktion f eine Funktion N addieren, deren bestimmtes Integral (mit variabler oberer Grenze) identisch verschwindet:

$$\int_{-\infty}^{t} N(\tau)\, d\tau = 0 \quad ; \tag{2.104}$$

$\tilde{f}$ bleibt so unverändert. Für Lebesguesche Integrale folgt dieses daraus, daß bis auf eine Menge vom Maß Null $N(t) = 0$, also auch $e^{-st} N(t) = 0$ ist; für Riemann Integrale ergibt es sich aus der durch partielle

[48] Die Mellin-Transformation kann als eine Art „virtuelle“ zweiseitige Laplace-Transformation angesehen werden.

Integration gewonnene Gleichung

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-st} N(t)\, dt = e^{-st} \int_{-\infty}^{t} N(\tau)\, d\tau \Big|_{-\infty}^{\infty} + s \int_{-\infty}^{\infty} e^{-st}\, dt \int_{-\infty}^{t} N(\tau)\, d\tau \quad .$$

Zu jeder Funktion f gehören also unendlich viele Funktionen $\tilde{f}$, so daß die Abbildung des ursprünglichen Raums in den Mellin- (bzw. Laplace-) Raum nicht eindeutig ist. Es kann jedoch nun gezeigt werde, daß diese Vieldeutigkeit sich schon in der oben aufgezeigten Möglichkeit völlig erschöpft, also relativ harmloser Natur ist[49]. Für die zweiseitige Laplace-Transformation $\mathfrak{L}_{II}$ gilt konkret[50]:

Satz 2.3
Wenn $\tilde{f}(s) = \mathfrak{L}_{II}\{f\}$ in dem Steifen $\beta_1 < x < \beta_2$ ($s = x + iy$) konvergiert und verschwindet, so ist $f(t)$ eine (bis auf eine Menge von Maße Null) Nullfunktion.

Existiert das Integral der Lösung (2.44) also im Sinne der inversen Mellin-Transformation, d.h. es gilt $p = \mathfrak{M}\{\mathfrak{M}^{-1}\{p\}\}$, so ist die Lösung (im obigen Sinne) eindeutig.

Eine Bemerkung zu Integralgleichungen erster Art

Neben dem analytischen Ausdruck und den Eigenschaften der Lösung der Integralgleichung (2.13) und den Bedingungen an die Funktionen zur deren (eindeutigen) Lösung, sind wir insbesondere an ihrer numerische Handhabbarkeit interessiert, da wir die Dielektrizitätsfunktion oftmals nur aus Messungen her kennen. Doch gerade in der numerischen Behandlung Fredholmscher Integralgleichung erster Art liegt das zentrale Problem, denn sie gehören prinzipiel zu den *schlecht gestellten inversen Problemen*[51]! Die Schlechtgestelltheit manifestiert sich hier in der Regel darart, daß beliebig kleine Änderungen, im Sinne einer Metrik, in der bekannten Funktion beliebig große Änderungen in der Lösung ergeben. Betrachten wir die Lösung (2.44), so können wir uns klarmachen, daß die inverse Transformation aufgrund des überlagerten Rauschanteils der Meßwerte von E^+ selbst bei theoretischer Existenz der inversen Transformation des Quotienten $\tilde{E^+}(s)/K(s)$ divergieren kann, da die Divergenzen der Reziproken der Mellintransformierten des Kerns $K(s)^{-1}$ von dem, im Wesen her stochastischen, Rauschanteil der Mellintransformierten $\tilde{E^+}(s)$ an den Integrationsgrenzen nicht kompensiert werden könnten[52].

Und selbst bei einer Existenz der inversen Transformation kann die Abweichung der erhaltenen von der „wahren“ Lösung beliebig sein. Um sich das klar zu machen, betrachten wir folgendes[53]: Ist der Kern $k(x,y)$ der Integralgleichung

$$g(x) = kf = \int_0^{\infty} k(x,y)\, f(y)\, dy$$

[49] Zur tiefergehenden Diskussion der im wesentlichen Eindeutigkeit der Mellin- bzw. Laplace-Transformation sei auf [Doe71, Tit67, Smi88] verwiesen.

[50] Aufgrund der engen Verwandtschaft der Mellin- mit der zweiseitigen Laplace-Transformation gilt ein entsprechender Satz für die Mellin-Transformation. Der Beweis des Satzes ist in [Doe71] zu finden.

[51] siehe Kapitel 4

[52] Ausführlicher wird auf die Instabilität der Lösung Fredholmscher Integralgleichungen erster Art (vom Faltungstyp) bei kleinen Änderungen der bekannten Funktion E^+ in Kapitel 4 und folgende und in den dort angegebenen Referenzen diskutiert.

[53] Die folgende Betrachtung ist sicherlich kein Beweis im strengen Sinne. Doch kann die Instabilität der Lösung Fredholmscher Integralgleichungen erster Art bei kleinen Störungen der bekannten Funktion, bei vorausgesetzter Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, allgemein gezeigt werden. Für eine weitere Diskussion sei auf das Kapitel 4 und folgende und besonders auf [AT77, Iva76, Lav67, LBP91, Mil74] und den dortigen Referenzen verwiesen.

als eine Funktion von y für alle x absolut integrierbar, dann gilt nach dem *Riemann-Lebesguen-Lemma* [Doe71, Tit67]:

$$\lim_{n\to\infty} h_n(x) = \int_0^\infty k(x,y)\cos ny\, dy = 0 \quad \text{für} \quad (0 \le x \le \infty) \quad .$$

Für ein ausreichend großes n kann man also immer sicherstellen, daß für ein $\varepsilon > 0$

$$\max_{0\le x\le\infty} |h_n(x)| \le \varepsilon$$

gilt. Nehmen wir weiter an, die Lösung der Gleichung $kf = g$ sei eindeutig und g möge eine kleine Störung $\delta g = C\,h_n(x)$ besitzen. Die dazu korrespondierende Störung von f ist dann $\delta f = C\cos nx$. Offensichtlich können wir für ein ausreichend großes n das Verhältnis

$$\frac{\|\delta f\|}{\|\delta g\|}$$

beliebig groß werden lassen. Mit anderen Worten, es ist immer möglich, eine z.B. maximale Frequenz ω_{max} zu finden, bei der die Abweichung zwischen der exakten g und der mit Fehlern behafteten bekannten Funktion g^ε kleiner als der Rauschpegel $\nu_R(\varepsilon)$ ist:

$$\|g - g^\varepsilon\| \le \|\nu_R(\varepsilon)\| \quad .$$

An dieser Stelle wollen wir noch das folgende bezüglich der Schlechtgestelltheit **bemerken**:
Die Äquivalenz der Lösungen (2.44), die Darstellung als inverse Mellin-Transformation[54], und der Lösung (2.80), die Darstellung durch den Sprung der Funktion E^+ über deren Verzweigungschnitt[55], legt die Vermutung nahe, daß der Grad der Schlechtgestelltheit[56] der analytischne Fortsetzung der Funktion E^+ in die untere komplexe Halbebene von der selben Größenordnung sein wird, d.h. in der gleichen Klasse der Schlechtgestellheit liegen wird, wie der Grad der Schlechtgestelltheit der Integralgleichung (2.13). Jene wird noch durch die Gleichung (2.85) auf Seite 22 bestärkt, die wir auch als eine Integralgleichung interpretieren können, welche die Funktion E^+ auf der reellen Achse durch deren Werte in der unteren komplexen Halbebene darstellt, genauer durch die Differenz ihrer Werte längs des dort liegenden Verzweigungsschnittes. Der Integralkern der Gleichung (2.85) besitzt bezüglich der Mellin-Transformation formal die gleich Struktur wir der Kern der Integralgleichung (2.13), so daß es nicht verwunderlich ist, daß die jeweiligen Mellintransformierten quasi identisch sind, wie wir an den Gleichungen (2.82) und (2.86) sofort ablesen[57] können. Zumindest die Form der analytischen Fortsetzung, wie wir jene bei der Lösung (2.80) benötigen, ist von gleichen Grad wie die hier untersuchte Integralgleichung schlecht gestellt[58].

2.5.1 Erste Zusammenfassung der Eigenschaften

Fassen wir (vorläufig) die wesentlichen Eigenschaften des phänomenologischen Ansatzes (2.13), die wir bisher in den vorangegangenen Kapiteln aufgezeigt haben, um sie später besser wieder in Erinnerung rufen zu können, zusammen:

1. Die Struktur der Integralgleichung (2.13) ist die eines *Faltungsintegrals*.
2. Da es sich bei der Integralgleichung (2.13) um eine *Fredholmsche Integralgleichung erster Art* handelt, gehört diese zu den *schlecht gestellten inversen Problemen*!

[54] siehe Abschnitt 2.4.2, Seite 15

[55] siehe Abschnitt 2.4.4, Seite 20

[56] Der Grad der Schlechtgestelltheit eines inversen Problems wird im Abschnitt 4.3 eingeführt; siehe dort insbesondere die Definitionen 4.6 und 4.7.

[57] siehe Abschnitt 2.4.5, Seite 22

[58] Diese Eigenschaft ist selbstverständlich die direkte Konsequenz der Äquivalenz der Lösungen.

3. In der Lösung der Integralgleichung (2.13) sind die *funktionentheoretischen Eigenschaften* der gegebenen Funktion E^+ und deren *analytische Fortsetzung* (respektive Fortsetzbarkeit) *implizit involviert*!

4. Die Reziproke der Mellintransformierten des Integralkerns K^{-1} *divergiert exponentiell* an den Grenzen der (komplexen) inversen Mellin-Transformation (Gl. (2.98))!

Abschließend wollen wir ebenso noch die Eigenschaft des „universellen“ Verhältnisses (2.67) respektive (2.68) der Mellintransformierten von Real- und Imaginärteil der Integralgleichung, welches eine Konsequenz der Kramers-Kronig Relationen ist, erwähnen.

Kapitel 3

Die Dichtefunktion einiger Modelle der Dielektrizitätsfunktion

Im nun folgenden Kapitel sollen die (berechneten) Dichtefunktionen p der am meisten verwendeten phänomenologischen Modelle der Dielektrizitätsfunktion E^+ amorpher Systeme (insbesonders werden die folgenden Modelle zur Beschreibung polarer Gläser verwendet!), vorgestellt werden. Die Berechnungen basieren alle auf der Darstellung der Dichtfunktion p als inverse Mellin-Transformation (2.44). Da wir einige Modelle schon in [KR98, Ros95] diskutiert haben, werden detailierte Rechnungen bei diesen Modellen gespart und nur die wesentlichen Zwischenschritte angegeben werden.

3.1 Das Drudemodell

Als erstes soll die Verteilungsfunktion p des Drudemodells [AM76, Jac75, Dru00a, Dru00b] berechnet werden. Die Dielektrizitätsfunktion respektive die korrespondierende Funktion E^+ des Drudemodells hat die Form

$$E_D^+(\omega) = \frac{1}{1 - i\tau_0\omega} \quad , \tag{3.1}$$

entspricht per definitionem des phänomenologischen Ansatzes gerade deren Integralkern (2.27). Die Mellintransformierte $\tilde{E_D^+}$ entspricht also die des Integralkerns (Gleichung (2.40), so daß wir die Dichtefunktion p_D gemäß Gleichung (2.45) schreiben können zu:

$$\tau p_D(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^{-s} ds \tag{3.2}$$

Zur Lösung des Integrales (3.2) schreiben wir es auf die korrespondierende (inverse) Laplace-Transformation um; wir substituieren also: $\tau/\tau_0 = x_{\tau_0} = e^{-t}$. Wir erhalten dann den Ausdruck:

$$p_D(-\ln t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{ts}\, ds \quad . \tag{3.3}$$

Die inverse Transformation (3.3) läßt sich mit Hilfe der Theorie der verallgemeinerten Funktionen (Distri-

butionen) lösen[1]. Daraus folgt für das Integral (3.3)

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\, e^{ts} = \delta(t) \quad , \tag{3.4}$$

denn es gilt nach der Theorie der Distributionen [Roo69, Doe71][2]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t)\, e^{-st} = 1 \quad . \tag{3.5}$$

So erhalten wir als Dichtefunktion p_D des Drudemodells die auch nicht anders erwartete δ-förmige Dichte:

$$\begin{aligned} \tau p_D(\tau) &= \delta\left(\ln\frac{\tau}{\tau_0}\right) \\ &= \frac{\delta(\tau-\tau_0)}{\left|\frac{1}{\tau_0}\frac{\tau_0}{\tau}|_{\tau_0}\right|} \\ p_D(\tau) &= \frac{\tau_0}{\tau}\,\delta(\tau-\tau_0) \end{aligned} \tag{3.6}$$

3.2 Ein funktionentheoretisches Modell

Begründet durch die allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion[3] E^+, haben wir in [Ros95] ein mehr akademisches, funktionentheoretisches Modell betrachtet: Die Funktion E^+ besitze längs der negativen imaginären Achse eine Folge von Polen a_ν. Nach dem Satz von MITTAG-LEFFLER läßt sich, wenn es sich bei der Folge a_ν um eine sich nicht häufende handelt, E^+ durch die Hauptteile der Laurent-Reihe an diesen Polen darstellen [BS76, Tit86]. Da das Holomorphigebiet $\mathcal{G}$ die kompakte Ebene ist, können nur endlich viele Pole: $a_1, a_2, \ldots, a_k$ und eventuell noch der Punkt ∞ existieren. Lauten dann die zugehörigen Hauptteile

$$\sum_{n=1}^{p_\nu} \frac{a_n^{(\nu)}}{(z-a_\nu)^n} \quad ; \qquad \nu = 1, 2, \ldots, k \tag{3.7}$$

bzw.

$$\sum_{m=0}^{p} b_m z^m \quad , \tag{3.8}$$

so liefert die meromorphe Funktion

$$\sum_{\nu=1}^{k}\sum_{n=1}^{p_\nu} \frac{a_n^{(\nu)}}{(z-a_\nu)^n} + \sum_{m=0}^{p} b_m z^m \tag{3.9}$$

eine gesuchte Funktion, die die geforderten Eigenschaften erfüllt [BS76, Tit86]. Sie ist in diesem Fall sogar bis auf eine additive Konstante b_0 eindeutig bestimmt, da die Differenz zweier solcher Funktionen in der komplexen Ebene holomorph, also konstant ist.

---

[1] Hervorragende Darstellungen zur Theorie verallgemeinerter Funktionen und deren Integraltransformationen, wobei es sich bei den Integraltransformationen hauptsächlich um die Fourier-Transformation handelt, sind beispielsweise in [BB93, Lig66, Roo69] zu finden. Eine entsprechende Anwendung der dort aufgeführten Ergebnisse auf andere Integraltransformationen ist aufgrund deren enge Verwandtschaft prinzipiell möglich. Entsprechende Modifikationen sind jedoch vorzunehmen.

[2] DOETSCH begründet das Integral (3.5) über das Stieltjes-Integral.

[3] siehe Kapitel 2.1

Die Darstellung der Funktion E^+ sei also

$$E^+(\omega) = \sum_{\nu=1}^{k} \sum_{n=1}^{p_\nu} \frac{a_n^{(\nu)}}{\left(\omega + \frac{i}{\tau_\nu}\right)^n} = \sum_{\nu=1}^{k} \sum_{n=1}^{p_\nu} a_n^{(\nu)} \left(\frac{\tau_\nu}{i}\right)^n \frac{1}{(1 - i\tau_\nu \omega)^n} \quad . \tag{3.10}$$

Ein Pol im Unendlichen, der $\tau_{k+1} = 0$, also keiner Relaxation, entsprechen würde, soll aufgrund seines unphysikalischen Charakters ausgeschlossen sein. Ohne jetzt auf die Details der Rechnung[4] einzugehen, soll die zu (3.10) korrespondierende Dichtefunktion direkt angegeben werden:

$$p(x) = i \sum_{\nu=1}^{k} \sum_{n=1}^{p_\nu} \frac{a_n^{(\nu)}}{(n-1)!} \left(\frac{\tau_\nu}{i}\right)^{n-1} F_n\left(\ln \frac{\tau_\nu}{x}\right) \quad , \tag{3.11}$$

wobei für die Funktion F_n die Rekursionsformel

$$F_n(t) = (n-2)\, F_{n-1}(t) + F'_{n-1}(t) \tag{3.12}$$

mit

$$\begin{aligned}
F_1(t) &:= \delta(t) && (3.13)\\
F_2(t) &= F'(t) = \delta'(t) && (3.14)\\
F_3(t) &= F_2(t) + F'_2(t) = \delta'(t) + \delta''(t) && (3.15)\\
F_4(t) &= \delta'''(t) + 3\delta''(t) + 2\delta'(t) && (3.16)\\
F_5(t) &= \delta^{(IV)}(t) + 6\delta'''(t) + 11\delta''(t) + 2\delta'(t) && (3.17)
\end{aligned}$$

gilt. Das Ergebnis bedeutet: Für den ν-ten Pol p_ν-ter Ordnung erhalten wir im wesentlichen eine Reihe, bestehend aus der Deltadistributionen und deren Ableitungen bis zur Ordnung $p_\nu - 1$. Im Spezialfall, daß nur $k-$Pole erster Ordnung vorkommen, erhalten wir, wie auch nicht anders erwartet, ein Reihe von Deltadistributionen:

$$p(x) = i \sum_{\nu=1}^{k} a_1^{(\nu)}\, \tau_\nu\, \delta(x - \tau_\nu) \quad . \tag{3.18}$$

3.3 Das Cole-Davidson Modell

Als nächstes soll eine der bekanntesten und oft verwendeten Modellansätze der Dielektrizitätsfunktion ε^+ respektive E^+ eines amorphen Systems behandelt werden. Dieses Modell, das von seinem Wesen her ebenso rein phänomenologisch ist, wurde von R. H. COLE und D. W. DAVIDSON in [DC51] vorgeschlagen und beschreibt das Verhalten einiger Silikat- und Alkaliboratgläser formal richtig [Bec88].

Das *Cole-Davidson Modell* ist konkret:

$$E^+(\omega) = \frac{1}{(1 - i\tau_0\omega)^\beta} \quad , \tag{3.19}$$

Hierbei sind τ_0 und β ersteinmal beliebige Parameter, wobei β zu Beginn der Rechnung auch komplex sein darf. Berechnen wir nun die für die Lösung (2.45) verlangte Mellin-Transformierte $\tilde{E^+}$ des Cole-Davidson Modells:

$$\begin{aligned}
\tilde{E^+}(s) &= \int_0^\infty \omega^{s-1}\, E^+(\omega)\, d\omega = \int_0^\infty \omega^{s-1}\, \frac{1}{(1 - i\tau_0\omega)^\beta}\, d\omega \\
&= \int_0^\infty \frac{\omega^{s-1}}{\left(1 + e^{-i\frac{\pi}{2}}\, \tau_0\omega\right)^\beta}\, d\omega
\end{aligned} \tag{3.20}$$

[4] Die Rechnug wurden detailiert in [Ros95] wiedergegeben. Die zur Berechnung notwendigen Integrale sind übrigens bereits in [Doe71, Tit86, Tit67] zu finden.

Die nach (3.20) zu transformierende Funktion (3.19) kann auf die allgemeine Form

$$f(x) = (1+\alpha x)^{-\nu} \quad \text{mit} \quad |\arg\alpha| < \pi \quad , \tag{3.21}$$

gebracht werden, deren Mellin-Transformierte[5] bekannt ist [EMOT54]:

$$\tilde{f}(s) = \alpha^{-s} B(s, \nu - s) \quad \text{mit} \quad 0 < \Re\mathrm{e}\, s < \Re\mathrm{e}\, \nu \quad . \tag{3.22}$$

Daraus folgt:

$$\tilde{E^+}(s) = (\tau_0)^{-s} e^{i\frac{\pi}{2}s} B(s, \beta - s) \quad . \tag{3.23}$$

$B(x,y)$ ist die *Euler'sche Beta-Funktion*, die durch das Integral

$$B(x,y) = \int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}\, dt \quad \text{mit} \quad \Re\mathrm{e}\, x > 0,\ \Re\mathrm{e}\, y > 0 \quad . \tag{3.24}$$

definiert werden kann[6]. Eine wichtige Beziehung ist die Darstellbarkeit der Beta-Funktion durch die *Gamma-Funktion*:

$$B(x,y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad . \tag{3.25}$$

Setzen wir den Ausdruck (3.23) in die Lösung (2.45) der Integralgleichung ein, erhalten wir für die Verteilungsfunktion das Integral:

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0}\,\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\, \left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{-s} \frac{\sin\{\pi(1-s)\}}{\pi}\, B(1-s, \beta - 1 + s) \quad , \tag{3.26}$$

wobei hier $0 < \Re\mathrm{e}\, s < 1$ als Bedingung für die Existenz der Mellintransformierten $\tilde{E^+}$ gelten muß, was konsistent mit der Bedingung der Existenz der Mellintransformierten $K(s)$ ist[7].

Für die weitere Auswertung des Integrales (3.26) nutzen wir den folgenden *Ergänzungssatz* der Gamma-Funktion aus:

$$\frac{\pi}{\sin \pi z} = \Gamma(z)\,\Gamma(1-z) \quad . \tag{3.27}$$

Setzen wir diesen nun in den Ausdruck (3.26) ein, so erhalten wir als wichtiges Zwischenergebnis:

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0}\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\, \left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{-s} \frac{\Gamma(\beta + s - 1)}{\Gamma(s)\,\Gamma(\beta)} \quad . \tag{3.28}$$

Mit der Substitution $\tilde{s} = s + \beta - 1$ erhalten wir schließlich:

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0\,\Gamma(\beta)}\,\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\tilde{s}\, \left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{-\tilde{s}+\beta-1} \frac{\Gamma(\tilde{s})}{\Gamma(\tilde{s}+1-\beta)} \quad . \tag{3.29}$$

Die inverse Mellin-Transformation der Form

$$\tilde{g}(s) = \frac{\Gamma(s)}{\Gamma(s+\nu)} \quad \text{mit} \quad \Re\mathrm{e}\, \nu > 0\ \ \Re\mathrm{e}\, s > 0 \tag{3.30}$$

[5] Für eine detailierte Berechnung sei z.B auf [Tit67] verwiesen.

[6] Definition, Eigenschaften und funktionale Beziehungen der Beta-Funktion und der Gamma-Funktion untereinander und zu anderen (tranzendenten) Funktionen sind z.B. in [AS68, EMOT53, JEL66] aufgelistet.

[7] siehe Gleichung (2.40)

ist ein Spezialfall eines *Mellin-Barnes Integrals* [EMOT53, Tit86, Tit67, MS78] und kann analytisch berechnet werden[8]:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{(1-x)^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} & \text{für} \quad 0 < x < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < x < \infty \end{cases} \tag{3.31}$$

Wir erhalten als Lösung demnach:

$$p_{CD}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_0 \Gamma(\beta)} \left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{\beta-1} \frac{\left(1-\frac{x}{\tau_0}\right)^{-\beta}}{\Gamma(1-\beta)} & \text{für} \quad 0 < \frac{x}{\tau_0} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < \frac{x}{\tau_0} < \infty \end{cases} \tag{3.32}$$

bzw. nach Zusammenfassen der Terme mit dem Exponenten β und (nochmaliger) Anwendung des Ergänzungsatzes (3.27) abschließend:

$$p_{CD}(x) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\beta\}}{\pi} \frac{1}{x} \left(\frac{x}{\tau_0 - x}\right)^{\beta} & \text{für} \quad 0 < \frac{x}{\tau_0} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < \frac{x}{\tau_0} < \infty \end{cases} \quad , \tag{3.33}$$

wobei aus der Bedingung $\mathfrak{Re}\ \nu > 0$ unmittelbar die Bedingung $\mathfrak{Re}\ \beta < 1$ folgt ($\nu = 1 - \beta$). Wie man sofort leicht sieht, geht für $\beta = 1$ das Cole-Davidson Modell (3.19) in das Drude Modell, und somit im wesentlichen in den Integralkern, über. Im Limes $\beta \to 1$, respektive im Spezialfall $\beta = 1$, geht also die Dichtefunktion (3.33) des Cole-Davidson Modells in die δ-förmige Dichte des Drude-Modells (3.6) über[9]:

$$p_{CD}(x) = \frac{\tau_0}{x}\, \delta(x - \tau_0) \quad (\text{für } \beta \to 1) \quad . \tag{3.34}$$

Der Parameter τ_0 des Cole-Davidson Modells (3.19) ist also, gemäß der Lösung (3.33) der Dichtefunktion zu urteilen, als eine Art obere Schranke bzw. Maximalwert der im System auftretenden Relaxationszeiten τ interpretierbar. In der Abbildung 3.1 auf der nächsten Seite zeigen wir die Dichte des Cole-Davidson Modells für einige Werte des Modellparameters β. Auf deren Verhalten für $x \to 0$ und $x \to \tau_0$ werden wir im Abschnitt 3.6, zusammen mit dem asymptotischen Verhalten der anderen Modelle, noch näher eingehen. Wir bemerken aber bereits hier die (leichte) Divergens der Dichte p_{CD} bei diese beiden Limites, die somit die Cole-Davidson Dichte zu einer der mathematisch pathologischsten macht.

Die hier abgeleitete Lösung (3.33) der Dichtefunktion des Cole-Davidson Modells entspricht, bis auf den Faktor $1/x$, der schon von COLE und DAVIDSON in [DC51] abgeleiteten Verteilung. Die Unterschiede liegen darin, daß die Integralgleichung, auf deren Basis COLE und DAVIDSON die nach ihnen benannte Verteilung berechnet haben, von vornherein auf einer logarithmischen Skala $d(\ln\tau/\tau_0)$ der Relaxations- bzw. Korrelationszeiten τ angesetzt worden ist. Die Integralgleichung (2.13) ist jedoch auf einer „linearen" Skala $d\tau$ angesetzt und somit sind beide Verteilungsfunktionen völlig äquivalent.

[8] So werden in [Tit67, MS78] (inverse) (Mellin)-Transformationen über Gammafunktionen und Mellin-Barnes Integrale ausführlich behandelt und es sei hier bereits auf den Anhang A verwiesen. Für die konkrete Berechnung derartige Integrale sei auch noch zusätzlich auf [Tit86] hingewiesen.

[9] Im Rahmen der Theorie der Distributionen läßt sich an der Dichte (3.33) auch direkt beweisen, daß diese für $\beta \to 1$ respektive $\beta = 1$ in eine δ-Funktion übergeht, jedoch auch für eine sogenannte *Distribution* in einer schon „pathologisch" zu nennenden Art und Weise.

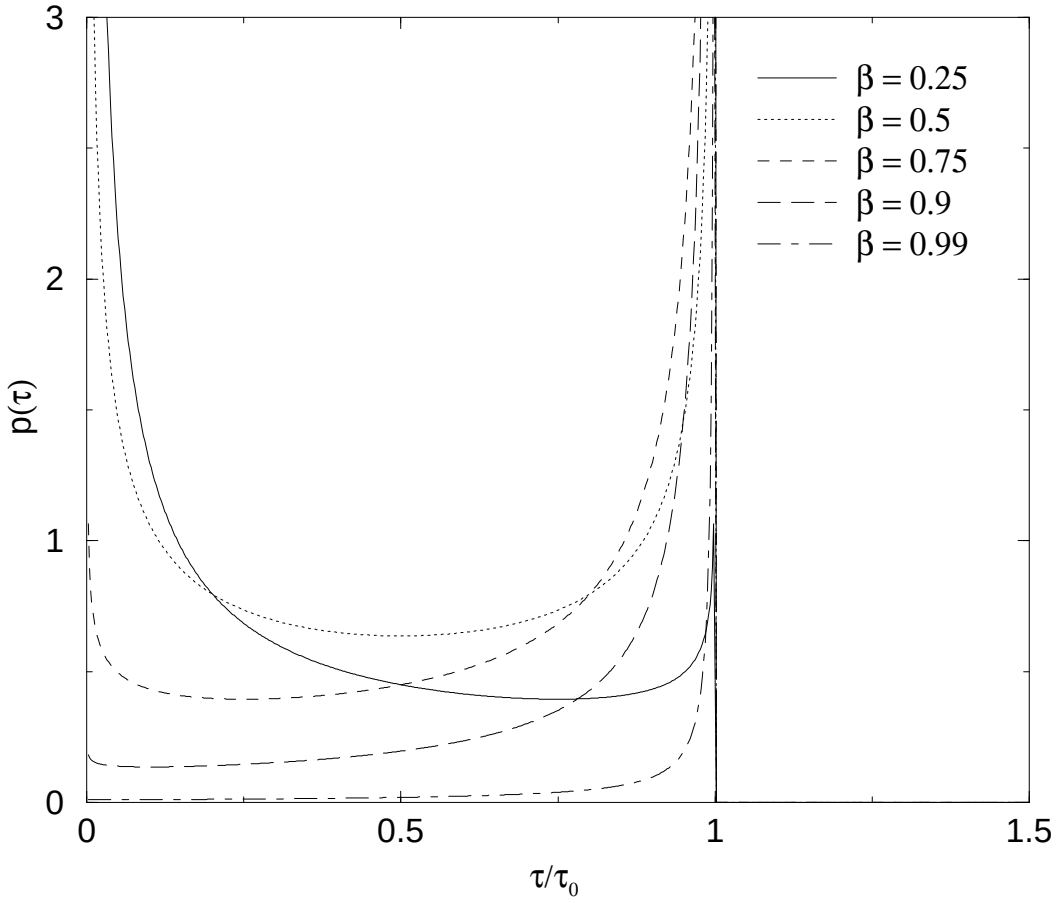

Abbildung 3.1: Die Dichte des Cole-Davidson Modells

3.4 Das Havriliak-Negami Modell

Als weiteres phänomenologisches Modell zur Beschreibung der Dielektrizitätsfunktion wird das *Havriliak-Negami Modell* [Bec88, HN66] herangezogen, dessen Verteilungsdichte p_{HN}, unseres Wissens nach, bisher unbekannt war und nun hergeleitet werden soll. Üblicherweise wird das *Havriliak-Negami Modell* für die komplex konjugierte Funktion E^{+^*} der Funktion E^+ angegeben:

$$E^{+^*}(\omega) = \frac{1}{\left[1 + (i\omega\tau_{HN})^{\alpha}\right]^{\gamma}} \quad , \tag{3.35}$$

woraus also konkret für E^+ folgt:

$$E^{+}(\omega) = \frac{1}{\left[1 + \left(e^{-i\frac{\pi}{2}}\ \omega\tau_{HN}\right)^{\alpha}\right]^{\gamma}} \quad . \tag{3.36}$$

Hierbei seien α, γ und τ_{HN} Parameter, für die wir anfänglich $\alpha \in \mathbb{R},\ \alpha > 0$, $\tau_{HN} \in \mathbb{R},\ \tau_{HN} > 0$ und $\gamma \in \mathbb{C}$ voraussetzen wollen[10]. Wie wir sofort sehen, beinhaltet das Havriliak-Negami Modell das *Cole-Davidson*

[10] Über die mögliche physikalische Bedeutung der Parameter wurde (und wird) heftig und gerne gestritten [Bec88, Ell83, Zal83]. Bezüglich der folgenden Berechnung der Dichte p_{HN} können wir den Parameter γ als eine komplexe Größe betrachten, in der Praxis wird dieser aber (sinnvollerweise) als reellwertig vorausgesetzt.

($\alpha = 1$), siehe vorangegangenes Kapitel 3.3 und [DC51], und das *Cole-Cole Modell* ($\gamma = 1$)[CC41] als *Spezialfälle*, weswegen letzteres hier auch nicht nochmal explizit behandelt werden soll. Für $\alpha = \gamma = 1$ geht das Modell wiederum in das *Drude Modell* über. Das Havriliak-Negami Modell kann also als eine *Synthese* respektive *Verallgemeinerung* dieser Modelle betrachtet werden.

Um auf der Basis von (2.44) bzw. (2.45) die gesuchte Dichtefunktion des Havriliak-Negami Modells auszurechnen, benötigen wir dessen Mellintransformierte

$$\tilde{E^+}(s) = \int_0^\infty \left[1 + \left(e^{-i\frac{\pi}{2}}\,\omega\tau_{HN}\right)^\alpha\right]^{-\gamma} \omega^{s-1}\,d\omega \quad . \tag{3.37}$$

Die nach (3.37) zu transformierende Funktion (3.36) ist von der allgemeinen Form

$$f(x) = \left(1 + ax^h\right)^{-\nu} \quad \text{mit} \quad |\arg a| < \pi\,, \quad h > 0 \quad , \tag{3.38}$$

deren Mellin-Transformierte $\tilde{f}$ berechenbar und durch[11]:

$$\tilde{f}(s) = h^{-1}\,a^{-\frac{s}{h}}\,B\left(\frac{s}{h}, \nu - \frac{s}{h}\right) \quad \text{mit} \quad 0 < \Re\mathrm{e}\,s < h\,\Re\mathrm{e}\,\nu \quad , \tag{3.39}$$

gegeben ist [EMOT54]. Hier sei $B(x,y)$ wiederum die *Euler'sche Beta-Funktion*[12]. Damit folgt für $\tilde{E^+}$:

$$\tilde{E^+}(s) = \alpha^{-1}\tau_{HN}^{-s}\,e^{i\frac{\pi}{2}s}\,B\left(\frac{s}{\alpha}, \gamma - \frac{s}{\alpha}\right) \quad \text{mit} \quad 0 < \Re\mathrm{e}\,s < \alpha\Re\mathrm{e}\,\gamma. \tag{3.40}$$

Aus der Bedingung $\left|\alpha\frac{\pi}{2}\right| < \pi$ folgt unmittelbar: $\alpha < 2$. Zusammen mit der Bedingung der Existenz der Mellintransfomierten K (Gl. (2.40)) des Integralkerns, folgt aus den *Faltungssätzen der Fourier-Laplace-* respektive *Mellin-Transformation*[13], daß hier für die Parameter

$$0 < \Re\mathrm{e}\,s < \alpha\Re\mathrm{e}\,\gamma < 1 \tag{3.41}$$

gelten muß. Setzen wir den obigen Ausdruck in (2.44) ein, berücksichtigen wir noch sowohl den Ergänzungssatz (3.27),

$$\frac{\pi}{\sin(\pi s)} = \Gamma(s)\Gamma(1-s) \quad ,$$

als auch die Darstellung der Beta- durch die Gammafunktion (3.25),

$$B(x,y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} \quad ,$$

und sortieren die erhaltenen Terme etwas um, so erhalten wir als wichtiges Zwischenergebnis die Darstellung

$$p_{HN}(x) = \frac{1}{\alpha\tau_{HN}}\frac{1}{\Gamma(\gamma)}\,\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-s}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1-s}{\alpha}\right)\Gamma\left(\gamma - \frac{1-s}{\alpha}\right)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)} \tag{3.42}$$

für die gesuchte p_{HN}.

Die obige Gleichung (3.42) ist ein Spezialfall eines sogenannten *Mellin-Barnes Integrals*:

$$H(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_L h(s)\,x^{-s}\,ds \tag{3.43}$$

---

[11] Für eine detailierte Berechnung sei, wie schon in Kapitel 3.3, z.B auf [Tit67] verwiesen.

[12] siehe auch Kapitel 3.3

[13] Eine ausführliche Darstellung der Faltungssätze findet sich in [Doe71]; siehe auch Anhang [FALTUNG]

mit

$$h(s) = \frac{\prod_{i=1}^{m} \Gamma(b_i + \beta_i s) \prod_{j=1}^{n} \Gamma(1 - a_j - \alpha_j s)}{\prod_{i=m+1}^{q} \Gamma(1 - b_i - \beta_i s) \prod_{j=n+1}^{p} \Gamma(a_j + \alpha_j s)} \quad , \tag{3.44}$$

wobei L ein Integrationsweg in der komplexen s-Ebene sei, a_j, b_j seien komplexe Zahlen und α_j und β_j seien positive reelle Zahlen, und die so definierte Funktion

$$H(x) = H_{p,q}^{m,n}(x) = H_{p,q}^{m,n}\left[x \,\middle|\, \begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right] \tag{3.45}$$

wird *Fox'sche H-Funktion* genannt. Ein kleine Einführung in die Theorie der Mellin-Barnes Integrale und der Fox'schen H-Funktion geben wir in dem Anhang A, wobei wir uns dort, verständlicherweise, nur auf die für unsere Arbeit relevanten Ergebnisse beschränken werden. Für ausführliche Darstellungen der Theorie und Anwendungen der Mellin-Barnes Integrale respektive der Fox'schen H-Funktion sei auf die Bücher von WHITTAKER und WATSON [WW69] und MATHAI und SAXENA [MS78], sowie auf [EMOT53] verwiesen. Es sei aber bereits an dieser Stelle erwähnt, daß es sich bei der H-Funktion um eine der *allgemeinsten speziellen Funktionen* handelt, die als *Spezialfälle nahezu alle speziellen Funktionen der Mathematik und mathematischen Physik enthält*!

Betrachten wir also nun folgende H-Funktion:

$$H_{2,2}^{1,1}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right) = \int_L \left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-s} \frac{\Gamma\left(\frac{1-s}{\alpha}\right)\Gamma\left(\gamma - \frac{1-s}{\alpha}\right)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)} \quad , \tag{3.46}$$

wobei der Integrationsweg L noch beliebig sein soll. Als erstes können wir festhalten, daß es sich sowohl bei den Polen von $\Gamma\left(\frac{1-s}{\alpha}\right)$ als auch von $\Gamma\left(\gamma - \frac{1-s}{\alpha}\right)$ jeweils um *Pole erster Ordnung* (einfache Pole) handelt, konkretisiert besitzt der Integrand (3.46) Pole erster Ordnung bei:

a) $-n = \gamma - \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\alpha}s$, also bei $s = 1 - \alpha(n+\gamma)$, $n \in \mathbb{N}$. An der Stelle $s = 1 - \alpha\gamma$ befindet sich somit der erste *linksseitige Pol*,

b) $-n = \frac{1}{\alpha} - \frac{1}{\alpha}s$, also bei $s = 1 + \alpha n$, $n \in \mathbb{N}$. An der Stelle $s = 1$ befindet sich somit der erste *rechtsseitige Pol*

und die linksseitigen und rechtsseitigen Pole sind offensichtlich dann voneinander wohl separiert, wenn wir

$$1 - \alpha\Re\mathfrak{e}\,\gamma < \Re\mathfrak{e}\,s < 1 \quad , \tag{3.47}$$

in Konsistenz mit (3.41), fordern; dementsprechend gilt dann $1 - \alpha(n+\gamma) \neq 1 + \alpha m$, $\forall n, m \in \mathbb{N}$.

Für die im Anhang A definierten Größen μ (Gl. A.8) und β (Gl. A.9), die für die Klärung der Existenz und für die Darstellung der H-Funktion hilfreich sind, ergibt sich hier konkret:

$$\mu = \frac{1}{\alpha} + 1 - \left(\frac{1}{\alpha} + 1\right) = 0 \tag{3.48}$$

$$\beta = \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\alpha}} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{\alpha}} = 1 \tag{3.49}$$

$$\text{und} \qquad q = 2\,; \quad p = 2 \quad ,$$

und gemäß den Ausführungen im Anhang A und in [MS78], können wir deswegen bezüglich der Existenz und der Darstellung obiger H-Funktion (3.46) zum einen festhalten, daß der Integrationsweg L auf $L_{(c-i\infty, c+i\infty)}$, also

$$\int_L ds \to \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \quad ,$$

ausgedehnt (deformiert) werden kann, und zum anderen[14]:

a) Die Funktion $H_{2,2}^{1,1}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)$ existiert für

$$\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| < 1 \quad , \tag{3.50}$$

und das Integral (3.46) läßt sich durch die *Summe der Residuen der linkseitigen Pole* bei

$$s = 1 - \alpha(n+\gamma) \tag{3.51}$$

darstellen, wobei des n-te Residuum durch

$$\alpha\frac{(-1)^n}{n!} \tag{3.52}$$

gegeben ist.

b) Die Funktion $H_{2,2}^{1,1}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)$ existiert für

$$\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| > 1 \quad , \tag{3.53}$$

und das Integral (3.46) läßt sich durch die *Summe der Residuen der rechtsseitigen Pole* bei

$$s = 1 + \alpha n \tag{3.54}$$

darstellen, wobei (ebenso) das n-te Residuum durch

$$\alpha\frac{(-1)^n}{n!} \tag{3.55}$$

gegeben ist.

Ob das Mellin-Barnes Integral (3.46) für $\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| = 1$ existiert, hängt von dessen Konvergenzverhalten, und somit von den Parametern α und γ ab. Basierend auf der Asymptotik für $|y| \to \infty$ ($s = \eta + iy$) der Γ-Funktion[15], können wir konkret folgendes zum Konvergenzverhalten des uns interessierenden Integrals sagen:

1. Fall: Es gelte $0 < \alpha < 1$: Das Integral (3.46) konvergiert absolut für $|\arg x| < a\frac{\pi}{2}$, wobei hier konkret $a = 2\left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)$ ist, und definiert eine im Sektor $|\arg x| < \min(\pi, a\frac{\pi}{2})$, mit eventuellem Ausschluß des Punktes $x = 0$, analytische Funktion.

2. Fall: Es gelte $\alpha = 1$ und $0 \leq \gamma < 1$, was dem Cole-Davidson Modell entspricht: Das Integral (3.46) konvergiert, wie bereits erwähnt, für $0 < \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| < 1$ und für $\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| > 1$. An dem Punkt $\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| = 1$ besitzt es, wie wir bereits aus dem Cole-Davidson Modell wissen, eine Unstetigkeit respektive ist dort nicht definiert.

Aus dem bisher gesagten folgt also, daß wir die gesuchte Dichte p_{HN} des Havriliak-Negami Modells durch die H-Funktion ausdrücken können:

$$p_{HN}(x) = \frac{1}{\alpha\tau_{HN}}\frac{1}{\Gamma(\gamma)}\, H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{x}{\tau_{HN}}\,\middle|\,\begin{matrix}\left(1-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1)\\ \left(\gamma-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1)\end{matrix}\right] \quad , \tag{3.56}$$

[14] Zu der Berechnung der Residuen der Γ-Funktion sei z.B. auf [BS76, Tit67, WW69] verwiesen.

[15] siehe Anhang A und [EMOT53]

wobei

$$H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{x}{\tau_{HN}}\,\middle|\,\begin{matrix}\left(1-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1)\\ \left(\gamma-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1)\end{matrix}\right]=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-s}\frac{\Gamma\left(\frac{1-s}{\alpha}\right)\Gamma\left(\gamma-\frac{1-s}{\alpha}\right)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)} \tag{3.57}$$

ist; dieses ist natürlich ersteinmal nur eine formale Umschreibung. Ausgedrückt durch die Summe der Residuen des Integranden (3.57), wie unter den obigen Punkten a) und b) dargelegt, können wir die H-Funktion (3.57) folgendermaßen darstellen[16]:

$$H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{x}{\tau_{HN}}\right]=\begin{cases}\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\alpha\frac{(-1)^n}{n!}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\alpha}-\frac{1}{\alpha}(1-\alpha(n+\gamma))\right)}{\Gamma(1-\alpha(n+\gamma))\Gamma(1-(1-\alpha(n+\gamma)))}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-(1-\alpha(n+\gamma))} & \text{für}\quad 0<\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right|<1\\ \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\alpha\frac{(-1)^n}{n!}\frac{\Gamma\left(\gamma-\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{\alpha}(1+\alpha n)\right)}{\Gamma(1+\alpha n)\Gamma(1-(1+\alpha n))}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-(1+\alpha n)} & \text{für}\quad \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right|>1\end{cases}, \tag{3.58}$$

woraus sich letztendlich für die Dichte des Havriliak-Negami Modells, nach einigen Umformungen, die Reihendarstellung

$$p_{HN}(x)=\begin{cases}\frac{1}{x}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{\alpha\gamma}\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\frac{\sin(\pi\alpha(n+\gamma))}{\pi}(\gamma)_n\left(\frac{\tau}{\tau_{HN}}\right)^{\alpha n} & \text{für}\quad 0<\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right|<1\\ \frac{1}{x}\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\frac{\sin(\pi(1+\alpha n))}{\pi}(\gamma)_n\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-\alpha n} & \text{für}\quad \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right|>1\end{cases} \tag{3.59}$$

ergibt. Hierbei bezeichnet $(\gamma)_n=\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)$, wobei per definitionem $(\gamma)_0=1$ gilt, das *Pochhammer-Symbol* und für die Modellparameter gilt, nochmal zusammengefaßt: $\tau_{HN}>0$, $0<\alpha\leq 1$, $0<\mathfrak{Re}\,\gamma$ und $0<\alpha\mathfrak{Re}\,\gamma<1$. Im Fall $\alpha=1$ (dem Cole-Davidson Modell) gilt zusätzlich $0<\mathfrak{Re}\,\gamma<1$.

Bevor wir uns einer Verallgemeinerung der bisherigen Modelle und den asymptotischen Eigenschaften des Havriliak-Negami Modells, und somit auch implizit denen des Cole-Cole- und Cole-Davidson Modells, zuwenden, wollen wir vorab einige Graphen der Dichte p_{HN} betrachten. Der Ausdruck (3.59) bietet die Basis, um die Dichte p_{HN} des Havriliak-Negami Modells zumindest numerisch zu bestimmen. Es kann nun gezeigt werden, daß die Summen in (3.59), für die angegeben Bereiche der Parameter α und γ, absolut konvergieren[17].

Abbildung 3.2 auf der nächsten Seite gibt einen Überblick über die Graphen der Havriliak-Negami Dichte bei einer Variation der Parameter α und γ innerhalb deren Geltungsbereichs, wobei wir uns - um physikalische und „vernünftige“ Dichten zu erhalten - auf $\gamma\in\mathbb{R}$ beschränkt haben. In Abbildung 3.3 auf Seite 42 haben wir das schon bekannte Cole-Cole Modell reproduziert.

[16] siehe die Gleichungen (A.14) und (A.15) des Anhangs A

[17] Generelles zur Konvergens der Reihendarstellung der Foxschen H-Funktion siehe Anhang A und beispielsweis [EMOT53, MS78]

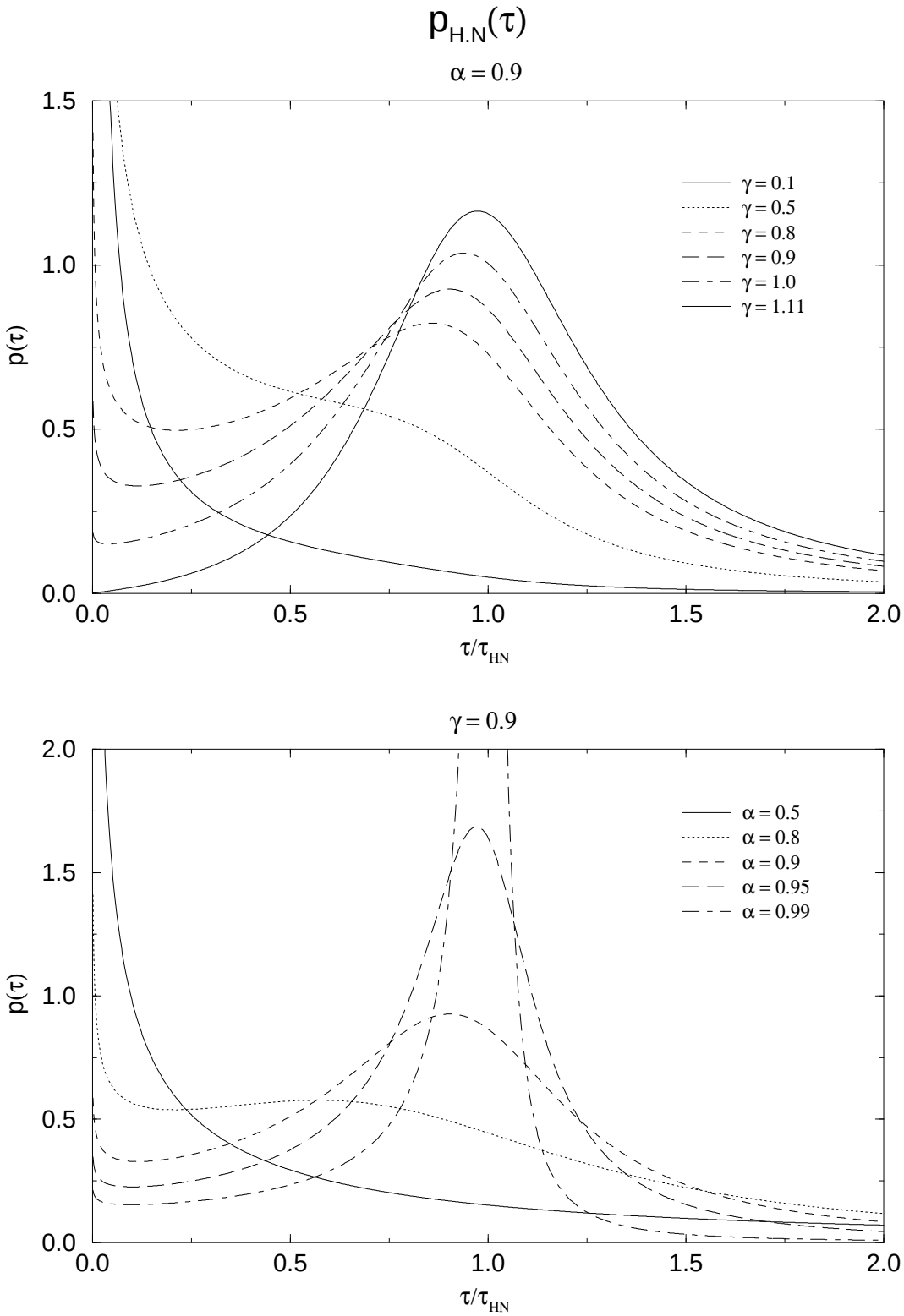

Abbildung 3.2: Die Dichte des Havriliak-Negami Modells

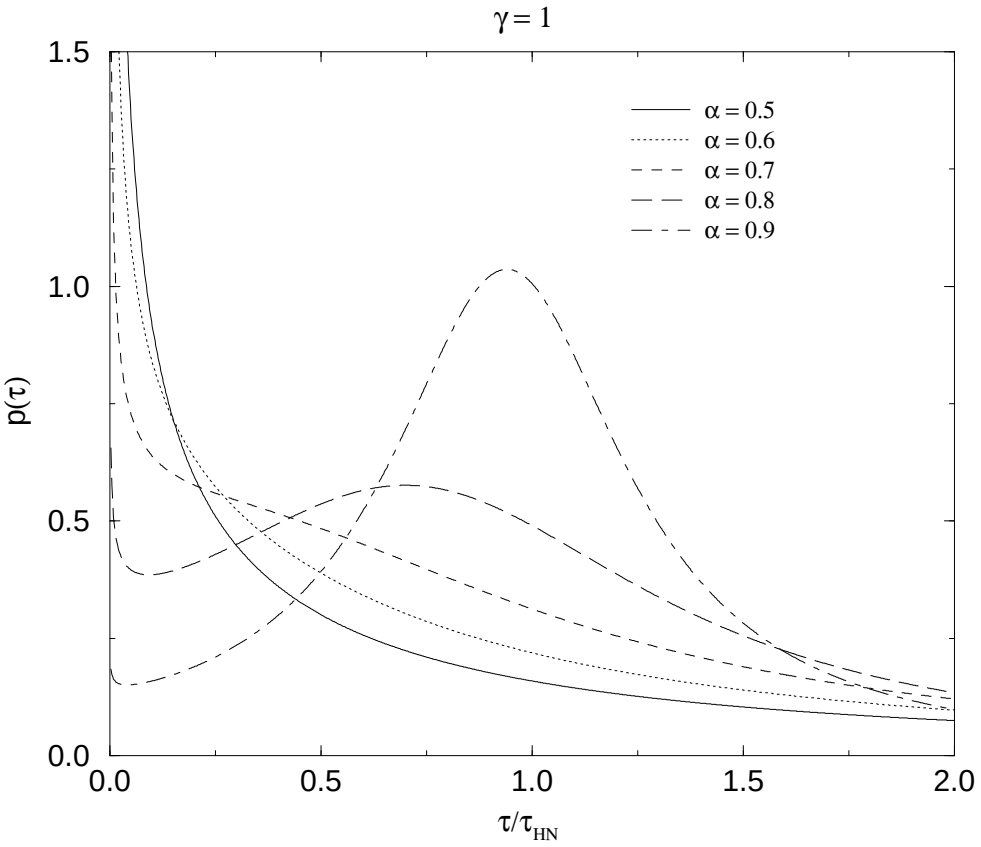

Abbildung 3.3: Die Dichte des Cole-Cole Modells

Die Abbildungen 3.2 und 3.3 weisen schon auf die problematischste Eigenschaft der Integralgleichung (2.13) hin: kleine Variationen in den Parametern können zu großen Veränderungen in den Graphen der Dichtefunktionen - also in den Lösungen - führen, was nichtsweiter als die Manifestation des schlecht gestellten Problems ist!

3.5 Ein verallgemeinertes Modell

Wie wir gerade gesehen haben (Kapitel 3.4), können wir die Dichte p_{HN} des (phänomenologischen) Havriliak-Negami Modells durch die Fox'sche H-Funktion ausdrücken (Gl. (3.56) und (3.57))

$$p_{HN}(x) = \frac{1}{\alpha\tau_{HN}} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{x}{\tau_{HN}} \middle| \begin{matrix} \left(1-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \\ \left(\gamma-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \end{matrix} \right] \quad ,$$

wobei

$$H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{x}{\tau_{HN}} \middle| \begin{matrix} \left(1-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \\ \left(\gamma-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \end{matrix} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-s} \frac{\Gamma\left(\frac{1-s}{\alpha}\right)\Gamma\left(\gamma-\frac{1-s}{\alpha}\right)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)}$$

ist. Es ist nun offensichtlich ebenso möglich, daß Cole-Davidson Modell durch eine H-Funktion darzustellen, denn zum einen ist dieses ein Spezialfall des Havriliak-Negami Modells ($\alpha = 1$), und zum anderen

haben wir in Kapitel 3.3 als ein wichtiges Zwischenergebnis bei der Herleitung der Dichte p_{CD} des Cole-Davidson Modells (Gl. (3.28))

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0}\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\ \left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{-s}\ \frac{\Gamma(\beta+s-1)}{\Gamma(s)\Gamma(\beta)}$$

erhalten. Also kann die Dichte p_{CD} auch durch

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0\Gamma(\beta)}\ H_{1,0}^{1,0}\left[\frac{x}{\tau_0}\,\middle|\,\begin{matrix}(0,1)\\(\beta-1,1)\end{matrix}\right] \tag{3.60}$$

ausgedrückt werden[18]. Die Gleichungen (3.56), (3.57) und (3.60) legen nun nahe, eine Verallgemeinerung der bisherigen Modelle, basierend auf der H-Funktion, vorzuschlagen. Quasi als „Vorstufe“, postulieren wir als generelle Struktur eines „verallgemeinerten Modells“ p_H:

$$\begin{aligned} p_H(x) &= C\,H_{p,q}^{m,n}\left(\frac{x}{\tau_0}\right) \\ &= C\,\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}\left(\frac{x}{\tau_0}\right)^{-s}\chi(s)\,ds \end{aligned} \tag{3.61}$$

mit

$$\chi(s) = \frac{\prod_{j=1}^{m}\Gamma(b_j+\beta_j s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)\prod_{j=m+2}^{q}\Gamma(1-b_j-\beta_j s)\prod_{j=n+2}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j s)}\quad , \tag{3.62}$$

wobei C die Normierungskonstante sei.

Geht man jetzt noch einen Schritt weiter, so kann auf der Basis der Struktur (3.61, 3.62) eine allgemeine Klasse von Dichtefunktionen p_H definiert werden. Da es sich bei der H-Funktion um eine recht allgemeine spezielle Funktion handelt [EMOT53, MS78, WW69], wurde ein derart allgemeines (Wahrscheinlichkeits-)Modell bereits von MATHAI und SAXENA im Rahmen der Statistik und Wahrscheinlichkeitstheorie vorgeschlagen. [MS78]. Dieses *verallgemeinerte Modell* ist konkret durch

$$p_H(x) = \frac{\exp(-dx)x^{\lambda-1}}{c(1+bx^k)^{\mu-1}}H_{p,q}^{m,n}\left[\left(\frac{ax^k}{1+bx^k}\right)^s\,\middle|\,\begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right]\quad\text{für}\quad x>0 \tag{3.63}$$

und $p(x)=0$ sonst, definiert, wobei die Normierung c durch

$$c = \sum_{r=0}^{\infty}\frac{(-d)^r b^{-\frac{\lambda+r}{k}}}{r!\,k}\Gamma\left(\mu-1-\frac{\lambda+r}{k}\right)H_{p+1,q+1}^{m,n+1}\left[\left(\frac{a}{b}\right)^s\,\middle|\,\begin{matrix}\left(1-\frac{\lambda+r}{k}\right),(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q),(2-\mu,s)\end{matrix}\right] \tag{3.64}$$

gegeben ist, und die Größen a, b, d, s seien reelle, positive Parameter[19]. Offensichtlich ist die so definierte Funktion p_H nicht für alle möglichen Werte der enthaltenen Parameter eine nicht-negative Funktion. Es existieren jedoch Parametersätze, für die

$$p_H(x) \geq 0 \quad \text{für} \quad 0 < x < \infty$$

[18] Im Fall des Cole-Davidson Modells geht die Fox'sche H-Funktion in die *Meijer'sche G-Funktion*

$$p_{CD}(x) = \frac{1}{\tau_0\Gamma(\beta)}\ G_{1,0}^{1,0}\left(\frac{x}{\tau_0}\,\middle|\,\begin{matrix}0\\\beta-1\end{matrix}\right)$$

über, was auch nicht verwundert, da die H-Funktion ist eine Verallgemeinerung der G-Funktion ist; Definition und Eigenschaften der G- und H-Funktionen siehe [EMOT53, MS78].

[19] Es sei darauf hingewiesen, daß s hier einen reellen, positiven Parameter bezeichnen soll und *nicht* die komplexe Variable der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation.

und

$$\int_0^\infty p_H(x)\, dx = 1$$

gilt[20], d.h. implizit wird sich in der Definition von p_H auf die Parametersätze beschränkt, für die (Gl. 3.63) tatsächlich eine Dichtefunktion darstellt.

Einige der in der Statistik häufig angewendeten *Spezialfälle* der verallgemeinerten Dichte (3.63) sind beispielsweise

1. die Γ-variante Dichtefunktion:

$$p_H(x) = \frac{\beta a^{\alpha/\beta}}{\Gamma\left(\frac{\alpha}{\beta}\right)} x^{\alpha-1}\, e^{-ax^\beta}, \quad a > 0, \alpha > 0, \beta > 0 \tag{3.65}$$

   für $x > 0$

2. die nichtzentrale Chi-Quadrat Dichte:

$$p_H(x) = e^{-\frac{\mu^2}{2\sigma^2}} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!\Gamma\left(r+\frac{k}{2}\right)} \left(\frac{\mu^2}{2\sigma^2}\right)^r \left(\frac{1}{2}\right)^{r+\frac{k}{2}} e^{-\frac{x}{2}} x^{r+k-1} \tag{3.66}$$

   für $x > 0$.

3. die nichtzentrale F-Dichte:

$$p_H(x) = e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\lambda^{2r}}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{k+m}{2}+r\right)}{r!\,\Gamma\left(\frac{k}{2}+r\right)\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)} \frac{x^{r-1+k/2}}{(1+x)^{r+(k+m)/2}} \tag{3.67}$$

   für $x > 0$.

4. die mit der hypergeometrischen Funktion assoziierten Dichtefunktion[21]:

$$p_H(x) = \frac{ba^{c/b}\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)\Gamma\left(\gamma-\frac{c}{b}\right) x^{c-1}}{\Gamma\left(\frac{c}{b}\right)\Gamma(\gamma)\Gamma\left(\beta-\frac{c}{b}\right)}\, {}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; -ax^b) \tag{3.68}$$

   für $x > 0$, $c > 0$, $\alpha - \frac{c}{b} > 0$, $\beta - \frac{c}{b} > 0$.

Diese Beispiele sollen den breiten Bereich an möglichen Dichtefunktionen, die mit dem verallgemeinerten Modell (3.63) abgedeckt werden, andeuten, wobei wir die weiteren „einfachen“ Beispiele wie Gauß- und Lorentz-Dichten erst gar nicht als Spezialfälle angegeben haben, und offensichtlich können wir bei einer geeigneten Wahl der Parameter die bisher diskutierten Modelldichten reproduzieren.

Aufgrund des in diesen und den vorangegangenen Kapiteln dargestellten, können wir es wagen, das folgende „Korollar“ auszusprechen:

Korollar 3.1
Das verallgemeinerte Modell p_H, definiert durch die Gleichungen (3.63) und (3.64), ist eine allgemeine Lösung, im Sinne eines allgemeinen Modellansatzes, der phänomenologischen Integralgleichung (2.13).

Bezüglich der Praxis hat dieses zur Konsequenz, daß wir die möglichen Lösungen der Integralgleichung (2.13) *nicht* von Vornherein, auch nicht aufgrund der allgemeinen physikalischen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion, einschränken können, sondern das im Gegenteil das breite Spektrum der erdenklichen Dichtefunktionen als Lösungen zu erwarten sei.

[20] Für weitere Details sei auf [MS78] und den dortigen Referenzen verwiesen.

[21] Definition und Eigenschaften der hypergeometrischen Funktionen sind ausführlich beispielsweise in [EMOT53, WW69] dargestellt

3.6 Das asymptotische Verhalten der Modelldichten

Eine der wichtigen Fragestellungen betrifft das asymptotische Verhalten der Dichtefunktion p für kleine Relaxationszeiten [KR98], also für $x \to 0$. Da, wie bereits erwähnt, das Havriliak-Negami Modell als Spezialfälle das Cole-Cole- und das Cole-Davidson Modell enthält, wollen wir uns bei der Untersuchung der Asymptotik auch nur auf dieses beschränken; die Asymptotik der beiden anderen Modelle[22] wird dann daraus unmittelbar folgen.

Betrachten wir die Dichte p_{HN} (Gl.(3.56)) des Havriliak-Negami Modells

$$p_{HN}(x) = \frac{1}{\alpha\tau_{HN}} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} H^{1,1}_{2,2}\left[\frac{x}{\tau_{HN}} \middle| \begin{matrix} \left(1-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \\ \left(\gamma-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}\right),(0,1) \end{matrix} \right] \quad ,$$

respektive deren Darstellung (3.59) durch die Summe der Residuen der obigen H-Funktion[23],

$$p_{HN}(x) = \begin{cases} \frac{1}{x}\left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{\alpha\gamma} \sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\sin(\pi\alpha(n+\gamma))}{\pi} (\gamma)_n \left(\frac{\tau}{\tau_{HN}}\right)^{\alpha n} & \text{für} \quad 0 < \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| < 1 \\ \frac{1}{x} \sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\sin(\pi(1+\alpha n))}{\pi} (\gamma)_n \left(\frac{x}{\tau_{HN}}\right)^{-\alpha n} & \text{für} \quad \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| > 1 \end{cases} .$$

Die Basis für die Untersuchung des asymptotischen Verhaltens kann jetzt sowohl die Darstellung (3.56), zuzüglich des asymptotischen Ausdrucks der im Integranden der H-Funktion stehenden Γ-Funktionen[24], als auch die Reihendarstellung (3.59) bilden, wobei wir bei letzteren die Asymptotik sowohl für $x \to 0$ als auch für $x \to \infty$ quasie direkt ablesen können, da die beiden Reihen für $0 < \left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| < 1$ und $\left|\frac{x}{\tau_{HN}}\right| > 1$ bereits als *asymptotische Entwicklungen* für $x \to 0$ und $x \to \infty$ interpretiert werden können[25]. Für die Asymptotik der Dichte p_{HN} folgt also aus der Reihendarstellung (3.59) unmittelbar:

a) Im Limes $x \to 0$, also $\frac{x}{\tau_{HN}} \to 0$, ist

$$p_{HN}(x) = O\left(x^{\alpha\gamma-1}\right) \tag{3.69}$$

mit $0 < \alpha\gamma < 1$,

b) Im Limes $x \to \infty$, also $\frac{x}{\tau_{HN}} \to \infty$, ist

$$p_{HN}(x) = O\left(x^{-1}\right) \quad , \tag{3.70}$$

und für die Asymptotik im Limes $x \to 0$ der Dichte p_{CC} des Cole-Cole Modells ($\gamma = 1$) folgt daraus sofort:

$$p_{CC}(x) = O\left(x^{\alpha-1}\right) \quad \text{mit} \quad 0 < \alpha < 1 \quad , \tag{3.71}$$

und entsprechend folgt für die Asymptotik der Dichte p_{CD} des Cole-Davidson Modells ($\alpha = 1$) für $x \to 0$ sofort[26]:

$$p_{CD}(x) = O\left(x^{\gamma-1}\right) \quad \text{mit} \quad 0 < \gamma < 1 \quad . \tag{3.72}$$

Für $x \to \tau_0$ gilt noch zusätzlich, gemäß des Ausdrucks (3.33),

$$p_{CD}(x) = O\left((\tau_0 - x)^{-\gamma}\right) \quad . \tag{3.73}$$

---

[22] Das asymptotische Verhalten der Cole-Cole- und der Cole-Davidson Dichten ist aufgrund deren vorherigen Kenntnis selbstverständlich bereits bekannt [CC41, DC51, Bec88].

[23] siehe Kapitel 3.4

[24] siehe auch [Doe71, Doe72, EMOT53, MS78]

[25] Diesbezüglich sei wiederum auf [Doe71, Doe72, EMOT53, MS78] verwiesen.

[26] Das asymptotische Verhalten des Cole-Davidson Modells läßt sich natürlich ebenso an (3.33) untersuchen und war dementsprechend bereits bekannt.

Wir können also festhalten, daß die Dichten der *phänomenologischen Cole-Cole-, Cole-Davidson- und Havriliak-Negami Modelle* für $x \to 0$ eine *schwache Divergenz* aufweisen, eine Tatsache, die wir ebenso anhand der Graphen dieser Dichten ablesen können.

Das asymptotische Verhalten des verallgemeinerten Modells p_H (Gl.(3.63)) hängt offensichtlich von dessen Parametern ab. Allgemein läßt sich über die Asymptotik der Fox'schen H-Funktion folgendes aussagen[27]:

- Für $x \to 0$ ist
$$H_{p,q}^{m,n}(x) = O(|x|^c) \quad , \tag{3.74}$$
wobei $c = \min \mathfrak{Re}\left(\frac{b_j}{\beta_j}\right)$ sei.
- Für $x \to \infty$ ist
$$H_{p,q}^{m,n}(x) = O\left(|x|^d\right) \quad , \tag{3.75}$$
wobei $d = \max \mathfrak{Re}\left(\frac{a_j-1}{\alpha_j}\right)$ sei.

Ohne jetzt auf weitere Details einzugehen, diese sind beispielsweise in [EMOT53, MS78] besser wiedergegeben, können wir deswegen allgemein festhalten, daß das verallgemeinerte Modell für die Sätze von Parametern, für die (3.63) tatsächlich eine Dichtefunktion p_H definiert, für $x \to 0$ entweder gegen Null oder einen konstanten Wert strebt oder, wie die phänomenologischen Modelle, eine schwache Divergenz aufweist.

Wir kommen am Ende dieses Kapitels bezüglich allgemeiner Aussagen über die Asymptotik der Dichtefunktionen, wie sie duch den phänomenologischen Ansatz (2.13) definiert sind, also zu dem

Ergebnis 1
Die Dichtefunktion p der Relaxationszeiten τ kann im Limes $\tau \to 0$ entweder

a) gegen Null streben, $p(\tau) \to 0$,

b) gegen eine Konstante C streben, $p(\tau) \to C$,

c) oder, wie die phänomenologischen Cole-Cole-, Cole-Davidson- und Havriliak-Negami Modelle, eine schwache Divergenz besitzen, $p(\tau) = O\left(\tau^{-\delta}\right)$, wobei $\delta < 1$ sei.

Aufgrund der allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion und im Blick des verallgemeinerten Modells p_H, läßt sich das asymptotische Verhalten der Dichte p also nicht *eingrenzen, sondern es müssen a priori die Möglichkeiten a) - c) in betracht gezogen werden.*

[27] siehe auch Anhang A

Kapitel 4

Inverse und schlecht gestellte Probleme

Im folgenden Kapitel sollen die Begriffe „inverse“ und „schlecht gestellte“ Probleme eingeführt und beschrieben werden. An einigen Beispielen sollen sowohl die prinzipiellen Schwierigkeiten bei der Lösung derartiger Probleme als auch die praktische Relevanz solcher Aufgabenstellungen demonstriert und erläutert werden. Anschließend sollen die Methoden zur Stabilisierung schlecht gestellter Probleme vorgestellt werden.

4.1 Konzepte, Begriffe und Definitionen

Ist die *direkte* Messung der Eigenschaften eines Objektes oder Größe nicht möglich, wie im vorliegenden Fall des phänomenologischen Ansatzes der Dielektrizitätsfunktion in (polaren) Gläsern, sondern muß man von *indirekten* Beobachtungen auf diese Größe schließen, so sprechen wir von einem *inversen Problem* oder auch von einem *Identifizierungsproblem*. Bezeichnen wir die zu bestimmende Größe f auch als Parameter, dann spricht man auch von einer Parameteridentifizierung, so können wir die Problemstellung auch folgendermaßen beschreiben: Gegeben ist als *mathematisches Modell* eine Abbildung A von der Menge X der *Parameter* in die Menge Y der *Resultate*, also

$$A : X \to Y \quad .$$

Der Unterschied zwischen *direkten* und *inversen* Problem läßt sich nun wie folgt beschreiben[1]. Die Lösung des *direkten Problems* ist die präzise Beschreibung des mathematischen Modelles A. Im Gegensatz dazu besteht die Lösung des *inversen Problems* in der Interpretation der Daten $g \in Y$, also in der Konstruktion des Urbildes f. Die Lösung des zweiten Problems ist sehr einfach, wenn

1. A eine *Bijektion* und
2. A^{-1} *stetig* bezüglich einer *geeigneten Topologie* in X und Y ist.

Die erste Bedingung garantiert, daß das Problem

$$A f = g$$

für alle $g \in Y$ eindeutig lösbar ist. Die zweite Bedingung liefert die Stabilität des Problems und zwar in dem Sinne, daß kleine Änderungen der Daten g nur zu kleinen Änderungen in der Lösung f führen. Mathematisch ausformuliert lautet letzteres:

[1] Es existieren keine präzisen mathematischen Definitionen der Begriffe *direktes* und *inverses Problem*, so daß die Unterteilung bis zu einem gewissen Grade willkürlich ist. Wir folgen hier die in [Lou89] dargelegte Diskussion der Begriffe, die praktische Überlegungen über direkt meßbare Größen und nur indirekt berechenbare Informationenen zugrunde liegen. Ansonsten sei noch bezüglich der beiden Begriffe auf P.C. Sabatiers Einführung der Zeitschrift „Inverse Problems“ hingewiesen.

Die Lösung $f = A^{-1}g$, $f \in X$ ist *stabil in den Räumen* (X,Y), wenn für jedes positive ε eine positive Zahl $\delta(\varepsilon)$ derart existiert, daß aus der Ungleichung $\|g_1 - g_2\|_Y \leq \delta(\varepsilon)$ die Ungleichung $\|f_1 - f_2\|_X \leq \varepsilon$ folgt.

Diese wünschenswerten Eigenschaften haben zur folgenden Begriffsbildung geführt, die am Anfang des letzten Jahrhunderts von dem französischen Mathematiker HADAMARD eingeführt worden ist[2].

Definition 4.1
Sei $A : X \to Y$ *mit topologischen Räumen* X, Y. *Das Problem* (A, X, Y), *also*

$$A f = g \quad , \tag{4.1}$$

heißt gut gestellt, *auch* sachgemäß *genannt*[3], *wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:*

1. *Die Lösung der Gleichung (4.1) existiert für jedes* $g \in Y$.

2. *Die Lösung der Gleichung (4.1) ist eindeutig in* X.

3. *Die Lösung der Gleichung (4.1) hängt stetig (kontinuierlich) von der rechten Seite, also von* g, *ab, sie sei also stabil in den Räumen* (X, Y).

Probleme, die eine dieser Bedingungen nicht erfüllt, werden schlecht gestellt *oder* nicht-sachgemäß[4] *genannt.*

Anschaulich läßt sich diese Definition folgendermaßen interpretieren: Ist der topologische Raum respektive die Klasse Y der vorgegebenen Daten in einer „natürlichen“ Art und Weise gewählt worden, so charakterisieren die Bedingungen 1 und 2 die mathematische Determiniert- und Definiertheit des Problems. Konkret bedeutet die erste Bedingung an ein gut gestelltes Problem, daß es nicht überbestimmt sein darf.

Die zweite Bedingung ist offensichtlich die Eindeutigkeit der Lösung.

Die 3. Bedingung, die Stabilität der Lösung, ist sowohl in einem gewissen Sinne mit der „physikalischen Determiniertheit“ des Problems, als auch mit der Anwendbarkeit numerischer Methoden, auf der Basis approximativ bekannter vorgegebener Daten, zur Lösung des Problems verknüpft. Der Ursprung der dritten Bedingung, Stetigkeit der inversen Funktion $A^{-1}g$, ist gerade die Tatsache, daß in den meisten realen Problemen die rechte Seite der Gleichung (4.1) durch Messungen erhalten wird und deswegen nur approximativ bekannt ist.

Interessant ist noch folgende historische Bemerkung: HADAMARD folgerte ursprünglich, daß alle Probleme, die schlecht gestellt sind, nicht zu irgendwelchen realen Problemen gehören, sie also keine Probleme der (mathematischen) Physik sein könnten. Die „Sachgemäßheit“ eines Problems wurde so als Bedingung betrachtet, die jedes mathematische Problem erfüllen mußte, das mit einem physikalischen korrespondierte[5]. Dadurch wurde der Zweifel an den realen Nutzen der Untersuchung schlecht gestellter Probleme erzeugt. Später wurde jedoch der Irrtum in HADAMARD'S Folgerung - und nicht nur seiner - festgestellt; viele Probleme der mathematischen Physik, so zeigte sich, führen zu schlecht gestellten Problemen. Demnach ist es also *nicht* so, daß die Tatsache der Schlechtgestelltheit eines Problems notwendigerweise dessen unvollkommene oder falsche mathematische, physikalische Formulierung bedeutet. Ein

[2] Verschieden Autoren präsentieren unterschiedliche Formulierungen des Begriffes des gut gestellten Problems, die zwar essenziell übereinstimmen, in Details sich jedoch voneinander unterscheiden. Wir haben hier die allgemeinste Definition über topologische Räume gewählt.

[3] Im englischen als *properly posed, well posed* oder *correct* bezeichnet.

[4] In der englischsprachigen Literatur als *improperly posed, ill-posed* oder auch als *incorrect* bezeichnet.

[5] Der Ursprung der deutschsprachigen Bezeichnung des Konzeptes liegt offenbar gerade in dieser Ansicht.

mathematisch und physikalisch exakt und vollständig formuliertes Problem kann sehrwohl schlecht gestellt sein [AT77, Lav67, Dav82, BW82], ein Umstand, der auch durch die nochfolgenden Beispiele demonstriert werden soll. Vorweggenommen führen viele physikalische Fragestellungen (z.B. in der Spektroskopie, der Röntgenstreuung, in der optimalen Prozeßkontrolle) auf sogenannte Integralgleichung erster Art, dessen fundamentale Eigenschaft es ist, schlecht gestellt zu sein. Die Untersuchung und Entwicklung von befriedigenden Methoden zur (numerischen) Behandlung inverser schlecht gestellter Probleme ist so nicht nur vom akademischen Interesse, sondern besitzt gerade auch eine grundlegende praktische Relevanz[Mil74, Dav82].

Betrachten wir nun zur Verdeutlichung der generellen Schwierigkeiten bei der Lösung inverser schlecht gestellter Probleme folgendes einfaches Problem[6] mit einem kompakten Operator A. Nehmen wir an, aus einem Eingangssignal I wird durch eine „Black Box“ ein Ausgangssignal g erzeugt. Zur Identifizierung dieser „Black Box“ nehmen wir weiter an, daß sie linear und kausal sei. Dann können wir als mathematisches Modell die Gleichung

$$Af(x) = \int_0^x I(x-t)\ f(t)\ dt = g(x) \quad , \tag{4.2}$$

aufstellen, wobei die Funktion f jetzt die „Black Box“ beschreiben soll. Zur Vereinfachung dieses Beispiels wählen wir den „Input“ konstant gleich eins, also $I = 1$, wodurch sich das mathematische Modell zu

$$Af(x) = \int_0^x f(t)\ dt = g(x) \tag{4.3}$$

vereinfacht. Suchen wir stetige Lösungen dieser Gleichung erster Art $Af = g$, so ergeben sich die Bedingungen:

1. g sei stetig differenzierbar und
2. $g(0) = 0$

und als Lösung erhalten wir sofort:

$$f = g' \quad . \tag{4.4}$$

Wir können nun zwei Probleme beobachten. Ändern wir die Daten nur ein wenig, etwa $g(0) = \varepsilon \neq 0$, so ist das Problem nicht mehr lösbar. Ein weitere Schwierigkeit sehen wir, wenn nur Näherungswerte für die Daten vorliegen. Der Einfachheit halber und der Illustration wegen sei g gestört zu

$$g^\varepsilon(x) = g(x) + \varepsilon \sin(nx) \quad . \tag{4.5}$$

Dann ist auch g^ε stetig differenzierbar und es gilt $g^\varepsilon(0) = 0$. Der Fehler in der Maximumsnorm ist

$$||g^\varepsilon - g||_\infty \leq \varepsilon \quad . \tag{4.6}$$

Als Ergebnis erhalten wir

$$f^\varepsilon(x) = f(x) + n\varepsilon\ \cos(nx) \quad , \tag{4.7}$$

dessen Fehler, ebenso in der Maximumsnorm gemessen,

$$||f^\varepsilon - f||_\infty = n\varepsilon \tag{4.8}$$

abhängig von n ist und so, bei festgehaltenem ε, beliebig groß werden kann! Es handelt sich aber trotzdem um einen praktisch nicht vorkommenden Idealfall. Ist nämlich der Fehler durch Messungen, genauer durch das der Messungen unterliegende Rauschen, verursacht, so können wir nicht annehmen, daß dieser Fehler stetig differenziebar mit Startwert 0 ist. Im Fall praktischer Anwendungen muß also der Raum Y

[6] siehe auch [Lou89]

der möglichen Resultate hinreichend groß gewählt werden. Ist $Y = L^2$, dann können wir unser Problem als Abbildung

$$A : L^2 \to L^2$$

untersuchen. Es zeigt sich aber, basierend auf die Darstellung der Lösung durch das *Singulärwertsystem* des kompakten Operators A, daß dieser nicht stetig invertierbar ist. Außerdem existiert nicht für jedes $g \in Y$ eine Lösung, der Wertebereich

$$\mathcal{R}(A) = \{g \in Y : \text{es exisitiert } f \in X \text{ mit } Af = g\} \tag{4.9}$$

kann sehr klein sein. Das Problem (A, L^2, L^2) ist also *schlecht gestellt*.

4.1.1 Einige Beispiele schlecht gestellter Probleme

Im folgenden Abschnitt sollen kurz einige, teilweise auch diese Arbeit berührende, Beispiele schlecht gestellter Probleme vorgestellt werden. Sie sollen verdeutlichen, daß es nicht nur von einem rein akademischen, theoretischen Standpunkt aus wichtig ist, sich mit derartigen Problemen zu beschäftigen, und deren Relevanz in konkreten, realen Problemen, nicht nur aus dem Bereich der Physik, aufzeigen. Weitere derartige Beispiele sind in [AT77, Lou89, Gro93] und in den dortigen Referenzen zu finden[7].

4.1.1.1 Fredholmsche Integralgleichung erster Art

Eines der am häufigsten vorkommenden Fälle schlecht gestellter Probleme sind Fredholmsche Integralgleichungen erster Art[8], die wir beispielsweise in der *Laufzeitanalyse in der Seismik* [Lou89], bei den *inversen Streuproblemen* [Lav67, Lou89, Sab90, PS93] oder der *inversen Tomographie*[9] [Lou89, Sab90, PS93] antreffen. In den vorangegangenen Kapitel 2.5 ist schon auf die generellen Eigenschaften und Probleme dieses Typuses von Integralgleichungen[10] eingegangen worden. Hier soll jetzt aber in einer etwas anderen Betrachtungsweise und besonders im Hinblick auf den oben definierte Begriff des „gut gestellten“ respektive „schlecht gestellten“ Problems (Definition 4.1), die Integralgleichung bei kleinen Änderungen der bekannten rechten Seite g untersucht werden.

Betrachten wir also die folgende Fredholmsche Integralgleichung erster Art mit dem Integralkern $K(x,s)$:

$$Af = \int_a^b K(x,s)\, f(s)\, ds = g(x) \quad ; \qquad (c \le x \le d)\,, \tag{4.10}$$

wobei wiederum $f \in X$ die gesuchte Funktion und $g \in Y$ als (prinzipiell) gegeben vorausgesetzt sei und wir keine Einschränkungen bezüglich der Intervallgrenzen machen wollen, sie also auch $-\infty$ und ∞ annehmen dürfen. Der Integralkern $K(x,s)$ sei stetig bezüglich der Variablen x und besitze noch eine stetige partielle Ableitung $\frac{\partial K}{\partial x}$, d.h. mit anderen Worten K sei bezüglich der Variablen x „hinreichend glatt“. Suchen wir jetzt, beispielsweise, die Lösung f in der Klasse C, der im Intervall $[a,b]$ stetigen Funktionen. Als Metrik des (metrischen) Raums X sei die Supremumsnorm L^∞ wählbar:

$$\| f_1 - f_2 \|_X = \| f_1 - f_2 \|_\infty = \sup_{s \in [a,b]} | f_1(s) - f_2(s) | \quad , \tag{4.11}$$

[7] Ergänzend sei diesbezüglich noch auf [Sab90, PS93] verwiesen

[8] Es ist eine prinzipielle Eigenschaft Integralgleichungen erster Art und nicht nur der Fredholmscher, daß sie zu den schlecht gestellten Problemen gehören.

[9] Die wichtigsten und für die Praxis relevantesten Beispiele hierfür sind die bildgebenden diagnostischen Verfahren der Medizin, wie beispielsweise die Computer-Tomographie und die NMR-Tomographie.

[10] siehe ebenso [CH68a, Smi88, AT77, Lou89, Gro93]

währenddessen die Metrik des Raums Y durch die L^2- Metrik gegeben sein soll:

$$\|g_1 - g_2\|_Y = \|g_1 - g_2\|_{L^2} = \left\{ \int_c^d \left(g_1(x) - g_2(x)\right)^2 \, dx \right\}^{1/2} \quad . \tag{4.12}$$

Wir nehmen weiter an, die Lösung der Gleichung (4.10) existiere und sei eindeutig, d.h. es existiere der zu A inverse Operator A^{-1}, und die Lösung sei somit gegeben durch:

$$f = A^{-1} g \quad . \tag{4.13}$$

Sie besitzt jedoch nicht die Eigenschaft der Stabilität bei kleinen Änderungen der vorgegebenen Funktion g. Um dies zu sehen, betrachten wir die Funktion

$$f_2(s) = f_1(s) + N \sin \omega s \quad , \tag{4.14}$$

die eine Lösung der Gleichung (4.10) mit der rechten Seite

$$g_2(x) = g_1(x) + N \int_a^b K(x,s) \, \sin \omega s \, ds \tag{4.15}$$

sein möge ($f_1 = A^{-1} g_1$). Offensichtlich kann, für jedes beliebige N, mit einem hinreichend großen ω die Abweichung

$$\|g_1 - g_2\|_{L^2} = |N| \left\{ \int_c^d \left(\int_a^b K(x,s) \, \sin \omega s \, ds \right)^2 dx \right\}^{1/2} \tag{4.16}$$

beliebig klein gemacht werden[11], ohne zu verhindern, daß die Abweichung in der L_∞-Metrik zwischen den korrespondierenden Lösungen f_1 und f_2,

$$\|f_1 - f_2\|_\infty = \sup_{s \in [a,b]} |f_1(s) - f_2(s)| = \sup_{s \in [a,b]} |N \sin \omega s| = |N| \, , \tag{4.17}$$

beliebig groß werden kann.

Sei nun anstelle der Supremumsnorm die L^2-Metrik im Raum X gewählt, dann ist die Lösung der Integralgleichung (4.10) wiederum instabil bei kleinen Änderungen der Vorgegebenen g. Konkret gilt dann:

$$\begin{aligned} \|f_1 - f_2\|_{L^2} &= \left\{ \int_a^b |f_1(s) - f_2(s)|^2 \, ds \right\}^{1/2} \\ &= |N| \left\{ \int_a^b \sin^2 \omega s \, ds \right\}^{1/2} \\ &= |N| \sqrt{\frac{b-a}{2} - \frac{1}{2\omega} \sin \omega(b-a) \cos \omega(b+a)} \, . \end{aligned} \tag{4.18}$$

Wie man wiederum sieht, kann man durch eine geeignete Wahl von ω und N erreichen, daß beliebig kleine Abweichungen zwischen den Funktionen g_1 und g_2 mit beliebig großen Abweichungen zwischen den korrespondierenden Lösungen (Gl.(4.18)) einhergehen können.

Es soll nochmals darauf hingewiesen werden, daß es sich hierbei, der Instabilität der Lösung gegenüber der Vorgegebenen, um eine *prinzipiell innere Eigenschaft* der Integralgleichungen erster Art handelt. Als nächtestes folgen, sehr kurz skizziert, zwei durch Integralgleichungen erster Art formulierte praktische Beispiele.

[11] Dieses folgt unmittelbar aus dem *Riemann-Lebesgues'schen Lemma* [BB93, Doe71, Tit67]

4.1.1.2 Die analytischen Fortsetzung einer Funktion

Hier sei kurz das Problem der analytischen Fortsetzung einer Funktion in ein Gebiet skizziert, wobei diese nur in einem Teil dieses Gebietes bekannt ist[12].

Es sei $\mathcal{D}$ ein berandetes Gebiet und $\mathcal{L}$ bezeichne den Rand einer Kurve, die ganz in $\mathcal{D}$ liegt. Das Problem der analytischen Fortsetzung einer Funktion, die auf der Kurve $\mathcal{L}$ bekannt ist, in das restliche Gebiet $\mathcal{D}$ ist instabil, also schlecht gestellt. Um dieses zu sehen, sei z_0 ein Punkt des Randes des Gebietes $\mathcal{D}$ mit dem positiven Abstand d von $\mathcal{L}$ und $f_1(z)$ sei eine analytische Funktion in $\mathcal{D}$. Die Funktion $f_2(z) = f_1(z) + \varepsilon/(z - z_0)$, mit gegebener positiver Zahl ε, ist ebenso analytisch in $\mathcal{D}$. Auf der Kurve $\mathcal{L}$ unterscheiden sich diese Funktionen durch $\varepsilon/(z - z_0)$, dessen Absolutbetrag nicht das Verhältnis ε/d überschreitet. Es ist also $|f_2(z) - f_1(z)| \leq \varepsilon/d$ überall auf $\mathcal{L}$. Das Verhältnis ε/d kann durch die Wahl von ε beliebig klein gemacht werden. Jedoch ist andererseits der Absolutbetrag der Differenz $f_2(z) - f_1(z) = \varepsilon/(z - z_0)$ unbeschränkt in dem Gebiet $\mathcal{D}$ als ganzes.

4.1.1.3 Verarbeitungssysteme, optimale Prozeßkontrolle

Ein für die Praxis wichtiges Problem ist die Konstruktion von Systemen der *automatischen mathematischen Verarbeitung von Daten*, insbesondere von aus physikalischen Messungen gewonnen Daten. Die Anwendung und der notwendige Gebrauch dieser Systeme geht von der Elementarteilchenphysik, der Untersuchung von Plasmen und Festkörpern bei hohen Temperaturen, der Untersuchung der Eigenschaften der Materie bei niedrigen Temperaturen, bis hin zu schon „alltäglichen“ *Anwendungen im Bereich der Medizin* und im Bereich der unzähligen *Fertiegungstechniken (optimale Prozeßkontrolle)*. Normalerweise wird dabei nicht der eigentlich interessierende Parameter f, sondern seine Manifestation $g = Af$ gemessen, die wiederum auf Grund der statistischen Natur des Meßprozesses nur approximativ bekannt sein kann. Grob gesprochen, reduziert sich in all diesen Fällen das Problem auf die Lösung der Gleichung $Af = g$, die in vielen Fällen schlecht gestellt ist.

Ein Verarbeitungssystem soll sowohl in einem „Dialog Modus“, als auch automatisch, ohne die notwendige Einflußnahme eines Menschen auf die Bearbeitungsschritte, arbeiten können. Es sind also effiziente Algorithmen zur Lösung des Problems $Af = g$, das eine Schlechtgestellheit einschließen kann, notwendig, die auf Computern realisiert werden können.

4.2 Stabilisierung schlecht gestellter Probleme

4.2.1 Vorbetrachtungen und Vorbemerkungen

Bevor wir die Stabilisierung schlecht gestellter Probleme diskutieren, sollen ein paar Vorbetrachtungen und Vorbemerkungen gemacht werden. Betrachten wir dafür die Integralgleichung erster Art aus dem obigen Beispiel (Gleichung (4.10)):

$$\int_a^b K(x,s)\, f(s)\, ds = g(x) \quad .$$

Kennen wir die Funktion g nur approximativ. d.h. unterscheidet sie sich in der Metrik des Raumes Y von der „wahren“ Funktion f_1 nur leicht, so können wir offensichtlich prinzipiel nur von dem Auffinden einer approximativen Lösung der Gleichung reden; einer Lösung also, die sich in der Metrik des Raumes X in einer kontrollierbaren Art und Weise von der theoretisch exakten Lösung unterscheidet.
Die Funktion g sei nun durch Messungen bekannt und möge an einigen Stellen „Ecken“ und „Kanten“

[12] Weitere konkrete Beispiele für die Probleme bei der analytischen Fortsetzung einer Funktion und deren Lösungen werden in den Buch von LAVRENTIEV [Lav67] diskutiert.

haben, an denen keine stetige Ableitung existiert. Auf Grund der allgemeinen Eigenschaften der Fredholmschen Integralgleichungen erster Art bzw. der quellenmäßig darstellbaren Funktionen[13], besitzt die Gleichung (4.10) keine Lösung (im klassischen Sinn), da der Kern, nach Voraussetzung (siehe Kapitel 4.1.1.1), eine stetige partielle Ableitung nach x besitzt und somit g ebenso eine stetige Ableitung nach x besitzen muß. Dieses bedeutet, daß wir nicht als approximative Lösung die nehmen können, die wir (formal) durch die approximativ bekannte rechte Seite g der Gleichung erhalten würden, da diese nicht existieren könnte. Die Lösung der betrachteten Gleichung existiert (im klassischen Sinn) für eine Funktion g offensichtlich dann, wenn sie zum Wertebereich $\mathcal{R}(A)$ des Operators A gehört:

$$\mathcal{R}(A) = \{g \in Y : \text{es exisitiert } f \in X \text{ mit } g = Af\} \quad . \tag{4.19}$$

Wie wir bereits oben erwähnt haben[14], besitzt die Inversion der Integralgleichung,

$$f = A^{-1}g \ , \tag{4.20}$$

nicht die Eigenschaft der Stabilität der Lösung bei kleinen Änderungen der Funktion g. Wir brauchen also nicht nur eine Antwort auf die Frage, was wir als approximative Lösung des Problems bezeichnen, sondern auch einen Algorithmus, um diese zu bestimmen, der stabil unter kleinen Änderungen der Funktion g ist.

Desweiteren kann das Auffinden einer approximativen Lösung in einer „natürlichen“ Klasse X eines schlecht gestellten Problems in der Praxis mehrdeutig sein. Um dieses zu verstehen, betrachten wir die Gleichung

$$Af = g \quad ,$$

die in der Klasse X schlecht gestellt sei. Weiter kennen wir die rechte Seite der Gleichung nur bis auf einen Fehler ε von den theoretisch exakten Wert g_T, also

$$\|g - g_T\|_Y \leq \varepsilon \quad .$$

Es ist naheliegend, die approximative Lösung in der Klasse X_ε der Elemente f zu suchen, für die $\|Af - g)\|_Y \leq \varepsilon$ gilt. In den meisten Fällen wird aber die Anzahl der Elemente dieser Klasse zu groß sein. Desweiteren können, wie das Beispiel im Kapitel 4.1.1.1 der Fredholmschen Integralgleichung erster Art zeigt, die einzelnen Elemente f sich erheblich, in der Metrik des Raumes X, voneinander unterscheiden. Also kann nicht jedes Element dieser Klasse als approximative Lösung betrachtet werden.

Es sind somit Regeln für die Auswahl möglicher Lösungen von Nöten. Um diese zu finden, müssen zusätzliche Informationen, die die Lösung betreffen und allgemein erhältlich sind respektive postuliert werden, herangezogen werden[15]. Verschieden Arten zusätzlicher Informationen sind denkbar und möglich. Die schlecht gestellten Probleme können, bezüglich der zusätzlichen Informationen, grob in zwei Kategorien aufgeteilt werden. Die erste Kategorie, in denen die Informationen *quantitativer* Art sind, ermöglicht einen die Klasse der möglichen Lösungen z.B. auf eine kompakte Menge zu beschränken, wodurch dann das Problem stabil unter kleinen Veränderungen der Ausgangsdaten (der Funktion g) wird. In der zweiten Kategorie werden zusätzliche Informationen *qualitativer* Art, wie z.B. Glattheit (smoothness), Konvexität, Positivität der Lösung usw., ausgenutzt, um diese Stabilität zu erreichen.

Im folgenden soll nun allgemein die Lösung der Gleichung

$$Af = g \quad , \tag{4.21}$$

betrachtet werden, wobei die gesuchte Lösung f Element des metrischen (topologischen) Raumes X ist, und die Funktion g zum metrischen (topologischen) Raum Y gehöre. Der Operator A bilde X auf Y ab. Es sei angenommen, zum Operator A existiere der inverse Operator A^{-1}, der im allgemeinen nicht stetig zu sein braucht. Erfüllt der Operator diese Eigenschaft, so wird Gleichung (4.21) *Operatorgleichung erster Art* oder auch nur kurz *Gleichung erster Art* genannt.

[13] siehe beispielsweise [CH68a, Smi88, Wer95]

[14] siehe die Kapitel 2.5, 4.1.1.1 und [AT77, Lou89]

[15] Tatsächlich scheint es so zu sein, daß es prinzipiell nur mit Hilfe zusätzlicher Informationen und Bedingungen möglich ist, schlecht gestellte durch gut gestellte Probleme zu approximieren [Mar82].

4.2.2 Gutgestelltheit im Sinne von TIKHONOV und die Selektionsmethode

Der Vollständigkeit halber sei als erste Methode zur Behandlung schlecht gestellter Probleme, die im wesentlichen quantitative zusätzliche Informationen heranzieht, diejenige vorgestellt, die die Definition des Begriffs des gut gestellten Problems verändert, also sich zu den Bedingungen 1, 2 und 3 aus Definition 4.1 unterscheidende derart einführt, daß eine Stabilisierung des schlecht gestellten Problems eintritt. Dazu soll zusätzlich zu den Räumen[16] X und Y und des Operators A eine abgeschlossene Menge $M \subset X$ gegeben sein. Es wird jetzt die folgende Änderung des Begriffes des gut gestellten Problems eingeführt:

Definition 4.2
Man nennt die Gleichung (4.21) gut gestellt (properly posed) im Sinne von TIKHONOV *wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:*

1. *Es ist a-priori bekannt, daß die Lösung f für eine Klasse von Daten existiert und zu einer gegebenen Menge M mit $f \in M$ gehört.*
2. *Die Lösung ist in einer Klasse von Funktionen, die zur Menge M gehören, eindeutig.*
3. *Beliebig kleine Änderungen der rechten Seite, also der Funktion g, die die Löung f nicht außerhalb der Menge M bringen, korrespondieren zu beliebig kleinen Veränderungen von f.*

Mit M_A sei das Bild der Menge M nach der Anwendung des Operators A auf den Raum X bezeichnet. Die dritte Bedingung kann dann in folgender Weise neu formuliert werden:

3. *Die Lösung der Gleichung (4.21) hängt stetig (kontinuierlich) von der rechten Seite g auf der Menge M_A ab.*

Die wesentliche Grundlage für die Anwendbarkeit der Definition des gut gestellten Problems im Sinne von TIKHONOV bildet das folgende wichtige Lemma, dessen Beweis in [AT77] zu finden ist:

Lemma 4.1
Die (selbst)kompakte Untermenge X des metrischen Raumes X_0 sei auf die Untermenge Y des metrischen Raumes Y_0 abgebildet. Ist die Abbildung $A : Y \to X$ stetig und eins-zu-eins (injektiv), so ist die inverse Abbildung $A^{-1} : X \to Y$ ebenso stetig.

Für den Fall einer kompakten Menge M, gilt weiter folgendes [Lav67]:

Satz 4.1
Erfüllt die Gleichung (4.21) die drei Bedingungen als gut gestelltes Problem im Sinne von TIKHONOV*, dann gibt es eine Funktion $\alpha(\tau)$ so, daß gilt:*

1. *$\alpha(\tau)$ ist eine stetige (kontinuierliche), nicht abnehmende Funktion mit $\alpha(0) = 0$.*
2. *für jede $f_1, f_2 \in M$, die die Ungleichung*

$$\|Af_1 - Af_2\|_Y \leq \varepsilon$$

befriedigen, gilt

$$\|f_1 - f_2\|_X \leq \alpha(\varepsilon) \quad .$$

[16] Bei diesen Räumen kann es sich allgemein auch um topologische handeln.

Daraus folgt, wenn die 1. und 2. Bedingungen des gut gestellten Problems nach TIKHONOV erfüllt sind, ist auch die 3. Bedingung nach der Stetigkeit erfüllt.

Man beachte, wenn ein Problem gut gestellt im Sinne von TIKHONOV ist, und wir ersetzen die metrischen Räume X und Y durch ihre Unterräume M und M_A, dann wird das Problem gut gestellt im Sinne der Definition 4.1. In anderen Worten bedeutet dieses, daß das Konzept des gut gestellten Problems im Sinne von TIKHONOV dann anwendbar ist, wenn sich die Schlechtgestelltheit der Operatorgleichung erster Art (Gl.4.21) darin manifestiert, daß eine der Bedingungen 1 und 2 aus Definition 4.1, die Existens und Eindeutigkeit der Lösung, verletzt ist, also eine Stabilisierung des schlecht gestellten Problems bezüglich dieser Bedingungen darstellt.

Ist die Gleichung (4.21) gut gestellt im Sinne von TIKHONOV und gehört die Funktion g zu M_A, dann kann die sogenannte *Selektions-Methode* erfolgreich zur Lösung des Problems benutzt werden. Sie besteht im wesentlichen darin, die Operation Af für die Elemente $f \in M \subset X$ auszuführen, also das *direkte* Problem zu lösen. Als approximative Lösung $f_0 \in M$ wird nun dasjenige Element genommen, für das die Differenz $\|Af - g\|_Y$ minimal wird[17]:

$$\|Af_0 - g\|_Y = \inf_{f \in M} \|Af - g\|_Y \quad . \tag{4.22}$$

Weitere Einzelheiten zum Konzept des gut gestellten Problems im Sinne von TIKHONOV, seine Probleme und Beispiele zu seiner Anwendung, sind in den Büchern von LAVRENTIEV [Lav67] und ARSENIN und IKHONOV [AT77] zu finden. Im Rahmen dieser Arbeit sei die bisherige Darstellung genügend.

4.2.3 Verallgemeinerte Inverse

Neben der vielleicht naheliegenden Idee, ein schlecht gestelltes Problem dadurch zu stabilisieren, indem der Begriff des gut gestellten Problems in geeigneter Art und Weise geändert wird[18], ist eine weitere Idee, den Lösungsbegriff für Operatorgleichungen erster Art zu verallgemeinern. Dieses führt auf den Begriff der *verallgemeinerten Lösung*, auch *Moore-Penrose Lösung* oder *Quasilösung* genannt[19] [AT77, Iva76, Lav67, Lou89, Mor84, Gro93].

Geben wir nun die allgemeine Definition der verallgemeinerten Inverse bzw. Quasilösung in (beliebigen) metrischen Räumen an[20]:

Definition 4.3
Neben den beiden metrischen Räumen X und Y und des Operators A sei eine Menge $M \subset X$ gegeben. Als verallgemeinerte Inverse, *auch* Quasilösung *oder* Moore-Penrose Lösung *genannt, der Gleichung (4.21) bezeichnen wir ein Element $\tilde{f}$, welches durch die Relation*

$$\|A\tilde{f} - g\|_Y = \inf_{f \in M} \|Af - g\|_Y \tag{4.23}$$

definiert ist.

Betrachten wir nun die verallgemeinerte Inverse detailierter[21]. Dafür seien X und Y Hilberträume und der Operator A,

$$A : X \to Y \quad ;$$

[17] Das so gewonnene f ist mit der im nachfolgenden Kapitel 4.2.3 eingeführten Quasilösung identisch; siehe auch [AT77, Iva76].

[18] siehe vorangegangenes Kapitel 4.2.2 und [AT77]

[19] Das Konzept der *verallgemeinerten Inverse* geht historisch sowohl auf MOORE und PENROSE als auch, jeweils unabhängig, auf V.K. IVANOV zurück, der auch den Begriff der *Quasilösung* eingeführt hat.

[20] Diese Definition geht in dieser Form auf V.K. IVANOV ZURÜCK.; siehe auch [AT77, Iva76, Lav67].

[21] Wir folgen hier weitestgehend den Darstellungen in [Lou89].

sei linear und stetig. Eine Lösung - im herkömmlichen Sinne - der Operatorgleichung erster Art (4.21)

$$Af = g$$

existiert nur für Elemente aus dem Bild von A, also $g \in \mathcal{R}(A)$. Um nun einen Lösungsbegriff für weitere Elemente in Y einzuführen, betrachten wir die Abweichung

$$J[f] := \|Af - g\|. \tag{4.24}$$

Bezeichnen wir mit

$$P_{\overline{\mathcal{R}(A)}} : Y \to Y \tag{4.25}$$

die orthogonale Projektion von Y auf den Abschluß des Wertebereichs von A, dann können wir die Abweichung in

$$J^2[f] = \|Af - P_{\overline{\mathcal{R}(A)}}g\|^2 + \|g - P_{\overline{\mathcal{R}(A)}}g\|^2 \tag{4.26}$$

aufspalten. Ist jetzt $g \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$, so ergibt sich die Minimierung der Abweichung zu

$$\min_{f \in X} J[f] = \min_{f \in X} \|Af - g\| = \|g - P_{\overline{\mathcal{R}(A)}}g\| \quad . \tag{4.27}$$

Andernfalls wählen wir unter allen f, welche die Gleichung (4.27) lösen, dasjenige mit kleinster Norm:

$$f : \|f\| < \|u\| \text{ für alle } u \neq f \text{ mit } J[u] = J[f] = \min J[v] \quad . \tag{4.28}$$

Durch das so bestimmte f, das wir also gemäß Definition 4.3 als *verallgemeinerte Inverse*, *Moore-Penrose Lösung* oder *Quasilösung* bezeichnen, wird die Abbildung

$$A^\dagger : \mathcal{D}(A^\dagger) = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp \subset Y \to X \quad , \tag{4.29}$$

die *verallgemeinerte Inverse*, definiert.

Als nächstes soll ein für die Theorie und der Praxis wesentlicher Satz angegeben werden, auf dessen Beweis wir hier verzichten wollen und der in [Lou89] angegeben ist. Im folgenden soll mit A^* der zu A *adjungierte Operator* bezeichnet werden.

Satz 4.2
$f = A^\dagger g$ ist die eindeutige Lösung der Normalgleichung

$$A^*Af = A^*g \tag{4.30}$$

in $\overline{\mathcal{R}(A^*)}$.

Dieses schließt übrigens auch den Fall mit ein, wenn (4.27) nicht eindeutig ist, daß als verallgemeinertes Inverse das f mit kleinster Norm gewählt wird [Lou89].

Desweiteren sei mit

$$L(X,Y) := \{A : X \to Y : A \text{ ist linear und stetig}\} \tag{4.31}$$

der Raum der linearen und stetigen Abbildungen von X nach Y bezeichnet[22]. Ist nun $A \in L(X,Y)$, so können u.a. folgende interessante *Eigenschaften der verallgemeinerten Inverse* bewiesen werden[23]:

1. $A^\dagger$ ist linear;
2. $A^\dagger$ ist genau dann stetig, wenn $\mathcal{R}(A)$ abgeschlossen ist;
3. $\mathcal{R}(A^\dagger) = \overline{\mathcal{R}(A^*)}$.

[22] siehe auch Anhang B, Gleichung (B.17) und [Wer95]

[23] Bezüglich der Beweise sei wieder auf [Lou89] verwiesen.

Die wichtige Eigenschaft der verallgemeinerten Lösung bzw. Quasilösung, eine Approximation der (herkömmlichen) Lösung sein zu können, konnte V.K. IVANOV zeigen [Iva76]. Konkret gilt:

Satz 4.3
Die verallgemeinerte Lösung f_ε, die mit einer Funktion g_ε, die in der Metrik des Raums X von der theoretisch exakten Funktion g_T um den Betrag ε abweichen möge, gewonnen worden ist, gehöre zu einer kompakten Menge M. Gehört die theoretische Lösung f_T ebenso zur kompakten Menge M, dann gilt für $\varepsilon \to 0$: $\| f_\varepsilon - f_T \|_X \to 0$.

Bevor wir weitere Bemerkungen zur verallgemeinerten Lösung machen werden, soll noch eine deren wichtigen Darstellung im Falle *kompakter Operatoren*[24] A angegeben werden. Im folgendem sei mit $K(X,Y)$ die Menge der kompakten Operatoren in $L(X,Y)$ bezeichnet:

$$K(X,Y) = \{A \in L(X,Y) : A \text{ ist kompakt}\} \quad , \tag{4.32}$$

insbesondere sei $K(X) = K(X,X)$. Betrachten wir also den kompakten Operator A, $A \in K(X,Y)$. Es ist dann der Operator $T = A^*A \in K(X)$ selbstandjungiert, und wir können die Eigenwerte λ_n und Eigenvektoren $v_n, n > 0$ von T bestimmen. Die λ_n seien ihrer Größe nach geordnet, d.h. sie seien so nummeriert, daß

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \cdots$$

gelte. Setzen wir nun

$$\sigma_n := +\sqrt{\lambda_n} \tag{4.33}$$

und

$$u_n := \sigma_n^{-1} A v_n \quad , \tag{4.34}$$

so gilt dann

$$A v_n = \sigma_n u_n \tag{4.35}$$

und

$$A^* u_n = \sigma_n v_n \quad . \tag{4.36}$$

Es können jetzt die wichtigen Eigenschaften bewiesen werden, daß $\{v_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem für

$$\overline{\mathcal{R}(A^*)} = \mathcal{N}(A)^\perp \quad , \tag{4.37}$$

und daß $\{u_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem für

$$\overline{\mathcal{R}(A)} = \mathcal{N}(A^*)^\perp \tag{4.38}$$

ist[25]. Diese Eigeschaften führen nun auf die folgende Definition[26]:

Definition 4.4
Die oben eingeführte Menge von Tripel

$$\{v_n, u_n; \sigma_n\}_{n \geq 0} \tag{4.39}$$

heißt singuläres System*, auch* Singulärwertzerlegung*, des Operators A.*

Die Nützlichkeit der Singulärwertzerlegung kompakter Operatoren läßt sich am folgendem Satz bereits ablesen, wobei wir hier wiederum auf dessen Beweis verzichten wollen und z.B. auf [Lou89] verweisen.

[24] Operatoren, die beschränkte Mengen in X in relativ kompakte Mengen in Y abbilden, werden *kompakte Operatoren* genannt [BB93, Lou89, Wer95].

[25] Mit $\mathcal{N}(A)$ sei der *Kern* des Operators $A : \{x : Ax = 0\}$ bezeichnet.

[26] Bezüglich Einzelheiten der Definition und Eigenschaften des singulären Systems, auch Singulärwertzerlegung genannt, wie z.B. dem Verhalten der Eigenwerte respektive Singulärwerte σ_n, sei auf [Lou89, Wer95], aber auch auf [Smi88], bei dem zwar das Konzept aber nicht die Bezeichnung des singulären Systems vorkommt, verwiesen.

Satz 4.4
Sei $A \in K(X,Y)$ mit singulärem System $\{v_n, u_n; \sigma_n\}$. Dann gilt

1.
$$Af = \sum_n \sigma_n \langle f, v_n \rangle u_n \quad . \tag{4.40}$$

2. *$Af = g$ hat genau dann eine Lösung, wenn die* PICARD-Bedingung *erfüllt ist:*
$$g = \sum_n g_n u_n \quad , \tag{4.41}$$
also wenn $g \in \overline{\mathcal{R}(A)}$ ist, und wenn
$$\sum_n \sigma_n^{-2} |\langle g, u_n \rangle|^2 < \infty \quad . \tag{4.42}$$

Die PICARD-Bedingung stellt eine „Glattheitsbedingung“ an die Funktion g da; wegen $\sigma_n^{-2} \to \infty$ für $n \to \infty$, die Eigenwerte des (kompakten) Operators T können höchstens die Zahl Null als Häufungspunkt besitzen [CH68a, Lou89, Wer95], müssen die Entwicklungskoeffizienten von g entsprechend schnell fallen. Die PICARD-Bedingung wird demzufolge auch als *Konsistenzbedingung* aufgefasst, und so wird $g \in Y$ genau dann *konsistent* genannt, wenn g die PICARD-Bedingung erfüllt.

Im Fall kompakter Operatoren läßt sich nun die verallgemeinerte Inverse mit Hilfe dessen Singulärwertzerlegung angeben:

Satz 4.5
Sei $A \in K(X,Y)$ mit singuläram System $\{v_n, u_n; \sigma_n\}$. Dann ist für $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$
$$A^\dagger g = \sum_n \sigma_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n \quad . \tag{4.43}$$

Vorweggenommen bildet diese Darstellung eine Basis der Regularisierung (kompakter) Operatoren.

Kommen wir nun zu einigen Bemerkungen: Der Begriff der verallgemeinerten Inverse ersetzt, wie bereits erwähnt, den „klassischen“ Begriff der Lösung, und implizit auch den Begriff deren Eindeutigkeit, wie diese in der Definition 4.1 verwendet werden und ist so als eine Stabilisierung bezüglich der Bedingungen 1 und 2 der Definition des gut gestellten Problems zu interpretieren. Wie wir auch schon in [Ros95] erwähnt haben, beschränkt sich jedoch ein Großteil der Untersuchungen respektive der (reinen) Anwendbarkeit der verallgemeinerten Inverse auf kompakte Lösungsmengen M[27], wie hier durch IVANOV's Satz 4.3 angedeutet ist. In diesem Sinne stellt dieses Konzept auch eine Stabilisierung schlecht gestellter Probleme unter Verwendung quantitativer zusätzlicher Informationen da, d.h. können wir die Lösungen der Operatorgleichung (4.21) auf kompakte Mengen einschränken oder wissen wir, daß das Bild $\mathcal{R}(A)$ des Operators A abgeschlossen ist (Eigenschaft 2.), dann können wir das schlecht gestellte Problem mit der verallgemeinerten Inversen stabilisieren. LAVRENTIEV weist übrigens darauf hin, daß der Bereich der (reinen) Anwendbarkeit der Quasilösung im wesentlichen mit den des gut gestellten Problems im Sinne von TIKHONOV übereinstimmt[28], wobei sich beide dann durch die Klarheit und „Einfachheit“ der verallgemeinerten Inverse unterscheiden[29], wodurch in der Litaratur die Quasilösung gegenüber des gut gestellten Problems im Sinne TIKHONOV'S

[27] Ursprünglich ist die Quasilösung von IVANOV auf eine kompakte Menge M des Raums X definiert worden; siehe Definition 4.3.

[28] Das in bestimmten Klassen von Problemen verschiedene Konzepte zur Stabilisierung zu äquivalenten approximativen Lösungen führen können, kann nicht verwunderlich sein. Diese Äquivalenzen sind durch die Gemeinsamkeit einiger grundlegender Ideen bei der Konstruktion approximativer Lösungen zu erklären. Nähere Einzelheiten zu den Gemeinsamkeiten, wann welche Methoden im wesentlichen äquivalent sind und den einzelnen Vorteilen einer Methode gegenüber einer anderen, sind in der betreffenden Literatur, beispielsweise in [AT77, Lou89], zu finden.

[29] Dieses ist hauptsächlich in Sinne der Definition zu verstehen. Die praktische Anwendbarkeit braucht deswegen nicht einfacher sein.

mittlerweile in den Betrachtungen den Vorzug gegeben worden ist. Ein weiterer, wichtigerer Grund dafür ist allerdings auch, daß die verallgemeinerte Inverse der Ausgangspunkt des Konzepts der *Regularisierung*, wie wir sie in den nachfolgenden Kapitel wiedergeben wollen, ist.

Weitere Einzelheiten zur verallgemeinerten Inversen und konkrete Beispiele sind in den Büchern von IVANOV [Iva76], LAVRENTIEV [Lav67], LOUIS [Lou89] und ARSENIN & TIKHONOV [AT77], und den dortigen Referenzen, zu finden.

4.2.4 Die Regularisierung

In den vorangegangenen Abschnitten 4.2.2 und 4.2.3 wurden kurz Methoden zur Stabilisierung schlecht gestellter Probleme vorgestellt, die im wesentlichen dann ausreichend und erfolgreich sein werden, wenn es sich bei der Klasse der möglichen Lösungen der Gleichung (4.21) um ein kompakte Menge handelt[30]. In der überwiegenden Zahl der (praktischen) Problemen ist der Raum X der möglichen Lösungen jedoch nicht kompakt (oder deren Kompaktheit kann nicht ohne weiteres nachgewiesen oder vorausgesetzt werden), und die Änderung der rechten Seite der Gleichung

$$Af = g \quad , \tag{4.44}$$

die mit der approximativen Natur der Funktion g verbunden ist, kann die (formale) Lösung außerhalb der Menge X bringen. Desweiteren ist der Wertebereich nicht degenerierter Operatoren unendlichdimensional und nicht abgeschlossen, woraus unmittelbar die Unstetigkeit der verallgemeinerten Inverse folgt [Lou89, Wer95]. Dieses alles führt auf das wohl allgemeinste Konzept zur Stabilisierung und zur Konstruktion kontrollierter Approximationen schlecht gestellter Probleme, die *Regularisierung* der verallgemeinerten Inversen $A^\dagger$.

Definition 4.5
Eine Regularisierung *der verallgemeinerten Inversen $A^\dagger$ ist eine Familie von Operatoren*

$$\left\{T_\gamma\right\}_{\gamma>0}, \; T_\gamma : Y \to X \tag{4.45}$$

mit folgender Eigenschaft:
Es existiert eine Abbildung $\gamma : \mathbb{R}^+ \times Y \to \mathbb{R}^+$, so daß für alle $g \in \mathcal{D}(A^\dagger)$ und für alle $g^\varepsilon \in Y$ mit $\|g - g^\varepsilon\| \leq \varepsilon$ gilt

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g}} T_{\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)} g^\varepsilon = A^\dagger g \quad . \tag{4.46}$$

Sind alle T_γ linear, so nennen wir $\left\{T_\gamma\right\}$ eine lineare Regularisierung*, der Parameter γ wird* Regularisierungsparameter *genannt, den wir so wählen, daß*

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g}} \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) = 0 \tag{4.47}$$

ist. Hängt γ nicht von g^ε ab, so sprechen wir von einer a-priori Parameterwahl*, andernfalls von einer* a-posteriori Parameterwahl*. Den Operator T_γ werden wir* Regularisierung-Operator *nennen.*

Das durch eine Regularisierung respektive durch einen Regularisierungs-Operator T_γ erzeugte Verfahren wird als *Regularisierungsverfahren* bezeichnet. Dementsprechend werden Verfahren, die zu einer Regularisierung repektive zu einem Regularisierungs-Operator T_γ korrespondieren, als Regularisierungverfahren bezeichnet. Die durch eine Regularisierung gewonnen approximative Lösung f_γ wird konsequenter Weise *regularisierte Lösung* genannt.

Bevor wir das Konzept der Regularisierung näher betrachten werden, wollen wir noch einige *Bemerkungen* und *Hinweise* zur Definition 4.5 machen:

[30] siehe [Iva76, Lav67, AT77]

In der Literatur werden Regularisierungen, wie auch ursprünglich, meist als lineare, stetige Operatoren eingeführt, wie wir dieses auch in [Ros95] getan haben und wie es beispielsweise in [AT77, Iva76, Lav67, Mor84] getan wird. Die obige Definition 4.5 schließt nicht-lineare Regularisierungen, wie das Verfahren der konjugierten Gradienten, welches sehr gute Ergebnisse liefert und weder linear noch mit einer a-priori Parameterwahl stetig ist [Lou89], mit ein und so wurde auf die beiden Einschränkungen der Linearität und Stetigkeit verzichtet. Offensichtlich existieren natürlich mehrere Regularisierungen respektive Regularisierungsverfahren für ein schlecht gestelltes Problem. Ebenso ist zu erwarten, daß die konkrete Form der Regularisierung mindestens implizit von dem konkreten schlecht gestellten Problem abhängen wird.

Vergleichen wir jetzt die regularisierte Lösung $f_\gamma^\varepsilon = T_\gamma g^\varepsilon$ mit der verallgemeinerten Lösung $f = A^\dagger g$, so sehen wir

$$\|T_\gamma g^\varepsilon - A^\dagger g\| \leq \|T_\gamma g^\varepsilon - T_\gamma g\| + \|T_\gamma g - A^\dagger g\| \quad . \tag{4.48}$$

Den ersten Term der rechten Seite der obigen Gleichung (4.48), $\|T_\gamma g^\varepsilon - T_\gamma g\|$ nennen wir den *Einfluß des Datenfehlers* (auf die Regularisierung), den zweiten Term, $\|T_\gamma g - A^\dagger g\|$ nennen wir den (reinen) *Regularisierungsfehler*. Wählen wir γ als Funktion von ε und g^ε, so folgt aus $\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) \to 0$ mit der punktweisen Konvergenz von T_γ gegen $A^\dagger$, daß der reine Regularisierungsfehler, also der zweite Term der rechten Seite, gegen Null geht. Aus der Definition 4.5 folgt weiter sofort, daß $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ so zu bestimmen ist, daß

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \|T_\gamma g^\varepsilon - T_\gamma g\| = 0 \tag{4.49}$$

gilt. So dann gilt, wenn die Daten g^ε immer exakter bereitgestellt werden, daß die approximative Lösung f_γ^ε gegen die Moore-Penrose Lösung $\tilde{f}$ konvergiert.

Um jetzt das generelle, unterschiedliche Verhalten der beiden Terme in (4.48) zu demonstrieren[31], betrachten wir das schon im Kapitel 4.1 vorgestellte einfache Beispiel (4.3)

$$Af(x) = \int_0^x f(t)\, dt = g(x) \quad . \tag{4.50}$$

Da $f = g'$ ist, können wir den zentralen Differenzquotienten

$$D_h g(x) = \frac{g(x+h) - g(x-h)}{2h},\ h > 0 \tag{4.51}$$

als Näherungsformel respektive Regularisierungsverfahren für die Lösung f verwenden[32]. Ist g dreimal stetig differenzierbar, so ergibt sich aus

$$g(x \pm h) = g(x) \pm h g'(x) + \frac{1}{2} h^2 g''(x) \pm \frac{h^3}{6} g'''(\xi_\pm) + O\left(h^4\right) \tag{4.52}$$

die Fehlerabschätzung

$$|g'(x) - D_h g(x)| \leq \frac{h^2}{6} \max_{\xi \in [x-h, x+h]} |g'''(\xi)| \quad . \tag{4.53}$$

Aufgrund von $f = g'$ liefert dieses den Regularisierungsfehler

$$|f(x) - D_h g(x)| \leq \frac{h^2}{6} \|f''\|_\infty \quad . \tag{4.54}$$

Wir müssen also h immer kleiner wählen, damit dieser Anteil - der (reine) Regularisierungfehler - klein wird.
Stehen aber nur gestörte Daten g^ε zur Verfühgung, dann gilt für den Einfluß des Datenfehlers

$$D_h(g^\varepsilon - g)(x) = \frac{(g^\varepsilon - g)(x+h) - (g^\varepsilon - g)(x-h)}{2h} \quad . \tag{4.55}$$

[31] Bezüglich des generellen Verhaltens des Einflusses des Datenfehlers und des reinen Regularisierungsfehlers sei jetzt bereits auf [AT77, Gro84, Iva76, Lav67, Lou89, Mor84] verwiesen. Im Abschnitt 9.3 werden wir die generellen Eigenschaften der beiden Terme kurz Zusammenfassen.

[32] Auf die stabilisiernden und eventuell regularisierenden Eigenschaften einer Diskretisierung wird desöfteren in der Literatur hingewiesen, wie beispielsweise in [AT77, Lou89, Mor84]. Hierbei ist die Schrittweite h der Diskretisierung der Regularisierungsparameter.

Wie im Kapitel 4.1 begündet, können wir nicht annehmen, daß $g^\varepsilon - g$ differenzierbar ist. Wissen wir nur, daß

$$\|g^\varepsilon - g\|_\infty \leq \varepsilon \tag{4.56}$$

gilt, dann sehen wir sofort, daß

$$|D_h(g^\varepsilon - g)(x)| \leq \frac{\varepsilon}{h} \tag{4.57}$$

gilt. Um den Einfluß des Datenfehlers klein zu halten, müssen wir demnach h groß wählen.
Betrachten wir die Abschätzung des *Gesamtfehlers* (der Regularisierung), so erkennen wir das Dilemma, daß

$$|D_h g^\varepsilon(x) - f(x)| \leq \frac{h^2}{6}\|f''\|_\infty + \frac{\varepsilon}{h} \quad . \tag{4.58}$$

gilt. Bei gestörten Daten g^ε kann der Gesamtfehler also *nicht beliebig klein werden*! Ein Umstand, der charakteristisch für alle schlecht gestellten inversen Probleme ist und in der Abbildung 4.1 auf dieser Seite skizziert ist.

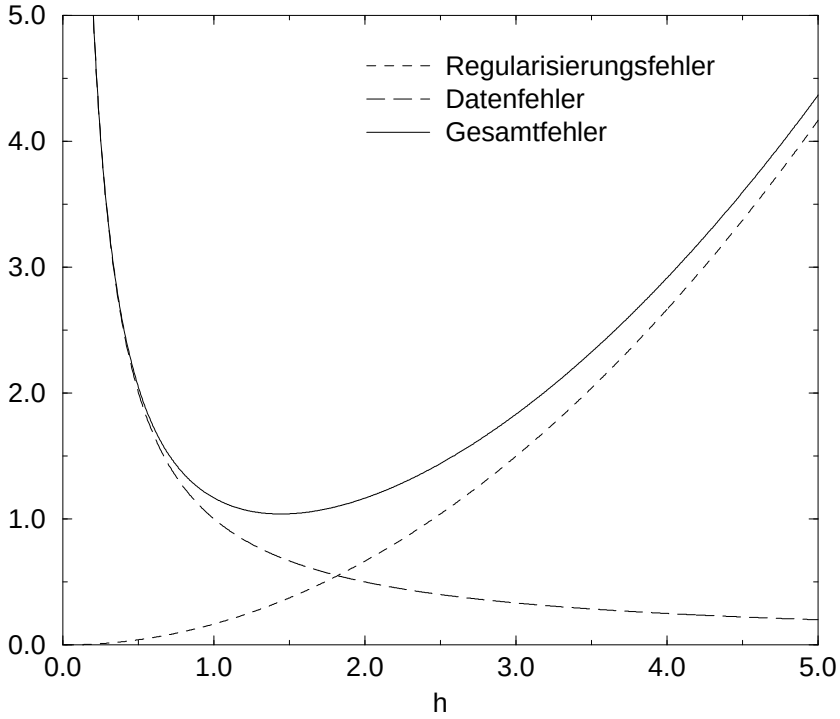

Abbildung 4.1: Regularisierungsfehler (monoton steigend), Datenfehler (monoton fallend) und Gesamtfehler

Es ist nun möglich, den Gesamtfehler bezüglich h zu minimieren. Dieses liefert die optimale Schrittweite

$$h_{\text{opt}} = \left(\frac{3\varepsilon}{\|f''\|_\infty}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{4.59}$$

und den Gesamtfehler der Ordnung

$$O\left(\varepsilon^{\frac{2}{3}}\right) \quad . \tag{4.60}$$

Es geht also ein Drittel der Genauigkeit der Daten im Ergebnis verlohren. Das größere Problem ist hier aber offensichtlich, daß die optimale Schrittweite nicht nur vom Datenfehler ε abhängt sondern auch von

der exakten Lösung f! Eine Problematik, die des öfteren in der Untersuchung zur (optimalen) Wahl des Regularisierungsparameters[33] in Erscheinung tritt.

Das Problem der Bestimmung einer approximativen Lösung, die stabil unter kleinen Änderungen der Funktion g ist, geht also über in[34]:

1. das Auffinden eines Regularisierungs-Operators T_γ und
2. die Bestimmung des (optimalen) Regularisierungsparameters γ,

wobei bei beiden Punkten zusätzlichen Informationen über das konkrete schlecht gestellte Probleme, wie beispielsweise allgemeine Eigenschaften des mathematischen Modells und daraus folgend Kenntnisse über Eigenschaften der Lösung, aber auch genaue Kenntnisse über den Fehler der Funktion g^ε, berücksichtigt werden müssen.

Zum Abschluß dieses Abschnitts wollen wir noch eine „Kuriosität“ anmerken:
Die Gleichung (4.44) wird *regularisierbar* genannt, wenn ein Regularisierungs-Operator für diese existiert. Diese eigentlich sinnvolle Definition verleitet nun manche Autoren dazu, ähnlich HADAMARD's ursprünglicher Schlußfolgerung, daß an mathematische Probleme, die mit konkreten physikalischen Fragestellungen korrespondieren, die notwendige Bedingung der Regularisierbarkeit gestellt wird. Unter dieser Betrachtungsweise kann ein (im neueren Sinne) „gut gestelltes“ Problem als ein regularisierbares angesehen werden. Inwieweit diese Schlußfolgerung auch ein Fehlschluß ist, wird die Zukunft zeigen. Begündet durch die Erkenntnis- und Wissenschafttheorie, ist es jedoch mehr als fraglich, inwieweit man sinnvoll derartige notwendigen Bedingungen an mathematische Modelle stellen kann, so daß diese zu „realen“ physikalischen Problemen korrespondieren werden. Desweiter sagt die prinzipielle, theoretische Regularisierbarkeit eines Problems nicht immer etwas über die praktische Realisierbarkeit der Regularisierung aus [Iva76].

4.2.5 Stabilisierung durch Änderung der Topologie

In folgendem wollen wir eine Methode zur Stabilisierung eines schlecht gestellten Problems vorstellen, die unseres Wissens nach bisher selten in der Literatur erwähnt worden ist, die *Stabilisierung durch Änderung der Topologie*[35]. Der hauptsächliche Grund für deren Erwähnung im Ramen dieser Arbeit ist der, daß sie als Ausgangspunkt für eine Weiterentwicklung bestehender oder sogar zur Entwicklung neuer Regularisierungsverfahren dienen und interpretiert werden kann, was wir hier auch (implizit) anwenden werden, und daß bestehende Regularisierungsverfahren ebenso als Änderung der Topologie interpretiert werden können[36].

Beruht die Schlechtgestellheit des Problems auf der Unstetigkeit des inversen Operators, so kann durch eine Änderung der verwendeten Topologie Abhilfe geschaffen werden. Es bestehen offensichtlich prinzipiell zwei Möglichkeiten:

1) Die Wahl einer *feineren Topologie in Y* ermöglicht die Stetigkeit des inversen Operators. Im Fall, daß Y ein Hilbertraum ist, bedeutet dieses aber, daß die Elemente in Y, die bezüglich der induzierten Norm endlich

[33] Wir verweisen darauf auch kurz im Kapitel 8.

[34] ARSENIN und TIKHONOV [AT77] sprechen hier von einer Reduzierung des Problems auf diese zwei Punkte. Tatsächlich kann jedoch gerade die Bestimmung des Regularisierungsparameters γ zu großen Schwierigkeiten führen. Zwar sind einige Methoden zur Wahl von γ vorgeschlagen worden, doch gründen diese sich oftmals auf a priori Kenntnisse der Varianz des Rauschens σ^2 und auf die konkrete prinzipielle Form des Regularisierungs-Operators. Ist die Varianz σ^2 nicht exakt bekannt, so sind viele dieser Methoden praktisch nicht anwendbar [Dav82]. Das Problem der Wahl von γ soll hier im Kapitel 8 betrachtet werden. Für weiterführende Einzelheiten bezüglich der Methoden und der Probleme bei der Bestimmung des Regularisierungsparameters sei jetzt schon auf [AT77, Dav82, Mar82, BW82] verwiesen.

[35] Wir folgen hier der Darstellung von A. K. LOUIS in [Lou89].

[36] Dieses trifft beispielsweise auf das hier verwendete, im Abschnitt 5.3 vorgestellte, Verfahren zur Regularisierung von Integralgleichung vom Faltungstyp zu; desweiteren siehe Kapitel 7

sind, stark eingeschränkt werden. Der Hilbertraum dieser Elemente ist dann so klein, daß die in natürlicher Weise auftretenden Datenfehler nicht mehr darin enthalten sind.

2) Die zweite Möglichkeit besteht darin, eine *gröbere Topologie in X* zu wählen. Statt Stetigkeit bezüglich der Norm in X kann man die Forderung dahingehend abschwächen, daß nur noch lineare Funktionale auf der gesuchten Lösung beschränkt sind. Das führt aber zu einer Abänderung des gesuchten Problems in folgender Art und Weise:

Statt der Lösung f von $Af = g$ sucht man die „Momente“ von f. Sei ψ gegeben und hinreichend glatt. Es gilt

$$\langle \psi, f\rangle = \langle \psi, A^{-1}g\rangle = \langle (A^{-1})^{*}\psi, g\rangle = \langle \Lambda, g\rangle \quad , \tag{4.61}$$

das heißt, man hat *a-priori* von der bekannten Funktion ψ die Funktion

$$\Lambda = \left(A^{-1}\right)^{*}\psi \tag{4.62}$$

zu berechnen und dann das Skalarprodukt mit den Daten zu bilden. Offensichtlich gilt

$$|\langle \psi, f\rangle| = |\langle \psi, A^{-1}g\rangle| \leq \|\Lambda\|\,\|g\| \quad , \tag{4.63}$$

also ist A^{-1} bezüglich der schwächeren Topologie in X stetig.

Betrachten wir wieder das Beispiel (4.3) der Differentiation aus Kapitel 4.1. Sei also

$$Af(x) = \int_0^x f(t)\,dt = g(x) \quad .$$

Dann gilt, gemäß des oben dargestellten:

$$\langle \psi, f\rangle = \langle \psi, g'\rangle = -\langle \psi', g\rangle \tag{4.64}$$

und somit ist

$$\Lambda = -\psi' \quad . \tag{4.65}$$

Generell gilt, bei geeignet gegebenen und hinreichend glattem ψ, daß die Funktion Λ dann entweder analytisch berechenbar ist oder, zumindest prinzipiell, mit hoher Genauigkeit und vor allem ohne Einfluß von Datenfehlern approximiert werden kann. Die anschließende Lösung des geänderten Problems ist dann stabil.

4.3 Klassifizierung schlecht gestellter Probleme

Die im Kapitel 4.2.3 angegebene Darstellung der verallgemeinerten Inverse mittels der Singulärwertzerlegung (4.43) bietet eine anschauliche Möglichkeit, schlecht gestellte Probleme zu klassifizieren. In der Darstellung stehen Glieder der Form

$$\sigma_n^{-1}\langle g, u_n\rangle v_n \quad .$$

Ist die Funktion g fehlerbehaftet und sind die σ_n klein, so werden diese Anteile des Fehlers verstärkt. Wie stark dieses geschieht, hängt vom Fallen der Singulärwerte ab. Die Singulärwerte σ_n ermöglichen somit eine Aussage über den Operator. Daneben sollen jetzt qualitative Zusatzinformationen über die Lösung in Form von Glattheitsaussagen berücksichtigt werden. Konkret sollen die Zuasatzinformationen der Lösung betreffend durch

$$f \in H^{\beta} \tag{4.66}$$

beschrieben werden, wobei H^β ein *Sobolev-Raum* sei[37] [Lou89, Iva76, Wer95]. Die Stärke der Zusatzinformation soll sinnvollerweise relativ zum Fallen der Singulärwerte betrachtet werden, was zur folgenden Definition führt.

Definition 4.6
Sei $A \in K(X,Y)$ nicht degeneriert[38] *mit singulärem System*

$$\{v_n, u_n; \sigma_n\}_{n\in\mathbb{N}} \quad .$$

1. *Existiert $\alpha > 0$, so daß $\sigma_n = O(n^{-\alpha})$ ist, dann nennen wir den* Operator A schlechtgestellt von der Ordnung α.
2. *Existiert $\rho > 0$, so daß $|\ln \sigma_n \geq cn^\rho$ gilt, so nennen wir den* Operator A exponentiell schlecht gestellt.
3. *Ist der Operator schlecht gestellt von der Ordnung α und die Lösung des ungestörten Problems $f \in H^\beta$, so nennen wir das* Problem schlecht gestellt von der Ordnung (α, β).

Diese Klassifizierung ist für lineare Probleme möglich, da hier eine Singulärwertzerlegung existiert. Eine anderer Methode zur Klassifizierung der Schlechtgestelltheit bietet die Verwendung der Sobolov-Räume zur Charakterisierung der „Glättungseigenschaften“ des Operators A, wodurch dieser jetzt auch nicht mehr unbedingt kompakt zu sein braucht. Es werden jetzt für $A : L^2 \to L^2$ die Normen von Af mit der Norm von f verglichen, die Zusatzinformation für f sei wiederum in der Form $f \in H^\beta$ mit positiven β gegeben. Wenn es Konstanten c_1 und c_2 mit

$$c_1 \|f\|_{H^{-\alpha}} \leq \|Af\|_{L^2} \leq c_2 \|f\|_{H^{-\alpha}} \tag{4.67}$$

oder

$$c_1 \|f\|_{L^2} \leq \|Af\|_{H^\alpha} \leq c_2 \|f\|_{L^2} \tag{4.68}$$

gibt, dann ist das Bild Af um α Stufen glatter als das Urbild f. Die obige Definition der Klassifizierung schlecht gestellter Probleme kann dann ebenso verwendet werden. Haben wir nämlich eine Singulärwertzerlegung mit $X = L^2$, dann kann insbesondere

$$c_1 \sigma_n^{-1} \leq \|u_n\|_{H^\alpha} \leq c_2 \sigma_n^{-1}$$

geschlossen werden. Für kleine Singulärwerte müssen die zugehörigen u_n stark oszillieren, damit die H^α-Norm groß wird, d.h. zu kleinen Singulärwerten gehören also bei schlecht gestellten Operatoren stark oszillierende Funktionen. Im Spezialfall $u_n(x) = e^{inx}$ kann man sofort ablesen, daß aus der Glättung um α Stufen folgt, daß $\sigma_n = O(n^{-\alpha})$ gilt.

Der Grad der Schlechgestelltheit kann jetzt durch die Größen α und β weiter charakterisiert werden. Dazu wird die folgende Definition getroffen:

Definition 4.7
1. *Ist $\beta \gg \alpha$, also $\beta/(\alpha+\beta) \approx 1$, so ist das Problem* schwach gestellt.
2. *Ist $\beta \approx \alpha$, also $\beta/(\alpha+\beta) \approx \frac{1}{2}$, so ist das Problem* mäßig schlecht gestellt.
3. *Ist $\beta \ll \alpha$, also $\beta/(\alpha+\beta) \approx 0$, so ist das Problem* stark schlecht gestellt.

Beispiele hierfür sind, der Reihe nach:

---

[37] Zwar folgen wir in diesem Abschnitt den Darstellungen in [Lou89], geben aber dazu abweichend die Zusatzinformationen über die Lösung durch die Verwendung von Sobolov-Räumen an. LOUIS formuliert die Zusatzinformationen ebenso durch die Singulärwertzerlegung des kompakten Operators A repektive auf den Raum $X_\nu = \mathcal{R}((A^*A)^{\nu/2})$, dessen Norm duch die Singulärwertzerlegung von A gegeben ist, was vorteilhafter bei der Formulierung der Theorie der Regularisierung kompakter Operatoren ist. Da aber einerseits Faltungsoperatoren nicht kompakt sind und andererseits die Formulierung über Sobolov-Räume mit der Formulierung über das singuläre System im wesentlichen äquivalent ist [Lou89], haben wir hier gleich die Sobolov-Raum Variante gewählt.

[38] Hat der (kompakte) Operator A einen endlichdimensionalen Bildbereich $\mathcal{R}(A)$, so wird A *degeneriert* genannt.

1. Differentiation einer glatten Funktion,
2. Radon-Transformation mit Anwendung in der Computer-Tomographi ($\alpha = \beta = \frac{1}{2}$),
3. Fredholmsche Integralgleichungen mit glattem Kern und nicht glatter Lösung.

Daneben existieren natürlich noch die in der Definition 4.6 erwähnten exponentiell schlecht gestellten Probleme, wie beispielsweise das Rückwärtsrechnen in der Zeit bei der Wärmeleitungsgleichung[39].

Die Ausführungen zur Klassifizierung schlecht gestellter Probleme ergänzend, sei hier bereits erwähnt, daß eine zur Singulärwertzerlegung formal analoge Zerlegung von Faltungsoperatoren existiert, die eine Übertragung der eben dargelegten Ergebnisse und Konzepte bei kompakten Operatoren, in einem gewissen Rahmen, erlaubt[40]. Wie wir im Abschnitt 5.3.2 noch näher darlegen werden, wird durch den Ausdruck[41] (5.46),

$$(k * f)(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{k}(\xi)\, \tilde{f}(\xi) e^{it\xi}\, d\xi \quad , \tag{4.69}$$

eine Zerlegung[42] von Faltungsoperatoren gegeben. Gemäß der Zerlegung (4.69) übernimmt die Transformierte $\tilde{k}$ des Faltungskerns die Rolle der Singulärwerte, womit und dem Zusammenhang von Sobolov-Räumen und der Fourier-Laplace Transformation unmittelbar[43] folgt, daß wir an dem Verhalten von $\tilde{k}$ respektive $\tilde{k}^{-1}$ für $|\xi| \to \infty$ (unmittelbar) den Grad der Schlechtgestelltheit des Entfaltungsproblems ablesen können.

Diesen Abschnitt nun abschließend, wollen wir noch auf das Korollar E.1 im Anhang E über den Grad der Schlechtgestelltheit bestimmter Entfaltungsprobleme hinweisen.

[39] Dieses Beispiel wird ausführlich in [Lou89] behandelt.

[40] Wir wollen diesbezüglich auch auf [AT77, Gro93, Lou89, Wer95] verweisen.

[41] siehe dort Seite 76 und man beachte die Bemerkungen zu der Zerlegung (5.46)

[42] Wir wollen an dieser Stelle wieder darauf hinweisen, daß wir hier die Fourier-Laplace Transformation betrachten, also in (4.69) sowohl die Fourier- als auch die (zweiseitige) Laplace-Transformation abgedeckt ist; ein zu (4.69) entsprechender Ausdruck für die Mellin-Transformation erhalten wir wieder vermöge der Variablenubstitutionen $t = -\ln(x)$ und $s = i\xi$.

[43] siehe diesbezüglich beispielsweise [Lou89, Smi88, Wer95]

Kapitel 5

Regularisierungsverfahren

In der Literatur ist eine Vielzahl von Regularisierungsverfahren vorgeschlagen worden. Im folgenden Kapitel sollen einige der wichtigsten vorgestellt und besprochen werden. Bei der Präsentation der Regularisierungsverfahren wollen wir uns aber hauptsächlich auf die hier verwendeten Verfahren[1] konzentrieren und weitere Regularisierungsverfahren nur kurz vorstellen oder sogar nur erwähnen. Bereits in [Ros95] haben wir ausführlicher einige der wichtigsten Regularisierungsverfahren und deren Konzepte vorgestellt. Für detailierte und bessere Diskussionen und für ausführliche Übersichten der verschiedenen Verfahren sei auf die Literatur hingewiesen, wobei wir insbesondere [AT77, Iva76, Lav67, Lou89, Mor84, Gro93] empfehlen wollen[2].

5.1 Regularisierung kompakter Operatoren

Wenden wir uns speziellen Regularisierungen kompakter Operatoren zu. Zwar ist der Integraloperator der Integralgleichung (2.13), da es sich hier um einen Faltungsoperator handelt[3], nicht kompakt, doch kann aus der Regularisierung kompakter Operatoren schon einiges über die Regularisierung nicht-kompakter (Faltungs-)Operatoren gelernt werden, insbesondere da eine zur Singulärwertzerlegung formal analoge Zerlegung für Faltungsoperatoren existiert[4]; darauf werden wir später ausführlicher zu sprechen kommen.

Spezielle Regularisierungsverfahren für kompakte Operatoren können wir nun ausgehend von dessen Singulärwert- respektive Spektralzerlegung (4.40)

$$Af = \sum_n \sigma_n \langle f, v_n \rangle u_n$$

und der Darstellung der verallgemeinerten Inversen (4.43)

$$A^\dagger g = \sum_n \sigma_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n \quad ,$$

ebenso durch dessen Singulärwertzerlegung, erhalten. Für reellwertige Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ auf den Singulärwerten von A *definieren* wir [Lou89]

[1] Genauer werden wir hier, mit Variationen, ein Verfahren verwenden, wobei der Grund dafür im folgendem sicher klar werden wird.

[2] Diese Empfehlung sei nicht als eine Wertung gegenüber anderen Autoren zu verstehen sondern spiegelt nur den persönlichen Geschmack des Autors wider.

[3] siehe Kapitel 2.5 und 2.5.1 und [Wer95]

[4] siehe Fußnote 37

$$T_\gamma g = \sum_n \sigma_n^{-1} \tilde{F}_\gamma(\sigma_n, g)\langle g, u_n\rangle v_n \quad . \tag{5.1}$$

Die Funktion $\tilde{F}_\gamma$ wird als *Filter*, aber auch als *stabilisierende Funktion* oder *Stabilisator*[5], bezeichnet [AT77, Lou89]. Hängt $\tilde{F}_\gamma$ nicht von g ab, so ist der Regularisierungs-Operator T_γ linear, andernfalls ist T_γ nichtlinear. Im weiteren werden wir uns, soweit wir es nicht explizit erwähnen werden, auf *lineare Regularisierungen* beschränken. Übrigens gilt, falls $A^\dagger$ unbeschränkt ist, nach dem Satz von BANACH-STEINHAUS [Lou89, Wer95]:

$$\|T_\gamma\| \to \infty \text{für } \gamma \to 0 \quad .$$

Man trifft nun folgende Definition:

Definition 5.1
Das von g unabhängige Filter[6] $\tilde{F}_\gamma$ *heißt* regularisierend *(für den Operator A), wenn gilt*

$$\sup_n |\tilde{F}_\gamma(\sigma_n)\sigma_n^{-1}\| = c(\gamma) < \infty \quad , \tag{5.2}$$

$$\lim_{\gamma \infty 0} \tilde{F}_\gamma(\sigma_n) = 1 \quad \textit{punktweise in } \sigma_n \quad , \tag{5.3}$$

$$|\tilde{F}_\gamma(\sigma_n)| \leq c \quad \textit{für alle } \gamma \textit{ und } \sigma_n \quad . \tag{5.4}$$

Es gilt nun der wesentliche Satz[7] [Lou89], den wir ohne Beweis nur angeben wollen:

Satz 5.1
Die durch ein regularisierendes Filter erzeugte Operatoren T_γ sind Regularisierungen von $A^\dagger$ mit $\|T_\gamma\| = c(\gamma)$.

Der Ansatz (5.1) über die Funktion $\tilde{F}_\gamma$ bildet die Basis für die Theorie der Regularisierung kompakter Operatoren. Dieser ist auch deswegen von Bedeutung, da gezeigt werden kann, daß viele der bedeutenden Regularisierungsverfahren, wie die *Tikhonov-Phillips Regularisierung*, iterative Verfahren wie die *Landweber-Iteration*, *Projektionsverfahren*, das Verfahren der *konjugierten Gradienten*, aber auch aus der Statistik abgeleitete wie die *Bayes-Schätzung*, sich auf einen Filter abbilden lassen[8] [AT77, Lou89].

Bemerkenswert ist es übrigens, daß bei den rein auf das Filter $\tilde{F}_\gamma$ basierende Regularisierungsverfahren, wenn also ausgehend von (5.1) und der Definition (5.1) ein Filter zur Regularisierung gesucht wird, in der Literatur und der Praxis sich auf das Filter der sogenannten *abgeschnittenen Singulärwertzerlegung* respektive den *idealen Tiefpaß*, das *Filter der Tikhonov-Phillips Regularisierung*, oder im Falle des inversen Faltungsproblem, auf Gaussartige Filter beschränkt wird[9].

Eine kleine Bemerkung noch zum Ende dieses Abschnitts: Auch wenn viele der bedeutesten Regularisierungsverfahren sich auf ein Filter abbilden lassen, so bedeutet dieses noch lange nicht, daß für die praktische Regularisierung (5.1) mit dem dazugehörenden Filter geeigneter ist. Die Probleme liegen zum einen darin, daß die Singulärwertzerlegungen in einer (numerisch) auswertbaren Form vorliegen müssen und zum

[5] Die Bezeichnungen Stabilisator oder stabilisierende Funktion werden in der Regularisierung von Faltungsgleichungen benutzt; siehe [AT77].

[6] Da es sich hier um einen technischen Begriff handelt, heißt es tatsächlich *das Filter* und nicht der Filter.

[7] In der Praxis respektive historisch ist man natürlich gerade andersherum vorgegangen: man sucht die Bedingungen, die das Filter $\tilde{F}_\gamma$ erfüllen muß, um einen Regularisierungs-Operator T_γ zu erzeugen.

[8] Die allgemeinste Formulierung der Tikhonov-Phillips Regularisierung ist detailiert in [AT77] und [Lou89] dargestellt und kurz in [Ros95] und hier im nachfolgenden Abschnitt 5.2; weiter sei bezüglich der Tikhonov-Phillips Regularisierung auf [Iva76, Lav67, LBP91, Mor84] verwiesen . Iterative Verfahren wie die Landweber Iteration, die wir kurz im Abschnitt 5.4 vorstellen werden, das Verfahren der konjugierten Gradienten, Projektionsverfahren und einige aus der (Bayesschen) Statistik abgeleitete Verfahren werden beispielsweise in [Lou89] diskutiert.

[9] siehe [Ros95] und Kapitel 6 und den (diesbezüglichen) Bemerkungen in [Dav82]

anderen an den (möglichen) oszillatorischen Verhalten der Funktionen u_n und v_n bei kleinen Singulärwerten σ_n [Lou89, LBP91]. Nichtsdestotrotz ist die Darstellung (5.1) für die Untersuchung der (theoretischen) Eigenschaften der Regularisierungsverfahren (kompakter Operatoren) von unschätzbaren Wert.

5.2 Die Tikhonov-Phillips Regularisierung

Aufgrund seiner sowohl praktisch als auch theoretisch fundamentalen Bedeutung, wollen wir im folgendem Abschnitt kurz die *Tikhonov-Phillips Regularisierung* vorstellen; ausführlicher haben wir dieses bereits in [Ros95] gemacht. Für detailierte Darstellungen dieses Regularisierungsverfahrens sei natürlich, da hier einer der Väter des Verfahrens selber schreibt, auf das Buch von ARSENIN und TIKHONOV [AT77] und des weiteren auf [Lou89, Iva76, Gro93] verwiesen. Bezüglich der Anwendung der Tikhonov-Phillips Regularisierung auf (kompakte) Fredholmsche Integralgleichungen erster Art wollen wir noch besonders auf [Gro84] hinweisen.

Die Tikhonov-Phillips Regularisierung beruht im wesentlichen auf der Extremalisierung (Minimierung) eines (quadratischen) Funktionals. Der Klarheit respektive „Einfachheit“ wegen seien X und Y Hilberträume. Wir nehmen an, daß die Gleichung $Af = g_T$ eine eindeutige Lösung $f_T \in V$, wobei $V \subset X$ gelte, besitze. Dann können wir die Minimierung des Defektes der verallgemeinerten Lösung (4.23) auf V beschränken, wir haben also

$$\inf_{f \in V} \|Af - g\| \tag{5.5}$$

zu bestimmen. Dieses ist jedoch ein schwierig zu lösendes restringiertes Minimierungsproblem, welches nur dann eine (eindeutige) Lösung hat, wenn zusätzliche Bedingungen erfüllt sind [Mic62, AT77, Iva76].

Mit $\Omega[f]$ sei nun ein stetiges, auf $\mathcal{N}(A)$ strikt konvexes, nicht-negatives Funktional auf X bezeichnet, und wir betrachten im folgendem speziell[10]

$$V = \left\{ f \in X : \Omega[f] \leq \rho^2 \right\} \quad . \tag{5.6}$$

Wir können nun das restringierte Minimierungsproblem (5.5) mit Hilfe der Lagrangeschen Multiplikatoren in ein unrestringiertes für

$$\mathcal{M}^\gamma[f,g] = \|Af - g\|^2 + \gamma^2 \Omega[f] \quad , \tag{5.7}$$

überführen [Mic62, AT77, Lou89]. Das Funktional $\mathcal{M}^\gamma[f,g]$ wird als *Tikhonov-Phillips Funktional* bezeichnet, der *Strafterm* $\Omega[f]$ wird in diesem Zusammenhang *stabilisierendes Funktional*, *Stabilisator* oder auch *glättendes Funktional* genannt [AT77, Lou89]. TIKHONOV hatte ursprünglich $\Omega[f] = \|f\|^2$ benutzt, PHILLIPS verwandte $\Omega[f] = \|f''\|^2$.

Es sei nun insbesondere

$$\Omega[f] = \|Bf\|^2 \quad , \tag{5.8}$$

wobei $B : \mathcal{N}(A)^\perp \to X$ mit $\mathcal{D}(B)$ dicht in $\mathcal{N}(A)^\perp$, und $(B^*B)^{-1} : \mathcal{N}(A)^\perp \to X$ sei stetig [Lou89, AT77]. Es existiere also $\beta > 0$ mit

$$\|Bf\| \geq \beta \|f\| \quad . \tag{5.9}$$

Das Tikhonov-Phillips Funktional ergibt sich dann zu

$$\mathcal{M}^\gamma[f,g] = \|Af - g\|^2 + \gamma^2 \|Bf\|^2 \quad . \tag{5.10}$$

Es gilt jetzt der wichtige Satz, dessen Beweis in [Lou89, AT77] zu finden ist:

[10] Bezüglich weitere Eigenschaften von $\Omega[f]$ sei auf [AT77, Lou89, Gro93] verwiesen.

Satz 5.2
Sei

$$C = A^*A + \gamma^2 B^*B \quad . \tag{5.11}$$

Dann löst das minimierende Element f_γ von $\mathcal{M}^\gamma[f,g]$ aus (5.10) die regularisierte Normalgleichung

$$\left(A^*A + \gamma^2 B^*B\right) f_\gamma = A^*g \quad ; \tag{5.12}$$

also

$$f_\gamma = C^{-1}A^*g \quad , \tag{5.13}$$

und

$$T_\gamma = \left(A^*A + \gamma^2 B^*B\right)^{-1} A^* \tag{5.14}$$

ist ein lineares *Regularisierungsverfahren.*

Auf Basis des obigen Satzes 5.2 lassen sich nun numerisch regularisierte Lösungen direkt gewinnen, ohne tatsächlich das Funktional numerisch (5.10) zu minimieren. Wesentlicher ist jedoch die Bedeutung des Satzes 5.2 bei der weiteren Untersuchung der theoretischen Eigenschaften der Tikhonov-Phillips Regularisierung.

Das auf seine theoretischen Eigenschaften am meisten untersuchte und so in der Praxis am meisten verwendete konkrete Funktional $\Omega[f]$ ist das folgende: Es sei nun $\mathcal{W}_2^p$ der Raum der Funktionen, die quadratintegrabel verallgemeinerte Ableitungen bis zur Ordnung p besitzen, in anderen Worten, ein *Sobolev-Raum*, dessen Metrik durch

$$\|f_1 - f_2\|_{\mathcal{W}_2^p} = \left\{ \int_a^b \sum_{r=0}^{p} q_r(x) \left(\frac{d^r f(x)}{dx^r} \right)^2 dx \right\}^{1/2} , \; f = f_1 - f_2 \, , \tag{5.15}$$

definiert[11] sei. Die Integralgrenzen a und b können sowohl endlich als auch unendlich sein, wobei $q_0, q_1, \ldots, q_{p-1}$ gegebene, nicht-negative, stetige Funktionen seien und $q_p(x)$ eine gegebene, positive, stetige Funktion sei. Es ist sehr wohl bekannt, daß, für jedes p, der Sobolev Raum $\mathcal{W}_2^p$ ein Hilbert-Raum ist, und das jede abgeschlossene Hülle in diesem kompakt in C (bzw. in der Metrik C) ist [Wer95, AT77]. Daraus folgt das für die Praxis wichtige Ergebnis: Suchen wir die regularisierte Lösung in den Raum $\mathcal{W}_2^p$ mit dem stabilisierenden Funktional

$$\Omega[f] = \int_a^b \sum_{r=0}^{p} q_r(x) \left(\frac{d^r f(x)}{dx^r} \right)^2 dx \quad , \tag{5.16}$$

dann gilt der Satz 5.2. Minimiert also die regularisierte Lösung f_γ, unter der Nebenbedingung $\|Af - g^\varepsilon\| = \varepsilon$, das stabilisierende Funktional (5.16), so wird diese, bis zur Ordnung p, die „glatteste“ (smoothest) Funktion sein, die diese Nebenbedingung erfüllt [AT77, Iva76]. In diesem Fall wird also die exakte Lösung f_T durch die bis zur Ordnung p glattesten Lösung approximiert. Stabilisatoren der Form (5.16), bei denen $q_r(x) \geq 0$ für $r = 0, 1, 2, \ldots, p-1$ und $q_p(x) > 0$ gilt, werden dem Rechnung tragend *(allgemeine) Stabilisatoren der Ordnung p* genannt. Ist jede der Funktionen q_r eine (positive) Konstante, so heißen diese Stabilisatoren entsprechend *Stabilisatoren der Ordnung p mit konstanten Koeffizienten.* Offensichtlich ist der Stabilisator der Ordnung p eine Verallgemeinerung der von TIKHONOV und PHILLIPS ursprünglich benutzten Funktionale.

Die konkrete Wahl des stabilisierenden Funktionals $\Omega[f]$ ist natürlich auch durch das konkrete Problem bestimmt. Doch, ähnlich der Bestimmung des Regularisierungsparameters ($\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$), auf die wir später im Kapitel 8 noch ausführlicher zu sprechen kommen werden, ist das Funktional $\Omega[f]$ für ein gegebenes Problem sicherlich nicht eindeutig bestimmt - was dem Konzept der Regularisierung gewissermaßen auch widersprechen würde. Wie DAVIES [Dav82] darauf hinweist, deutet der Sachverhalt, daß im Vergleich zum

[11] Zur Definition der *Sobolev-Räume* siehe [Lou89, Iva76, Wer95].

Problem der optimalen Bestimmung des Regularisierungsparameters γ weniger Untersuchungen zur Wahl des stabilisierenden Funktionals $\Omega[f]$ existieren, auf die Schwierigkeit dieses Problems hin[12].

Wir wollen noch auf das folgende hinweisen[13]: Das Tikhonov-Phillips Funktional $\mathcal{M}^\gamma[f,g]$, Gleichung (5.7) bzw. (5.10), wird in der Literatur auch folgendermaßen formuliert:

$$\mathcal{M}^\gamma[f,g] = \|Af-g\|_2^2 + \gamma^2 \|f\|_1^2 \quad . \tag{5.17}$$

Hierbei seien $\|\cdot\|_1$ und $\|\cdot\|_2$ die Normen zweier Hilberträume H_1 und H_2. Gemäß des Satzes 5.2 ist die Lösung f_γ des Funktionals (5.17) jetzt durch die Normalgleichung

$$\left(A^*A+\gamma^2 I\right) f_\gamma = A^*g \quad , \tag{5.18}$$

wobei I der Einheitsoperator ist, gegeben. Würden wir für H_1 beispielsweise den Sobolev-Raum $\mathcal{W}_2^p$ ansetzen, so führt uns dieses, gemäß des eben gesagten, auf das stabilisierende Funktional (5.16), also auf Stabilisatoren p-ter Ordnung. Dem entsprechend können wir den Operator B in (5.10) als eine Art „Erzeugungsoperator“ der Norm des H_1-Raumes interpretieren. In diesem Sinne besitzt die Darstellung (5.17) eine höhere Abstraktion, bezüglich der Regularisierung in Hilberträumen, als die Darstellungen (5.7) und (5.10). Es sei noch bemerkt, daß viele der allgemeinen Eigenschaften der Tikhonov-Phillips Regularisierung auf der Basis der Darstellung (5.17) abgeleitet worden sind[14]; so basieren die globalen Konvergenzeigenschaften bezüglich γ der unterschiedlichen Fehlerquellen[15] bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung, die wir im Abschnitt 9.3.1 auf der Seite 166f und im Abschnitt 9.3.2 auf der Seite 172f angeben werden, auf der Darstellung (5.17).

Zum Abschluß wollen wir noch auf ein weiteres, oft benutztes stabilisierendes Funktional hinweisen, daß in der Literatur jedoch weniger im Zusammenhang mit dem Tikhonov-Phillips Funktional (5.7) erwähnt wird, sondern im Rahmen der Entwicklung statistischer Methoden, basierend auf der Bayesschen Statistik, zur Stabilisierung und Regularisierung schlecht gestellter Probleme abgeleitet wird. Es handelt sich hier um das Funktional der *Maximum-Entropie Methode*

$$\Omega[f] = -S = \int f(x) \ln f(x)\, dx \quad , \tag{5.19}$$

welches ebenso im Rahmen des (allgemeinen) Tikhonov-Phillips Funktionals (5.7) abgeleitet werden kann[16]. Es ist zu bemerken, daß wir mit (5.19) nur das einfachst mögliche Entropie-Funktional[17] angegeben haben. Es existieren noch weitere, deren generelle Struktur aber der von (5.19) entspricht.

5.3 Die Regularisierung von Faltungsgleichungen

Wenden wir uns nun im folgendem speziell der Regularisierung von Integralgleichungen vom Faltungstyp zu, wie unser Problem des phänomenologischen Ansatzes der Dielektrizitätsfunktion amorpher Substanzen

[12] DAVIES bezieht sich konkret auf stabilisierende Funktionale, die durch $\Omega[f] = \|Bf\|^2$ (Gl. (5.8)) darstellbar seien, doch trifft sein Kommentar generell zu, d.h. die quasi generische Bestimmung eines (optimalen) Regularisierungsverfahrens, allein schon die Bestimmung eines generischen Funktionals, ja sogar nur weiterer, alternativer Funktionale $\Omega[f]$, scheint ein fundamental schwieriges Problem zu sein. Die Arbeiten von TIKHONOV und ARSENIN in [AT77] gehören übrigens, unseres Wissens nach, zu den wenigen, die $\Omega[f]$ neben des hier dargelegten allgemeiner untersuchen; siehe auch hier den Abschnitt 6.1. Das Gesagte trifft auch auf die stabilisierenden Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ zu, die im Abschnitt 5.3.2 eingeführt werden.

[13] Die nachfolgend kurze Darstellung wird beispielsweise von GROETSCH in [Gro84] verständlich und detailierter ausgeführt.

[14] siehe beispielsweise [GKM82, Gro93, Mor84]

[15] siehe Abschnitt 4.2.4, Seite 60

[16] siehe beispielsweise [Gro93]; bezüglich Details der *Maximum-Entropie Methode* sei auf [SG85, WW99, WW92] und den dortigen Referenzen, und bei jenen noch insbesondere auf [Jay57, Jay68], verwiesen.

[17] Wir wollen darauf hinweisen, daß es sich i.a. bei den in der *Maximum-Entropie Methode* verwendeten Entropiebegriffs um den der *Informationstheorie* handelt, der wiederum aus der Statistik folgt.

(2.13) bzw. (2.47) eines ist[18]. Bevor wir uns einer konkreten Regularisierung des Problems (2.13) bzw. (2.47) zuwenden, soll natürlich ersteinmal auf spezielle Regularisierungen des *inversen Faltungsproblems*, bekannter als *Entfaltung* bezeichnet, eingegangen werden. Dabei wollen wir allgemein die Probleme betrachten, die vermöge der Fourier- respektive der komplexen Fourier-Laplace- und Mellin-Transformation (formal) gelöst werden können.

5.3.1 Die verallgemeinerte Inverse bei Faltungsgleichungen

Bevor wir uns jedoch der (speziellen) Regularisierung der Faltungsgleichungen zuwenden, wollen wir zuerst deren Moore-Penrose- oder verallgemeinerte Lösung[19] untersuchen, denn gemäß der allgemeinen Definition 4.5 ist eine Regularisierung eine Approximation der verallgemeinerten Inverse[20]. Konkret wollen wir die Integralgleichung (2.47) der Dichtefunktion w untersuchen, deren allgemeine Struktur

$$g(x) = \int_0^\infty k(x \cdot y)\, \frac{f(y)}{y}\, dy \tag{5.20}$$

ist[21]. Wie wir im Abschnitt 2.4.2 bereits gezeigt haben, können wir die Lösung dieser Integralgleichung im Mellin- respektive Fourier-Laplace Raum[22] als

$$\tilde{f}(s) = \frac{\tilde{g}(-s)}{\tilde{k}(-s)} \quad , \tag{5.21}$$

angeben, wobei wir selbstverständlich (implizit) die Existenz der Mellintransformierten $\tilde{f}$, $\tilde{g}$ und $\tilde{k}$ der Funktionen f, g und k und die Gültigkeit eines Faltungssatzes der Mellin-Transformation[23] vorausgesetzt haben.

Gemäß des Satzes[24] 4.2 ist die verallgemeinerte Inverse $f = A^\dagger g$ die eindeutige Lösung der Normalgleichung (4.30),

$$A^* A f = A^* g \tag{5.22}$$

in $\overline{\mathcal{R}(A^*)}$. Die Normalgleichung (5.22) nimmt hier also die konkrete Form[25]

$$\int_0^\infty d\xi\, k^*(x\xi) \int_0^\infty dy\, k(\xi y)\, \frac{f(y)}{y} = \int_0^\infty d\xi\, k^*(x\xi)\, g(\xi) \tag{5.23}$$

an; man beachte noch die - trivialerweise - Gültigkeit von $k^*(\xi x) = k^*(x\xi)$. Wenden wir, entsprechend der Vorgehensweise zur Lösung der Integralgleichung (2.47) respektive (5.20), auf die obige Normalgleichung (5.23) die Mellin-Transformation (2.29) und sukzessiv einen entsprechend geeigneten Faltungssatz[26] an, so

[18] siehe Kapitel 2.5 und 2.5.1

[19] siehe Abschnitt 4.2.3 und [AT77, Iva76, Lav67, Lou89, Mor84, Gro93]

[20] Es sei auf die diesbezüglichen Bemerkungen auf Seite 60 zur Definition der Regularisierung im Abschnitt 4.2.4 hingewiesen.

[21] Wir wollen darauf hinweisen, daß wir mit der Substitution $y \to 1/y$ und der entsprechenden Transformationen der Funktionen k, g und f die obige Gleichung (5.20) in die für die Mellin-Transformation üblichere Form (5.42) (siehe Seite 76 im nachfolgenden Abschnitt 5.3.2) und anschließend mit den Substitutionen $y = e^{-t}$ und $x = e^{-t_0}$, und wiederum zuzüglich der entsprechenden Transformationen der Funktionen, diese Gleichung in die für Faltungssgleichung bekanntere Form (5.40) bringen können. Das folgende gilt somit ebenso für diese Arten von Faltungsgleichungen.

[22] siehe auch Gleichung (2.50) auf Seite 16

[23] siehe auch Abschnitt 2.4.2 und [Doe71, EMOT54, Tit67]

[24] siehe Abschnitt 4.2.3 und [Lou89]

[25] Wir notieren hier, um die Struktur der Normalgleichung zu erhalten, die Integrale als Operatoren, wie es in der physikalischen Literatur auch nicht unüblich ist.

[26] Es sei wiederum auf Abschnitt 2.4.2, besonders dort auf Gleichung (2.32) auf Seite 13, und desweiteren auf [Doe71, EMOT54, Tit67] verwiesen.

transformiert sich die Normalgleichung in den Mellin- respektive Fourier-Laplace Raum zu

$$\tilde{f}(s-1)\,\tilde{k}(1-s)\,\tilde{k^*}(s) = \tilde{g}(1-s)\,\tilde{k^*}(s) \quad , \tag{5.24}$$

woraus mit der Substitution $\overline{s} = s-1$ unmittelbar

$$\tilde{f}(\overline{s}) = \frac{\tilde{g}(-\overline{s})}{\tilde{k}(-\overline{s})} \tag{5.25}$$

folgt. Dieses ist aber gerade die oben angegebene Lösung (5.21) der Integralgleichung (5.20) im Mellin-Raum. Wir habe also gezeigt:

> Existiert die Lösung einer Faltungsgleichung als inverse Integraltransformation, dann ist die Moore-Penrose Lösung mit jener Lösung identisch.

Rufen wir uns die Bemerkungen im Kapitel 2.5 auf Seite 26 zur Eindeutigkeit der Mellin- respektive Fourier-Laplace Transformation ins Gedächnis zurück und berücksichtigen wir die allgemeinen Eigenschaften, sowohl der Mellin- respektive der Fourier-Laplace Transformation als auch deren Faltungssätze[27], besonders die Transformation von Integration und Differentiation zu algebraischen Operationen und die Transformation des Faltungsprodukts zu einem algebraischen Produkt der Transformierten, so ist die Identität der (transformierten) Lösung mit der (transformierten) Moore-Penrose Lösung nicht nur nicht wirklich verwunderlich, sondern bereits zu erwarten gewesen.

Abschließend können wir also festhalten: Das nachfolgende spezielle Regularisierungsverfahren für Entfaltungsprobleme, das auf der Darstellung der (formalen) Lösung als inverse Mellin- respektive Fourier-Laplace Transformation beruhen wird, ist somit ebenso eines für die Moore-Penrose Lösung, entsprechend der von uns vorgestellten allgemeinsten Definition 4.5 der Regularisierung.

5.3.2 Das genuin auf stabilisierenden Funktionen basierende Regularisierungsverfahren

Damit die Grundidee der nun vorgestellten Methode deutlich wird, betrachten wir (nochmals) das Verhalten der Integralgleichung gegenüber Fehlern der rechten Seite, also die Ursache der Schlechtgestelltheit, jetzt untersucht im Rahmen der Integraltransformationen respektive der Integraltransformierten. Die hier betrachtete Integralgleichung[28] (2.13) hat, zur Erinnerung, die Form:

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty k(\omega\tau)\,p(\tau)\,d\tau \,, \tag{5.26}$$

deren generelle Struktur die einer Mellinschen Faltung ist. Die linke Seite E^+ der Gleichung (5.26) sei wiederum nur approximativ bekannt, und diese sei durch

$$E^+(\omega) = E_T^+(\omega) + \nu(\omega) \tag{5.27}$$

dargestellt[29], wobei E_T^+ die ungestörte, theoretische Funktion und ν eine stochastische, den Fehler bzw. das Rauschen modellierende, Funktion sei. Bezüglich der Lösung der Integralgleichung (5.26) bzw. deren Transformierte im Mellin-Raum gilt dann:

$$\tilde{p}(s) = \frac{\tilde{E^+}(1-s)}{K(1-s)} = \frac{\tilde{E_T^+}(1-s)}{K(1-s)} + \frac{\tilde{\nu}(1-s)}{K(1-s)} \quad , \tag{5.28}$$

[27] Ausführlich und ausgezeichnet werden diese Eigenschaften beispielsweise von DOETSCH in [Doe71] und TITCHMARSH in [Tit67] behandelt.

[28] Das nachfolgende gilt natürlich entsprechend für die Integralgleichung der Dichte *w*, Gleichung (2.47).

[29] siehe beispielsweise [AT77, LBP91, Dav82, RC82, Mil74, BW82]

wobei wiederum $\tilde{p}$ die Mellintransformierte der gesuchten Funktion p, K die Mellintransformierte des Integralkerns k, $\tilde{\nu}$ die Mellintransformierte[30] von ν und $\tilde{E_T^+}$ die Transformierte von E_T^+ bzw. $\tilde{E^+}$ die Transformierte der Funktion E^+ sei.

Für die theoretische, analytische Lösung bei exakt bekannter Funktion E_T^+ gilt[31]:

$$\tilde{E^+}(s) = K(s)\ \tilde{p}_T(1-s) \tag{5.29}$$

bzw.

$$\tilde{p}_T(s) = \frac{\tilde{E_T^+}(1-s)}{K(1-s)}\ ; \tag{5.30}$$

somit bekommen wir

$$\tilde{p}(s) = \tilde{p}_T(s) + \frac{\tilde{\nu}(1-s)}{K(1-s)}\ , \tag{5.31}$$

die (formale) Mellintransformierte der (analytischen) Lösung der Integralgleichung (5.26) bei approximativ bekannter Funktion E^+. Es scheint jetzt naheliegend zu sein, als approximative Lösung der Gleichung (5.26) bei approximativ bekannter Funktion E^+ die Funktion zu wählen, die wir durch die inverse Transformation erhalten würden, also konkret die Funktion

$$\begin{aligned} p(\tau) &= \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\ \tau^{-s}\left\{\tilde{p}_T(s) + \frac{\tilde{\nu}(1-s)}{K(1-s)}\right\} \\ &= p_T(\tau) + \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\ \tau^{-s}\ \frac{\tilde{\nu}(1-s)}{K(1-s)} \quad . \end{aligned} \tag{5.32}$$

Diese Funktion (Gleichung (5.32) könnte jedoch aufgrund der möglichen Divergenzen des letzten Integrals nicht existieren. Zwar strebt hier K gegen Null für $|is| \to \infty$[32], und auch die Funktion $\tilde{\nu}$ sollte, aufgrund allgemeiner Eigenschaften der Mellintransformierten, gegen Null für $|is| \to \infty$ streben[33], doch ist dieses asymptotische Streben der beiden Funktionen gegen Null nicht koordiniert, solange ν, und somit auch $\tilde{\nu}$, von stochastischer Natur ist. Deswegen könnte

$$\frac{\tilde{\nu}(1-s)}{K(1-s)} \quad , \tag{5.33}$$

als Folge der stochastischen Natur der Funktion $\tilde{\nu}$ und der daraus resultierenden Einflüsse großer $|is|$ auf (5.33), keine inverse Mellin-Transformation besitzen. Doch auch wenn (5.33) eine inverse Transformation besitzen würde, so kann die Abweichung der Funktion ν von Null, gemessen in der C- oder L_2-Metrik oder einer beliebig anderen Metrik des Raums Y, beliebig groß werden. In anderen Worten kann die inverse Transformierte des Ausdrucks (5.33), im Sinne der Norm, beliebig und unkontrollierbar groß werden. Tatsächlich wird es hier sogar so sein, daß aufgrund der exponentiellen Divergenz der Reziproken K^{-1} der Rauschterm $\tilde{\nu}$ exponentiell verstärkt werden wird.

Offensichtlich: Eine approximative Lösung der Integralgleichung können wir also nicht dadurch gewinnen, indem wir in die exakte, analytische Lösung die nur approximativ bekannte Funktion E^+ einsetzen. Diese „Lösung“ könnte nicht existieren, und selbst bei ihrer Existenz, der Existenz des Ausdrucks (5.32), würde sie instabil gegenüber kleinen Abweichungen von E^+ sein. Der Gründe für diese Instabilität liegen, wie

[30] Die Funktion $\tilde{\nu}$ existiert, streng genommen, nur im Rahmen der Theorie der Distributionen, d.h. ν und $\tilde{\nu}$ müssen korrekterweise als Distributionen aufgefaßt werden [Str63a]; siehe hier auch die diesbezügliche Bemerkung und Fußnote auf Seite 134 im Abschnitt 8.2.2.

[31] siehe die analytische Lösung der Integralgleichung 2.44 bzw. 2.45

[32] siehe Kapitel 2.5

[33] Dieses gilt, wenn $\tilde{\nu}$ als Mellintransformierte im herkömmlichen Sinne existiert. Fassen wir ν und $\tilde{\nu}$ als Distributionen auf, so muß $\tilde{\nu}$ für $|is| \to \infty$ nicht gegen Null streben; siehe diesbezüglich beispielsweise [BB93, Doe71, Lig66, Tit67]

eben dargestellt worden ist, sowohl im Verhalten der Transformierten $\tilde{\nu}$ respektive von (5.33) für $|is| \to \infty$[34] als auch in dem generell divergenten Verhalten[35] von K^{-1} für $|is| \to \infty$. Natürlich ist dies alles letztendlich die Manifestation der Schlechtgestelltheit der Integralgleichung (5.26).

Betrachten wir nun für eine gegebene Funktion k den linearen Operator

$$Af = k * f = g \quad , \tag{5.34}$$

wobei wir mit „$*$“ allgemein eine Faltungsoperation symbolisieren wollen. Auf die konkrete Form der *Faltungsgleichung* (5.34) werden wir gleich zu sprechen kommen. Es sei wieder $f \in X$, $g \in Y$, und wir nehmen an, daß die Lösung der Gleichung (5.34) existiere und eindeutig sei. Mit I soll eine *lineare Integraltransformation* (z.B Fourier-, ein- oder zweiseitige (Fourier-)Laplace- oder Mellin-Transformation) symbolisiert werden. Diese angewandt auf die Faltungsgleichung (5.34) ergebe[36]:

$$I[Af] = I[f] = \tilde{g}(\varpi) \quad . \tag{5.35}$$

Angenommen, der Operator A besitze ganz allgemein eine Struktur, die uns ermöglicht,

$$I[f] = \tilde{f}(\varpi) \tag{5.36}$$

in die Form

$$\tilde{f}(\varpi) = \Psi(\tilde{g}(\varpi), \varpi) \tag{5.37}$$

zu bringen. Unter der Voraussetzung der Gültigkeit eines Faltungssatzes, die Funktionen f und k mögen die diesbezüglichen Eigenschaften besitzen, also der Gültigkeit von

$$I[k * f] = I[k] \cdot I[f] \tag{5.38}$$

bezüglich der Integral-Transformation I, gilt offensichtlich

$$\Psi(\tilde{g}(\varpi), \varpi) = \frac{\tilde{g}(\varpi)}{\tilde{k}(\varpi)} = \tilde{f}(\varpi) \quad . \tag{5.39}$$

Die Gleichung (5.39) ist z.B. gültig bei, und nun kommen wir zu den möglichen konkreten Formen der Gleichung (5.34), Faltungsintegralen der Form:

a)

$$k(t) * f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} k(t-\tau)\, f(\tau)\, d\tau \quad , \tag{5.40}$$

bei der wir als Integraltransformation I die Fourier- oder die (Fourier-)Laplace Transformation anwenden können,

b)

$$k(t) * f(t) = \int_{0}^{t} k(t-\tau)\, f(\tau)\, d\tau \tag{5.41}$$

(wobei hier $k(t) \equiv f(t) \equiv 0$ für $t < 0$ gelte), bei der wir die (einseitige) Laplace-Transformation anwenden können und

[34] Dieses wird sensitiv durch die stochastische Natur von $\tilde{\nu}$ bestimmt; man siehe auch z.B. [AT77, Mil74]

[35] Die Divergenz von K^{-1} für $|is| \to \infty$ folgt, wie bereits erwähnt, direkt aus den allgemeinen Eigenschaften der Integraltransformierten der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation [Doe71, Doe72, Tit67].

[36] Mit $\tilde{x}(\varpi)$ sei die Transformierte der Funktion x bezeichnet: $I[x] = \tilde{x}(\varpi)$

c)

$$k(t) * f(t) = \int_0^\infty k\left(\frac{t}{\tau}\right) f(\tau)\, \frac{d\tau}{\tau} \quad , \tag{5.42}$$

bei der wir die Mellin-Transformation anwenden können[37].

Wie wir im vorangegangenen Abschnitt (5.3.2) gezeigt haben, werden die Gründe der Schlechtgestelltheit der Faltungsgleichung (5.34), genauer der Instabilität deren Lösung, in dem asymptotischen Verhalten des Quotienten $\frac{\tilde{g}(\varpi)}{\tilde{k}(\varpi)}$ für $|\varpi| \to \infty$ liegen. Um die störenden Einflüsse bei hohen „Frequenzen" ϖ zu eliminieren und eine stabile Approximation der Lösung der Gleichung (5.34) basierend auf der analytischen Lösung (5.39) zu erhalten, ist es nun naheliegend, eine (mögliche) *Regularisierung* durch

$$T_\gamma g = I^{-1}\left[\tilde{F}_\gamma(\varpi)\, \Psi(\tilde{g}(\varpi), \varpi)\right] \tag{5.43}$$

zu *definieren*. Die Funktion $\tilde{F}_\gamma$ wird hier ebenso, wie bei der im Abschnitt 5.1 vorgestellten Regularisierung kompakter Operatoren, als *Filter*, *stabilisierende Funktion* oder *Stabilisator* bezeichnet.

Konkretisieren wir dieses am Beispiel der Fourier-Transformation[38], betrachten wir also die Faltungsgleichung

$$Af(x) = \int_{\mathbb{R}^N} k(x-y) f(y)\, dy \quad , \tag{5.44}$$

wobei jeweils X und Y der Hilbertraum L^2 sei. Der *Faltungssatz* der Fourier-Transformation [Doe71, Tit67] besagt bekanntlich:

$$\mathcal{F}(f * g) = (2\pi)^{N/2} \tilde{f}\tilde{g} \quad , \tag{5.45}$$

und dieser liefert so eine einfache Darstellung des inversen Operators A^{-1}. Wenn wir $\tilde{k}(\xi) \neq 0\ \forall \xi$ voraussetzen, gilt

$$\widetilde{(A^{-1}g)} = (2\pi)^{-N/2} \frac{\tilde{g}}{\tilde{k}} \quad .$$

Ist jetzt $k \in L^1(\mathbb{R}^N)$, dann ist die Fouriertransformierte $\tilde{k}$ stetig, beschränkt und wegen des Satzes von RIEMANN-LEBESGUE gilt[39]

$$\left|\tilde{k}(\xi)\right| \to 0 \text{ für } |\xi| \to \infty \quad .$$

Daraus folgt, daß A^{-1} nicht beschränkt ist. Schreiben wir mit Hilfe der inversen Fourier-Transformation

$$Af(x) = \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{k}(\xi) \tilde{f}(\xi) e^{i\langle x,\xi\rangle}\, d\xi \quad , \tag{5.46}$$

so übernehmen, formal, die ebenen Wellen $e^{ix\xi}$ die Rolle der Eigenfunktionen[40] und die $\tilde{k}(\xi)$ die der Eigenwerte, womit wir also die schon erwähnte, zur Singulärwertzerlegung formal analoge, Zerlegung dieses nicht kompakten Operators haben. Entsprechend den Ausführungen des Abschnitts 4.3 zur Klassifizierung

[37] Bezüglich dieses „Mellinschen Faltungsintegrals" sei (nochmals) auf [AT77, Doe71, Tit67] verwiesen

[38] In diesen Abschnitt verwenden wir die Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ im $\mathbb{R}^N$ in der Form

$$\mathcal{F} f(\xi) = \tilde{f}(\xi) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} f(x) e^{-i\langle x,\xi\rangle} dx \quad .$$

[39] siehe [Doe71, Tit67]

[40] Formal ist $e_\xi(x) = e^{i\langle x,\xi\rangle}$ Eigenfunktion von A zum Eigenwert $\tilde{k}(\xi)$, aber natürlich ist $e_\xi \notin L^2$ und damit nicht im Definitionsbereich von A! Solche „verallgemeinerten" Eigenfunktionen treten typischerweise beim stetigen Spektrum auf; siehe [Wer95].

schlecht gestellter Probleme, können wir jetzt, zur Erinnerung, den Grad der Schlechtgestelltheit der Faltungsgleichung[41] (5.44) an dem Verhalten der Transformierten $\tilde{k}$ für $|\xi| \to 0$ ablesen, oder in anderen Worten an den divergenten Verhalten von $\tilde{k}^{-1}$ für $|\xi| \to 0$.

Regularisieren wir also die Faltungsgleichung gemäß des Ansatzes (5.43) über eine stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$, so erhalten wir hier konkret die Darstellung

$$T_\gamma g(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{F}_\gamma(\xi) \frac{\tilde{g}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} \, e^{i\langle x,\xi\rangle} \, d\xi \quad , \tag{5.47}$$

welche ein Analogon zum speziellen Regularisierungsverfahren kompakter Operatoren mittels deren Singulärwertzerlegung (5.1) darstellt. Die approximative, regularisierte Lösung f_γ des (inversen) Faltungsproblems (5.44) ist dann, per definitionem, gegeben durch:

$$f_\gamma(x) = T_\gamma g(x) \quad . \tag{5.48}$$

Entsprechend führt uns das (abstrakte) Regularisierungsverfahren (5.43) auf Regularisierungen der inversen Faltungsprobleme, die mit Hilfe der (einseitigen) *Laplace-Transformation* oder der zweiseitigen *(Fourier-)Laplace-Transformation* formal gelöst werden, also Faltungsgleichungen des Typs a) und b); konkret erhalten wir also für jene die als inverse Laplace-Transformation dargestellte regularisierte Lösung[42]

$$f_\gamma(t) = T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s) \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)} \, e^{st} \, ds \quad . \tag{5.49}$$

Dem entsprechend erhalten wir Regularisierungen der Mellinschen Faltungsgleichung c), die als inverse Mellin-Transformation dargestellt sind, durch:

$$f_\gamma(x) = T_\gamma g(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s) \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)} \, x^{-s} \, ds \quad . \tag{5.50}$$

So haben wir elegante Formulierungen eines quasi „natürlichen“ Regularisierungsverfahrens für inverse Faltungsprobleme, die, wie es sich jetzt schon andeutet und wie wir in den nachfolgenden Kapiteln noch sehen werden, eine anschauliche Interpretation des abstrakten Regularisierungsverfahrens (5.43) respektive (5.47) bis (5.50) ermöglichen.

5.3.3 Eigenschaften des Regularisierungsverfahrens I

In diesem Abschnitt sollen die allgemeinen Eigenschaften des auf einer stabilisierenden Funktion $\tilde{F}_\gamma$ basierende Regularisierungsverfahrens (5.43) dargestellt werden, die direkt aus dessen Struktur folgen, wobei wir uns im wesentlichen auf die konkreten Darstellungen (5.47), (5.49) und (5.50) beschränken wollen. Dieses bedeutet offensichtlich, daß wir uns sogar auf die Darstellung

$$T_\gamma g(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{F}_\gamma(\xi) \frac{\tilde{g}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} \, e^{i\langle x,\xi\rangle} \, d\xi \quad , \tag{5.51}$$

beschränken können, da (5.47), (5.49) und (5.50) bezüglich der *formalen* Struktur völlig *äquivalent* sind[43].

[41] Bezüglich des Grades der Schlechtgestelltheit bei Eintfaltungsproblemen, wollen wir insbesondere noch auf das Korollar E.1 des Anhangs E verweisen.

[42] Im Fall der komplexen Integraltransformationen wollen wir uns auf eine Dimension, also $t, x \in \mathbb{R}$, beschränken. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß wir in dieser Arbeit die Begriffe *Fourier-Laplace Transformation* und *(zweiseitige) Laplace-Transformation synonym verwenden.*

[43] Bezüglich der mathematischen Eigenschaften gibt es natürlich, trotz der engen Verwandtschaft der hier betrachteten Integraltransformationen, stellenweise erhebliche Unterschiede; siehe dazu auch [Doe71, Tit67].

Es sei nun $\tilde{g} = \tilde{g_T} + \tilde{\nu}$, wobei $\tilde{\nu}$ wiederum eine stochastische Funktion sei, die den Datenfehler der Transformierten $\tilde{g}$ modelliert[44]. Setzen wir dieses $\tilde{g}$ nun in den Ausdruck des Regularisierungsverfahrens (5.51) ein, so erhalten wir einen zu (5.32) analogen Ausdruck:

$$\begin{aligned} f_\gamma(x) &= (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\tilde{F}_\gamma(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} (\tilde{g_T}(\xi) + \tilde{\nu}(\xi))\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \\ &= (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \left(\tilde{F}_\gamma(\xi)\,\tilde{f}_T(\xi) + \tilde{\Phi}_\gamma(\xi)\tilde{\nu}(\xi)\right)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad , \end{aligned} \tag{5.52}$$

wobei die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ jetzt durch

$$\tilde{\Phi}_\gamma(\xi) = \frac{\tilde{F}_\gamma(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} \tag{5.53}$$

definiert sei und ausgenutzt worden ist, daß

$$\tilde{f}_T(\xi) = \frac{\tilde{g_T}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)}$$

gilt[45]. Für die Abweichung der regularisierten f_γ von der exakten Lösung f_T folgt aus (5.52) unmittelbar:

$$\begin{aligned} f_\gamma(x) - f_T(x) &= (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} (\tilde{F}_\gamma(\xi) - 1)\,\tilde{f}_T(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \\ &+ (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{\Phi}_\gamma(\xi)\ \tilde{\nu}(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad . \end{aligned} \tag{5.54}$$

Definieren wir noch die folgenden Funktionen, die bei der späteren Betrachtung von Nutzen sein werden,

$$\Delta_\gamma^r(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} (\tilde{F}_\gamma(\xi) - 1)\ \tilde{f}_T(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \tag{5.55}$$

$$\Delta_\gamma^\nu(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{\Phi}_\gamma(\xi)\ \tilde{\nu}(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad , \tag{5.56}$$

so können wir für die Abweichung $\Delta_\gamma = f_\gamma - f_T$, Gleichung (5.54), kurz

$$\Delta_\gamma(x) = \Delta_\gamma^r(x) + \Delta_\gamma^\nu(x) \tag{5.57}$$

schreiben. Wie wir sofort sehen, beschreibt Δ_γ^r den *reinen Einfluß des Regularisierungsverfahrens* und Δ_γ^ν den *Einfluß des Datenfehlers* auf den *Gesamtfehler* Δ_γ *der Regularisierung*.

Betrachten wir den *reinen Einfluß des Regularisierungsverfahrens*, genauer betrachten wir die Funktion f_γ^T, gegeben durch den Ausdruck

$$f_\gamma^T(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{F}_\gamma(\xi) \frac{\tilde{g_T}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)}\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{F}_\gamma(\xi)\,\tilde{f}_T(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad , \tag{5.58}$$

der unmittelbar sowohl aus (5.55) als auch aus Anwendung des Regularisierungsverfahrens (5.51) bei exakt bekannten Daten g_T folgt.

---

[44] siehe Abschnitt 5.3.2

[45] siehe auch Kapitel 2.4 und Abschnitt 5.3 in diesem Kapitel

Nehmen wir nun an, daß $\tilde{F}_\gamma$ die Voraussetzungen eines Faltungssatzes erfülle[46] und bezeichnen wir mit F_γ das Urbild von $\tilde{F}_\gamma$, es gelte also

$$\tilde{F}_\gamma(\xi) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} F_\gamma(x)\ e^{-i\langle x,\xi\rangle}\ dx \quad \text{und} \tag{5.59}$$

$$F_\gamma(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{F}_\gamma(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad , \tag{5.60}$$

dann können wir f_γ^T durch die Faltung

$$f_\gamma^T(x) = \int_{\mathbb{R}^N} F_\gamma(x-y)\ f_T(y)\ dy \tag{5.61}$$

darstellen. Die Funktion F_γ, die gemäß den Gleichungen (5.59) und (5.60) mit der stabilisierenden Funktion $\tilde{F}_\gamma$ via der verwendeten Integraltransformation, hier die Fourier-Transformation, in einer eineindeutigen Art und Weise verbunden sein möge, bezeichnen wir in diesem Zusammenhang als *Mollifier-Funktion*[47]. Das (reine) Regularisierungsverfahren ist also als Faltung der exakten Lösung f_T mit der Mollifier-Funktion[48] F_γ darstellbar[49],

$$T_\gamma g_T(x) = f_\gamma^T(x) = (F_\gamma * f_T)(x) = \left\langle F_\gamma(x), f_T \right\rangle \quad . \tag{5.62}$$

Erfüllt jetzt F_γ die Eigenschaften einer Dichtefunktion, so können wir die (reine) Regularisierung anschaulich auch als eine Mittelung der exakten Lösung f_T mit der Dichte F_γ interpretieren:

$$T_\gamma g_T = f_\gamma^T = \langle f_T \rangle_{F_\gamma} \tag{5.63}$$

Wie wir später im Kapitel 6 aufzeigen werden, erfüllen die Mollifier-Funktionen F_γ, die zu den von uns abgeleiteten stabilisierenden Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ korrespondieren, die Eigenschaften einer Dichtefunktion; genauer werden diese $\tilde{F}_\gamma$ auf solchen F_γ beruhen, die als Dichtefunktionen interpretiert werden können.

Kehren wir nun zu der *Ausgangsgleichung* (5.51) dieses Abschnittes zurück, und formulieren wir diese mit Hilfe der oben eingeführten Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ (5.53):

$$T_\gamma g(x) = (2\pi)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{\Phi}_\gamma(\xi)\tilde{g}(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \quad . \tag{5.64}$$

Nehmen wir diesmal wiederum an, daß $\tilde{\Phi}_\gamma$ den Bedingungen eines Faltungssatzes genüge, so können wir das Regularisierungsverfahren (5.51) auf die Faltungsoperation

$$T_\gamma g = \Phi_\gamma * g \tag{5.65}$$

$$T_\gamma g(x) = \int_{\mathbb{R}^N} \Phi_\gamma(x-y) g(y)\ dy \quad , \tag{5.66}$$

---

[46] Daß die Annahme, die hier betrachteten Funktionen mögen den Voraussetzungen eines Faltungssatzes genügen, gerechtfertigt ist, wird sich in den späteren Kapitel 6 zeigen.

[47] Der hier benutzte Begriff der *Mollifier-Funktion* ist allgemeiner im Zusammenhang mit dem Regularisierungskonzept der *approximativen Inversen* in [LM90] eingeführt worden. Unsere Verwendung dieses Begriffs entspricht gerade einem Spezialfall.

[48] Wir setzen implizit F_γ als (rein) reellwertige Funktion für Argumente $x \in \mathbb{R}^N$ voraus. Auf die Problematik komplexwertiger Funktionen F_γ werden wir kurz im Abschnitt 6.2 zu sprechen kommen.

[49] Mit $\langle f, g\rangle$ bezeichnen wir in dieser Arbeit das *„Skalarprodukt"* der Funktionen $f \in X$ und $g \in Y$, wobei die topologischen respektive metrischen Räume X und Y identisch sein dürfen:

$$\langle f, g\rangle = \int_{\mathbb{R}^N} f(x)\ g(x)\ dx \quad ;$$

siehe auch Anhang B.

wobei Φ_γ das Urbild von $\tilde{\Phi}_\gamma$ sei, abbilden. Die Funktion Φ_γ, die wir bei Gültigkeit der obigen Gleichung (5.66) *regularisierender Kern*[50] nennen wollen, hängt offensichtlich (implizit) vom Kern k des inversen Faltungsproblems ab, wie bereits deutlich an der Definition (5.53) der Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ zu erkennen ist.

Wir haben also, so Φ_γ und $\tilde{\Phi}_\gamma$ die nötigen Eigenschaften aufweisen, eine zu (5.51) alternative Formulierung und Darstellung der auf einer stabilisierenden Funktion basierenden Regularisierungsverfahren, die von wesentlicher Bedeutung für die Regularisierungsverfahren (5.49) und (5.50), also denjenigen, die komplexe Integraltransformationen und deren komplexe inverse Integraltransformationen anwenden, sein wird.

Als letztes wollen wir die durch die *Regularisierte f_γ erzeugte Funktion g_γ* betrachten, die also per definitionem durch

$$g_\gamma = Af_\gamma = k * f_\gamma \tag{5.67}$$

$$g_\gamma(x) = \int_{\mathbb{R}^N} k(x-y)\, f_\gamma(y)\, dy \tag{5.68}$$

gegeben ist. Der zu (5.68) im Fourier-(Laplace-)Raum korrespondierende Ausdruck lautet

$$\tilde{g}_\gamma(\xi) = \tilde{k}(\xi)\, \tilde{f}_\gamma(\xi) \quad , \tag{5.69}$$

so wir wieder die Gültigkeit eines entsprechenden Faltungssatzes voraussetzen. Per definitionem des Regularisierungsverfahrens (5.51) gilt für die Transformierte

$$\tilde{f}_\gamma(\xi) = \tilde{F}_\gamma(\xi) \frac{\tilde{g}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} \quad . \tag{5.70}$$

Setzen wir den Ausdruck der Transformierten der Regularisierten, Gleichung (5.70), in (5.69) ein, so erhalten wir

$$\tilde{g}_\gamma(\xi) = \tilde{k}(\xi)\tilde{F}_\gamma(\xi) \frac{\tilde{g}(\xi)}{\tilde{k}(\xi)} = \tilde{F}_\gamma(\xi)\tilde{g}(\xi) \quad , \tag{5.71}$$

und die im Originalraum korrespondierende Gleichung lautet rückübersetzt

$$g_\gamma(x) = \int_{\mathbb{R}^N} F_\gamma(x-y) g(y)\, dy \quad , \tag{5.72}$$

d.h. g_γ ist wiederum durch eine Faltungsoperation darstellbar:

$$g_\gamma = F_\gamma * g \quad . \tag{5.73}$$

Gemäß des obigen Ausdrucks (5.72), können wir die Anwendung der Regularisierten f_γ, so F_γ noch zusätzlich die Eigenschaften einer Dichtefunktion aufweist, wiederum anschaulich als einen Mittelungsprozeß interpretieren.

Noch eine *Bemerkung* am Ende dieses Abschnittes: Es ist natürlich nicht verwunderlich, daß wir formale Eigenschaften des Regularisierungsverfahrens auf Faltungsgleichungen haben abbilden können, denn schließlich handelt es sich bei den Ausgangsproblem selbst um eine Faltungsgleichung und das Regularisierungsverfahren als solches basiert ja gerade auf der (formalen) Lösung des inversen Faltungsproblems, die wiederum auf der Anwendung eines Faltungssatzes linearer Integraltransformationen basiert.

---

[50] Der *regularisierende Kern* wird zwar auch in [TGSY95] bei der Regularsierung von Faltungsgleichung auf der Basis der (eindimensionalen) Fourier-Transformation hingeschrieben, doch wird, unseres Wissens nach, erst im Rahmen dieser Arbeit der regularisierenden Kern allgemeiner, im Sinne der Anwendbarkeit einer (beliebigen) linearen Integraltransformation, und mit einer dementsprechend fundametaleren Bedeutung in der Regularisierung eingeführt. Entsprechendes gilt dann auch für dessen allgemeinen Eigenschaften; siehe hier Kapitel 6f.

5.4 Lineare Iterationsverfahren

Dieses Kapitel abschließend, wollen wir noch kurz auf regularisierende *lineare Iterationsverfahren* eingehen. Dabei werden wir uns, da wir die iterativen Verfahren nur zum Vergleich mit dem genuin auf stabilisierenden Funktionen basierenden Regularisierungsverfahren heranziehen werden, im Wesentlichen auf die Wiedergabe der zentralen Formeln und Ergebnisse beschränken bzw. deren Ableitungen nur kurz skizzieren. Detailiert werden Iterationsverfahren beispielsweise in [Lou89] behandelt[51].

Die Iterationsverfahren werden zur Lösung der Normalgleichung (4.30) der verallgemeinerten Inversen[52],

$$A^*Af = A^*g \quad ,$$

angewandt. Der Startpunkt zur Ableitung eines Iterationsverfahrens ist der folgende:
Sei $B : X \to X$ ein linearer, stetiger Operator, und gesucht sei die Lösung von

$$Bx = b \quad . \tag{5.74}$$

Iterationsverfahren gewinnt man nun durch Aufspalten von B in

$$B = S - T \quad , \tag{5.75}$$

wobei S derart zu wählen ist, daß die Gleichungen der Form $Sy = z$ „einfach“ zu lösen sind. Nach einigen Rechnungen[53] ergibt sich aus den obigen Gleichungen (5.74) und (5.75) die Ausgangsformel für Iterationsverfahren:

$$x^{m+1} = Gx^m + y \quad , \tag{5.76}$$

mit

$$\begin{aligned} G &= S^{-1}T \\ &= S^{-1}(S-B) \end{aligned}$$

und

$$y = S^{-1}b \quad .$$

Wählt man S und T unabhängig vom Iterationsindex, so erhält man das *stationäre Verfahren* (5.76), andernfalls das *nichtstationäre Verfahren*

$$x^{m+1} = G_m x^m + y_m \quad . \tag{5.77}$$

Das Auflösen der Rekursion führt im stationären Fall, auf den wir uns im folgenden beschränken wollen, auf

$$\begin{aligned} x^m &= G^m x^0 + \sum_{j=0}^{m-1} G^j y \\ &= G^m x^0 + (I - G^m)(I - G)^{-1} y \quad , \end{aligned} \tag{5.78}$$

falls $(I-G)^{-1}$ existiert.

Um die Normalgleichung zu lösen, wird

$$\begin{aligned} B &= A^*A \quad \text{und} \\ b &= A^*g \end{aligned}$$

[51] Wir wollen diesbezüglich ebenso auf die entsprechenden dortigen Referenzen und Bemerkungen hinweisen.

[52] siehe Abschnitt 4.2.3 und [Lou89]

[53] siehe [Lou89]

gesetzt. Führt man jetzt noch

$$\begin{aligned} S &= s(A^*A) \quad \text{und} \\ T &= t(A^*A) \end{aligned}$$

ein, so erhält man zum einen

$$s(x) - t(x) = x$$

und zum anderen, mit der Wahl $f^0 = 0$ als Startwert [Lou89],

$$f^m = \sum_{j=0}^{m-1} G^j S^{-1} A^* g \tag{5.79}$$

$$= \sum_{\sigma_n > 0} \tilde{F}_m(\sigma_n) \sigma_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n \tag{5.80}$$

mit

$$\tilde{F}_m(\sigma) = \frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)} \sum_{j=0}^{m-1} \left(1 - \frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)}\right)^j \tag{5.81}$$

$$= 1 - \left(1 - \frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)}\right)^m \tag{5.82}$$

für

$$\left|1 - \frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)}\right| < 1 \quad , \tag{5.83}$$

also

$$\frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)} \in]0,2[\quad . \tag{5.84}$$

Es kann nun bewiesen werden, daß für $\frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)} \in]0,2[$ für alle Singulärwerte von A und in Null stetigen $\frac{x}{s(x)}$

$$\tilde{F}_m(\sigma) = 1 - \left(1 - \frac{\sigma^2}{s(\sigma^2)}\right)^m \tag{5.85}$$

ein regularisierender Filter ist [Lou89]. Im Fall der Integralgleichung vom Faltungstyp (5.34) gilt für die stabilisierende Funktion analog[54]:

$$\tilde{F}_m(\xi) = 1 - \left(1 - \frac{|\tilde{k}(\xi)|^2}{s(|\tilde{k}(\xi)|^2)}\right)^m \quad , \tag{5.86}$$

mit den analogen Bedingungen $\frac{|\tilde{k}(\xi)|^2}{s(|\tilde{k}(\xi)|^2)} \in]0,2[$ und in Null stetigen $\frac{x}{s(x)}$[55].

Als Spezialfall des allgemeinen Iterationsverfahrens (5.76) wollen wir die *Landweber-Iteration* erwähnen[56],

$$\begin{aligned} f^{m+1} &= f^m + \beta A^*(g - A f^m) \\ &= (I - \beta A^* A)\, f^m + \beta A^* g \quad , \end{aligned} \tag{5.87}$$

[54] siehe Abschnitt 5.3.2

[55] Wir wollen an dieser Stelle erwähnen, daß das Filter (5.86) nur im Falle der Anwendbarkeit der Fourier-Transformation numerisch praktisch von Nutzen ist; siehe auch die Ausführungen in Kapitel 6 ff.

[56] siehe [Lan51, Lou89]

welche wir hier auch konkret zum Vergleich verschiedener linearer Regularisierungsverfahren auf unser Ausgangsproblem (2.13) angewandt haben. In der Landweber-Iteration ist also

$$\begin{aligned} S &= \beta^{-1} I \quad , \\ T &= \beta^{-1} I - A^* A \quad \text{und} \\ S^{-1} T &= I - \beta A^* A \quad . \end{aligned}$$

Wählt man als Startpunkt der Iteration $f^0 = 0$, so gelangt man zur Darstellung

$$f^m = \sum_{j=0}^{m-1} (I - \beta A^* A)^j A^* g \tag{5.88}$$

$$= \sum_n \tilde{F}_m(\sigma_n) \sigma_n^{-1} \langle g, u_n \rangle v_n \quad , \tag{5.89}$$

mit

$$\tilde{F}_m(\sigma) = 1 - (1 - \beta\sigma^2)^m \quad , \tag{5.90}$$

respektive im Fall des Entfaltungsproblems

$$\tilde{F}_m(\xi) = 1 - (1 - \beta |\tilde{k}(\xi)|^2)^m \quad . \tag{5.91}$$

Die Landweber-Iteration läßt sich also wiederum als gefilterte Version der verallgemeinerten Lösung interpretieren und sie ist für

$$0 < \beta < \frac{2}{\|A\|^2} \tag{5.92}$$

ein lineares Regularisierungsverfahren.

Genauer betrachtet konvergieren die Iterationsverfahren bei Verwendung eines beliebigen Startwertes f^0 und exakten Daten gegen[57]

$$f^\dagger + P_{\mathcal{N}(A)} f^0 \quad , \tag{5.93}$$

wobei $P_{\mathcal{N}(A)}$ die Orthogonalprojektion von f^0 auf $\mathcal{N}(A)$ ist. Dieses Ergebnis besagt nun, daß bei schlecht gestellten Problemen eine Regularisierung dadurch erreicht wird, daß im Falle gestörter Daten die Iteration hinreichend früh abgebrochen wird. Iteriert man zu lange, so wird man feststellen, daß der Fehler stark anwächst. Dementsprechend wird der Iterationsindex m mit dem Regularisierungsparameter γ identifiziert, konkret als

$$\gamma = \frac{1}{m} \quad . \tag{5.94}$$

Unter Verwendung des Filters (5.90) ergibt sich nun bezüglich der Landweber-Iteration folgendes Bild[58]: Ist

$$(1 - \beta\sigma^2)^m \ll 1 \quad ,$$

so treten die entsprechenden Anteile der Lösung in der iterierten Näherung nahezu unverfälscht auf. Ist dagegen σ klein, also

$$(1 - \beta\sigma^2)^m \approx 1 \quad ,$$

dann werden die entsprechenden Terme weggedämpft.

Neben den eben dargestellten linearen Iterationsverfahren existieren *nichtlineare Iterationsverfahren*, wobei hier das Verfahren der *konjugierten Gradienten* [HS52, Lue73, Lou89] zu den bekanntesten zählen dürfte. Im Rahmen dieser Arbeit soll jedoch auf nichtlineare Verfahren nicht weiter eingegangen werden[59].

[57] Hieraus wird auch der Grund für die Wahl von $f^0 = 0$ als Startpunkt der Iterationen erkennbar.

[58] Entsprechendes gilt natürlich für den Filter (5.91) der Landweber-Iteration im Entfaltungsproblem (5.34).

[59] Das Verfahren der konjugierten Gradienten kann übrigens auf ein nichtlinearen, d.h. von g abhängenden, Filter abgebildet werden [Lou89]. Da diese Abhängigkeit jedoch nicht-trivial ist, wurde eine weitere Untersuchung im Rahmen dieser Arbeit außen vor gelassen.

Kapitel 6

Stabilisierende Funktionen I

Zwar haben wir prinzipiell ein Regularisierungsverfahren für das Entfaltungsproblem (5.34), welches genuin auf einer stabilisierenden Funktion $\tilde{F}_\gamma$ basiert, formuliert, doch muß nun die Frage nach den Eigenschaften von $\tilde{F}_\gamma$ geklärt werden, damit gemäß den Darstellungen (5.47) bis (5.50) tatsächlich durch $\tilde{F}_\gamma$ ein Regularisierungs-Operator T_γ erzeugt wird[1]. Während nun in den Untersuchungen der theoretischen Grundlagen, Prinzipien und allgemeinen Eigenschaften der Regularisierungsverfahren die Räume X und Y als topologische Räume im allgemeinsten Sinn betrachtet werden, respektive als allgemeine Banach- oder Hilbert-Räume [AT77, GKM82, Lav67, Lou89, Iva76], wird sich in den Untersuchungen zur praktischen Anwendung auf Banach- oder Hilbert-Räume *reeller* Funktionen [Dav82, Mar82, Mil74, Lou89, RC82] beschränkt. Im Fall der Integralgleichung vom Faltungstyp (5.34) werden dementsprechend auch „nur" Gleichungen bezüglich praktischer Realisierungen und deren theoretischen Eigenschaften betrachtet, bei denen die Fourier-Transformation angewandt werden kann [AT77, Dav82, LBP91, Lou89], also die Regularisierungsverfahren, die auf der Gleichung (5.47) basieren. Für unser konkretes Problem bedeutet dieses, daß die prinzipielle, theoretische Anwendbarkeit des Regularisierungsverfahrens (5.43) auf das inverse Faltungsproblem, das mit den Mitteln der komplexen Fourier-Laplace-[2] oder der Mellin-Transformation gelöst werden kann, zwar erwähnt und untersucht wird, wie beispielsweise in [AT77], vom *praktischen* Standpunkt aus diese Probleme jedoch kaum behandelt werden, was unter anderem damit zusammenhängt, daß die (komplexe) inverse Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation, für sich allein betrachtet, selber zu den schlecht gestellten Problemen gehört[3].

Als zentralen Punnkt dieses Kapitels wollen wir die bisher in der Literatur diskutierten Eigenschaften der stabilisierenden Filter des auf der Fourier-Transformation basierenden Regularsisierunsgsverfahrens wiedergeben. Im Anschluß daran soll (kurz) darauf eingegangen werden, in wie weit diese Ergebnisse auf Regularisierungsverfahren, die auf der (komplexen) Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation basieren, angewandt oder erweitert werden können und welche Probleme dabei dann unweigerlich zu Tage treten, wodurch die Notwendigkeit der Untersuchung der (möglichen) Eigenschaften stabilisierender Funktionen für diese Verfahren deutlich wird.

[1] Daß Regularisierungsverfahren auf Filter abgebildet werden können, haben wir bereits öfters erwähnt und beispielhaft an den regularisierenden linearen Iterationsverfahren (vorangegangenen Abschnitt 5.4) gesehen.

[2] Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß der Ausdruck „Fourier-Laplace Transformation" hier synonym zum Ausdruck „zweiseitige Laplace-Transformation" verwendet wird. Mit „Fourier-Transformation" bezeichnen wir in diesem Kaptiel die „herkömmliche" Fourier-Transformation; siehe auch Fußnote 7 im Kapitel 2.3.

[3] Bezüglich der Schwierigkeiten und Problemen, die in der numerischen Anwendung der Fourier-Laplace Transformation und deren Inversion zu beachten sind, sei auf die diesbezüglichen Kommentare in [Doe71] und [DR84] verwiesen.

6.1 Filter der Fourier-Transformation

Geben wir also zuerst die Ergebnisse für den Fall der Anwendbarkeit der Fourier-Transformation wieder, so wie dieser in der Litaratur bisher behandelt worden ist[4], wobei wir uns ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf den Raum $\mathbb{R}$ beschränken wollen, also auf (eindimensionale) Faltungsgleichungen

$$g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} k(t-\tau) f(\tau)\, d\tau,\ t,\tau \in \mathbb{R} \quad , \tag{6.1}$$

deren Regularisierte gemäß (5.47) durch

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}_\gamma(\omega) \frac{\tilde{g}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\, e^{it\omega}\, d\omega \quad , \tag{6.2}$$

gegeben sei.

Die Funktion $\tilde{F}_\gamma(\omega)$ möge nun den folgenden Bedingungen genügen [AT77][5]:

- $1_{\tilde{F}}$) $\tilde{F}_\gamma(\omega)$ sei im Gebiet $(\gamma \geq 0,\ -\infty < \omega < \infty)$ definiert;
- $2_{\tilde{F}}$) Es sei $0 \leq \tilde{F}_\gamma(\omega) \leq 1$ für alle $\gamma \geq 0$ und ω;
- $3_{\tilde{F}}$) Es sei $F_{\gamma=0}(\omega) \equiv 1$;
- $4_{\tilde{F}}$) Für jedes $\gamma > 0$ sei die Funktion $\tilde{F}_\gamma(\omega)$ eine gerade Funktion bezüglich ω und gehöre zu $L^2(-\infty,\infty)$;
- $5_{\tilde{F}}$) Für alle $\gamma > 0$ gelte: $\tilde{F}_\gamma(\omega) \to 0$ für $\omega \to \pm\infty$;
- $6_{\tilde{F}}$) Für $\gamma \to 0$ sei $\tilde{F}_\gamma(\omega) \to 1$ nicht-abnehmend und diese Konvergenz sei gleichmäßig für jedes Intervall $|\omega| \leq \omega_1$;
- $7_{\tilde{F}}$) Es sei
$$\frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \in L^2(-\infty,\infty) \qquad \forall\, \gamma > 0 \quad ;$$
- $8_{\tilde{F}}$) Für jedes $\omega \neq 0$ gelte in jedem Intervall der Gestalt $[\omega_1,\omega_2]$, wobei $0 < \omega_1 < \omega_2$ gelten soll, $\tilde{F}_\gamma(\omega) \to 0$ für $\gamma \to \infty$ und diese Konvergenz sei gleichmäßig.

Eine Funktion $\tilde{F}_\gamma$, die diese acht Bedingungen erfüllt, definiert einen einparametrigen Operator T_γ der Form (6.2). Wird die Differenz der rechten Seite von (6.1), g, vom theoretischen Wert g_T in der $L^2(-\infty,\infty)$-Metrik und die Abweichung der Lösung von der theoretischen in der Supremumsnorm gemessen, und nehmen wir weiter an, daß $\tilde{f}(\omega) \in L^1(\infty,\infty)$ gelte, dann gilt der[6]

Satz 6.1
Erfüllt die Funktion $\tilde{F}_\gamma(\omega)$ die Bedingungen $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$), so ist der korrespondierende Operator T_γ der Form (6.2) ein Regularisierungs-Operator der Gleichung (6.1), der stetig (kontinuierlich) bezüglich der Funktion g ist.

---

[4] siehe [AT77, Lou89]

[5] TIKHONOV und ARSENIN sind, unseres Wissens nach, die wenigen, die explizit Bedingungen, die eine stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ beim Regularisierungsverfahren (6.2) erfüllen muß, angeben.

[6] Der Beweis findet sich u.a. in den schon oft zitierten Buch von ARSENIN und TIKHONOV [AT77]. Der Satz gilt übrigens auch, wenn der Raum X, $f \in X$, in der L^2-Metrik gemessen wird.

An dieser Stelle haben wir in [Ros95] zu $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$) entsprechende Bedingungen an einer stabilisierenden Funktion $\tilde{F}_\gamma$ für das Regularisierungsverfahren (5.49) respektive (5.50), also im Fall der Anwendung der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation, angegeben, die aus einer quasie „eins-zu-eins“ Übersetzung des Beweises des Satzes 6.1 entspringen, wenn dort an Stelle der Fourier- die Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation eingesetzt wird. Die so abgeleiteten Bedingungen sind formal analog zu den Bedingungen $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$). Die große Schwierigkeit mit diesen Bedingungen ist jedoch deren *Restringtivität*: selbst eine Gaußsche stabilisierende Funktion,

$$\tilde{F}_\gamma(s) = e^{\gamma^2 s^2} \quad , \tag{6.3}$$

würde diese Bedingungen nicht erfüllen[7]! Es ist deswegen notwendig, alternative Bedingungen an $\tilde{F}_\gamma$, die derartige Restringtivitäten nicht beinhalten, für die Regularisierungsverfahren (5.49) und (5.50) abzuleiten. Diese alternativen Bedingungen und deren Ableitung werden wir in dem nachfolgenden Kapitel 7 ausführlicher darstellen.

Eines der theoretisch und praktisch wichtigsten Beispiele, es handelt sich mit um das am meisten untersuchte und praktisch angewandte und wir wollen es deswegen auch nicht unerwähnt lassen, eines regularisierenden Filters $\tilde{F}_\gamma$ für das Regularisierungsverfahren (5.47) bzw. (6.2) ist der *ideale Tiefpaß*, welcher im Fall kompakter Operatoren der sogenannten *abgeschnittenen Singulärwertzerlegung* entsprechen würde. Der ideale Tiefpaß ist *definiert*[8] durch [AT77, Lou89]:

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad |\omega| \leq \gamma \\ 0 & \text{für} \quad |\omega| > \gamma \end{cases} \quad . \tag{6.4}$$

Das Regularisierungsverfahren (6.2) nimmt mit den idealen Tiefpaß dann die folgende explizite Form an:

$$\begin{aligned} T_\gamma g(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}_\gamma(\omega) \frac{\tilde{g}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \, e^{i\omega t} \, d\omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\gamma}^{\gamma} \frac{\tilde{g}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \, e^{i\omega t} \, d\omega \qquad (6.5) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\gamma}^{\gamma} \tilde{f}(\omega) \, e^{i\omega t} \, d\omega \quad . \qquad (6.6) \end{aligned}$$

Um den inversen Operator zu erhalten, muß also γ gegen Unendlich gehen. Aufgrund des Faltungssatzes[9] können wir $T_\gamma g$ durch ein Faltungsintegral darstellen[10]:

$$T_\gamma g = F_\gamma * f \quad . \tag{6.7}$$

Die zu diesem Filter korrespondierende Mollifier-Funktion F_γ ist für $x \in \mathbb{R}$, wie eine einfache Rechnung zeigt, durch

$$F_\gamma(x) = \frac{\sin \gamma x}{\pi x} \tag{6.8}$$

gegeben [Lou89].

---

[7] Eine Gauß'sche stabilisierende Funktion erfüllt diese Bedingungen nur für den Fall $\mathfrak{Re}\, s = 0$. Bei dem Problem (2.13) gilt aber $0 < \mathfrak{Re}\, s < 1$; siehe Kapitel 2 und Abschnitt 2.4.2.

[8] In [AT77, Lou89] wird bewiesen, daß die durch (6.4) definierte Funktion $\tilde{F}_\gamma$ tatsächlich eine stabilisierende Funktion ist.

[9] Wir setzen wiederum implizit die Gültigkeit eines Faltungssatzes voraus.

[10] siehe Abschnitt 5.3.3

Das Abschneiden der hohen Frequenzen, also der Frequenzen $|\omega| \geq \gamma$, bewirkt demnach eine Faltung, respektive Mittelung, der gesuchten Funktion f mit der Mollifier-Funktion F_γ, gegeben durch (6.8). Die Funktion F_γ des idealen Tiefpasses hat die Eigenschaft, daß diese für kleiner werdende γ immer „breiter“ wird, was zur Folge hat, daß man ein sehr verschwommenes Bild von f erhält, das allerdings wenig von dem Datenfehler beinflußt wird. Für wachsendes γ wird F_γ immer „schmaler“, das Bild von f wird schärfer und ist stärkeren Einflüssen der Datenfehler unterworfen. Der Grenzfall $\gamma \to \infty$ liefert übrigens die Delta-Distribution als Grenzwert für F_γ [BB93, Lou89].

Nun sind ARSENIN und TIKHONOV bei den obigen Bedingungen $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$) nicht stehengeblieben, sondern haben ein konkretes, aber doch noch sehr *allgemeines Beispiel einer stabilisierenden Funktion* $\tilde{F}_\gamma$ für das Regularisierungsverfahren (6.2) untersucht:
Wir nehmen an, $M(\omega)$ sei eine gegebene, gerade Funktion und sie habe folgende Eigenschaften [AT77]:

a) $M(\omega)$ sei in jedem endlichen Intervall stückweise stetig;

b) $M(\omega)$ sei nicht-negativ und es gelte $M(\omega) > 0$ für $\omega \neq 0$;

c) Es gelte $M(\omega) \geq C > 0$ für ein hinreichend großes ω;

d) Für jedes $\gamma > 0$ sei

$$\frac{\tilde{k}^*(\omega)}{|\tilde{k}(\omega)|^2 + \gamma^2 M(\omega)} \in L^2(-\infty, \infty) \quad ,$$

wobei $|\tilde{k}(\omega)|^2 = \tilde{k}(\omega)\tilde{k}^*(\omega)$ ist[11].

Setzen wir

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \frac{|\tilde{k}(\omega)|^2}{|\tilde{k}(\omega)|^2 + \gamma^2 M(\omega)} \quad , \tag{6.9}$$

so erhalten wir Klassen von Regularisierungs-Operatoren T_γ, gegeben durch (6.2), für die Gleichung (6.1). Jede dieser Klassen ist durch die Funktion $M(\omega)$ charakterisiert. Wie wir sehen, hängt das Filter (6.9) vom Operator A ab.

An dieser Stelle soll auf einen wichtigen Zusammenhang hingewiesen werden[12]: Man kann zeigen, daß die mit dem Filter (6.9) regularisierte Lösung der Gleichung (6.1), die gemäß des Regularisierungsverfahrens (6.2) durch

$$f_\gamma(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{k}^*(\omega)}{|\tilde{k}(\omega)|^2 + \gamma^2 M(\omega)} \, \tilde{g}(\omega) \, e^{i\omega t} \, d\omega \tag{6.10}$$

definiert ist, das Funktional der *Tikhonov-Phillips Regularisierung*[13]

$$\mathcal{M}^\gamma[f, g] = \|Af - g\|_{L^2}^2 + \gamma^2 \, \Omega[f] \quad , \tag{6.11}$$

mit dem *stabilisierenden Funktional* $\Omega[f]$

$$\Omega[f] = \int_{-\infty}^{\infty} M(\omega) \, |\tilde{f}(\omega)|^2 \, d\omega \quad , \tag{6.12}$$

minimiert. Setzen wir konkret

$$M(\omega) = \sum_{n=0}^{p} q_n \, \omega^{2n} \quad , \tag{6.13}$$

[11] Mit $\tilde{k}^*$ sei hier das konjugiert Komplexe von $\tilde{k}$ bezeichnet.

[12] Für das folgende sei besonders auf [AT77, Lou89], aber auch auf [Iva76, Dav82, Mil74, BW82] verwiesen.

[13] siehe Abschnitt 5.2 und [AT77, Lou89]

wobei die q_n's gegebene, nicht-negative Konstanten seien und besonders $q_p > 0$ gelte, so erhalten wir, nach Gleichung (6.12), sogenannte *Stabilisatoren der Ordnung* p[14], und das Filter $\tilde{F}_\gamma(\omega)$ nimmt die konkrete Form

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \frac{|\tilde{k}(\omega)|^2}{|\tilde{k}(\omega)|^2 + \gamma^2 \sum_{n=0}^{p} q_n \omega^{2n}} \tag{6.14}$$

an. Setzen wir $M(\omega) = \omega^{2r}$, wobei r eine beliebige positive Zahl sein kann, so erhalten wir Stabilisatoren der Form

$$\Omega[f] = C \int_{-\infty}^{\infty} |f^r(t)|^2 \, dt \quad , \tag{6.15}$$

mit

$$f^r(t) = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+1-r)} \int_{-\infty}^{t} (t-\tau)^{m-r} \, \frac{d^{m+1} f}{d\tau^{m+1}} \, d\tau \quad . \tag{6.16}$$

Die Funktion $f^r(t)$ kann als eine Art Ableitung der nicht-ganzzahligen Ordnung r betrachtet werden. Hier ist m eine ganze Zahl, für die $m \geq r$ gilt, und C sei eine (beliebige) positive Konstante.

Im Fall der Integralgleichung vom Faltungstyp (6.1) ist es also äquivalent, ein stabilisierendes Funktional $\Omega[f]$ der Ordnung p oder eine stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ der Form (6.14) zur Bestimmung einer regularisierten, approximativen Lösung zu benutzen oder in anderen Worten, in diesem Fall kann die Tikhonov-Phillips Regularisierung (5.7) mit dem stabilisierenden Funktional $\Omega[f]$ (6.15) auf das Filter $\tilde{F}_\gamma$ (6.12) abgebildet werden, eine Eigenschaft, die Abbildbarkeit auf einem Filter, vieler Regularisierungsverfahren, die wir bereits erwähnt haben.

Für $M(\omega)$ können wir sicherlich Funktionen mit beliebiger Wachstumsrate für $\omega \to \infty$ ansetzen. Würden wir dann so wie eben skizziert vorgehen, könnten wir auf der Basis der Gleichung (6.12) weitere Stabilisatoren $\Omega[f]$ erhalten[15].

6.2 Übertragbarkeit der Ergebnisse auf die Fourier-Laplace Transformation

Wir wollen jetzt kurz die Übertragbarkeit der Ergebnisse für die Filter $\tilde{F}_\gamma$ des auf der Fourier-Transformation basierenden Regularisierungsverfahrens (5.47) auf das Regularisierungsverfahren (5.49), welches auf der zweiseitigen Fourier-Laplace Transformation basiert, und somit auch die Übertragbarkeit auf das auf der Mellin-Transformation[16] basierende Verfahren (5.50), diskutieren. Wie wir im vorangegangenen Abschnitt bereits erwähnt haben, führt die direkte Übertragung der Eigenschaften $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$) eines stabilisierenden Filters der Fourier-Transformation auf Filter des Regularisierungsverfahrens (5.49) zwar auf formal analoge Ausdrücke, diese weisen jedoch zu große Restringtivitäten auf, so daß selbst nach diesen Kriterien ein Gauß'sches Filter nicht anwendbar sein würde.

Nichtdestotrotz können wie jetzt die Übertragbarkeit der Ergebnisse prüfen, indem wir untersuchen, ob durch

$$T_\gamma g \quad = \quad \Phi_\gamma * g \tag{6.17}$$

[14]Das stabilisierende Funktional (6.12) ist offensichtlich gerade die Fouriertransformierte des Stabilisators der Ordnung p (5.16) mit konstanten Koeffizienten. Für nähere Einzelheiten sei auf [AT77, Iva76, Dav82, Mil74, BW82] verwiesen.

[15]Die Arbeiten von TIKHONOV und ARSENIN in (beispielsweise) [AT77] sind, unseres Wissens nach, mit die wenigen, in denen die Bestimmung eines stabilisierenden Funktionals $\Omega[f]$, wie z.B. nach Gleichung (6.12), untersucht wird; siehe auch die im Abschnitt 5.2 erwähnten Bemerkungen von DAVIES in [Dav82] und die betreffende Fußnote 12).

[16]Es sei daran erinnert, daß die Mellin-Transformation, vermöge der Substitution $x = e^{-t}$, als virtuelle (Fourier-)Laplace-Transformation interpretierbar ist [Doe71].

$$T_\gamma g(t) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-\tau) g(\tau)\, d\tau \quad , \tag{6.18}$$

wobei Φ_γ das Urbild von $\tilde{\Phi}_\gamma$ sei, hier konkret also durch

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, e^{st}\, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, e^{st}\, ds \tag{6.19}$$

gegeben, ein mathematisch korrekter und auch bezüglich einer Regularisierung vernünftiger Ausdruck gegeben ist. Die folgenden Ausführungen werden demonstrieren, wie dieses genau zu verstehen ist.

6.2.1 Der ideale Tiefpaß

Um den idealen Tiefpaß (6.4) auf das Regularisierungsverfahren (5.49) zu übertragen, ist man naiv dazu verleitet, dieses durch die zu (6.5) formal analoge Form

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{x_0-i\gamma}^{x_0+i\gamma} \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)}\, e^{st}\, ds \tag{6.20}$$

zu tun. Dieses ist aber schon allein deswegen problematisch, da dieser Ansatz dem Wesen der komplexen inversen zweiseitigen Fourier-Laplace Transformation widerspricht, denn mathematisch handelt es sich hier um ein auf eine vertikale Gerade in der s-Ebene deformiertes Kurvenintegral [Doe71]:

$$\int_L ds \to \int_{x_0-i\infty}^{x_0+i\infty} ds \quad .$$

Und selbst wenn man sich auf den Standpunkt[17] stellt, durch (6.20) *formal* den idealen Tiefpaß der Fourier-Laplace Transforamtion zu *definieren*, so bereitet ein weiteres Problem die zu (6.20) korrespondierende Mollifier-Funktion F_γ, die, wie eine einfache Rechnung zeigt, durch

$$F_\gamma(t) = e^{x_0 t}\, \frac{\sin(i\gamma t)}{\pi t} = -e^{x_0 t}\, \frac{\sinh(\gamma t)}{i\pi t} \tag{6.21}$$

gegeben ist, da diese eine *komplexwertige* Funktion ist. Das hat natürlich direkt zur Konsequenz, daß die reine Regularisierung (5.61)

$$f_\gamma^T(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(x-y)\; f_T(y)\; dy \tag{6.22}$$

ebenso eine *komplexwertige* Funktion f_γ^T liefert, auch wenn f_T selbst *rein reellwerig* ist, was beispielsweise dann der Fall sein wird, wenn f_T als Dichtefunktion interpretiert werden kann. Es ist offensichtlich nicht gerade eine wünschenswerte Eigenschaft einer Mollifier-Funktion, komplexwertig zu sein[18]. Der „naive“ Ansatz (6.20) ist somit keine praktikable und mathematisch sinnvolle Realisierung des Tiefpaß-Filters.

Der zweite und mathematisch sinnvolle Ansatz sieht nun so aus, die Fourier-Laplace Transformierte der Mollifier-Funktion (6.8) des idealen Tiefpasses der Fourier-Transformation,

$$F_\gamma(t) = \frac{\sin \gamma t}{\pi t} \quad , \tag{6.23}$$

[17] Wir teilen die Auffassung HILBERTS gegenüber einem Standpunkt.

[18] Zumindest kann festgehalten werden, daß komplexwertige F_γ nicht zu den *universellen Filtern* des verwendeten Regularisierungsverfahrens gehören können, also Filter bzw. stabilisierende Funktionen, die unabhängig von den charakteristischen Eigenschaften der theoretischen Lösung eines inversen Problems verwendet werden können.

zu bestimmen, denn die Mollifier-Funktion F_γ und das (regularisierende) Filter $\tilde{F}_\gamma$ mögen, per definitionem, vermöge der das Regularisierungsverfahren definierende linearen Integraltransformation eineindeutig in Zusammenhang stehen. Wir müssen also das Integral der zweiseitigen Fourier-Laplace Transformation[19]

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\ e^{-st}\ dt \quad s \in \mathbb{C} \tag{6.24}$$

auswerten, also konkret

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \gamma t}{\pi t}\ e^{-st}\ dt \quad . \tag{6.25}$$

Offensichtlich konvergiert dieses Intergral nur, wenn wir noch einschränkend

$$F_\gamma(t) = \begin{cases} \frac{\sin \gamma t}{\pi t} & \text{für} \quad 0 \le t < \infty \\ 0 & \text{für} \quad -\infty < t < 0 \end{cases} \quad . \tag{6.26}$$

fordern. Dieses würde dann äquivalent mit der Aussage sein, daß für die exakte Lösung $f_T = 0$ für $t < 0$ gelten würde oder wir die Integralgleichung in der Form

$$Af(t) = \int_0^{\infty} k(t-\tau)\ f(\tau)\ d\tau \tag{6.27}$$

bringen könnten. Die zweiseitige Laplacetransformierte $\tilde{F}_\gamma$ der so eingeschränkten Mollifier-Funktion (6.26), die jetzt nicht viel mehr als die einseitige Laplacetransformierte ist, ist wohlbekannt und, ohne daß wir die Rechnung angeben wollen, durch

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \tan^{-1}\left(\frac{\gamma}{s}\right) \quad \Re\mathfrak{e}\, s > |\Im\mathfrak{m}\, \gamma| \tag{6.28}$$

gegeben[EMOT54, Doe71, Tit67], wobei hier sogar $\gamma \in \mathbb{R}^+$ gilt. Übertragen auf das auf der Mellin-Transformation basierende Regularisierungsverfahren (5.50) bedeutet dieses, daß die zum Filter (6.28) gehörende Mollifier-Funktion F_γ durch

$$F_\gamma(x) = \begin{cases} \frac{\sin(\gamma \ln(x))}{\pi \ln(x)} & \text{für} \quad 0 < x < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < t < \infty \end{cases} \tag{6.29}$$

gegeben ist, ein Ergebnis, daß wir mit der Variablensubstitution $x = e^{-t}$ unmittelbar aus (6.26) erhalten. Die Integralgleichung muß jetzt demnach in der Form

$$Af(x) = \int_0^1 k\left(\frac{x}{\xi}\right)\ f(\xi)\ \frac{d\xi}{\xi} \tag{6.30}$$

formulierbar sein.

Wir können also als *Fazit* ziehen: Der ideale Tiefpaß ist bei den auf der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation basierenden Regularisierungsverfahren nur dann anwendbar, wenn die Integralgleichung auf die Gestalt (6.27) bzw. (6.30) eingeschränkt oder gebracht werden kann. Ansonsten ist eine mathematisch korrekte Adaption des idealen Tiefpasses für diese Regularisierungsverfahren nicht möglich.

Für das Problem der Dielektrizitätsfunktion amorpher Substanzen (2.13), welches prinzipiel mit dem Regularisierungsverfahren (5.50) behandelt werden kann, bedeutet dieses also, daß der ideale Tiefpaß ohne weiteres nicht anwendbar[20] sein wird.

[19] Aufgrund der Formulierung (5.49) des Regularisierungsverfahrens wollen wir die Fourier-Laplace Transformation in der Form der zweiseitigen Laplace-Transformation formulieren. Beide Formulierungen gehen bekanntlich durch die Substitution $s \to iy$, $y, s \in \mathbb{C}$, ineinander über; siehe auch Fußnote 7 im Abschnitt 2.3.

[20] Dieses gilt streng genommen nur für die komplexwertige Integralgleichung (2.13). Behandelt man den Imaginärteil (2.18) der Integralgleichung als ein eigenständiges Problem, so kann diese mit dem auf der Fourier-Transformation basierenden Regularisierungsverfahren behandelt werden, und somit ist dort auch der ideale Tiefpaß anwendbar.

6.2.2 Das Filter der Tikhonov-Phillips Regularisierung

Um das Filter der Tikhonov-Phillips Regularisierung[21] für das Regularisierungsverfahren (5.49) respektive (5.50) zu erhalten, gehen wir genau so vor, wie es bei der Ableitung des Ausdrucks (6.14) dieses Filters für das Verfahren (5.47) getan wird. Im Gegensatz zum vorangegangenen Abschnitt, werden wir uns dabei diesmal aber explizit auf das die Mellin-Transformation benutzende Regularisierungsverfahren beschränken, zum einen (wiederum) aufgrund der engen Verwandtschaft von zweiseitiger (Fourier-)Laplace- und Mellin-Transformation, zum anderen weil naheliegender Weise[22] auf unser Ausgangsproblem des phänomenologischen Ansatzes (2.13) das Regularisierungsverfahren (5.50) angewandt werden soll. Folgen wir also jetzt der Darstellung in [Lou89], wobei wir an Stelle der Fourier- die Mellin-Transformation verwenden werden:

Schreiben wir das stabilisierende Funktional wieder in der Form (5.8)

$$\Omega[f] = \|Bf\|^2 \quad , \tag{6.31}$$

wobei wir, aufgrund der Faltungsstruktur des Ausgangsproblems, die Zusatzinformation B ebenso in Form eines Faltungsoperators einführen wollen

$$Bf = b * f \quad . \tag{6.32}$$

Setzen wir wieder die Gültigkeit des Faltungssatzes voraus, so können wir Bf durch die (komplexe) inverse Mellin-Transformation ausdrücken:

$$Bf(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{b}(s)\tilde{f}(s)\, x^{-s}\, ds \quad . \tag{6.33}$$

Wählen wir jetzt explizit $\tilde{b}$ als Polynom, konkret sei

$$\tilde{b}(s) = \sum_{n=0}^{\tilde{p}} (-1)^n\, a_n\, s^n \quad , \tag{6.34}$$

wobei die a_n's konstante Koeffizienten seien, so ergibt sich wegen[23] [Doe71, EMOT54]

$$\mathfrak{M}\left\{ \left(x\frac{d}{dx} \right)^n f(x) \right\} = (-1)^n s^n \tilde{f}(s) \tag{6.35}$$

die Darstellung von B zu

$$Bf(x) = \sum_{n=0}^{\tilde{p}} a_n \left(x\frac{d}{dx} \right)^n f(x) \quad . \tag{6.36}$$

Da die Operatoren A^*A und B^*B angewandt[24] auf f dargestellt werden können als Multiplikation der Mellintransformierten von f mit den Mellintransformierten der entsprechenden Kerne, kommutieren beide Operatoren. Für die Tikhonov-Phillips Regularisierung ergibt sich somit

$$f_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{k}^*(s)}{|\tilde{k}(s)|^2 + \gamma^2 |\tilde{b}(s)|^2}\, \tilde{g}(s)\, x^{-s}\, ds \tag{6.37}$$

---

[21] Wir verwenden natürlich wieder die Bezeichnungen und Begriffe aus den Abschnitt 5.2, so daß wir diese hier nicht wiederholen werden. Für weitere Einzelheiten sei wiederum auf [AT77, Lou89] verwiesen.

[22] siehe dazu auch Abschnitt 2.4.2 und Kapitel 5.3

[23] Wir verwenden hier die folgende Notation:

$$\left(x\frac{d}{dx} \right)^n f(x) = \underbrace{x\frac{d}{dx}\left(x\frac{d}{dx}\left(\cdots \left(x\frac{d}{dx} f(x) \right) \right) \right)}_{n-mal} \quad .$$

[24] siehe Gleichung (5.12)

mit dem Filter

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \frac{|\tilde{k}(s)|^2}{|\tilde{k}(s)|^2 + \gamma^2 |\tilde{b}(s)|^2} \quad . \tag{6.38}$$

Offensichtlich korrespondiert das Filter (6.38) mit dem polynomialen $\tilde{b}$ gemäß Gleichung (6.34) zu der Mellinschen Version des Stabilisators der Ordnung p mit konstanten Koeffizienten; noch deutlicher wird diese Korrespondenz, wenn wir, analog zu dem Ansatz (6.13),

$$M(s) = |\tilde{b}(s)|^2 = \sum_{n=0}^{p} q_n \, s^{2n} \tag{6.39}$$

setzen.

Mit (6.38) besitzen wir jetzt einen Ausdruck des Filters der Tikhonov-Phillips Regularisierung für das auf der Mellin-Transformation, und somit auch für das auf der Fourier-Laplace Transformation, basierende Regularisierungsverfahren (5.50). Da jedoch die numerische, komplexe inverse Mellin- respektive Fourier-Laplace Transformation, für sich allein betrachtet, selber zu den schlecht gestellten Problemen gehört[25], müssen wir das Regularisierungsverfahren (5.50),

$$f_\gamma(x) = T_\gamma g(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s) \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)} \, x^{-s} \, ds \quad ,$$

auf das Faltungsintegral

$$f_\gamma(x) = \int_0^\infty \Phi_\gamma\left(\frac{x}{\xi}\right) \, g(\xi) \, \frac{d\xi}{\xi} \tag{6.40}$$

umschreiben können, wobei offensichtlich Φ_γ durch

$$\Phi_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s) \, x^{-s} \, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \, x^{-s} \, ds \tag{6.41}$$

gegeben sein soll. Für unser konkretes Problem des phänomenologischen Ansatzes (2.13) bedeutet dieses, unter Berücksichtigung, daß die Mellintransformierte $\tilde{k}$ des Integralkerns durch[26]

$$\tilde{k}(s) = \frac{\pi (i)^s}{\sin\{\pi s\}} = (i)^s \, \Gamma(s) \, \Gamma(1-s) \quad , \quad \text{mit} \quad 0 < \mathfrak{Re}\, s < 1 \tag{6.42}$$

gegeben ist, daß wir gemäß (6.38) die inverse Mellin-Transformation der Form[27]

$$\begin{aligned} \Phi_\gamma(x) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{K(s)} \, x^{-s} \, ds \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\Gamma^*(s)\Gamma^*(1-s)}{|\Gamma(s)\Gamma(1-s)|^2 + \gamma^2 \sum_{n=0}^{p} q_n \, s^{2n}} \, (ix)^{-s} \, ds \end{aligned} \tag{6.43}$$

---

[25] Bezüglich der Problematik der Numerik der komplexen Umkerformel der Fourier-Laplpace - und der Mellin-Transformation sei auf [Doe71, DR84, KF87, Lav67] verwiesen. DAVIS und RABINOWITZ bezeichnen übrigens in [DR84] den (derzeitigen) Stand der Numerik der komplexen inversen Transformationen eher als eine Kunst denn als eine Wissenschaft, was schon einiges über diese Problematik aussagt.

[26] siehe Gleichung (2.40) des Abschnittes 2.4.2

[27] In [Ros95] haben wir bereits einen zu (6.43) äquivalenten Ausdruck angegeben, den wir nach Anwendung des Ergänzungssatzes (3.27) der Gammafunktion und einigen algebraischen Umformungen erhalten haben.

auszuwerten haben, wobei wir hier, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, konkret den Ausdruck (6.39) für $M(s) = |\tilde{b}(s)|^2$ eingesetzt haben.

Die *analytische* Berechnung des Integrals (6.43) war bisher jedoch nicht durchführbar. Mit ein Grund dafür ist, daß der Nenner der rückzutransformierenden Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ in (6.43) sich nur als Summe mindestens zweier Terme darstellen läßt, wodurch die Anwendung des Residuensatzes[28] zur Gewinnung eines geschlossenen, analytischen Ausdrucks faktisch unpraktikabel wird. Weitere, auf dem Residuensatz basierende, Approximationen[29], die die Summe im Nenner (asymptotisch) beseitigen, führen einen jedoch außerhalb einer allgemeinen Regularisierung. Die so erhaltenen Ausdrücke beschreiben dann die Asymptotik von Φ_γ für $\gamma \to 0$ und $x \to 0$. Daraus folgt unmittelbar, daß man dann nicht mehr genau weiß, inwiefern die mit dieser Asymptotik erhaltene, auf Gleichung (6.40) basierende, „Lösung“ etwas mit einer regularisierten Lösung des ursprünglichen Problems, selbst für kleine γ- und x-Werten, zu tun hat. Dieses äußert sich beispielsweise darin, daß man, je nach Wahl von $M(s)$, bei kleinen Werten für γ beliebige Ergebnisse qualitativer Art für f_γ, der regularisierten Lösung, erhält. Eine numerische Berechnung der Funktion Φ_γ erschien uns aufgrund der bekannten Schwierigkeiten der numerischen Behandlung der komplexen Umkehrformel als nicht empfehlenswert.

Abschließend wollen wir noch folgendes erwähnen: Neben der Abbildung der Tikhonov-Phillips Regularisierung auf einen Filter, können wir natürlich dieses Verfahren auch direkt anwenden, d.h. wir betrachten die Variation des (quadratischen) Funktionals (5.7) der Tikhonov-Phillips Regularisierung,

$$\mathcal{M}^\gamma[f,g] = \|Af - g\|^2 + \gamma^2 \|Bf\|^2 \quad , \tag{6.44}$$

dessen Lösung durch die zum obigen Funktional korrespondierende *Euler-Lagrange Gleichung* (5.12),

$$\left(A^*A + \gamma^2 B^*B\right) f_\gamma = A^*g \quad , \tag{6.45}$$

gegeben ist[30]. Für einen *allgemeinen Stabilisator der Ordnung*[31] $p = 1$ haben wir bereits in [Ros95] die dazu gehörende Euler-Lagrange Gleichung abgeleitet:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \left\{ \int_0^\infty \frac{1}{\xi\tau - i} \, \frac{1}{t\xi + i} \, d\xi \right\} p(t)\, dt \quad &- \quad \int_0^\infty \frac{1}{\tau\xi - i} \, E^+(\xi)\, d\xi \\ -\gamma^2 \left\{ \frac{d}{d\tau} \left[q_1(\tau) \frac{dp(\tau)}{d\tau} \right] \quad &- \quad q_0(\tau)\, p(\tau) \right\} = 0 \end{aligned} \tag{6.46}$$

oder kurz als

$$\int_0^\infty \overline{K}(\tau,t)\, p(t)\, dt - b(\tau) - \gamma^2 \left\{ \frac{d}{d\tau} \left[q_1(\tau) \frac{dp(\tau)}{d\tau} \right] - q_0(\tau)\, p(\tau) \right\} = 0 \tag{6.47}$$

geschrieben. Hierbei sei, zur Erinnerung, $q_0(\tau)$ eine nicht-negative, stetige Funktion und $q_1(\tau)$ sei eine positive, stetige Funktion, es gelte also $q_0(\tau) \geq 0$ und $q_1(\tau) > 0 \quad \forall\, \tau$; beide seien als gegeben vorausgesetzt. In der Praxis wird man sich hier, wie bereits erwähnt, sogar auf einen Stabilisator mit konstanten Koeffizienten, also $q_0(\tau) = q_0 \geq 0$ und $q_1(\tau) = q_1 > 0$, beschränken. Die Lösung der Integrodifferentialgleichung (6.46) ist dann, gemäß des Satzes 5.2, die durch das Tikhonov-Phillips Verfahren gewonnenen regularisierte Lösung der Integralgleichung (2.13).

Formal läßt sich die Integrodifferentialgleichung (6.46) bei Stabilisatoren mit konstanten Koeffizienten q_n

[28] siehe beispielsweise [BS76, Tit86, Roo69]

[29] Diese werden beispielsweise von ARSENIN und TIKHONOV in [AT77] zur Untersuchung des asymptotischen Verhaltens der beiden Fehlerbeiträge, Gleichungen (5.55) und (5.56) auf Seite 78, in der Tikhonov-Phillips Regularisierung für $\gamma \to 0$ angewandt.

[30] siehe Satz 5.2 im Abschnitt 5.2 und [AT77, Lou89, Mic62, Smi88]

[31] siehe Gleichung (5.16) auf Seite 70

übrigens wiederum mit Hilfe der Mellin-Transformation lösen[32]. Diese (formale) Lösung ist, wie die Rechnung zeigt und wie auch nicht anders zu erwarten ist, gerade die Tikhonov-Phillips Regularisierte (6.37), mit einem entsprechenden Ausdruck der Form (6.39) für $M(s) = |\tilde{b}(s)|^2$ mit $p = 1$; eine weitere Behandlung der Integrodifferentialgleichung erscheint uns deswegen nicht unbedingt vorteilhaft[33].

[32]Hierfür wird technisch ebenso vorgegangen wie im vorangegangenen Abschnitt 5.3.1 bei der Berechnung der verallgemeinerten Inversen bei Faltungsgleichungen. Prinzipiell kann auch die Normalgleichung (6.46) mit allgemeinen Stabilisator mit der Mellin-Transformation behandelt werden, doch wird man dann im Mellin-Raum auf implizite Gleichungen für die Mellintransformierte der Regularisierten geführt.

[33]Es sei hier auch auf die Bemerkungen und Hinweise zur Behandlung von Integrodifferentialgleichung der Form (6.46) in den betreffenden Artikeln und Büchern, wie beispielsweise [AT77, Iva76, Lav67, Mic62], hingewiesen.

Kapitel 7

Stabilisierende Funktionen II

In diesem Kapitel präsentieren wir nun endlich, als eines der zentralen Ergebnisse dieser Arbeit, die von uns abgeleiteten Filter $\tilde{F}_\gamma$ und deren Mollifier-Funktion F_γ für die auf der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation basierenden Regularisierungsverfahren (5.49) und (5.50). Zusätzlich werden wir zu $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$) alternative Bedingungen für Filter des auf der Fourier-Transformation basierenden Verfahrens (5.47) angeben, die sich ebenso aus dem von uns verwendeten Ansatz zur Bestimmung der Eigenschaften einer stabilisierenden Funktion ergeben[1].

Aufgrund der schon oftmals erwähnten engen Verwandtschaft zwischen (Fourier-)Laplace- und Mellin-Transformation, können wir uns bei den folgenden Betrachtungen auf das Regularisierungsverfahren (5.49) beschränken, was auch als angenehme Konsequenz die Möglichkeit einer „mathematisch eleganten Formulierung“ zur Folge hat. Die Ergebnisse für das auf der Mellin-Transformation basierende Verfahren (5.50) folgen dann unmittelbar.

Wir wollen bereits hier, am Anfang des Kapitels, erwähnen, daß die Basis der von uns abgeleiteten stabilisierenden Funktionen die *Theorie der Distributionen* bildet, deren zentrale Ergebnisse wir, den Bedürfnissen dieser Arbeit entsprechend, im Anhang B kurz wiedergeben werden[2].

7.1 Vorbetrachtungen und Postulate

Bevor wir uns aber den Ableitungen der stabilisierenden Funktionen im Detail widmen, müssen wir natürlich deren Ausgangsbasis darlegen. Dafür betrachten wir (nochmals) die Eigenschaften der hier untersuchten Regularisierungsverfahren.

Sehen wir uns zuerst den *reinen Einfluß des Regularisierungsverfahrens* gemäß Gleichung[3] (5.61) an:

$$f_\gamma^T(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(x-y)\ f_T(y)\ dy \quad . \tag{7.1}$$

Hier sei wieder F_γ die Mollifier-Funktion des Filters $\tilde{F}_\gamma$. Im Beispiel des idealen Tiefpasses (6.4) konvergiert,

[1] Dieses ist schon allein deswegen naheliegend, weil die Fourier-Transformation als ein wichtiger Spezialfall der (zweiseitigen Fourier-)Laplace-Transformation betrachtet werden kann [Doe71].

[2] Bezüglich allgemeiner Einführungen in die Distributionentheorie sei bereits an dieser Stelle beispielsweise auf [BB93, Bre65, Lig66, Roo69, Wal94] verwiesen.

[3] Wir haben hier, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, $x, y \in \mathbb{R}$ gewählt, da wir ebenso nur, um uns die Untersuchungen nicht unnötig zu erschweren, die eindimensionale Versionen der komplexen Integraltransformationen betrachten wollen.

wie bereits erwähnt, die zu diesem Filter korrespondierende Mollifier-Funktion (6.8)

$$F_\gamma(x) = \frac{\sin \gamma x}{\pi x} \tag{7.2}$$

für $\gamma \to \infty$ gegen die Dirac'sche Delta-Funktion oder, in anderen Worten, diese Mollifier-Funktion ist also eine *Approximation der Delta-Funktion* [BB93, Lou89].

Per definitionem der Regularisierung[4] respektive des Regularisierungs-Operators T_γ gelte generell:

$$\lim_{\gamma \to 0} f_\gamma^T(x) = f_T(x) \quad , \tag{7.3}$$

was in diesem Fall bezüglich der reinen Regularisierung konkret bedeutet, daß

$$\lim_{\gamma \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(x-y)\ f_T(y)\ dy = f_T(x) \tag{7.4}$$

zu gelten habe.

Der Limes (7.3) bzw. (7.4) wird sicherlich dann erfüllt sein, wenn für die Mollifier-Funktion der Limes

$$\lim_{\gamma \to 0} F_\gamma(x) = \delta(x) \quad , \tag{7.5}$$

und zwar im Sinne der Theorie der Distributionen, gilt. Dieses führt uns direkt dazu, das folgende *Postulat* aufzustellen:

Postulat 1
Die Mollifier-Funktion F_γ sei eine Approximation der Dirac'schen Delta-Funktion*, es gelte also*

$$\lim_{\gamma \to 0} F_\gamma(x) = \delta(x) \quad , \tag{7.6}$$

genauer gelte

$$\lim_{\gamma \to 0} \langle F_\gamma, \varphi \rangle = \langle \delta, \varphi \rangle \quad \forall \varphi \in \mathcal{T} \quad , \tag{7.7}$$

wobei $\mathcal{T}$ der noch konkret und dem Problem angemessen zu wählende Raum der Grundfunktionen φ, die auch Testfunktionen genannt werden, sei. Bezeichnen wir mit $\mathcal{T}'$ den (topologischen) Dualraum des Grundfunktionenraums $\mathcal{T}$, so bedeutet dieses in anderen Worten, daß

$$F_\gamma \in \mathcal{T}' \quad \forall \gamma \in \mathbb{R}^+ \tag{7.8}$$

gelte, also $\tilde{F}_\gamma$ eine Distribution für jedes $\gamma \geq 0$ sei.

Der Ausdruck (7.1) der reinen Regularisierung legt sogar noch ein weiteres Postulat nahe, da dieser formal mit dem Ausdruck der *Regularisation einer Distribution*[5] [BB93], und zwar hier der Distribution f_T, übereinstimmt. Dieses und vor allem die Tatsache der Existenz von Modellen der Dielektrizitätsfunktion E^+, wie beispielsweise dem Drudemodell[6], die die Dirac'sche Delta-Funktion als Lösung für p besitzen, führt zum

[4] siehe Definition 4.5

[5] Wir beziehen uns hier auf den Begriff der *Regularisierung von Distributionen*, wie dieser in [BB93] eingeführt wird und verweisen auf die von uns im Anhang B.4.3 gemachten Bemerkungen zu diesem Begriff. Der Begriff der *Regularisierung von Distributionen* respektive der *Regularisierten einer Distribution* ist *nicht* mit dem Begriff der Regularisierung schlecht gestellter Probleme *identisch*! Vorausgreifend können wir aber bereits sagen, daß beiden Begriffen die Idee einer (kontrollierten) Approximation zugrunde liegen.

[6] siehe Abschnitt 3.1

Postulat 2
Die Lösung f des Faltungsproblems $Af = k * f = g$ sei eine Distribution*, es sei also:*

$$f \in \mathcal{T}' \quad . \tag{7.9}$$

Ebenso sei g eine Distribution:

$$g \in \mathcal{T}' \quad . \tag{7.10}$$

Es ist nur konsequent, wenn $f \in \mathcal{T}'$ postuliert wird, auch die vorgegebene Funktion g als Distribution zu postulieren, was, wie wir später sehen werden, auch ganz praktische Gründe hat und zu mathematisch eleganten Betrachtungen und Formulierungen führt. Ein paar *Bemerkungen* zu den bisherigen Postulaten:

- Das Postulat, das f eine Distribution sei, ist nicht nur eine „künstliche“ Erweiterung des Raums der Lösungen des Entfaltungsproblems $g = k * f$, sondern stellt im Fall des phänomenologischen Ansatzes (2.13) eine *mathematische Notwendigkeit* dar. Ansonsten würde für beispielsweise alle Drudeartigen Modelle *keine* Lösung, unabhängig von deren Darstellung, existieren.
- Eine direkte Konsequenz aus der Forderung, daß f eine Distribution sei, ist, daß dann auch f_γ als Distribution für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+$ interpretierbar sein muß und diese eine Approximation (im Sinne der Distributionentheorie) von f darstellt.
- Eine weitere Konsequenz der Postulate 1 und 2 ist offensichtlich, daß die Regularisierungsverfahren (5.47), (5.49) und (5.50), im Gegensatz zu anderen Regularisierungsverfahren[7], Approximationen von Distributionen, insbesondere der Dirac'schen Delta-Funktion, so quasi generisch beinhalten.

Im Abschnitt 5.3.3 haben wir das Regularisierungsverfahren (5.49) durch die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ (Gl. (5.53)) dargestellt:

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \tag{7.11}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s) \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \quad . \tag{7.12}$$

Aufgrund der schon erwähnten Schwierigkeiten bei der Numerik der komplexen Umkehrformel[8], dürfen wir nicht nur die Gültigkeit eines Faltungssatzes annehmen, sondern müssen dieses sogar im Hinblick einer (praktischen) numerischen Anwendung fordern! Wir postulieren abschließend also:

Postulat 3
Die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$, definiert durch

$$\tilde{\Phi}_\gamma(s) = \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \quad , \tag{7.13}$$

erfülle die Bedingungen eines Faltungssatzes, so daß das Regularisierungsverfahren

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s) \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \tag{7.14}$$

als Faltung

$$T_\gamma g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-\tau)\, g(\tau)\, d\tau \quad , \tag{7.15}$$

[7] siehe Kapitel XYZ

[8] Es sei nochmals auf diesbezüglichen Kommentare in [DR84] verwiesen.

wobei

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, e^{st}\, ds \tag{7.16}$$

sei, dargestellt werden kann.

7.1.1 Eigenschaften der Lösung

Wir wollen an dieser Stelle, als weitere Vorbetrachtungen, die Eigenschaften, die a priori an die Lösung f der Integralgleichung[9]

$$(k * f)(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} k(t_0 - t)\; f(t)\; dt = g(t_0) \tag{7.17}$$

gestellt werden, wiederholen. In unserem konkreten Fall der Dielektrizitätsfunktion amorpher Systeme soll f eine Dichtefunktion repräsentieren, d.h. es gelte[10]:

1. $f \in L^1_{LOC}$
2. $f \in L^1$

Betrachten wir die im Anhang B.4.1 angegebenen (allgemeinen) Eigenschaften der Faltung, so sehen wir leicht, daß die obigen Bedingungen keine wirklichen Einschränkungen an die gesuchte Funktion f darstellen, sondern eher zu denen die Gesuchte noch am wenigsten einschränkenden Bedingungen gehören, ja sogar im gewissen Sinne die Grundvoraussetzungen für die Existenz der Faltung sind.

Aus diesen Eigenschaften folgt unmittelbar, daß f für fast alle t, d.h. bis auf eine Menge von Lebesgues Maße Null, eine stetige Funktion ist [Wer95].

Ist jetzt f eine Dichtefunktion, so soll noch

3. $f \geq 0 \; \forall \, t \in \mathbb{R}$

gelten.

Das Postulat 2 sagt uns, daß wir f als Distribution zu betrachten haben, daß also

a) $f \in \mathcal{T}'$

gelten soll.

Aus den obigen Bedingungen an f folgt jetzt unmittelbar:

b) Ist f eine Funktion im herkömmlichen Sinn, welche die Eigenschaften 1. und 2. besitzt, so ist f eine *reguläre* Distribution[11] [Bre65, BB93, Wal94, Roo69].

Die gesuchte (Dichte-)Funktion f soll die Manifestation physikalischer Prozesse, genauer deren Überlagerung, beschreiben. Wir können deswegen, aus physikalischer Sicht, unterstellen, daß f den Eigenschaften 1. bis 3. genügt. Desweiteren ist die Delta-Funktion - aus theoretischer Sicht - eine Idealisierung; die Überlagerung reiner exponentieller Zerfälle ist letztendlich ein theoretisch idealisiertes Modell[12]. Wir werden

[9] Obwohl wir uns hier auf eindimensionale (Faltungs-)Integrale über den $\mathbb{R}$ beschränken wollen, sind die folgenden Ergebnisse i.A. auch für den $\mathbb{R}^N$ gültig.

[10] siehe auch die Eigenschaften 2 und 3 der Dichtefunktion im Abschnitt 2.2

[11] Dieses folgt sofort aus der Definition der regulären Distributionen.

[12] Die Frage, ob in der Natur reine delta-förmige Prozesse vorkommen respektive vorkommen können, ist letztendlich ein erkenntnis- und wissenschaftstheoretisches, und somit ein philosophisches, Problem.

deswegen, ohne daß es wirklich eine Beschränkung sein würde, im weiteren explizit nur die Dirac'sche Delta-Funktion als nicht-reguläre Distribution in Betracht ziehen.

7.2 Filter der Fourier-Laplace- und Mellin-Transformation

Wir wollen uns nun den, aus dem Postulat 1 folgenden, „notwendigen" Eigenschaften des Filters $\tilde{F}_\gamma$ und dessen Mollifier-Funktion F_γ zuwenden. Dafür müssen wir uns als erstes Gedanken über die für unsere Zwecke geeignete Wahl des Grundfunktionenraums $\mathcal{T}$ machen. Per definitionem[13] stehen die Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ und F_γ vermöge der zur Lösung des Problems (7.17) verwendeten Integraltransformation in einem eineindeutigen Zusammenhang. Wie wir im Abschnitt B.4.4 angegeben haben, spielt der Grundfunktionenraum $\mathcal{S}$, der Raum aller überpolynomial abfallenden $\mathcal{C}^\infty$-Funktionen, in der Fourier-Transformation eine besondere Rolle, denn gemäß des Satzes B.10 gilt:
Der Operator der Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ ist ein Automorphismus in $\mathcal{S}$, d.h. $\mathcal{F}$ bildet $\mathcal{S}$ linear, stetig und bijektiv auf $\mathcal{S}$ ab, und die Umkehrabbildung, die inverse Fourier-Transformation, respektive der inverse Operator, $\mathcal{F}^{-1}$ besitzt dieselben Eigenschaften.

Somit ist der Grundfunktionenraum $\mathcal{S}$, der auch als *Schwarz-Raum* bezeichnet wird, als Ausgangsbasis für unsere Untersuchungen ideal geeignet. Der *Schwarz-Raum* $\mathcal{S}$ ist folgendermaßen definiert[14]:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^N) = \left\{\varphi \in \mathcal{C}^\infty \;\middle|\; p_{m,l}[\varphi] < \infty \quad \forall\, m,l = 0,1,2,\ldots\right\} \quad , \tag{7.18}$$

$$\text{mit} \quad p_{m,l}[\varphi] = \sup\left\{\left(1+x^2\right)^{\frac{m}{2}} |D^\alpha \varphi| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N,\ |\alpha| \le l\right\} \quad . \tag{7.19}$$

Für unsere Zwecke ebenso geeignet wäre der Grundfunktionenraum $\mathcal{D}$, die Menge $\mathcal{C}_0^\infty\left(\mathbb{R}^N\right)$ aller im $\mathbb{R}^N$ finiten und beliebig oft differenzierbaren (komplexwertigen) Funktionen[15]. Es kann aber gezeigt werden, daß die stetige (identische) Einbettung

$$\mathcal{D} \subset \mathcal{S}$$

gilt [BB93, Wal94]. Offenbar sind also alle Grundfunktionen aus $\mathcal{S}$, ein weiterer Grund, den Raum $\mathcal{S}$ als Grundraum $\mathcal{T}$ zu wählen.

Der Inhalt des Postulats 1 ist, daß die Mollifier-Funktion eine Approximation der Delta-Distribution sein soll. Die Sätze B.8 und B.9 zur Approximationen von Distributionen auf $\mathcal{S}'$ bzw. $\mathcal{D}'$ bilden nun naheliegenderweise die Ausgangsbasis der Untersuchungen, welche notwendige Eigenschaften die Mollifier-Funktion besitzen muß, wobei gerade der Satz B.9 für uns von großer praktischer Bedeutung sein wird. Eine direkte Konsequenz des Satzes B.8 ist, wie auch im Anhang B.4.3 und in [Wal94] erwähnt, daß die Delta-Funktion als Limes regulärer Distributionen dargestellt werden kann, ja sogar von solchen, die durch Grundfunktionen erzeugt werden.

Basierend auf den Satz B.9, möge die Mollifier-Funktion F_γ nun die folgenden Eigenschaften besitzen[16]:

Die Mollifier-Funktion F_γ sei, im Sinne der Theorie der Distributionen, eine *regularisierende Folge* respektive *regularisierende Schar* d.h. F_γ besitze konkret die Eigenschaften:

I) $F_\gamma \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right) \quad \forall\, \gamma > 0, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\},$

II) $F_\gamma(x) \ge 0 \quad \forall\, x \in \mathbb{R}^N, \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\},$

III) $\int\limits_{\mathbb{R}^N} F_\gamma(x)\, dx = 1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\},$

[13] siehe allg. Abschnitt 5.3.3 und dort besonders Gleichungen (5.59) und (5.60)

[14] siehe Definition B.8 im Anhang B.2.2 und [BB93, Wal94, Bre65]; wir geben an dieser Stelle die „kompakte" Version an.

[15] siehe Definition B.6 im Anhang B.2.1 und [BB93, Wal94, Bre65]

[16] Wir formulieren hier die Version für den $\mathbb{R}^N$ und es sei darauf hingewiesen, daß die Bedingungen nur formal mit denen des Satzes B.9 identisch sind und sich in den aufgestellten Voraussetzungen voneinander unterscheiden.

IV) F_γ ist für alle $\gamma > 0$ eine gerade Funktion: $F_\gamma(x) = F_\gamma(-x)$,

V) $F_\gamma(x) = \gamma^{-N} F\left(\frac{x}{\gamma}\right), \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, wobei $F \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right)$ eine feste Funktion sei.

In anderen Worten, besitzt eine feste Funktion F die Eigenschaften

a) $F \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right)$,

b) $F \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}^N$,

c) $\int\limits_{\mathbb{R}^N} F(x)\, dx = 1$ und

d) $F(x) = F(-x)$ (F ist eine gerade Funktion),

dann wird durch

$$F_\gamma(x) = \gamma^{-N} F\left(\frac{x}{\gamma}\right) \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \tag{7.20}$$

eine regularisierende Schar F_γ konstruiert.

Für uns von größter Bedeutung ist nun die Gültigkeit des folgenden Satzes[17]:

Satz 7.1
Erfüllt die Funktion F_γ die Eigenschaften I bis V, so ist diese eine Approximation der Delta-Funktion.

Wir wollen diesen für uns zentral Satz nun **beweisen**:
Untersuchen wir das Integral[18]

$$\int F_\gamma(x)\, \varphi(x)\, dx = \int \gamma^{-N} F\left(\frac{x}{\gamma}\right)\, \varphi(x)\, dx \quad , \tag{7.21}$$

wobei $\varphi \in \mathcal{S}$ sei. Gemäß der Eigenschaft I gelte ebenso $F_\gamma \in \mathcal{S}$ für alle $\gamma > 0$, woraus unmittelbar folgt, daß F_γ eine temperierte Distribution für alle $\gamma > 0$ ist: $F_\gamma \in \mathcal{S}' \; \forall\, \gamma > 0$, $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, es gilt die Abschätzung[19]

$$\int F_\gamma(x)\, \varphi(x)\, dx \leq \|F_\gamma\|_{L^2}\, \|\varphi\|_{L^2} \tag{7.22}$$

und es gilt sogar, daß das Produkt zweier Grundfunktionen aus $\mathcal{S}$ wieder in $\mathcal{S}$ liegt, also eine Grundfunktion darstellt: $F_\gamma \cdot \varphi = \psi \in \mathcal{S}$ für alle $\gamma > 0$. Offensichtlich ist F_γ sogar für alle $\gamma > 0$ eine *reguläre temperierte Distribution*. Betrachten wir also:

$$\langle F_\gamma, \varphi \rangle \quad = \quad \int F_\gamma(x)\, \varphi(x)\, dx \tag{7.23}$$

$$= \int F_\gamma(x)\, \varphi(0)\, dx \quad + \quad \int F_\gamma(x)\, \left(\varphi(x) - \varphi(0)\right)\, dx \quad . \tag{7.24}$$

Das erste Integral in (7.24) ist, wenn wir die Eigenschaft III der Funktion F_γ, also deren Normierung, berücksichtigen, gleich dem Wert $\varphi(0)$, das zweite Integral in (7.24) ist, wenn wir die Substitution $x = \gamma y$ anwenden und Darstellung (7.20) der Funktion F_γ (Eigenschaft V) berücksichtigen:

$$\int F_\gamma(x)\, \left(\varphi(x) - \varphi(0)\right)\, dx = \int F(y)\, \left(\varphi(\gamma y) - \varphi(0)\right)\, dy \quad . \tag{7.25}$$

[17] Die Bezeichnung „Satz“ ist an dieser Stelle vielleicht etwas hochgegriffen und eventuell wäre der Begriff „Korollar“ angemessener gewesen. Da die Aussage jedoch von zentraler Bedeutung ist, haben wir die Bezeichnung „Satz“ gewählt.

[18] Soweit es nicht anders erwähnt wird, werden die folgenden Integrale über den ganzen $\mathbb{R}^N$ respektive den ganzen $\mathbb{R}$ erstreckt.

[19] Es gelten die (stetigen) Inklusionen $\mathcal{S} \subset L^1$ und $\mathcal{S} \subset L^2$; siehe Anhang B und [BB93, Wal94, Wer95].

Es gelten jetzt übrigens, gemäß der HÖLDERSCHEN Ungleichungen [Wer95, Doe71], die folgenden Abschätzungen:

$$\int F(y)\ (\varphi(\gamma y)-\varphi(0))\ dy \quad \leq \quad \|F_\gamma\|_{L^2}\ \|\varphi(\gamma y)-\varphi(y)\|_{L^2} \tag{7.26}$$

$$\int F(y)\ (\varphi(\gamma y)-\varphi(0))\ dy \quad \leq \quad \|F\|_{L^1}\ \|\varphi(\gamma y)-\varphi(y)\|_{\infty} \quad . \tag{7.27}$$

Uns interessiert nun der Limes $\gamma \to 0^+$. Da aufgrund von $\varphi \in \mathcal{S}$, quasi per definitionem, sowohl $\varphi \in \mathcal{C}^\infty$ als auch $\varphi \in L^2$ gilt, können wir die Grenzprozesse, also die Integration und den Limes, vertauschen, und erhalten so:

$$\int F(y)\ (\varphi(\gamma y)-\varphi(0))\ dy \to 0 \quad \text{für } \gamma \to 0 \quad . \tag{7.28}$$

Greifen wir auf die im Anhang B.2.2.4 eingeführten Normen in $\mathcal{S}$ zurück[20], so gilt offensichtlich, mit Verwendung der Notation $\varphi^\gamma(y) = \varphi(\gamma y)$

$$|\varphi(\gamma y)-\varphi(y)| \leq C p_{m,0}\,[\varphi^\gamma - \varphi] \tag{7.29}$$

respektive

$$|\varphi(\gamma y)-\varphi(y)| \leq C \|\varphi^\gamma - \varphi\|^{\mathcal{S}}_m \quad , \tag{7.30}$$

wobei jeweils $m \in \mathbb{N}$ und $m > 0$ gelte. Ebenso sieht man ohne große Mühe, daß für jede Folge $\{\gamma_j\}$, j sei ganzzahlig positiv, der Form $\gamma_j = \gamma_0 j$ mit festem $\gamma_0 > 0$,

$$\lim_{j\to 0} \|\varphi^{\gamma_j} - \varphi\|^{\mathcal{S}}_m = 0 \tag{7.31}$$

respektive

$$\lim_{j\to 0} p_{m,l}\,[\varphi^{\gamma_j} - \varphi] = 0 \tag{7.32}$$

gilt, daß also $\varphi^\gamma \to \varphi$ bezüglich der Konvergenz in $\mathcal{S}$ gilt,

$$\lim_{j\to 0} \|\varphi^{\gamma} - \varphi\|^{\mathcal{S}}_m \quad , \ m \geq 0 \quad , \tag{7.33}$$

und so auch in diesem Sinne

$$\int F(y)\ (\varphi(\gamma y)-\varphi(0))\ dy \to 0 \quad . \tag{7.34}$$

gerechtfertigt ist. Wir haben somit gezeigt: Besitzt eine Funktion F_γ die Eigenschaften I bis V, so gilt im Sinne der Theorie der Distributionen

$$\lim_{\gamma\to 0^+} \langle F_\gamma, \varphi\rangle = \langle \delta, \varphi\rangle \quad \forall\ \varphi \in \mathcal{S} \quad , \tag{7.35}$$

also der behauptete Satz 7.1.

Mit den Eigenschaften I bis V besitzen wir also (mögliche) notwendige Bedingungen, mit denen das Postulat 1 an die Mollifier-Funktion erfüllt ist. Wir müssen jetzt jedoch nocheinmal das Faltungsintegral[21] (7.1)

$$f_\gamma(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(x-y)\ f(y)\ dy \quad . \tag{7.36}$$

[20] siehe auch Gleichung (7.19) in der Einführung des Schwarz-Raums in diesem Kapitel

[21] Der Übersicht wegen haben wir den Index „T“ für die theoretischen, exakten Funktionen weggelassen.

also die reine Regularisierung, näher betrachten. Aus den Eigenschaften, die wir an die Lösung f gestellt haben[22] folgt unmittelbar die Wohldefiniertheit und Existenz[23] des obigen Faltungsintegrals für alle $\gamma > 0$, es gilt die Abschätzung

$$\|f_\gamma\|_{L^1} \leq \|f\|_{L^1} \, \|F_\gamma\|_{L^1} = \|f\|_{L^1} \quad \forall\, \gamma > 0 \quad , \tag{7.37}$$

wobei hier die Eigenschaften II und III an F_γ berücksichtigt worden sind, und mit der Eigenschaft I der Mollifier-Funktion folgt, daß die regularisierte Lösung (der reinen Regularisierung) in dieser Darstellung eine temperierte Distribution für alle $\gamma > 0$ ist; konkret gilt, per definitionem der Faltung einer Distribution $f \in \mathcal{S}'$ mit einer Grundfunktion $F \in \mathcal{S}$ (B.135), für jedes $\varphi \in \mathcal{S}$:

$$\langle f_\gamma, \varphi \rangle = \langle f * F_\gamma, \varphi \rangle = \langle f, \check{F}_\gamma * \varphi \rangle \quad , \tag{7.38}$$

wobei wir die Notation $\check{F}_\gamma(x) \equiv F_\gamma(-x)$ verwendet haben. Nun ist aber gemäß der Eigenschaft IV F_γ eine gerade Funktion, so daß wir (7.38) auch schreiben können als

$$\langle f_\gamma, \varphi \rangle = \langle f, F_\gamma * \varphi \rangle \quad . \tag{7.39}$$

Die Faltung $F_\gamma * \varphi$ zweier Funktionen $\varphi \in \mathcal{S}$ und $F_\gamma \in \mathcal{S}$ ist offensichtlich wohldefiniert und gehört, wie sich zeigen läßt, wieder zu $\mathcal{S}$ [BB93, Wal94], d.h. es gilt

$$\varphi_\gamma := F_\gamma * \varphi = \varphi * F_\gamma \in \mathcal{S} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \quad , \tag{7.40}$$

woraus sofort folgt, daß f_γ eine reguläre temperierte Distribution ist, sofern f eine Funktion im herkömmlichen Sinne ist, die die im Abschnitt 7.1.1 dargelegten Eigenschaften besitzt. Handelt es sich bei der exakten Lösung f um die Delta-Funktion, die keine reguläre Distribution ist, so ist sowohl, da $F_\gamma \in \mathcal{S}$ gelten soll, die Faltung

$$f_\gamma(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \, F_\gamma(x-y) \, dy = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y) \, F_\gamma(y) \, dy \tag{7.41}$$

für alle x wohldefiniert und es gilt analog zu (7.38) respektive (7.39)

$$\langle f_\gamma, \varphi \rangle = \langle \delta * F_\gamma, \varphi \rangle = \langle \delta, F_\gamma * \varphi \rangle = \langle \delta, \varphi_\gamma \rangle \quad , \tag{7.42}$$

wobei das Skalarprodukt - offensichtlich - aufgrund von $\varphi_\gamma \in \mathcal{S} \;\forall \gamma \in \mathbb{R}^+$ im Rahmen der Theorie der Distributionen wohldefiniert ist. Übrigens handelt es sich auch bei $f_\gamma = \delta * F_\gamma$ um eine reguläre Distribution, denn es gilt bereits per definitionem der Delta-Distribution:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \, F_\gamma(x-y) \, dy = F_\gamma(x) \tag{7.43}$$

und somit

$$\langle (\delta * F_\gamma)(x), \varphi(x) \rangle = \langle F_\gamma, \varphi \rangle \quad , \tag{7.44}$$

woraus das Behauptete unmittelbar folgt.

Als nächstes müssen wir noch explizit zeigen, daß für $\gamma \to 0$ die regularisierte gegen die exakte Lösung konvergiert und zwar im Sinne der Konvergenz in $\mathcal{S}'$. Dafür gehen wir von Gleichung (7.39)

$$\langle f_\gamma, \varphi \rangle = \langle f, F_\gamma * \varphi \rangle$$

aus. Betrachten wir jetzt hier zuerst die Faltung $F_\gamma * \varphi \in \mathcal{S}$. Wir haben eine zum Beweis des obigen Satzes 7.1 folgende analoge Situation:

$$(F_\gamma * \varphi)(x) \quad = \quad \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(y-x) \, \varphi(y) \, dy$$

[22] siehe Abschnitt 7.1.1

[23] Aus $f \in L^1$ und $F_\gamma \in L^1$ folgt die Existenz für fast alle x, d.h. bis auf eine Menge vom Lebesguen Maß Null.

$$
\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(y)\ \varphi(x-y)\ dy \\
= \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(y)\ \varphi(x)\ dy \quad &+ \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(y)\,[\varphi(x-y)-\varphi(x)]\ dy \\
= \varphi(x) \quad &+ \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\,[\varphi(x-\gamma t)-\varphi(x)]\ dt \quad , \qquad (7.45)
\end{aligned}
$$

wobei wir wiederum die Substitution $y = \gamma t$ und die Darstellung (7.20) respektive die Eigenschaft V der Funktion F_γ verwendet haben. Da $\varphi \in \mathcal{S}$ gilt, können wir offensichtlich die Integration und die uns interessierende Limesbildung $\gamma \to 0^+$ vertauschen, so daß aus

$$\varphi(x-\gamma t)-\varphi(x) \to 0 \quad \text{für } \gamma \to 0 \quad , \qquad (7.46)$$

die Konvergenz des Integrals in (7.45) für $\gamma \to 0^+$ gegen Null folgt:

$$\lim_{\gamma\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\,[\varphi(x-\gamma t)-\varphi(x)]\ dt = 0 \quad . \qquad (7.47)$$

Kommen wir jetzt zu (7.39) zurück und betrachten den Limes:

$$
\begin{aligned}
\lim_{\gamma\to 0} \langle f_\gamma, \varphi \rangle &= \lim_{\gamma\to 0} \langle f, \varphi_\gamma \rangle \\
&= \lim_{\gamma\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(x-y)\varphi(y)\ dy \right) f(x)\ dx \quad , \qquad (7.48)
\end{aligned}
$$

denn da $f \in L^1$ gelte, können wir die Integrationen vertauschen, und da wir mit der selben Argumentation wie oben, $f \in L^1$, $\varphi \in \mathcal{S}$ und Stetigkeit der Integrale[24] auch die Integrationen und die Limesbildung vertauschen können, erhalten wir mit den obigen Ergebnis (7.47):

$$
\begin{aligned}
\lim_{\gamma\to 0} \langle f_\gamma, \varphi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x) \left(\lim_{\gamma\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, F_\gamma(x-y)\ \varphi(x) \right) \\
= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\ \varphi(x)\ dx &= \langle f, \varphi \rangle \quad . \qquad (7.49)
\end{aligned}
$$

Übrigens gilt sogar $\varphi_\gamma \to \varphi$ für $\gamma \to 0$ im Sinne der Konvergenz in $\mathcal{S}$. Um dieses zu sehen, betrachten wir für beliebige Paare p, q, wobei p und q ganzzahlig seien:

$$
\begin{aligned}
\left| x^q D_x^p \left(\varphi_\gamma(x) - \varphi(x) \right) \right| &= \left| x^q D_x^p \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(y)\,[\varphi(x-y)-\varphi(y)]\ dy \right| \\
&= \left| \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\,[x^q D_x^p\,[\varphi(x-\gamma t)-\varphi(x)]]\ dt \right| \\
&\le \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\,|x^q D_x^p\,[\varphi(x-\gamma t)-\varphi(x)]|\ dt \quad . \qquad (7.50)
\end{aligned}
$$

[24] Die Integrale sind mindestens bis auf eine Menge vom Lebesgues Maße Null stetig, und es gelte, zur Erinnerung, hier sogar noch $f \in L^1_{LOC}$.

Per definitionem des Raums $\mathcal{S}$, ist nun der Integrand für jedes p,q-Paar stetig, fällt für $|t| \to \infty$ überpolynomial ab, und wir können wiederum die Integration und den Limes $\gamma \to 0^+$ vertauschen, so daß wir letztendlich

$$\lim_{\gamma \to 0} \left\| x^q D_x^p \left(\varphi_\gamma(x) - \varphi(x) \right) \right\|_\infty = 0 \tag{7.51}$$

erhalten, also die Konvergenz in $\mathcal{S}$.

Wir haben bisher gezeigt, daß die Eigenschaften I bis V notwendige Eigenschaften einer Mollifier-Funktion F_γ sind, soweit wir nur die durch diese dargestellte reine Regularisierung betrachten. Die weiteren (notwendigen) Eigenschaften können wir jetzt, zumindest auf einer Metaebene, sofort angeben, da diese zum einen direkt aus der Definition der Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ und F_γ und zum anderen aus dem Postulat 3 folgen. In der Tat haben wir diese Eigenschaften bereits angegeben und wollen diese nun wiederholen:

VI) Die stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ ist die Integraltransformierte der Mollifier-Funktion F_γ.

VII) Bezeichnen wir mit $\tilde{k}$ die Integraltransformiert des Integralkerns k des Faltungsproblems (7.17), so möge die Funktion

$$\tilde{\Phi}_\gamma = \frac{\tilde{F}_\gamma}{\tilde{k}} \tag{7.52}$$

für alle $\gamma > 0$ die Bedingungen eines Faltungssatzes genügen.

Offensichtlich: Die Eigenschaft VI gilt per definitionem[25] und die Eigenschaft VII ist nichts anderes als der Inhalt des Postulates 3, wobei beide Bedingungen jetzt je nach anzuwendendem Regularisierungsverfahren konkretisiert werden müssen, wobei wir natürlich auch mit einer Ergänzung der bereits aufgestellten Eigenschaften rechnen müssen.

7.2.1 Filter der Fourier-Transformation

Als erstes wollen wir, quasi als ein „einfaches“ Beispiel, um das weitere Vorgehen zu demonstrieren, Alternativen zu den Bedingungen $1_{\tilde{F}}$) - $8_{\tilde{F}}$) der Filter des Regularisierungsverfahrens (5.47) herleiten[26].

Die Eigenschaften I bis VI können wir, letztlich, wie sich gleich zeigen wird, aufgrund der Wahl des Raums $\mathcal{S}$ als Grundfunktionenraum direkt übernehmen. Aus den allgemeinen Eigenschaften und Rechenregeln der Fourier-Transformation, die beispielsweise in [Doe71, Tit67, EMOT54] detailiert dargelegt sind, und daraus, daß, wie bereits erwähnt, der Operator der Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ ein Automorphismus in $\mathcal{S}$ ist[27], lassen sich direkt die folgenden Eigenschaften des Filters $\tilde{F}_\gamma$ herleiten:

(a) Da gemäß der Eigenschaft I $F_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ gelte, folgt unmittelbar, daß das Filter $\tilde{F}_\gamma$ ebenso eine Grundfunktion für alle $\gamma > 0$ ist: $\tilde{F}_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$.

(b) Aus der Eigenschaft IV, F_γ sei eine gerade Funktion, und den allgemeinen Eigenschaften des Operators $\mathcal{F}$ folgt:

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \tilde{F}_\gamma(-\omega) \quad \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad ; \tag{7.55}$$

[25] siehe Gleichungen (5.59) und 5.59 des Abschnitts 5.3.3

[26] Im diesem Abschnitt soll die Variable im Originalraum mit t und die Variable im Fourier-Raum mit ω bezeichnet werden, und wir wollen hier die Fourier-Transformation in der der zweiseitigen (Fourier-)Laplace-Transformation analogen Gestalt

$$\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{-i\omega t}\, dt \tag{7.53}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega \tag{7.54}$$

verwenden.

[27] siehe Satz B.10 des Anhangs B.4.4

$\tilde{F}_\gamma$ ist also eine *gerade* Funktion bezüglich des Arguments ω.

(c) Es gilt, aufgrund der Einbettung $\mathcal{S} \subset L^2$:

$$\tilde{F}_\gamma \in L^2 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.56}$$

(d) Es gilt der Limes:

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \tilde{F}_\gamma(\omega) \quad = \quad 1 \quad \text{bzw.} \tag{7.57}$$

$$\tilde{F}_{\gamma=0}(\omega) \quad \equiv \quad 1 \quad . \tag{7.58}$$

Die Gültigkeit der Eigenschaften (a) bis (c) für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ läßt sich übrigens folgendermaßen zeigen: Bezüglich der Fourier-Transformation gilt:

$$f(at) \quad (a > 0) \quad \overset{\mathcal{F}}{\longleftrightarrow} a^{-1} \tilde{f}(a^{-1}\omega) \quad . \tag{7.59}$$

Da nun aufgrund der Eigenschaft V (Gl. 7.20)

$$F_\gamma(x) = \gamma^{-N} F\left(\frac{x}{\gamma}\right) \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.60}$$

wobei $F \in \mathcal{S}$ eine feste Funktion sei, gelte, aus den Eigenschaften der Fourier-Transformation unmittelbar analoge Eigenschaften zu (a) bis (c) für die Fouriertransformierten $\tilde{F}$ der Funktion F folgen, also

(a') $\tilde{F} \in \mathcal{S}$ (Automorphismus der Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$),

(b') $\tilde{F}(\omega) = \tilde{F}(-\omega)$,

(c') $\tilde{F} \in L^2$,

gilt, ergibt sich aus all dem zusammengefaßt die Gültigkeit der Eigenschaften (a) bis (c) für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$.

Der **Beweis** der Eigenschaft (d) sieht nun so aus:
Es sei $\varphi \in \mathcal{S}$, $F_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ und $f \in \mathcal{S}$ fest. Desweiteren gelte

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \langle F_\gamma, \varphi \rangle = \langle \delta, \varphi \rangle \quad . \tag{7.61}$$

Betrachten wir nun die Fouriertransformierte $\mathcal{F} F_\gamma = \tilde{F}_\gamma$, wobei wir bereits aufgrund des Automorphismusens der Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ wissen, daß dann ebenso $\tilde{F}_\gamma \in \mathcal{S}$ gilt. Genauer wollen wir die Fouriertransformierte der Distribution $F_\gamma \in \mathcal{S}'$, gemäß Definition B.18, betrachten. Wir wissen bereits aus der Theorie der Distributionen[BB93, Bre65, Wal94]:

$$\langle \mathcal{F}\delta, \varphi \rangle = \langle 1, \varphi \rangle \quad . \tag{7.62}$$

Betrachten wir also

$$\lim_{\gamma \to 0} \langle \mathcal{F} F_\gamma, \varphi \rangle \quad = \quad \lim_{\gamma \to 0} \langle F_\gamma, \mathcal{F}\varphi \rangle \tag{7.63}$$

$$= \quad \lim_{\gamma \to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \varphi(\omega)\, d\omega \right) dt \tag{7.64}$$

$$= \lim_{\gamma\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right)\, dt \right) \varphi(\omega)\, d\omega \tag{7.65}$$

$$= \lim_{\gamma\to 0} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}(\gamma\omega)\, \varphi(\omega)\, d\omega \quad , \tag{7.66}$$

wobei Gleichungen (7.63) und (7.64) nichts weiter als die Definition der Fourier-Transformation einer temperierten Distribution sind[28], wir in Gleichung (7.64) offensichtlich wiederum die Darstellung (7.20) respektive Eigenschaft V der Mollifier-Funktion F_γ angewandt haben, und die Gleichungen (7.65) und (7.66) direkt aus der Vertauschbarkeit der Integrationsreihenfolge, alle in den Integranden stehenden Funktionen sind Elemente $\mathcal{S}$, folgen, wobei wir in der Gleichung (7.66) noch zusätzlich die (Transformations-)Eigenschaft (7.59) der Fourier-Transformation berücksichtigt haben; es gilt somit für das Filter die Darstellung:

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \tilde{F}(\gamma\omega) \quad . \tag{7.67}$$

Wiederum können wir jetzt in (7.66) die Integration und die Limesbildung aufgrund der allgemeinen Eigenschaften der Elemente in $\mathcal{S}$ vertauschen, so daß wir als Zwischenergebnis

$$\begin{aligned} \lim_{\gamma\to 0} \left\langle \mathcal{F} F_\gamma, \varphi \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\gamma\to 0} \tilde{F}(\gamma\omega)\, \varphi(\omega)\, d\omega \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}(0)\, \varphi(\omega)\, d\omega \end{aligned} \tag{7.68}$$

erhalten. Wir können nun $\tilde{F}(0)$ mit Hilfe der Fourier-Transformation ausrechnen, denn $\tilde{F}(0)$ ist die „nullte Fourierkomponente“ der Funktion F:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(0) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}\, \gamma^{-1}\, F\left(\frac{t}{\gamma}\right)\, dt \Bigg|_{\omega=0} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \gamma^{-1}\, F\left(\frac{t}{\gamma}\right)\, dt = 1 \quad , \end{aligned} \tag{7.69}$$

denn gemäß der Eigenschaft III sei die Mollifier-Funktion F_γ auf Eins normiert, und so erhalten wir abschließend das zu zeigende:

$$\lim_{\gamma\to 0} \left\langle \mathcal{F} F_\gamma, \varphi \right\rangle = \langle 1, \varphi \rangle \quad \text{und} \tag{7.70}$$

$$\tilde{F}_{\gamma=0}(\omega) \equiv 1 \quad . \tag{7.71}$$

Wir können sogar noch mehr über die Funktion $\tilde{F}_\gamma$ aussagen:

(a2) Ist jetzt $F_\gamma \in \mathcal{D}$ und supp $F_\gamma \subset \bar{B}_{R_\gamma}$, so gilt der Satz von PALYE-WIENER[29], d.h. konkret:
$\tilde{F}_\gamma(\omega)$ ist für alle $\gamma > 0$ eine ganze Funktion mit der Eigenschaft, daß zu jedem (Multi-)Index p ein $C_p^\gamma > 0$ mit

$$\left| z^p \tilde{F}_\gamma(z) \right| \le C_p^\gamma\, e^{R_\gamma |\eta|} \quad (z = \omega + i\eta) \tag{7.72}$$

existiert.

[28] siehe Definition B.18 des Anhanges B.4.4.2

[29] siehe Satz B.12 des Anhangs B.4.4.3 und [BB93, Wal94]; mit $\bar{B}_r$ wird die abgeschlossene Kugel im $\mathbb{R}^N$ mit Radius r bezeichnet.

Kommen wir nun zu der konkretisierten Version der aus dem Postulat 3 folgenden Eigenschaft VII im Gewandt des auf der Fourier-Transformation basierenden Regularisierungsverfahrens (5.47):

VII) Mit $\tilde{k}$ sei die Fouriertransformierte des Integralkerns k der Faltungsgleichung (7.17) bezeichnet. Es gelte dann:

$$\tilde{\Phi}_\gamma(\omega) := \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \in L^2 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.73}$$

Nach all den Voruntersuchungen und -betrachtungen, können wir nun für die Filter des Regularisierungsverfahrens (5.47) den folgenden Satz beweisen:

Satz 7.2
Weist eine Funktion F_γ und deren Fouriertransformierte $\tilde{F}_\gamma$ die obigen Eigenschaften I bis VII auf, also konkret

I) $F_\gamma \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right) \quad \forall\, \gamma > 0, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

II) $F_\gamma(x) \geq 0 \quad \forall\, x \in \mathbb{R}^N, \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

III) $\int\limits_{\mathbb{R}^N} F_\gamma(x)\, dx = 1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

IV) F_γ *ist für alle* $\gamma > 0$ *eine gerade Funktion:* $F_\gamma(x) = F_\gamma(-x)$,

V) $F_\gamma(x) = \gamma^{-N} F\left(\frac{x}{\gamma}\right), \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, *wobei* $F \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right)$ *eine feste Funktion sei,*

VI) Die stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ ist die Integraltransformierte der Mollifier-Funktion F_γ,

VII) Mit $\tilde{k}$ sei die Fouriertransformierte des Integralkerns k der Faltungsgleichung (7.17) bezeichnet. Es gelte dann:

$$\tilde{\Phi}_\gamma(\omega) := \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \in L^2 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.74}$$

so ist der durch

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\, \tilde{g}(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega \tag{7.75}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\, \tilde{g}(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega \tag{7.76}$$

definierte Operator T_γ ein Regularisierungs-Operator der Integralgleichung (7.17) vom Faltungstypus, und die durch

$$f_\gamma = T_\gamma g \tag{7.77}$$

definierte Funktion ist eine regularisierte Lösung des schlecht gestellten Problems (7.17), wobei mit $\tilde{g}$ die Fouriertransformierte der vorgegebenen Funktion (Daten) g ist. Die regularisierte Lösung f_γ können wir dann unter Anwendung des Faltungssatzes (der Fourier-Transformation) durch

$$f_\gamma(t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-\tau)\, g(\tau)\, d\tau \quad , \tag{7.78}$$

wobei Φ_γ durch

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\, e^{i\omega t}\, d\omega \tag{7.79}$$

gegeben ist, darstellen.

Es folgt nun quasi der Rest des **Beweises** des obigen Satzes 7.2:
Die Darstellung (7.78)

$$f_\gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-\tau)\, g(\tau)\, d\tau \quad , \tag{7.80}$$

ist sofort einzusehen, denn die Eigenschaft VII gibt gerade die Bedingungen des Faltungssatzes der Fourier-Transformation wieder [Doe71, Tit67], und wir haben bei der Lösung der Faltungsgleichung (7.17) vermöge der Fourier-Transformation implizit vorausgesetzt, daß g respektive $\tilde{g}$ den Voraussetzungen des Faltungssatzes genüge, denn wir müssen hierbei die eineindeutige Zuordnung der Funktionen g und $\tilde{g}$ vermöge der Fourier-Transformation fordern. Ebenso wissen wir aus der Theorie der Fourier-Transformation, daß das Urbild Φ_γ der Transformierten $\tilde{\Phi}_\gamma$, so $\tilde{\Phi}_\gamma \in L^2$ für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ gilt, durch

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\, e^{i\omega t}\, d\omega \tag{7.81}$$

gegeben ist, und die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ tatsächlich die Fouriertransformierte der Funktion Φ_γ ist,

$$\tilde{\Phi}_\gamma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t)\, e^{-i\omega t}\, dt \quad , \tag{7.82}$$

und daß desweiteren $\Phi_\gamma \in L^2 \; \forall \, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ gilt [Doe71, Tit67]. Die Zuordnung der Funktionen Φ_γ und $\tilde{\Phi}_\gamma$ vermöge der Fourier-Transformation ist dann wiederum eineindeutig [Doe71, Tit67].

Die Konvergenz der regularisierten f_γ gegen die theoretische, exakte Lösung f_T bei exakt bekannten vorgegebenen Funktion g_T, also der Limes $\gamma \to 0$, haben wir bereits gezeigt. Es sei darauf hingewiesen, daß approximative Daten g^ε stets $\gamma > 0$ implizieren, und per definitionem des Regularisierungsoperators und des Regularisierungsparameters[30] die Limites $g^\varepsilon \to g_T$, $\varepsilon \to 0$ einerseits und $\gamma \to 0$ bei der Kenntnis der exakten, theoretischen Vorgegebenen g_T andereseits de facto äquivalent sind [AT77, Lou89].

Wir können sogar, bei der Gültigkeit der Eigenschaften I bis VII des obigen Satzes, die Stetigkeit des durch diese gegebenen Regularisierungsoperators respektive Regularisierungsverfahrens T_γ bezüglich der Supremumsnorm zeigen:
Es sei im weiteren dieses Beweises[31] $g_1, g_2 \in L^2$. Betrachten wir die Differenz

$$\begin{aligned} T_\gamma \Delta g(t) &= T_\gamma(g_1(t) - g_2(t)) && (7.83)\\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \, [\tilde{g}_1(\omega) - \tilde{g}_2(\omega)] \, e^{i\omega t}\, d\omega && (7.84)\\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(\omega) \, [\tilde{g}_1(\omega) - \tilde{g}_2(\omega)] \, e^{i\omega t}\, d\omega \quad . && (7.85) \end{aligned}$$

Der Betrag dieser Differenz ist durch

$$|T_\gamma \Delta g(t)| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\right| \; |[\tilde{g}_1(\omega) - \tilde{g}_2(\omega)]| \; d\omega \tag{7.86}$$

abschätzbar. Wenden wir jetzt die HÖLDER'sche Ungleichung an [Wer95, Doe71], so erhalten wir

$$|T_\gamma \Delta g(t)| \leq \frac{1}{2\pi} \left\|\tilde{\Phi}_\gamma\right\|_{L^2} \; \|g_1 - g_2\|_{L^2} \quad . \tag{7.87}$$

[30] siehe Definition 4.5 des Abschnitts 4.2.4 und [AT77, Lou89]

[31] Dieses ist eine (mögliche) Voraussetzung an die Vorgegebenen g, um die Faltungsgleichung (7.17) im Fourier-Raum durch $\tilde{g} = \tilde{k}\tilde{f}$ darstellen zu können.

Die Forderung VII stellt nun die Existenz der Norm $\left\| \frac{\tilde{F}_\gamma}{k} \right\|_{L^2} = \left\| \tilde{\Phi}_\gamma \right\|_{L^2}$ für alle $\gamma > 0$ sicher, und wir wollen diese in Abhängigkeit von den Parameter γ mit $\phi(\gamma)$ bezeichnen:

$$\phi(\gamma) = \left\| \tilde{\Phi}_\gamma \right\|_{L^2} \quad . \tag{7.88}$$

Bezüglich der Differenz der Funktionen g_1 und g_2 gelte nun, gemessen in der L^2-Norm:

$$\|g_1 - g_2\| \leq \varepsilon \quad . \tag{7.89}$$

Gemäß der Parsevalschen Formel [Doe71, Tit67] gilt bekanntlich:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{g}(\omega)|^2 \, d\omega = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |g(t)|^2 \, dt \quad , \tag{7.90}$$

womit also

$$|T_\gamma \Delta g(t)| \leq \left\| \tilde{\Phi}_\gamma \right\|_{L^2} \varepsilon = \phi(\gamma) \, \varepsilon \tag{7.91}$$

folgt, und daraus wiederum folgt die Stetigkeit des Operators T_γ in der Supremumsnorm bezüglich der Vorgegebenen g für alle $\gamma > 0$.

Es gilt sogar noch mehr, denn betrachten wir die Fouriertransformierte $\Delta \tilde{f}_\gamma$ der Differenz der Regularisierten, per definitionem des Regularisierungsverfahrens durch

$$\Delta \tilde{f}_\gamma(\omega) = \tilde{\Phi}_\gamma(\omega) \; [\tilde{g}_1(\omega) - \tilde{g}_2(\omega)] \tag{7.92}$$

gegeben, so folgt aus $\tilde{\Phi}_\gamma \in L^2 \; \forall \, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ und $\tilde{g}_{1,2} \in L^2$ unmittelbar

$$\Delta \tilde{f}_\gamma \in L^2 \; \forall \, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.93}$$

Gehen wir jetzt analog zur obigen Betrachtung vor, konkret wenden wir die HÖLDER'sche Ungleichung und das Parsevalsche Theorem an, so erhalten wir die Abschätzung

$$\|T_\gamma \Delta g\|_{L^2} = \|\Delta \tilde{f}_\gamma\|_{L^2} \leq \left\| \tilde{\Phi}_\gamma \right\|_{L^2} \varepsilon = \phi(\gamma) \, \varepsilon \quad , \tag{7.94}$$

woraus die Stetigkeit des Operators T_γ in der L^2-Norm folgt.

Desweiteren läßt sich noch zeigen: Gilt $g_1, g_2 \in L^1$, so können wir aufgrund der Eigenschaft VII ebenso einen Faltungssatz (der Fourier-Transformation) anwenden [Doe71, Tit67], so daß wir jetzt

$$T_\gamma \Delta g(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t - \tau) \, [g_1(\tau) - g_2(\tau)] \; d\tau \tag{7.95}$$

erhalten, wobei

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(\omega) \, e^{i\omega t} \, d\omega \tag{7.96}$$

sei. Mit der Eigenschaft (ix) der Faltung, welche wir im Anhang B.4.1 angegeben haben, folgt nun:

$$\|T_\gamma \Delta g\|_{L^2} \leq \phi(\gamma) \; \|g_1 - g_2\|_{L^1} \quad , \tag{7.97}$$

woraus sich ebenso die Stetigkeit des Operators T_γ für $\gamma > 0$ ergibt.

7.2.2 Filter der Fourier-Laplace Transformation

Wenden wir uns jetzt den uns besonders interessierenden Fall der stabilisierenden Funktionen für das, auf der Fourier-Laplace Transformation basierende, Regularisierungsverfahren (5.49) zu, welches wir hier in dem Gewandt der zweiseitigen Laplace-Transformation[32] betrachten wollen:

$$f_\gamma(t) = T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s)\frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)}\, e^{st}\, ds \tag{7.98}$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \quad . \tag{7.99}$$

Wie wir bereits im vorangegangenen Abschnitt 7.2.1 erwähnt haben, gilt, falls $F_\gamma \in \mathcal{D}$ und supp $F_\gamma \subset \bar{B}_{R_\gamma}$ erfüllt ist, der Satz von PALYE-WIENER[33], d.h. die Fourier-Laplacetransformierte $\tilde{F}_\gamma$ ist exponentiell abschätzbar und der Raum aller $F_\gamma \in \mathcal{D}$ mit supp $F_\gamma \subset \bar{B}_{R_\gamma}$ wird bijektiv auf den Raum aller ganzen holomorphen Funktionen $\tilde{F}_\gamma(s)$ abgebildet. Greifen wir nun auf die Theorie der zweiseitigen Laplace-Transformation[34] zurück, so können wir die obigen Voraussetzungen des Satzes von PALYE-WIENER entschärfen und trotzdem analoge Aussagen treffen.

Es sei $F_\gamma \in \mathcal{S}$ und F_γ genüge einer Exponentialabschätzung, genauer soll $F_\gamma \in \mathcal{S}$ für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ der Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ der in einem *Horizontalstreifen* $\eta_1^\gamma \le \eta \le \eta_2^\gamma$, mit $t = \xi + i\eta$, analytischen Funktionen $F_\gamma(t)$, die einer Exponentialabschätzung der konkreten Form

$$\left|F_\gamma(t)\right| \le C_\gamma\, e^{x_1^\gamma \xi} \quad \text{für } \xi \ge 0 \quad , \tag{7.100}$$

$$\left|F_\gamma(t)\right| \le C_\gamma\, e^{x_2^\gamma \xi} \quad \text{für } \xi < 0 \quad , \tag{7.101}$$

wobei $x_1^\gamma < x_2^\gamma$ sei, genügen, angehören. Durch die *verallgemeinerte zweiseitige Laplace-Transformation*

$$\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)} F_\gamma \equiv \int_{\infty+i\eta}^{-\infty+i\eta} F_\gamma(t)\, e^{-st}\, dt \quad (\eta_1^\gamma \le \eta \le \eta_2^\gamma) \tag{7.102}$$

wird aus jedem F_γ der Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ eine von η unabhängige Funktion $\tilde{F}_\gamma$ der Klasse $\mathfrak{a}_{II}$ erzeugt, aus der wiederum F_γ durch die komplexe Umkehrformel

$$\mathfrak{L}_{II}^{-1(\eta)} \tilde{F}_\gamma = F_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s)\, e^{st}\, ds \quad (x_1^\gamma < x < x_2^\gamma) \tag{7.103}$$

gewonnen werden kann, konkret wird durch die *komplexe Umkehrformel* aus jeder Funktion $\tilde{F}_\gamma$ der Klasse $\mathfrak{a}_{II}$ die von x unabhängige Funktion F_γ der Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ erzeugt [Doe71].

Die Klasse $\mathfrak{a}_{II}$ ist ihrerseits definiert als die Klasse der in einem *Vertikalstreifen* $x_1^\gamma \le x \le x_2^\gamma$ $(s = x + iy)$ analytischen Funktionen $\tilde{F}_\gamma$, die einer Exponentialabschätzung der folgenden Form genügen:

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \le C_\gamma\, e^{\eta_1^\gamma y} \quad \text{für } y \ge 0 \quad , \tag{7.104}$$

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \le C_\gamma\, e^{\eta_2^\gamma y} \quad \text{für } y < 0 \quad , \tag{7.105}$$

[32] Nochmaliger Hinweis: Die Begriffe „Fourier-Laplace Transformation“ und „zweiseitige Laplace-Transformation“ sind hier Synonyme.

[33] siehe Satz B.12 des Anhangs B.4.4.3 und [BB93, Wal94]; mit $\bar{B}_r$ wird die abgeschlossene Kugel im $\mathbb{R}^N$ mit Radius r bezeichnet.

[34] Eine immer noch hervorragende Darstellung der Theorie der (zweiseitigen) Laplace-Transformation bieten die Bücher von DOETSCH [Doe71, Doe72, Doe73], wobei wir aber ebenso noch auf [Tit67] verweisen wollen.

wobei $\eta_1^\gamma < \eta_2^\gamma$ gelte.

Es kann nun gezeigt werden, daß die Zuordnung jeder Funktion $F \in \mathfrak{A}_{II}$ vermöge der (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformation (7.102) - und deren komplexen Umkehrformel (7.103) - zu einer Funktion $\tilde{F} \in \mathfrak{a}_{II}$ eineindeutig ist; mit anderen Worten wird die Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ vermöge der zweiseitigen Laplace-Transformation bijektiv auf die Klasse $\mathfrak{a}_{II}$ abgebildet.

Die Konsequenz des eben dargelegten, in Hinblick darauf, daß die Funktionen F_γ und $\tilde{F}_\gamma$ vermöge der hier verwendeten zweiseitigen Laplace-Transformation eineindeutige einander zugeordnet sind, ist also, daß wir die Eigenschaft I der Mollifier-Funktion in der folgenden naheliegenden Art und Weise abändern werden[35]:

I) Wenden wir die (verallgemeinerte) zweiseitige Laplace-Transformation an, also das Verfahren (7.99), so gelte für die Mollifier-Funktion F_γ:

$$F_\gamma \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.106}$$

Dem entsprechend ändern wir die Eigenschaft V folgendermaßen ab:

V) $F_\gamma(t) = \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right), \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, wobei $F \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$ eine feste Funktion sei.

Der Satz 7.1, die die Eigenschaften I bis V besitzende Mollifier-Funktion ist eine Approximation der Delta-Funktion, gilt natürlich weiterhin.

Noch eine Bemerkung zu der modifizierten Eigenschaft I: Handelt es sich bei der Variablen t im (ursprünglichen) Problem um eine reelle Größe, gilt also $t \in \mathbb{R}^N$ bzw. $t \in \mathbb{R}$, so bedeutet dieses offensichtlich für die Eigenschaft $F_\gamma \in \mathfrak{A}_{II}$:
Die Funktion $F_\gamma(t)$, $t = \xi + i\eta$, ist für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ eine in einem die reelle t-Achse einschließenden Horizontalstreifen

$$\eta_1^\gamma \le \eta \le \eta_1^\gamma \quad , \qquad \eta_1^\gamma \le 0 \le \eta_1^\gamma$$

analytische Funktion, die einer Exponentialabschätzung der Form (7.100) und (7.101) genüge.

Es ist klar, daß die, per definitionem der Mollifier-Funktion, gegebene Eigenschaft VI jetzt die folgende Form annimmt:

VI) Die stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ ist die (verallgemeinerte) zweiseitige Laplacetransformierte der Mollifier-Funktion F_γ: $\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)} F_\gamma = \tilde{F}_\gamma$.

Aus den derart modifizierten Eigenschaften I bis VI und der Theorie der (verallgemeinerten zweiseitigen) Laplace-Transformation lassen sich jetzt folgende Eigenschaften der Funktion $\tilde{F}_\gamma$ ableiten:

(a) Die Funktion $\tilde{F}_\gamma(s)$ ist, für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, (zumindest) in einem Vertikalstreifen

$$x_1^\gamma \le x \le x_2^\gamma \quad (s = x + iy)$$

eine analytische Funktion.

(b) Es gilt: $\tilde{F}_\gamma(s) = \tilde{F}_\gamma(-s)\ \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$.

[35] Bemerkung: Nicht jede Funktion $\varphi \in \mathcal{S}$ genügt einer Exponentialabschätzung. Um dieses zu sehen, betrachte man folgendes: Es sei $\varphi \in \mathcal{S}$ und asymptotisch gelte: $\varphi \sim \frac{1}{x^{\ln x}}$ für $|x| \to \infty$. Somit fällt φ für $|x| \to \infty$ stärker ab als jede Potenz $1/|x|^m$. Desweiteren können wir schreiben: $\varphi \sim \frac{1}{x^{\ln x}} = e^{-(\ln x)^2}$. Es gilt, aufgrund den Eigenschaften der ln-Funktion: $\ln^2 x \le ax$ mit einer geeigneten Konstanten a. Daraus folgt: $e^{-(\ln x)^2} \ge e^{-ax}$; also muß eine Funktion $\varphi \in \mathcal{S}$ nicht unbedingt einer Exponentialabschätzung genügen.

(c) Es ist: $\tilde{F}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$. Aufgrund der Konvergenz des Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} |F_\gamma(t)|^2\, dt \quad , \tag{7.107}$$

denn es gelte gemäß der Eigenschaft I $F_\gamma \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II} \quad \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, folgt aus dem Parsevalschen Theorem[36] der (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformation:

$$\tilde{F}_\gamma(x_0 + iy) \in L^2(x_0 - i\infty, x_0 + i\infty) \quad , \tag{7.108}$$

wobei $x_1^\gamma \leq x_0 \leq x_2^\gamma$ ist.

(d) Es gilt der Limes:

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \tilde{F}_\gamma(s) \quad = \quad 1 \quad \text{bzw.} \tag{7.109}$$

$$\tilde{F}_{\gamma=0}(s) \quad \equiv \quad 1 \quad . \tag{7.110}$$

Um einzusehen, daß die Eigenschaften (a) bis (c), und zwar für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, gelten, betrachten wir folgendes:
Vorangestellt sei, daß bezüglich der (zweiseitigen) Laplace-Transformation, analog zur Fourier-Transformation, die „Transformationsregel“

$$f(at) \quad (a > 0) \quad \overset{\mathfrak{L}_{II}^{\eta}}{\longleftrightarrow} a^{-1} \tilde{f}(a^{-1}s) \quad . \tag{7.111}$$

gilt. Gemäß der Eigenschaft V sei F_γ durch

$$F_\gamma(t) = \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right)$$

gegeben, wobei, nach Voraussetzung, $F \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$ sei. Aus der allgemeinen Theorie der (zweiseitigen) Laplace-Transformation folgen nun mit diesen Eigenschaften unmittelbar analoge Aussagen zu denen von (a) bis (c) für die Laplacetransformierten $\tilde{F}$ der Funktion F, als da wären:

(a') Aus $F \in \mathfrak{A}_{II}$ folgt sofort: $\tilde{F} \in \mathfrak{a}_{II}$ und $\tilde{F}$ ist (zumindest) in einem Vertikalstreifen $x_1 \leq x \leq x_2$ $(s = x + iy)$ eine analytische Funktion und die Zuordnung $F \overset{\mathfrak{L}_{II}}{\longleftrightarrow} \tilde{F}$ - vermöge der zweiseitigen Laplace-Transformation - ist eineindeutig.

(b') Da F eine gerade Funktion sein soll (Eigenschaft IV), folgt aus der Definition (7.102) der zweiseitigen Laplace-Transformation: $\tilde{F}(s) = \tilde{F}(-s)$.

(c') Aus der Konvergenz des Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t}\ |F(t)|^2\, dt \quad , \tag{7.112}$$

es gelte $F \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$, folgt aus dem Parsevalschen Theorem der (zweiseitigen) Laplace-Transformation unmittelbar:

$$\tilde{F}(x_0 + iy) \in L^2(x_0 - i\infty, x_0 + i\infty) \quad , \tag{7.113}$$

wobei $x_1 \leq x_0 \leq x_2$ ist.

[36] Das *Parsevalsche Theorem der (zweiseitigen) Laplace-Trasnformation* wird detailiert in [Doe71, Tit67] besprochen; für die *Parsevalsche Formel* des Theorems siehe hier nachfolgende Gleichung 7.128.

Offensichtlich folgen dann die Eigenschaften (a) bis (c), unter Berücksichtigung der Transformationseigenschaft (7.111), direkt aus (a') bis (c').

Wir müssen jetzt noch die Eigenschaft (d) beweisen:
Mit der Rechenregel (7.111) und der Eigenschaft V (Gleichung (7.20)) erhalten wir für die Laplacetransformierte $\tilde{F}_\gamma$ die konkrete Darstellung:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_\gamma(s) &= \int_{-\infty}^{\infty} \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right) e^{-st}\, dt \\ &= \tilde{F}(\gamma s) \quad . \end{aligned} \tag{7.114}$$

Der Fall $\gamma = 0$ ist also gemäß obiger Gleichung (7.114) mit den Fall $\tilde{F}(0)$ identisch, welcher durch

$$\tilde{F}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\, dt$$

gegeben ist. Mit der Eigenschaft III, der Normierung der Funktion F_γ, folgt daraus:

$$\tilde{F}(0) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\, dt = 1 \quad . \tag{7.115}$$

Damit haben wir

$$\tilde{F}_{\gamma=0}(s) \equiv 1 \tag{7.116}$$

gezeigt.

Für den Limes $\gamma \to 0$ betrachten wir nochmals die $\tilde{F}_\gamma$ erzeugende zweiseitige Laplace-Transformation:

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\, e^{-st}\, dt \tag{7.117}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right) e^{-st}\, dt \tag{7.118}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} F(\tilde{t})\, e^{-\gamma s\tilde{t}}\, d\tilde{t} \quad . \tag{7.119}$$

Gleichung (7.118) ist die Eigenschaft V und um zu Gleichung (7.119) zu gelangen, haben wir die Variablensubstitution $t = \gamma\tilde{t}$ durchgeführt. Die Laplace-Transformation (7.117) konvergiert aufgrund von $F_\gamma \in \mathfrak{A}_{II}$ respektive $\tilde{F} \in \mathfrak{A}_{II}$ für alle γ absolut. Desweiteren gilt, gemäß der Eigenschaft IV:

$$\begin{aligned} F_\gamma(t) &\geq 0 \quad \forall\, t \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad \text{respektive} \\ F(t) &\geq 0 \quad \forall\, t \in \mathbb{R} \quad . \end{aligned}$$

Wir können also in

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \tilde{F}_\gamma(s) = \lim_{\gamma \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} F(\tilde{t})\, e^{-\gamma s\tilde{t}}\, d\tilde{t} \tag{7.120}$$

die Limesbildung und die Integration vertauschen:

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \tilde{F}_\gamma(s) = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{\gamma \to 0^+} F(\tilde{t})\, e^{-\gamma s\tilde{t}}\, d\tilde{t} \quad , \tag{7.121}$$

woraus wiederum die (gleichmäßige) Konvergenz von $\tilde{F}_\gamma$ gegen Eins für $\gamma \to 0^+$ folgt:

$$\lim_{\gamma \to 0^+} \tilde{F}_\gamma(s) = 1 \quad . \tag{7.122}$$

Somit haben wir die Eigenschaft (d) nachgewiesen.

Kommen wir nun zu dem Punkt VII im Gewand des durch (7.98) bzw. (7.98) dargestellten Regularisierungsverfahrens:

VII) Mit $\tilde{k}$ sei die (verallgemeinerte) zweiseitige Laplacetransformierte des Integralkerns k und mit $\tilde{g}$ die Transformierte der Vorgegebenen g des Faltungsproblems (7.17) bezeichnet. Es gelte dann:

(a)

$$\tilde{\Phi}_\gamma(s) := \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \in \mathfrak{a}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.123}$$

Für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ besitze nun $\tilde{\Phi}_\gamma$ und $\tilde{g}$ einen gemeinsamen Vertikalstreifen $x_1^\gamma \le x \le x_2^\gamma$, $\mathfrak{Re}\, s = x$, in dem diese beiden Funktionen analytische Funktionen sind.

Alternativ ist es auch möglich zu fordern:

(b) Es sei

$$\Phi_\gamma \quad \in \quad L^1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.124}$$

$$\mathfrak{L}_{II}\Phi_\gamma \quad = \quad \tilde{\Phi}_\gamma \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.125}$$

d.h. $\tilde{\Phi}_\gamma$ sei die zweiseitige Laplacetransformierte der Funktion $\Phi_\gamma \in L^1$. Weiter konvergiere für (mindestens) ein $\mathfrak{Re}\, s = x_0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_0 t} \left| \Phi_\gamma(t) \right| \, dt \quad , \tag{7.126}$$

die Laplace-Transformation $\mathfrak{L}_{II}\Phi_\gamma = \tilde{\Phi}_\gamma$ konvergiere also für $\mathfrak{Re}\, s = x_0$ absolut, und es möge auch

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left| \Phi_\gamma(t) \right|^2 \, dt \tag{7.127}$$

für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ konvergieren. Entsprechendes erfülle die Funktion g für das gleiche $\mathfrak{Re}\, s = x_0$.

Wichtig ist an dieser Stelle zu erwähnen, daß in der Theorie der zweiseitigen Laplace-Transformation gezeigt werden kann, wenn eine Funktion die Eigenschaften VII.(a) respektive VII.(b) erfüllt, so gilt die *Parsevalsche Formel der (zweiseitigen) Laplace-Transformation*:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \, |\Phi_\gamma(t)|^2 \, dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\Phi}_\gamma(x_0 + iy)|^2 \, dy \quad . \tag{7.128}$$

Die Konsequenz daraus ist also die Notwendigkeit der Gültigkeit von:

$$\tilde{\Phi}_\gamma \in L^2(x_0 - i\infty, x_0 + i\infty) \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.129}$$

Wir können nun den folgenden Satz formulieren:

Satz 7.3
Weist eine Funktion F_γ und deren (Fourier-)Laplacetransformierte $\tilde{F}_\gamma$ die obigen Eigenschaften I bis VII auf, also konkret

I) $F_\gamma \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

II) $F_\gamma(t) \geq 0 \quad \forall\, t \in \mathbb{R},\ \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

III) $\int\limits_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\, dt = 1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$,

IV) F_γ *ist für alle* $\gamma > 0$ *eine gerade Funktion:* $F_\gamma(t) = F_\gamma(-t)$,

V) $F_\gamma(t) = \gamma^{-1} F\left(\frac{t}{\gamma}\right), \quad \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, *wobei* $F \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$ *eine feste Funktion sei,*

VI) Die stabilisierende Funktion $\tilde{F}_\gamma$ *ist die (verallgemeinerte) (Fourier-)Laplacetransformierte der Mollifier-Funktion* F_γ*:* $\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)} F_\gamma = \tilde{F}_\gamma$,

VII) Mit $\tilde{k}$ *sei die (verallgemeinerte) zweiseitige Laplacetransformierte des Integralkerns* k *und mit* $\tilde{g}$ *die Transformierte der Vorgegebenen* g *des Faltungsproblems (7.17) bezeichnet. Es gelte dann:*

(a)

$$\tilde{\Phi}_\gamma(s) := \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \in \mathfrak{a}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{7.130}$$

Für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ *besitze* $\tilde{\Phi}_\gamma$ *und* $\tilde{g}$ *einen gemeinsamen Vertikalstreifen* $x_1^\gamma \leq x \leq x_2^\gamma$, $\mathfrak{Re}\, s = x$, *in dem diese beiden Funktionen analytische Funktionen sind,*

oder dazu alternativ:

(b) Es sei

$$\Phi_\gamma \in L^1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.131}$$

$$\mathfrak{L}_{II}\Phi_\gamma = \tilde{\Phi}_\gamma \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{7.132}$$

d.h. $\tilde{\Phi}_\gamma$ *sei die zweiseitige Laplacetransformierte der Funktion* $\Phi_\gamma \in L^1$*. Weiter konvergiere für (mindestens) ein* $\mathfrak{Re}\, s = x_0$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x_0 t} \left|\Phi_\gamma(t)\right| \, dt \quad , \tag{7.133}$$

die Laplace-Transformation $\mathfrak{L}_{II}\Phi_\gamma = \tilde{\Phi}_\gamma$ *konvergiere also für* $\mathfrak{Re}\, s = x_0$ *absolut, und es konvergiere auch*

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left|\Phi_\gamma(t)\right|^2 \, dt \tag{7.134}$$

für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$*. Entsprechendes erfülle die Funktion* g *für das gleiche* $\mathfrak{Re}\, s = x_0$,

so ist der durch

$$T_\gamma g(t) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \tag{7.135}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, \tilde{g}(s)\, e^{st}\, ds \tag{7.136}$$

definierte Operator T_γ *ein Regularisierungs-Operator der Integralgleichung (7.17) vom Faltungstypus, und die durch*

$$f_\gamma = T_\gamma g \tag{7.137}$$

definierte Funktion ist eine regularisierte Lösung des schlecht gestellten Problems (7.17). Die regularisierte Lösung f_γ können wir dann unter Anwendung des Faltungssatzes der (Fourier)-Laplace-Transformation durch

$$f_\gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-\tau)\, g(\tau)\, d\tau \quad , \tag{7.138}$$

wobei Φ_γ durch

$$\Phi_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, e^{st}\, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, e^{st}\, ds \tag{7.139}$$

gegeben ist, darstellen.

Wir wollen nun den Satz 7.3 beweisen. Dafür setzen wir im allgemein voraus:

- Die Funktionen $k,\ f\,g$ des Faltungsproblems (7.17) mögen die Bedingungen der Faltungssätze der (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformation erfüllen[37].

Konkretisiert bedeutet dieses:

(A) Die Funktionen $k,\ f, g$ mögen zur Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ gehören, so daß also

$$k \in \mathfrak{A}_{II} \quad \overset{\mathfrak{L}_{II}}{\longleftrightarrow} \quad \tilde{k} \in \mathfrak{a}_{II} \quad , \tag{7.140}$$

$$f \in \mathfrak{A}_{II} \quad \overset{\mathfrak{L}_{II}}{\longleftrightarrow} \quad \tilde{f} \in \mathfrak{a}_{II} \quad , \tag{7.141}$$

$$g \in \mathfrak{A}_{II} \quad \overset{\mathfrak{L}_{II}}{\longleftrightarrow} \quad \tilde{g} \in \mathfrak{a}_{II} \tag{7.142}$$

gelte, und $\tilde{k},\ \tilde{f}$ und $\tilde{g}$ mögen einen gemeinsamen Vertikalstreifen $x_1 \le x \le x_2$ besitzen, indem diese analytische Funktionen sind.

Bedeuten diese Forderungen zu große Restriktionen an die Funktionen $k,\ f, g$, so möge aber mindestens folgendes gelten[38]:

(B) Es sei $k \in L^1,\ f \in L^1$ und $g \in L^1$, die (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformationen $\mathfrak{L}_{II}k = \tilde{k},\ \mathfrak{L}_{II}f = \tilde{f}$ und $\mathfrak{L}_{II}g = \tilde{g}$ mögen absolut konvergieren und ebenso mögen die Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2xt}\ |k(t)|^2\ dt \quad , \tag{7.143}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2xt}\ |f(t)|^2\ dt \tag{7.144}$$

$$\text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2xt}\ |g(t)|^2\ dt \tag{7.145}$$

konvergieren und zwar jeweils für das gleiche x, wobei $\mathfrak{Re}\, s = x$ sei.

Der **Beweis** des Satzes 7.3 geht nun wie folgt:
Betrachten wir zuerst

$$f_\gamma(t) \quad = \quad \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s)\, \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)}\, e^{st}\, ds \tag{7.146}$$

[37] Diese Forderungen sind bereits implizit in der Lösbarkeit der Faltungsgleichung durch die $\mathfrak{L}_{II}$-Transformation enthalten.

[38] Die folgenden Voraussetzungen stellen, bezüglich der Gültigkeit der Faltungsätze, die Mindestanforderungen an die Funktionen $k,\ f,\ g$ dar.

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s)\ \tilde{f}(s)\ e^{st}\ ds \quad , \tag{7.147}$$

wobei wir die zur Faltungsgleichung (7.17) im (Fourier-)Laplace-Raum korrespondierende Gleichung

$$\tilde{g}(s) = \tilde{k}(s)\ \tilde{f}(s) \tag{7.148}$$

verwendet haben. Gemäß den Voraussetzungen (A) respektive (B) und den Eigenschaften I und VII konvergieren sowohl $\mathfrak{L}_{II}F = \tilde{F}_\gamma$ als auch $\mathfrak{L}_{II}f = \tilde{f}$ absolut. Die Regularisierte ist per definitionem des Regularisierungsverfahrens im (Fourier-)Laplace-Raum durch

$$\tilde{f}_\gamma(s) = \tilde{\Phi}_\gamma(s)\ \tilde{g}(s) = \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\ \tilde{g}(s) \tag{7.149}$$

gegeben, und $\tilde{\Phi}_\gamma$ und $\tilde{g}$ sind, gemäß VII, in einem gemeinsamen Vertikalstreifen in der $s-$Ebene analytische Funktionen, und also ist $\tilde{f}_\gamma$ in jenem eine analytische Funktion. Anderseits ist aber, wenn wir die Faltungsgleichung (7.148) im (Fourier-)Laplace-Raum berücksichtigen, $\tilde{f}_\gamma$ auch durch

$$\tilde{f}_\gamma(s) = \tilde{F}_\gamma(s)\ \tilde{f}(s) \tag{7.150}$$

gegeben, woraus letztlich sofort die Analytizität der Transformierten $\tilde{F}_\gamma$ und $\tilde{f}$ in einem gemeinsamen Vertikalstreifen, zumindest aber für ein $x_0 = \mathfrak{Re}\, s$, folgt. Wir können also den Faltungssatz anwenden, wodurch wir die schon bekannte Gleichung

$$f_\gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t-t')\ f(t')\ dt' \tag{7.151}$$

erhalten, aus welcher wiederum die Konvergenz - im Sinne der Theorie der Distributionen - der regularisierten f_γ gegen die (exakte) Lösung f für $\gamma \to 0$ folgt[39]:

$$\lim_{\gamma\to 0} f_\gamma = f \quad \text{respektive} \tag{7.152}$$

$$\lim_{\gamma\to 0} \langle f_\gamma, \varphi\rangle = \langle f, \varphi\rangle \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{7.153}$$

Wir wollen nun die Stetigkeit des Regularisierungsverfahrens nachweisen. Dazu betrachten wir, analog wie im vorangegangenen Fall des auf der Fourier-Transformation basierenden Verfahrens, die Differenz

$$T_\gamma \Delta g(t) = T_\gamma(g_1(t) - g_2(t)) \tag{7.154}$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\ [\tilde{g}_1(s) - \tilde{g}_2(s)]\ e^{st}\ ds \tag{7.155}$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\ [\tilde{g}_1(s) - \tilde{g}_2(s)]\ e^{st}\ ds \quad . \tag{7.156}$$

Die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ möge jetzt die Eigenschaft VII.(a) - es sei

$$\tilde{\Phi}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \tag{7.157}$$

und $\tilde{\Phi}_\gamma$, $\tilde{g}_1$ und $\tilde{g}_2$ seien in einem gemeinsamen Vertikalstreifen analytische Funktionen - besitzen. Ist jetzt auch $\tilde{g}_{1,2} \in \mathfrak{a}_{II}$, so können wir den Faltungssatz der (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformation

[39] siehe den diesbezüglichen Beweis im Abschnitt 7.2.1 und es sei ebenso daran erinnert, daß bei der Approximativen g^ε, per definitionem der Regularisierung 4.5, immer $\gamma > 0$ zu gelten habe.

anwenden [Doe71]. Erfüllen g_1 und g_2 die Bedingung (B), dann können wir die Faltungssätze der „normalen“ zweiseitigen Laplace-Transformation anwenden [Doe71, Tit67]. Da $\tilde{\Phi}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II}$ gilt, und somit für deren Urbild $\Phi_\gamma \in \mathfrak{A}_{II}$, erfüllen diese Funktionen offensichtlich die Bedingungen der Faltungssätze. Wir können also die Differenz (7.154) im t-Raum als Faltungsintegral darstellen:

$$T_\gamma \Delta g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-t') \ \left[g_1(t') - g_2(t')\right] \ dt' \quad . \tag{7.158}$$

$T_\gamma \Delta g$ existiert dann, eventuell bis auf eine Menge vom Lebesgues Maße Null, für alle t. Mit $\Phi_\gamma \in \mathfrak{A}_{II} \ \forall \ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ gilt auch $\Phi_\gamma \in L^1 \ \forall \ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, welches eine direkte Konsequenz der Definition der Funktionen-Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ ist [Doe71]. Da wir auch $g_{1,2} \in L^1$ voraussetzen, können wir jetzt $T_\gamma \Delta g$ nach Gleichung (7.158) in der Form[40]

$$\begin{aligned} \|T_\gamma \Delta g\|_{L^1} &\leq \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \ \|g_1 - g_2\|_{L^1} && (7.159)\\ &\leq \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \ \varepsilon && (7.160) \end{aligned}$$

abschätzen, so wir noch $\|g_1 - g_2\|_{L^1} \leq \varepsilon$ voraussetzen. Damit haben wir die Stetigkeit des Regularisierungsverfahrens T_γ, gegeben durch die Gleichungen (7.98) und (7.99), bezüglich der L^1-Norm, gezeigt, wenn die Mollifier-Funktion und deren stabilisierende Funktion die Eigenschaften I bis VII.(a) besitzt.

Nun möge $\tilde{\Phi}_\gamma$ die alternative Eigenschaft VII.(b) besitzen: Es sei $\Phi_\gamma \in L^1$, $\mathfrak{L}_{II}\Phi_\gamma = \tilde{\Phi}_\gamma$ konvergiere für $\mathfrak{Re}\, s = x_0$ und jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ absolut und

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left|\Phi_\gamma(t)\right|^2 \ dt$$

konvergiere für jedes $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$. Sind $\tilde{g}_1, \tilde{g}_2 \in \mathfrak{a}_{II}$ (Bedingung (A)), so ist (implizit) gemäß Voraussetzung VII.(b) $x_1 \leq x_0 \leq x_2$, d.h. $\mathfrak{Re}\, s = x_0$ liege in dem Vertikalstreifen $x_1 \leq x \leq x_2$, in dem die Funktionen $\tilde{g}_1$ und $\tilde{g}_2$ analytische Funktionen sind. Erfüllen g_1 und g_2 die Bedingung (B), so gelte dieses für das gleiche $\mathfrak{Re}\, s = x_0$, was wir ja mit VII.(b) fordern. Es gelten somit die Voraussetzungen eines Faltungssatzes der (zweiseitigen) Laplace-Transformation und wir können die Differenz $T_\gamma \Delta g$ ebenso wieder durch die Faltung (7.158) ausdrücken:

$$T_\gamma \Delta g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\gamma(t-t') \ \left[g_1(t') - g_2(t')\right] \ dt' \quad .$$

Desweiteren sehen wir sofort, daß die so dargestellte Differenz ebenso durch (7.160) abschätzbar ist, woraus wiederum die Stetigkeit des Operators T_γ bezüglich der L^1-Norm folgt.

Wir können das Faltungsintegral (7.158) für $T_\gamma \Delta g$ grundsätzlich auch noch durch

$$\|T_\gamma \Delta g\|_\infty \leq \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \ \|g_1 - g_2\|_\infty \leq \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \ \varepsilon_\infty \tag{7.161}$$

abschätzen, wobei dann offensichtlich $\|g_1 - g_2\|_\infty \leq \varepsilon_\infty$ gelten soll. Hieraus folgt die Stetigkeit des Regularisierungsverfahrens T_γ bezüglich der Supremumsnorm.

Wir haben somit den Satz 7.3 bewiesen.

Aus der Stetigkeit des Regularisierungs-Operators T_γ, bezüglich der L^1- und Supremumsnorm, folgt übrigens unmittelbar dessen Stetigkeit in $\mathcal{S}'$, d.h. es existiert für

$$\left\langle T_\gamma \Delta g, \varphi \right\rangle \quad , \ \varphi \in \mathcal{S} \tag{7.162}$$

[40] siehe die Wiedergabe der allgemeinen Eigenschaften der Faltung im Anhang B.4.1 und diesbezüglich (beispielsweise) auch [Bre65, BB93, Wal94, Wer95]

eine Abschätzung der Form[41]

$$|\left\langle T_\gamma \Delta g, \varphi \right\rangle| \leq \quad \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \, |\langle \Delta g, \varphi \rangle| \quad \leq C_{\Delta g} \, \|\Phi_\gamma\|_{L^1} \, \|\varphi\|^{\mathcal{S}}_{m_{\Delta g}} \quad \text{respektive} \tag{7.163}$$

$$|\left\langle T_\gamma \Delta g, \varphi \right\rangle| = \qquad |\left\langle \Delta f_\gamma, \varphi \right\rangle| \qquad \leq \; C_{\Delta f_\gamma} \|\varphi\|^{\mathcal{S}}_{m_{\Delta f_\gamma}} \quad , \tag{7.164}$$

und zwar für alle $\varphi \in \mathcal{S}$ und $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, wobei $C_{\Delta g} \in \mathbb{R}^+$ und $C_{\Delta f_\gamma} \in \mathbb{R}^+$ Konstante und $m_{\Delta g} \in \mathbb{N}$ und $m_{\Delta f_\gamma} \in \mathbb{N}$ sind.

7.2.3 Filter der Mellin-Transformation

Nachdem wir Filter des auf der zweiseitigen (Fourier-)Laplace-Transformation basierenden Regularisierungsverfahrens abgeleitet haben, können wir nun Eigenschaften der Filter des auf der Mellin-Transformation basierenden Verfahrens (5.50) angeben, welches, zur Erinnerung, durch

$$f_\gamma(z) = T_\gamma g(z) \quad = \quad \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{F}_\gamma(s) \frac{\tilde{g}(s)}{\tilde{k}(s)} \, z^{-s} \, ds \tag{7.165}$$

$$= \quad \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s) \; \tilde{g}(s) \; z^{-s} \, ds \tag{7.166}$$

gegeben ist.

Wir haben bereits des öfteren auf die enge Verwandtschaft zwischen zweiseitiger (Fourier-)Laplace- und Mellin-Transformation hingewiesen. Führen wir in der Definition (7.102) der verallgemeinerten zweiseitigen Laplace-Transformation,

$$\left(\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)} F_\gamma\right)(s) \equiv \int\limits_{\infty+i\eta}^{-\infty+i\eta} F_\gamma(t) \; e^{-st} \, dt \quad ,$$

mit $t = \xi + i\eta$, die Variablensubstitution

$$e^{-t} = z = \rho e^{i\vartheta}, \quad \text{also } e^{-\xi} = \rho, \; -\eta = \vartheta \quad , \tag{7.167}$$

durch, so entspricht dem *Horizontalstreifen* $\eta_1^\gamma \leq \eta \leq \eta_2^\gamma$ der *Winkelraum* $-\eta_2^\gamma \leq \vartheta \leq -\eta_1^\gamma$, oder, wenn wir $\vartheta_1^\gamma = -\eta_2^\gamma$ und $\vartheta_2^\gamma = -\eta_1^\gamma$ setzen, $\vartheta_1^\gamma \leq \vartheta \leq \vartheta_2^\gamma$, wobei der Nullpunkt $z = 0$ eventuell ausgeschlossen sei. Für $\vartheta_1^\gamma - \vartheta_2^\gamma \geq 2\pi$ ist der Winkelraum auf der Riemannschen Fläche des Logarithmus liegend zu denken. Bezeichnen wir die darin definierte Funktion $F_\gamma(-\ln z) = F_\gamma(-\ln\rho - i\vartheta)$ mit $\bar{F}_\gamma(z)$. Dem *Integrationsweg* $-\infty + i\eta \cdots + \infty + i\eta$ entspricht dann, streng genommen, der *Strahl* mit der Amplitude $\vartheta = -\eta$ in der Richtung vom Unendlichen gegen den Nullpunkt. Ersetzen wir noch kurz[42] $\tilde{F}_\gamma$ durch $\tilde{\bar{F}}_\gamma$, so geht die $\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)}$-Transformation in die *verallgemeinerte Mellin-Transformation*

$$\left(\mathfrak{M}^{(\vartheta)} \bar{F}_\gamma\right)(s) \equiv \int\limits_{0}^{\infty(\vartheta)} z^{s-1} \bar{F}_\gamma(z) \, dz = \tilde{\bar{F}}_\gamma(s) \quad , \tag{7.168}$$

über, während die *komplexe Umkehrformel* die Gestalt

$$\bar{F}_\gamma(z) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{x-i\infty}^{x+i\infty} z^{-s} \, \tilde{\bar{F}}_\gamma(s) \, ds \tag{7.169}$$

---

[41] siehe Anhang B.2.2.4 und B.3.2, sowie [BB93, Wal94]

[42] Wir werden, wie bisher, damit es zu keinen Verwechslungen kommt, im folgenden weiterhin allgemein $\tilde{F}_\gamma$ für die Integraltransformierte der Funktion F_γ schreiben.

annimmt. Dabei ist $\arg z = \vartheta$ in dem Winkelraum $\vartheta_1^\gamma \le \vartheta \le \vartheta_2^\gamma$ ein für allemal stetig festzulegen und in (7.168) und (7.169) $z = e^{\ln\rho + i\vartheta}$, also

$$z^{s-1} = e^{(s-1)(\ln\rho + i\vartheta)}, \quad z^{-s} = e^{s(\ln\rho + i\vartheta)} \tag{7.170}$$

zu setzen.

Die Klasse $\mathfrak{A}_{II}$ entspricht nun der Klasse $\mathfrak{B}$, der in einem *Winkelraum* $\vartheta_1^\gamma \le \vartheta \le \vartheta_2^\gamma$ mit eventuellem Ausschluß des Nullpunktes analytischen Funktionen[43] F_γ, die der Potenzabschätzung:

$$\left|F_\gamma(z)\right| \le C_\gamma\, \rho^{-x_1^\gamma} \quad \text{für } \rho \le 1 \quad , \tag{7.171}$$

$$\left|F_\gamma(z)\right| \le C_\gamma\, \rho^{-x_2^\gamma} \quad \text{für } \rho > 1 \quad , \tag{7.172}$$

mit $x_1^\gamma < x_2^\gamma$, genügen.

Dementsprechend entspricht nun die Klasse $\mathfrak{a}_{II}$ der Klasse $\mathfrak{b}$ der in einem *Vertikalstreifen* $x_1^\gamma \le x \le x_2^\gamma$ analytischen Funktionen $\tilde{F}_\gamma$, die der Exponentialabschätzung der Form

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \le C_\gamma\, e^{-\vartheta_1^\gamma y} \quad \text{für } y \ge 0 \quad , \tag{7.173}$$

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \le C_\gamma\, e^{-\vartheta_2^\gamma y} \quad \text{für } y < 0 \quad , \tag{7.174}$$

mit $\vartheta_1^\gamma < \vartheta_2^\gamma$ genügen.

Die via der $\mathfrak{L}_{II}^{(\eta)}$-Transformation vermittelte reziproken Beziehung zwischen den Klassen $\mathfrak{A}_{II}$ und $\mathfrak{a}_{II}$ entspricht nun einer durch die (verallgemeinerten) Mellin-Transformation[44] vermittelten reziproken Beziehung zwischen den Klassen $\mathfrak{B}$ und $\mathfrak{b}$: Wenden wir die verallgemeinerten Mellin-Transformation (7.168) auf eine Funktion $F_\gamma \in \mathfrak{B}$ an, so entsteht eine von ϑ unabhängige Funktion $\tilde{F}_\gamma \in \mathfrak{b}$, aus der wir F_γ durch die komplexe Umkehrformel (7.169) zurückgewinnen können. Wenden wir, von der anderen Seite her betrachtet, die (verallgemeinerte) inverse Mellin-Transformation (7.169) auf eine Funktion $\tilde{F}_\gamma \in \mathfrak{b}$ an, so erhalten wir eine von x unabhängige Funktion $F_\gamma \in \mathfrak{B}$, aus der wir $\tilde{F}_\gamma$ durch die Transformation (7.168) zurückgewinnen können [Doe71, Tit67].

Dieses alles hat nun zur Konsequenz, daß wir über den eleganten Umweg der (verallgemeinerten) zweiseitigen Laplace-Transformation sofort die möglichen Eigenschaften einer Mollifier-Funktion F_γ respektive eines Filters $\tilde{F}_\gamma$ des auf der (verallgemeinerten) $\mathfrak{M}$-Transformation basierende Regularisierungsverfahrens angeben können. Dafür müssen wir nur im Satz 7.3 die Variablensubstitution (7.167) durchführen, anstelle der Klassen $\mathfrak{A}_{II}$ und $\mathfrak{a}_{II}$ die Klassen $\mathfrak{B}$ und $\mathfrak{b}$ betrachten und die $\mathfrak{L}_{II}$-Transformation durch die $\mathfrak{M}$-Transformation ersetzen. Noch einfacher ist es jedoch, den umgekehrten Weg einzuschlagen, und den folgenden, implizit bewiesenen, Satz zu formulieren:

Satz 7.4
Es sei $F_\gamma \in \mathfrak{B}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$. Erfüllt die durch die Variablensubstitution (7.167),

$$e^{-t} = z = \rho e^{i\vartheta}, \quad \textit{also } e^{-\xi} = \rho,\ -\eta = \vartheta \quad ,$$

aus $F_\gamma(z)$ gewonnen Funktion $\mathfrak{F}_\gamma(t)$,

$$F_\gamma(z) \xrightarrow{z=e^{-t}} \mathfrak{F}_\gamma(t) \quad \textit{also } F_\gamma(e^{-t}) = \mathfrak{F}_\gamma(t), \tag{7.175}$$

[43] Damit es zu keinen Verwechslungen oder Irritationen kommt, werden wir im weiteren generell wieder mit F_γ die Mollifier-Funktion und mit $\tilde{F}_\gamma$ den Filter, also die Integraltransformierte von F_γ, bezeichnen, unabhängig von der verwendeten Integraltransformation; dieses haben wir bisher bereits so gehandhabt.

[44] Eine historische Bemerkung: Tatsächlich ist die reziproke Beziehung zwischen den Klassen $\mathfrak{A}_{II}$ und $\mathfrak{a}_{II}$ in der Literatur zuerst in der Gestalt der Mellin-Transformation erwähnt worden, wobei deren schönen Symmetrie im Gewand der Mellin-Transformation gar nicht zum Vorschein kommt; siehe [Doe71] und den diesbezüglich dortigen Referenzen.

die Eigenschaften I bis VII des Satzes 7.3, so ist der durch

$$T_\gamma g(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, \tilde{g}(s)\, z^{-s}\, ds \tag{7.176}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, \tilde{g}(s)\, z^{-s}\, ds \tag{7.177}$$

definierte Operator T_γ ein Regularisierungs-Operator der (Mellinschen) Integralgleichung

$$g(z) = \int_0^\infty k\left(\frac{z}{\zeta}\right) f(\zeta)\, \frac{d\zeta}{\zeta} \quad , \tag{7.178}$$

und die durch

$$f_\gamma = T_\gamma g \tag{7.179}$$

definierte Funktion ist eine regularisierte Lösung des schlecht gestellten Problems (7.178). Die regularisierte Lösung f_γ können wir dann unter Anwendung des Faltungssatzes der (verallgemeinerten) Mellin-Transformation durch

$$f_\gamma(z) = \int_0^\infty \Phi_\gamma\left(\frac{z}{\zeta}\right)\, g(\zeta)\, \frac{d\zeta}{\zeta} \quad , \tag{7.180}$$

wobei Φ_γ durch

$$\Phi_\gamma(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, z^{-s}\, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{x-i\infty}^{x+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, z^{-s}\, ds \tag{7.181}$$

gegeben ist, darstellen.

Besonders hervorheben wollen wir den *Spezialfall*, daß der Winkelraum, in dem $F_\gamma \in \mathfrak{B}$ analytisch ist, *symmetrisch zur reellen Achse* liegt: $|\vartheta^\gamma| \leq \vartheta_0^\gamma$ ($\vartheta_1^\gamma = -\vartheta_0^\gamma,\ \vartheta_2^\gamma = \vartheta_0^\gamma$). Dann genügt das Filter $\tilde{F}_\gamma$ in $x_1^\gamma < x < x_2^\gamma$ der Abschätzung

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \leq C_\gamma\, e^{-\vartheta_0^\gamma |y|} \quad , \tag{7.182}$$

strebt also für $|y| \to \infty$ gleichmäßig gegen 0, und zwar exponentiell [Doe71].

Entsprechendes gilt für eine Funktion $F_\gamma \in \mathfrak{A}_{II}$, die in einem *symmetrisch zur reellen Achse* liegenden Streifen analytisch ist. Dann genügt $\tilde{F}_\gamma$, wenn wir mit η_0^γ die Hälfte der Streifenbreite bezeichnen, der entsprechenden Abschätzung

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \leq C_\gamma\, e^{-\eta_0^\gamma |y|} \quad , \tag{7.183}$$

strebt also ebenso für $|y| \to \infty$ gleichmäßig und exponentiell gegen 0 [Doe71].

7.3 Bemerkungen und Eigenschaften des Verfahrens II

Basierend auf der Theorie der Distributionen, haben wir Eigenschaften der stabilisierenden Funktion $\tilde{F}_\gamma$ ableiten können, konkret haben wir die Funktionen im Entfaltungsproblem als Distributionen aufgefaßt. Dieses führt konsequenter Weise auf eine Approximation, respektive Regularisation, der gesuchten Funktion f in dem Distributionenraum $\mathcal{S}'$. Rufen wir uns der Stabilisierung eines schlecht gestellten Problems durch die Änderung der Topologie[45] in Erinnerung, so erkennen wir, daß jene ebenso als Ausgangsbasis

[45] siehe Abschnitt 4.2.5 und [Lou89]

für die eben in diesem Kapitel dargelegten Untersuchungen gedeutete werden kann, denn tatsächlich gilt folgendes:

$$\langle f, \varphi \rangle = \langle A^{-1} g, \varphi \rangle = \langle g, (A^{-1})^* \varphi \rangle = \langle g, \Lambda \rangle \quad , \tag{7.184}$$

mit

$$\Lambda = \left(A^{-1}\right)^* \varphi \quad , \tag{7.185}$$

wobei $\varphi \in \mathcal{S}$ bzw. sogar $\varphi \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$ gelte. Die obigen Gleichungen (7.184) und (7.185), die wir offensichtlich als einen Augangspunkt der obigen Untersuchungen interpretieren können, entsprechen gerade den Gleichungen (4.61) und (4.62) der Änderung der Topologie, konkret der Einführung einer gröberen Topologie[46] in X.

Desweiteren gilt übrigens noch folgendes:
Die regularisierte Lösung f_γ sei also durch

$$f_\gamma(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \, \tilde{g}(\omega) \, e^{i\omega t} \, d\omega \tag{7.186}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{F}_\gamma(\omega) \, \tilde{f}(\omega) \, e^{i\omega t} \, d\omega \quad , \tag{7.187}$$

gegeben[47]. Es gelte nun bezüglich der Approximativen $\tilde{g}^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ die Darstellung[48]

$$\tilde{g}^\varepsilon = \tilde{g}_T + \tilde{\nu} \quad , \tag{7.188}$$

wobei $\tilde{\nu} \in \mathcal{S}'$ eine stochastische Funktion sei, und es gelten für $|\omega| \to \infty$ die (asymptotische) Abschätzungen der Form

$$|\tilde{\nu}(\omega)| \leq C_\nu \, (1 + \omega^2)^{\frac{m_\nu}{2}} \tag{7.189}$$

und

$$\left| \frac{\tilde{\nu}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)} \right| \leq C_{\nu,k} \, (1 + \omega^2)^{\frac{m_{\nu,k}}{2}} \quad , \tag{7.190}$$

wobei C_ν und $C_{\nu,k}$ (positive) Konstanten und m_ν, $m_{\nu,k} \in \mathbb{N}$ seien[49]. Dann ist, gemäß der Theorie der Distributionen, die Funktion

$$\tilde{f}^\varepsilon = \frac{\tilde{g}^\varepsilon}{\tilde{k}} = \tilde{f}_T + \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{k}} \quad , \tag{7.191}$$

unter Berücksichtigung des Postulats 2, eine temperierte Distribution, und damit ist auch die Fouriertransformierte deren Regularisierten $\tilde{f}^\varepsilon_\gamma$, durch

$$\tilde{f}^\varepsilon_\gamma = \tilde{F}_\gamma \, \tilde{f}^\varepsilon \tag{7.192}$$

gegeben, aufgrund der Eigenschaft $\tilde{F}_\gamma \in \mathcal{S} \; \forall \, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, eine temperierte Distribution. Da nun die Fourier-Transformation ebenso ein Automorphismus in $\mathcal{S}'$ ist[50], sind damit auch die nicht-regularisierte f^ε und die regularisierte Lösung f^ε_γ temperierte Distributionen[51].

---

[46] Dieses wird, zur Erinnerung, erreicht, indem die Forderung nach Stetigkeit bezüglich der Norm in X dahingehend abgeschwächt wird, daß nur noch lineare Funktionale auf der gesuchten Lösung beschränkt seien.

[47] Das Nachfolgende gilt, gemäß den Ausführungen der Abschnitte 7.2.1 und 7.2.2, entsprechend im Fall Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation; siehe auch [BB93, Bre65].

[48] siehe Abschnitt 5.3.2 und beispielsweise [AT77, Dav82, Iva76, LBP91]

[49] Ist $\tilde{\nu} \in \mathcal{S}'$, so ist auch die Abschätzung (7.189) erfüllt; siehe [BB93, Wal94].

[50] siehe Satz B.11 des Anhangs B.4.4.2 und [BB93, Wal94]

[51] Wir haben bereits im Abschnitt 7.1 darauf hingewiesen, daß die (reine) Regularisierte f_γ aufgrund des Postulates 2 eine Distribution ist. An dieser Stelle wollten wir aufzeigen, daß auch die auf der stochastisch gestörten g^ε basierende Regularisierte f^ε_γ eine Distribution ist.

Gilt die Abschätzung (7.190) nicht, so können wir dann einerseits aufgrund der in den vorangegangenen Abschnitt 7.2 abgeleiteten Eigenschaften des Filters $\tilde{F}_\gamma$ und der Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ sagen, daß zumindest die Regularisierte $\tilde{f}_\gamma^\varepsilon$ eine temperierte Distribution ist, denn dann gilt eine zu (7.190) analoge Abschätzung der Form

$$\left|\frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)\tilde{\nu}(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\right| = \left|\tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\tilde{\nu}(\omega)\right| \leq C_{\tilde{F}_\gamma,\nu,k}\,(1+\omega^2)^{\frac{1}{2}m_{\tilde{F}_\gamma,\nu,k}} \quad , \tag{7.193}$$

respektive mit der Voraussetzung $\tilde{g}^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ gilt die Abschätzung

$$\left|\frac{\tilde{F}_\gamma(\omega)\tilde{g}^\varepsilon(\omega)}{\tilde{k}(\omega)}\right| = \left|\tilde{\Phi}_\gamma(\omega)\tilde{g}^\varepsilon(\omega)\right| \leq C_{\tilde{F}_\gamma,\tilde{g}^\varepsilon}\,(1+\omega^2)^{\frac{1}{2}m_{\tilde{F}_\gamma,\tilde{g}^\varepsilon}} \quad , \tag{7.194}$$

also gilt auch $f_\gamma^\varepsilon \in \mathcal{S}'$, woraus mit dem Automorphismus in $\mathcal{S}'$ das Behauptete folgt, und andereseits können wir dann noch sagen, daß zumindest $\tilde{f}^\varepsilon \in \mathcal{D}'$ gilt. Es kann jetzt gezeigt werden, daß die Fourier-Transformation in $\mathcal{D}'$ wohldefiniert ist und aus dem Satz B.12 von PALYE-WIENER folgt dann, daß deren Fouriertransformierte ebenso Distributionen sind[52].

Was die Regularisierte f_γ^ε betrifft, können wir sogar erwarten, daß, je nach Verhalten der stochastischen Funktionen $\tilde{\nu}$ und ν und dem Verhalten von $\tilde{\Phi}_\gamma$ (lokale Integrierbarkeit), f_γ^ε eine reguläre Distribution ist, wohingegen aufgrund der stochastischen Natur von $\tilde{\nu}$ und ν es sehr wohl möglich ist, daß f^ε keine reguläre Distribution ist.

Was bedeutet all dieses nun zuammengefaßt? Dadurch, daß wir die Funktionen als Distributionen auffasssen, haben wir also, wie oben bereits erwähnt, de facto die Topologie in X geändert. Wir könnten nun theoretisch mit der durch (7.185) gegebenen Funktion Λ *indirekt* die Distribution f^ε, genauer das Skalarprodukt (7.184), berechnen und würden so eine stabile Lösung erhalten, bei der wir aber nicht den Fehler begehen dürfen, mit dieser direkt auf physikalische Prozesse zu schließen. Die so indirekt berechnete f^ε könnten wir höchstens als Basis für weitere Berechnungen benutzen. Die Änderung der Topologie nehmen wir jedoch als Ausgangspunkt um *direkte* Approximationen f_γ^ε der gesuchten Funktion f_T zu erhalten, indem wir Approximationen in der geänderten Topologie, hier konkret in dem Distributionenraum $\mathcal{S}'$, untersuchen. Mit anderen Worten betrachten wir jetzt nicht nur das Skalarprodukt[53]

$$\langle f, \varphi\rangle = \langle g, \Lambda(\varphi)\rangle \quad ,$$

sondern zusätzlich noch

$$\langle f_\gamma, \varphi\rangle = \langle g, \Lambda_\gamma(\varphi)\rangle \quad , \tag{7.195}$$

unter der Bedingung

$$\lim_{\gamma\to 0}\langle f_\gamma - f, \varphi\rangle = \langle g, (\Lambda_\gamma - \Lambda)(\varphi)\rangle = 0 \quad , \tag{7.196}$$

wobei es möglich sein soll, f_γ auch direkt zu bestimmen. Dieses entspricht aber, jetzt anders interpretiert, genau der Vorgehensweise, die wir in diesem Kapitel angewandt haben, um Eigenschaften des Filters $\tilde{F}_\gamma$ abzuleiten.

---

[52] Genauer sind die Fouriertransformierten in $\mathcal{D}'$ Distributionen auf den Dualraum eines hier nicht näher erläuterten Grundfunktionenraumes, der zwar große Ähnlichkeiten mit den Raum $\mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II}$ besitzt, jedoch für unsere Zwecke restriktiver ist; siehe [Bre65, Roo69]

[53] Wir lassen an dieser Stelle irgendwelche Indizes der Funktionen f und g betreffend weg, da die Gleichungen die generellen Ideen und Vorgehensweisen aufzeigen sollen.

Kapitel 8

Zur Wahl des Regularisierungsparameters

In diesem Kapitel wollen wir uns der Kriterien zur Wahl des Regularisierungsparameters γ zuwenden. Dabei soll aber zuerst auf eine quasi schon aus der Definition der Regularisierung folgenden Eigenschaft des Regularisierungsparameters und die dann daraus resultierende Problematik zur dessen Wahl eingegangen werden. Anschließend werden wir uns im wesentlichen drei verschiedenen Kriterien, wobei eines davon kein wirklich mathematisch strenges, aber, um erste Ergebnisse zu erziehlen, sehr nützliches ist, zuwenden: dem *„Trial and Error"-Verfahren*, dem MOROZOV*schen Diskrepanz-Prinzip* und dessen Modifikationen,und wir wollen hier ein von uns entwickeltes neues Kriterium, welches ersteinmal noch als ein Vorschlag zu betrachten ist, das *Konsistenzkriterium über die Schranken der integrierten Dichtefunktion*, vorstellen.

Wir sollten jedoch bereits am Anfang dieses Kapitels bemerken, daß die fundamentalen Probleme bei der Regularisierung der Integralgleichung (2.13) bzw. (2.47) aufgrund der exponentiellen Grades der Schlechtgestelltheit *nicht* in der Wahl des Regularisierungsparameters liegen. Wir werden dementsprechend die allgemeinen Betrachtungen zur Wahl des Regularisierungsparameters, die mathematisch beliebig intensiv durchgeführt werden können[1], relativ kurz halten.

8.1 Vorbetrachtungen und das „Trial and Error"-Verfahren

Bevor wir konkrete Kriterien zur Wahl des Regularisierungsparameters $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ besprechen, wollen wir auf eine seiner wesentlichsten Eigenschaft eingehen, die wir bereits schon aus der Definition 4.5 der Regularisierung erahnen können. Der nun nachfolgende Satz wurde von TIKHONOV und ARSENIN in [AT77] ursprünglich für das Tikhonov-Phillips Verfahren bewiesen, doch kann der Beweis ebenso allgemein auf eine Regularisierung T_γ übertragen werden.

Satz 8.1
Mit f_T sei die Lösung der Operatorgleichung erster Art,

$$Af = g \tag{8.1}$$

mit der rechten Seite $g = g_T$ bezeichnet; es sei also $Af_T = g_T$. Dann existiert für eine beliebige positive Zahl δ und für alle in dem Intervall $[0, \varepsilon_1]$ stetigen, nicht-negativen und monoton wachsenden Funktionen $\beta_1(\varepsilon)$

[1] Forschung verläuft, auch wenn der Eindruck entstehen mag oder dieser versucht wird den Außenstehenden glauben zu machen, selten tatsächlich geradlinieg; so werden wir auf die Präsentation der theoretischen Ergebnisse zur Wahl des Regularisierungsparameters, die bezüglich der konkret durchgeführten Regularisierung keine oder nur eine sekundäre Relevanz besitzen, um den Umfang dieser Arbeit erträglich zu halten, verzichten.

und $\beta_2(\varepsilon)$*, für die* $\beta_2(0) = 0$ *und* $\varepsilon^2/\beta_1(\varepsilon) \leq \beta_2(\varepsilon)$ *gelte, eine Zahl* $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\delta, \beta_1, \beta_2)$ *so, daß für* $g^\varepsilon \in Y$ *und* $\varepsilon \leq \varepsilon_0$ *aus der Ungleichung* $\|g^\varepsilon - g_T\|_Y \leq \varepsilon$ *die Ungleichung* $\|f_T - f_\gamma\|_X \leq \delta$ *folgt, wobei* $f_\gamma = T_\gamma g^\varepsilon$ *für alle* γ*, die die Ungleichung*

$$\frac{\varepsilon^2}{\beta_1(\varepsilon)} \leq \gamma \leq \beta_2(\varepsilon) \tag{8.2}$$

erfüllen, gilt.

Die sofort von ARSENIN und TIKHONOV aufgezeigte wichtige Konsequenz des Satzes 8.1 ist [AT77]:

Der Regularisierungparameter $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ ist eine vieldeutige (mehrwertige) Funktion des Fehlers ε der vorgegebenen Funktion g^ε, und ganz allgemein der rechten Seite der Gleichung (8.1)!

Dieses ist im den Sinne zu verstehen, daß wir es mit einer Menge $\{\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)\}$ zu tun haben, deren einzelne Elemente eindeutige Funktionen $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ sind. Das hat wiederum die Möglichkeit verschiedener Strategien zur Wahl des Parameters γ zur Konsequenz.

Rufen wir uns die Definition 4.5 in die Erinnerung zurück[2], so sehen wir den Grund für die Vermutung der Existenz eines Satzes wie Satz 8.1: die Regularisierung T_γ des schlecht gestellten Problems (8.1) ist in dem Sinne nicht eindeutig, daß die Möglichkeit verschiedener Regularisierungen in der Definition enthalten ist; ebenso wird dort die Möglichkeit verschiedener Funktionen $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ angedeutet, denn es wird von der Existenz einer möglichen, und nicht einer einzig möglichen, Abbildung $\gamma : \mathbb{R}^+ \times Y \to \mathbb{R}^+$, für die

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g}} \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) = 0 \tag{8.3}$$

gilt, gesprochen[3].

Neben der Frage nach der Wahl eines geeignete Regularisierungsverfahrens ist somit die Frage nach geeigneten Kriterien zur Wahl des Regularisierungsparameters die nächste nicht triviale. Wie wir bereits bei der Darlegung der Regularisierung erwähnt haben, weist DAVIES[4] darauf hin, daß die Frage nach dem optimalen Regularisierungs-Operator fundamental schwieriger zu sein scheint als die nach dem optimalen Parameter γ. Wir wollen deswegen nun die einfachste Methode zur Wahl des Regularisierunsparameters vorstellen.

Das „Trial and Error"-Verfahren

Das Konzept sieht folgendermaßen aus: Man löst bzw. regularisiert das Problem (8.1), $Af = g$, für einige Modellfälle und benutzt dann den durch Vergleich der Resultate gefundenen Parameter. Hier würde dieses u.a bedeuten, daß wir den Parameter γ, beispielsweise in einem uns selbst vorgegeben Intervall, solange verändern, bis in den regularisierten Lösungen die oszillatorischen Anteile, die durch numerische Einflüsse und durch den Datenfehler begründet sind, verstärkt zunehmen. Dieses Verfahren kann dann angewendet werden, wenn wir einen ersten Überblick über die mögliche Formen der Regularisierten eines Problems erhalten wollen. Wie wir im Kapitel 9 sehen werden, ist diese „Strategie" bei der Anwendung der im Kapitel 5 beschriebenen Regularisierungsverfahren auf unser Problem (2.13) respektive (2.47), insbesondere bei der Verwendung Gauß'scher stabilisierender Funktionen, sogar schon ausreichend, um akzeptable[5] Ergebnisse zu erziehlen.

[2] siehe ebenso die diesbezüglichen Bemerkungen und Hinweis im Abschnitt 4.2.4

[3] Die Vorderung nach der Existenz genau einer möglichen Funktion $\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ würde einerseits dem Konzept der Regularisierung eine unnötige Restringtion auferlegen und andererseits im Kontext des obigen Satzes 8.1 zu kaum lösbaren Problemen im Fall der Tikhonov-Phillips Regularisierung führen.

[4] siehe [Dav82] und die Fußnote 12 auf Seite 71 im Abschnitt 5.2

[5] Tatsächlich liefert die Anwendung der nachfolgenden Verfahren keine besseren Ergebnisse; wenn wir den Grad der Schlechtgestelltheit und der engen Verwandtschaft, fast schon einer Äquivalenz, dieses Problems mit der analytischen Fortsetzung einer Funktion rekapitulieren, so könnten wir schon erahnen, daß die fundamentalen Probleme hier woanders liegen werden.

8.2 Das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip

8.2.1 Das (verallgemeinerte) Diskrepanz-Prinzip

In diesem Abschnitt soll die am intensivsten untersuchte, und quasi als „Standartverfahren“ zu bezeichnende, a posteriori Wahl des Regularisierungsparameters vorgestellt werden. Betrachten wir nochmals kurz ganz allgemein die Tikhonov-Phillips Regularisierung[6], und speziell dort deren Funktional (5.7),

$$\mathcal{M}^\gamma[f,g] = \|Af-g\|^2 + \gamma^2\,\Omega[f] \quad , \tag{8.4}$$

so sehen wir, daß wir den Regularisierungsparameter hier ebenso als Lagrange-Parameter interpretieren können. Demzufolge würden wir diesen jetzt, mit $\|g_T - g\| \le \varepsilon$, über die (Neben-)Bedingung

$$\|Af_\gamma - g\| = \varepsilon \tag{8.5}$$

bestimmen.

Es ist nun naheliegend, die Diskrepanz (8.5) als generelles Kriterium zur Wahl des Parameters γ zu benutzen, um so eine „Konsistenz“ von der durch die Regularisierte erzeugte Funktion $g_\gamma \equiv Af_\gamma$ mit der vorgegebenen g zu garantieren. Die Diskrepanz kann nun noch dahingehend erweitert werden, indem wir eine zusätzliche mögliche Unsicherheit bezüglich des Operators A annehmen, was dann zu dem *verallgemeinerten (quadratischen) Diskrepanz-Funktional* [Mor84, TGSY95] führt:

$$\rho_\eta(\gamma) = \left\|A_h f_\gamma^\eta - g^\varepsilon\right\|^2 - \left(\varepsilon + h\left\|f_\gamma^\eta\right\|\right)^2 \quad , \tag{8.6}$$

mit

$$\eta = (\varepsilon, h) \quad , \tag{8.7}$$

$$\|g_T - g^\varepsilon\| \le \varepsilon \quad \text{und} \tag{8.8}$$

$$\|A - A_h\| \le h \quad . \tag{8.9}$$

Als Regularisierungparameter ist dann derjenige zu Wählen, der das Diskrepanz-Funktional (8.6) minimiert. Dieses Prinzip zur Wahl des Parameters γ wird nun entsprechend (VERALLGEMEINERTES) MOROZOV*sches Diskrepanz-Prinzip* genannt. Können wir den Operator A als exakt bekannt voraussetzen, wie im unseren Fall des phänomenologischen Ansatzes[7], dann geht das Diskrepanz-Funktional in die ursprünglich von MOROZOV vorgeschlagene Form[8]

$$\rho_\varepsilon(\gamma) = \left\|Af_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\right\|^2 - \varepsilon \tag{8.10}$$

über, in der Parameter γ dann also über

$$\|Af_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\| = \varepsilon \tag{8.11}$$

zu bestimmen ist.

VINOKUROV konnte nun eine, auch bezüglich der Praxis nützliche, a priori obere Schranke für den nach dem Diskrepanz-Prinzip (8.11) gewählten Parameter angeben[9] [Gro84, Vin72]:

---

[6] siehe Abschnitt 5.2 und die diesbezüglichen Referenzen. Mit $\|\cdot\|$ sei hier übrigens eine beliebige Norm bezeichnet.

[7] Würde die Möglichkeit eines Fehlers des Integralkerns (2.27) eingeräumt werden, so wäre es praktisch unmöglich, die gesuchte Dichte zu bestimmen.

[8] Aus den entsprechenden historischen Anmerkungen in der mathematischen Literatur ist zu entnehmen, daß MOROZOV das nach ihm benannte Prinzip ursprünglich nicht in der From des Funktionals (8.10), sondern gleich als (8.11) formuliert hat; siehe beispielsweise [AT77, Gro84, Lav67, Mor84].

[9] Wir haben die Version nach [Gro84] zitiert. Der Satz gilt streng genommen für kompakte Operatoren A. Den (Integral)-Oparator in (2.13) respektive (2.47) können wir jedoch aus physikalischen Gründen als einen *pseudokompakten Operator* betrachten, d.h. wir könnten die obere Integrationsgrenze auf eine maximale Relaxationszeit $\tau_{\max}$ beschränken, wodurch die Kompaktheit dieses „neuen“ Operators gewährleistet sein würde (siehe [Wer95].)

Satz 8.2
Ist $\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ durch (8.11) gegeben, dann gilt als obere Schranke

$$\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) \leq \varepsilon \, \frac{\|A\|^2}{\|g^\varepsilon\| - \varepsilon} \quad . \tag{8.12}$$

Unabhängig von und zeitgleich zu MOROZOV veröffentlichte ARCANGELI eine zum obigen Diskrepanz-Prinzip ähnliche Methode, die wir, da diese auch in der Praxis oftmals angewandt wird, nicht unerwähnt lassen wollen. Konkret schlug ARCANGELI in [Arc66] vor, den Parameter γ über die Bedingung

$$\|A f_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\| = \frac{\varepsilon}{\sqrt{\gamma}} \tag{8.13}$$

zu bestimmen[10].

Selbstverständlich kann sowohl bei der Wahl des Parameters γ über das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip (8.11) als auch bei der Wahl gemäß des von ARCANGELI vorgeschlagenen Prinzips (8.13) die Konvergenz von $\gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ gegen Null und f_γ^ε gegen f_T für $g^\varepsilon \to g_T$ und $\varepsilon \to 0$ bewiesen werden. Für diese Beweise und weitere Details der Diskrepanz-Prinzipien wollen wir auf die Literatur, und hier exemplarisch auf [AT77, Gro84, Lou89, Mor84], verweisen.

Wir wollen ebenso noch erwähnen, daß die Diskrepanzverfahren in der Praxis auch noch in einer leicht modifizierten Form angewandt werden. So nimmt dann das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip, für das von ARCANGELI gilt dann entsprechendes, die folgende Gestallt an[11]:
Es sei $g \in \mathcal{R}(A)$, und man wähle $1 < r \leq R$.

1. Ist[12] $\|g^\varepsilon\| \leq r\varepsilon$, dann sei $\gamma = \infty$.
2. Ist $\|g^\varepsilon\| > r\varepsilon$, dann sei γ so gewählt, daß

$$r\varepsilon \leq \|A f_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\| \leq R\varepsilon \tag{8.14}$$

gelte.

Diesen Abschnitt abschließend, wollen wir noch kurz einen weiteren Zugang zu den Diskrepanzkriterien wiedergeben. Betrachten wir für ein beliebiges Regularisierungsverfahren $T_\gamma : Y \to X$ den Abstand von $T_\gamma g^\varepsilon$ von der gesuchten (verallgemeinerten) Lösung $A^\dagger g$ des Problems $Af = g$, wobei wir von einer Zusatzinformation der Form $f \in X_\nu$ mit $\|f\|_\nu \leq \rho$ ausgehen und für den Datenfehler wiederum $\|g^\varepsilon - g\| \leq \varepsilon$ gelte. Der Abstand sei dann also durch

$$E_\nu(\varepsilon, \rho, T_\gamma) = \sup\left\{ \|T_\gamma g^\varepsilon - A^\dagger g\| : \|g^\varepsilon - g\| \leq \varepsilon, \|A^\dagger g\|_\nu \leq \rho \right\} \tag{8.15}$$

gegeben. Der unvermeidbare Fehler bei der (regularisierten) Lösung des Problems $Af = g$ mit gestörten Daten und den Zusatzinformationen in der obigen Form ist dann (bezüglich der Regularisierung T_γ):

$$E_\nu(\varepsilon, \rho) = \inf_{T_\gamma} E_\nu(\varepsilon, \rho, T_\gamma) \quad . \tag{8.16}$$

Kein Algorithmus kann im allgemeinen Fall eine höhere Genauigkeit erreichen[13]. Im Lichte dessen wird dann, allgemein gesprochen[14], der Regularisierungparameter γ_o *optimal* für eine Regularisierung T_γ ge-

[10] wiederum zitiert nach [Gro84]

[11] siehe beispielsweise [Lou89]

[12] Diese Eigenschaft bedeutet in Worten, daß die Daten hoffnunglos verrauscht sind.

[13] siehe [Lou89]

[14] LOUIS gibt in [Lou89] im Falle kompakter Operatoren und der Verwendung deren Singulärwertzerlegung (siehe Abschnitt 4.2.3) Definitionen von *optimalen, ordnungsoptimalen* und *asymptotisch optimalen* Regularisierungsverfahren respektive Regularisierungsparametern an. Wir haben uns hier, wegen der schon erwähnten Gründe, auf die Angabe der mehr allgemeinen, aber üblichen Bezeichnungen für optimale und fast- bzw. quasi optimale Parameter beschränkt; siehe dazu auch [AT77, Gro84, Mor84].

nannt, für den

$$E_\nu(\varepsilon, \rho, T_{\gamma_o}) = \inf_\gamma E_\nu(\varepsilon, \rho, T_\gamma) \tag{8.17}$$

gilt, d.h. der den gesamten Regularisierungsfehler minimiert. Teilen wir jenen wieder in seine beiden Hauptbestandteile[15] auf, also einmal in den Einfluß des Datenfehlers in der Regularisierung und dem reinen Regularisierungsfehler (Gl. (4.48)),

$$\|T_\gamma g^\varepsilon - A^\dagger g\| \leq \|T_\gamma g^\varepsilon - T_\gamma g\| + \|T_\gamma g - A^\dagger g\| \quad , \tag{8.18}$$

so wird der Parameter γ_{qo} *quasi optimal* oder auch *fast optimal* genannt, für den

$$\|T_{\gamma_{qo}} g^\varepsilon - T_\gamma g\| = \|T_{\gamma_{qo}} g - A^\dagger g\| \tag{8.19}$$

gilt, d.h. bei denen der Einfluß der beiden Fehlerquellen auf den Gesamtfehler gleich ist.

Wird jetzt der so eingeführte optimale respektive quasi optimale Wert des Regularisierungsparameters für ein gegebenes Regularisierungsvefahren, oder auch ganz allgemein, untersucht, so hängen die gefundenen Ausdrücke für γ_o und γ_{qo} u.a. einmal von dem Fehlerniveau ε und zum anderen von der Norm der gesuchten Funktion f und den Normen derer Ableitungen ab[16]. Diese Normen werden jedoch allgemein natürlich nicht bekannt sein[17], so daß für die Praxis durchführbare Kriterien notwendig sind, die den optimalen respektive quasi optimalen Werten des Parameters nahe kommen. Es hat sich nun herausgestellt, und aufgrund der Ausdrücke (8.11) und (8.19) können wir dieses bereits vermuten, daß die eben eingeführten Diskrepanz-Prinzipien zumindest eine Quasioptimalität des Regularisierungsparameters garantieren[18]. Für weitere Details und Zusammenhänge sei wiederum aus den bekannten Gründen auf die Literatur, wie beispielsweise auf [AT77, Dav82, Gro84, Lou89, Mor84], verwiesen.

Abschätzung in der Supremumsnorm

Erste einfache Abschätzungen des Diskrepanz-Prinzips (8.11), der Operator A ist hier als exakt bekannt vorausgesetzt, bei Verwendung stabilsierender Funktionen zur Regularisierung des Entfaltungsproblems, können wir bei der Verwendung der Supremumsnorm erhalten. Wie wir im Abschnitt 5.3.3 bereits gezeigt haben, ist die wiederum durch die Regularisierte f_γ erzeugte g_γ vermöge der Mollifier-Funktion F_γ durch

$$g_\gamma \equiv A f_\gamma = F_\gamma * g^\varepsilon \tag{8.20}$$

gegeben. Für den Betrag der Differenz Δg_γ zwischen Vorgegebener g und g_γ folgt damit sofort:

$$\begin{aligned} \left|\Delta g_\gamma(t_0)\right| &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t_0 - t)\; g(t)\; dt - g(t_0) \right| \\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t_0 - t)\; \left(g(t) - g(t_0)\right)\; dt \right| \quad , \end{aligned} \tag{8.21}$$

wobei wir die Eigenschaft

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\; dt = 1 \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \tag{8.22}$$

[15] siehe Abschnitt 4.2.4

[16] siehe auch das Beispiel der Differentiation in Kapitel 4.2.4 (Gl. (4.58) und (4.59)) und es sei bezüglich weiterer Details noch auf[AT77, Lou89, Gro84, Mor84] verwiesen

[17] Oftmals wird auch nicht der genaue Datenfehler, sondern eine Abschätzung desselbigen, bekannt sein.

[18] Wir werden hier im Abschnitt 8.2.5 auf den Zusammenhang der von uns modifizierten Diskrepanz-Prinzipien mit der entsprechend modifizierten obigen Regularisierungsfehler (8.18) hinweisen.

der Mollifier-Funktion ausgenutzt haben. Die Differenz (8.21) läßt sich bekanntermaßen nun durch

$$\left|\Delta g_\gamma(t_0)\right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t_0 - t)\ |g(t) - g(t_0)|\ dt \tag{8.23}$$

abschätzen, wobei wir hier die Eigenschaft[19] $F_\gamma \geq 0\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+$ der Mollifier-Funktion ausgenutzt haben. Desweiteren gilt die Ungleichung[20]

$$\frac{|g(t) - g(t_0)|}{|t - t_0|} \leq \max_{t_0} |g'(t_0)| \quad , \tag{8.24}$$

mit der wir und der Substitution $t - t_0 \to t$ unmittelbar die Abschätzung

$$\left|\Delta g_\gamma(t_0)\right| \leq \max_{t_0} |g'(t_0)| \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t)\ |t|\ dt \tag{8.25}$$

erhalten. Berücksichtigen wir noch die von uns angegebene Darstellung der Mollifier-Funktion, also Gleichung (7.20), und das jene Funktion eine gerade Funktion für alle γ sei, deren allgemeine Eigenschaft[21] V, so gelangen wir letztendlich bei der Abschätzung

$$\left|\Delta g_\gamma(t_0)\right| \leq \max_{t_0} |g'(t_0)|\ 2\gamma \int_0^{\infty} F(t)\ t\ dt \tag{8.26}$$

an. Führen wir jetzt noch das erste „Betragsmoment“ der Funktion F als

$$m_1[F] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} F(t)\ |t|\ dt \tag{8.27}$$

ein[22] und Messen die Diskrepanz Δg_γ in der Supremums- oder Maximumsnorm, so folgt aus den eben abgeleiteten (8.26)

$$\left\|\Delta g_\gamma\right\|_\infty \leq \gamma\, m_1[F]\ \|g'\|_\infty \quad , \tag{8.28}$$

und daraus folgt seinerseits unmittelbar für den nach dem in der Supremumsnorm formulierten Diskrepanz-Prinzip gewählten Parameter γ_∞,

$$\|A f^\varepsilon_{\gamma_\infty} - g^\varepsilon\|_\infty = \left\|\Delta g_{\gamma_\infty}\right\|_\infty = \varepsilon_\infty \quad \text{mit} \quad \|g - g^\varepsilon\|_\infty \leq \varepsilon_\infty \quad , \tag{8.29}$$

die Abschätzung

$$\gamma_\infty \geq \frac{\varepsilon_\infty}{m_1[F]\ \|g'\|_\infty} \quad . \tag{8.30}$$

Die problematische Größe in (8.30) wird die Norm $\|g'\|_\infty$ sein, die in der Praxis nicht bekannt sein dürfte.

8.2.2 Erste Modifikation des Diskrepanz-Prinzips: Stochastische Funktionen als Distributionen

In den vorangegangenen Kapitel 7, in dem wir Eigenschaften der stabilisierenden Funktion und deren Mollifier-Funktion abgeleitet haben, wurden von uns die Funktionen f und g der Operatorgleichung (vom Faltungstyp)

$$Af = g$$

[19] Wir verwenden die hier von uns im Abschnitt 7.2 bzw. 7.2.2 abgeleiteten Eigenschaften der Funktionen $\tilde{F}_\gamma$ und F_γ; desweiteren sei diesbezüglich ebenso auf die Kapitel 6f verwiesen.

[20] siehe beispielsweise [Doe71, Wal94]; desweiteren gehen wir von der Existenz der Ableitung g' und deren Maximum $\max|g'|$ aus.

[21] siehe Abschnitt 7.2

[22] Die Funktion $m_1[F]$ wird von einigen Autoren auch als *mittlere Abweichung* (der Dichte) bezeichnte; siehe [Str63a].

explizit als Distributionen[23] aufgefaßt. Dieses legt nun nahe, das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip entsprechend zu modifizieren, d.h. auf den Schwarz-Raum Raum $\mathcal{S}$ respektive dessen Distributionenraum[24] $\mathcal{S}'$, die für unsere Untersuchungen die geeignetsten sind, zu formulieren. Bevor wir dieses im nachfolgenden Abschnitt 8.2.3 puristisch durchführen werden, wollen wir zuerst das folgende, für die Praxis „naheliegendere“ oder „relavantere“, betrachten. Neben den Skalarprodukten auf $\mathcal{S}$ wollen wir konkret noch zusätzlich, da wir explizit stochastische Funktionen berücksichtigen werden, eine statistische Mittelung durchführen, in anderen Worten neben einen Maß auf $\mathcal{S}'$ noch ein statistisches Maß einführen.

Im Faltungsproblem (wir werden uns nur auf diese Probleme beschränken)

$$k * f = g_T \tag{8.31}$$

seien k, f und g_T *reellwertige* Funktionen[25], die noch die folgenden Eigenschaften erfüllen mögen:
Es seien $k \in L^2$, $g_T \in L^2$ und $f \in L^1$ und $f \in L^2$. Die fehlerbehaftete Funktion $g^\varepsilon \in L^2$ sei wiederum durch

$$g^\varepsilon = g_T + \nu \quad , \tag{8.32}$$

wobei ν eine *stationäre stochastische Funktion* sei[26], darstellbar und es gelte ebenso wieder

$$\|g_T - g^\varepsilon\|_{L^2} \leq \varepsilon \quad . \tag{8.33}$$

Im folgendem nehmen wir der Einfachheit wegen noch an, daß ν einen verschwindenen Erwartungswert besitze, es möge somit konkret

$$E[\langle \varphi, \nu \rangle] = 0 \quad \forall\, \varphi \in L^2 \tag{8.34}$$

gelten[27], wobei wir hier mit $E[\cdot]$ allgemein die statistische Mittelung bezeichnen wollen. Weiter setzen wir die Existenz des zweiten Moments der stochastischen Funktion, gegeben durch[28]

$$E\left[|\langle \varphi, \nu \rangle|^2\right] \leq 0 \quad \forall\, \varphi \in L^2 \quad , \tag{8.35}$$

und dessen Stetigkeit in φ voraus. Dann ist

$$E\left[\langle \varphi, \nu \rangle \langle \nu, \psi \rangle\right] \leq 0 \quad \forall\, \varphi, \psi \in L^2 \tag{8.36}$$

eine stetige, symmetrische, nichtnegative Bilinearform über L^2, es existiert also ein stetiger, linearer, selbstadjungierter, nichtnegativer Operator[29]

$$R_{\nu\nu} : L^2 \to L^2 \tag{8.37}$$

mit

$$\langle R_{\nu\nu}\varphi, \psi \rangle = E\left[\langle \varphi, \nu \rangle \langle \nu, \psi \rangle\right] \quad . \tag{8.38}$$

Der Operator R wird *Kovarianzoperator* genannt.

Als Regularisierungsverfahren sei selbstverständlich wieder das auf den stabilisierenden Funktionen basierende verwendet, ebenso sei die Lösung der Integralgleichung (8.31) wieder als (inverse) Integraltransformation dartstellbar. Speziell setzen wir noch voraus, daß wir diese Faltungsgleichung mit der Fourier-Transformation lösen können. Demzufolge wählen wir als Grundfunktionenraum den Schwarz-Raum $\mathcal{S}$,

---

[23] siehe Postulat 2 auf Seite 99

[24] siehe Anhang B.2.2 und B.3.2 und [BB93, Wal94]

[25] Die Ergebnisse dieses Abschnitts gelten somit streng genommen nicht für das ursprüngliche Problem der komplexen Integralgleichung, sondern jeweils für deren Real- und Imaginärteil, als eigenständige Integralgleichungen betrachtet. Die Bemerkungen am Anfang dieses Kapitels und die Ergebnisse der späteren Kapitel, besonders des Kapitels 10, zeigen jedoch, daß dieses für unser Problem keine relevante Einschränkung sein wird.

[26] siehe beispielsweise [Str63a]

[27] Dieses stellt keine Einschränkung dar, denn ansonsten können wir, wenn diese Bedingung nicht erfüllt ist, die Zufallsvariable respektive stochastische Funktion $\nu' = \nu - E[\nu]$ betrachten.

[28] siehe [Lou89, Str63a]

[29] siehe [Lou89, Str63a, Wer95]

die Fourier-Transformation ist ein Automorphismus[30] in $\mathcal{S}$, es gelte also $\varphi \in \mathcal{S}$. Betrachten wir das Skalarprodukt $\langle g, \varphi \rangle$, welches wir bekanntlich folgendermaßen abschätzen können[31]:

$$|\langle g, \varphi \rangle| \leq \|g\|_{L^2} \, \|\varphi\|_{L^2} \quad . \tag{8.39}$$

Es gilt also einerseits

$$|\langle g_T - g^\varepsilon, \varphi \rangle| \leq \|g_T - g^\varepsilon\| \, \|\varphi\| \quad . \tag{8.40}$$

Andererseits gilt, wenn wir die Darstellung (8.32) und die eben dargelegten Eigenschaften der stochastischen Funktion berücksichtigen:

$$\begin{aligned} E\left[|\langle g_T - g^\varepsilon, \varphi \rangle|^2\right] &= E\left[|\langle \nu, \varphi \rangle|^2\right] \\ &= E\left[\langle \varphi, \nu \rangle \langle \nu, \varphi \rangle\right] \\ &= \langle R_{\nu\nu}\varphi, \varphi \rangle \quad ; \end{aligned} \tag{8.41}$$

letzteres folgt per definitionem des Kovarianzoperators (Gl. 8.38).

Mit den eben wiedergegebenen Eigenschaften des Operators R, erhalten wir weiter:

$$\begin{aligned} |\langle R_{\nu\nu}\varphi, \varphi \rangle| &= \langle R_{\nu\nu}\varphi, \varphi \rangle && (8.42) \\ &\leq \|R_{\nu\nu}\varphi\| \, \|\varphi\| && (8.43) \\ &\leq \|R_{\nu\nu}\| \, \|\varphi\|^2 = \sigma^2[\nu] \, \|\varphi\|^2 \quad . && (8.44) \end{aligned}$$

Beim Übergang von Ungleichung (8.43) zur Ungleichung (8.44) wurde die Definition der Norm eines Operators[32] ausgenutzt, in der letzten Zeile (8.44) haben wir berücksichtigt, daß die Norm des Kovarianzperators gleich der Varianz des stochastischen Prozesses ist[33]: $\|R_{\nu\nu}\| = \sigma^2[\nu]$. Zusammengefaßt schätzen wir also den Fehler der Daten modifiziert durch

$$E\left[|\langle g_T - g^\varepsilon, \varphi \rangle|^2\right] \leq \sigma^2[\nu] \, \|\varphi\|^2 \tag{8.45}$$

ab.

Wie schon STRATONOVICH in seinem Buch [Str63a] darauf hingewiesen hat, können wir stochastische Funktionen ebenso als Distributionen auffassen[34]. Da wir in dieser Arbeit von Daten, die aus Messungen oder Simulationen gewonnen werden ausgehen, können wir noch zusätzlich die Beschränktheit der Funktion ν,

$$|\nu| \leq C_\nu \leq \|g_T\|_\infty \quad , \tag{8.46}$$

fordern, denn ansonsten wären die Daten offensichtlich hoffnunglos verrauscht, und aus dieser Eigenschaft folgt somit sofort $\nu \in \mathcal{S}'$. Die (mathematische) Existens der bisherigen Ausdrücke ist also gesichert.

Den Ausdruck des Fehlers respektive dessen Abschätzung der Vorgegebenen g^ε haben wir, um das Diskrepanz-Prinzip (8.11) zu modofizieren, nun übertragen, und führen wir die entsprechende Modifikation bezüglich des Maßes an der linken Seite durch, so können wir (offensichtlich) das folgende aussprechen:
Die ***erste Modifizierung des Diskrepanz-Prinzips*** sei konkret durch

$$E\left[\left|\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi \rangle\right|^2\right] = \sigma^2[\nu] \, \|\varphi\|^2 \tag{8.47}$$

gegeben, mit $g_\gamma^\varepsilon \equiv A f_\gamma^\varepsilon$.

---

[30] siehe Satz B.10 im Anhang B.4.4

[31] siehe [BB93, Doe71, Wal94, Wer95]; im folgendem werden wir den Index L^2 an der Norm fortlassen.

[32] siehe z.B. [Wer95]

[33] siehe [Lou89, Str63a]; wir benutzen als Notation die in der Funktionalanalysis übliche und schreiben für die Varianz σ^2 der Stochastischen ν anstatt σ_ν^2 entsprechend $\sigma^2[\nu]$.

[34] Dieses ist zwingend notwendig, wie STRATONOVICH deutlicht macht, wenn wir das Spektrum, das nichts anderes als die Fouriertransformierte der stochastischen Funktion ist, einführen, da diese im herkömmlichen Sinne offensichtlich i.A. nicht existieren würde.

Untersuchen wir noch etwas die linke Seite des durch (8.47) eingeführten (modifizierten) Diskrepanz-Prinzips. Dazu berücksichtigen wir das im Abschnitt 5.3.3 bereits abgeleitete Ergebnis, daß die durch die Regularisierte wieder erzeugte mit der Mollifier-Funktion als Faltung darstellbar ist:

$$g_\gamma^\varepsilon = F_\gamma * g^\varepsilon \quad , \tag{8.48}$$

die linke Seite des Diskrepanz-Prinzips also jetzt ebenso durch $E\left[\,|\left\langle F_\gamma * g^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle|^2\right]$ gegeben ist. Mit den allgemeinen Eigenschaften der Mollifier-Funktion F_γ aus dem Abschnitt 7.2 respektive 7.2.2, besonders den Eigenschaften $F_\gamma \in \mathcal{S}$ und $F_\gamma(t) = F_\gamma(-t)$, und den Definitionen der Faltung zweier Grundfunktionen und einer Distribution mit einer Grundfunktion[35], erhalten wir folgendes:

$$\left\langle g_\gamma^\varepsilon, \varphi\right\rangle = \left\langle F_\gamma * g^\varepsilon, \varphi\right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, F_\gamma * \varphi\right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma\right\rangle \quad , \tag{8.49}$$

wobei wir analog die Bezeichnung $\varphi_\gamma = F_\gamma * \varphi$ eingeführt haben. Für das uns interessierende Skalarprodukt folgt damit, wobei die Linearität des Skalarproduktes $\langle\cdot,\cdot\rangle$ berücksichtigt worden ist[36]:

$$\begin{aligned} \left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle &= \left\langle F_\gamma * g^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle && (8.51)\\ = \left\langle g^\varepsilon, F_\gamma * \varphi - \varphi\right\rangle &= \left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle \quad , && (8.52) \end{aligned}$$

womit wir wiederum für den eigentlich untersuchten Mittelwert erhalten:

$$\begin{aligned} E\left[\left|\left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle\right|^2\right] &= E\left[\left|\left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle\right|^2\right] && (8.53)\\ &= E\left[\left\langle g_T + \nu, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle \left\langle \varphi_\gamma - \varphi, g_T + \nu\right\rangle\right] && (8.54)\\ &= E\left[\,|\left\langle g_T, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle|^2 + \left\langle \varphi_\gamma - \varphi, \nu\right\rangle \left\langle \nu, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle\right] && (8.55)\\ &= |\left\langle g_T, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle|^2 + \left\langle R_{\nu\nu}(\varphi_\gamma - \varphi), (\varphi_\gamma - \varphi)\right\rangle \quad . && (8.56) \end{aligned}$$

In der Ableitung der Gleichungen (8.53) bis (8.56) haben wir noch die Linearität des Mittelwerts $E[\cdot]$ und wiederum die Definition des Kovarianzperators ausgenutzt. Den Term mit dem Kovarianzperator in der Gleichung (8.56) können wir jetzt, analog zu der Abschätzung des Datenfehlers, Ungleichung (8.44), durch

$$\left\langle R_{\nu\nu}(\varphi_\gamma - \varphi), (\varphi_\gamma - \varphi)\right\rangle \leq \sigma^2[\nu]\ \|\varphi_\gamma - \varphi\|^2 \tag{8.57}$$

abschätzen, und für das Betragsquadrat des Skalarproduktes in (8.56) gilt nun die zu (8.39) entsprechende Abschätzung

$$|\left\langle g_T, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle|^2 \leq \|g_T\|^2\ \|\varphi_\gamma - \varphi\|^2 \quad . \tag{8.58}$$

Die Abschätzungen (8.57) und (8.58) zusammen bilden also eine Abschätzung der linken Seite des modifizierten Diskrepanz-Prinzips (8.47), die gemäß diesem Prinzips ebenso eine Abschätzung dessen rechten

---

[35] siehe hier generell Anhang B.4 und ebenso [BB93, Wal94]

[36] Wir wollen noch auf das folgende hinweisen: Auch wenn g^ε eine stationäre stochastische Funktion ist, so stellt die Differenz

$$g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon \tag{8.50}$$

selber im allgemeinen *keine* stationäre stochastische Funktion dar, weil aufgrund der Regularisierung g_γ^ε keine stationäre Stochastische mehr sein muß. Betrachten wir die Funktionen g^ε und g_γ^ε als Distributionen und setzen wir die hier gegebene Gültigkeit der Darstellungen (8.32) und (8.48) voraus, wobei ν eine stationäre stochastische Funktion sei, so folgt aus der Theorie der Distributionen der obige Ausdruck (8.49)

$$\left\langle g_\gamma^\varepsilon, \varphi\right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma\right\rangle \quad .$$

Wir können dieses Skalarprodukt noch in

$$\left\langle g_\gamma^\varepsilon, \varphi\right\rangle = \left\langle g_T, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle + \left\langle \nu, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle$$

aufspalten, woraus dessen Stationärität deutlicher folgt. Der (statistische) Mittelwert (8.53),

$$E\left[\left|\left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle\right|^2\right] = E\left[\left|\left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle\right|^2\right] \quad ,$$

ist hier somit ebenso, wie gewünscht, eine stationäre Größe respektive in diesem Sinne können wir g_γ^ε ebenso als eine stationäre Stochastische betrachten.

Seite, $\sigma^2[\nu]\,\|\varphi\|^2$, ist. Zusammengefaßt bedeutet dieses: wird der Regularisierungsparameter über das von uns modifizierte Diskrepanz-Prinzip (8.47) gewählt, so gilt:

$$\sigma^2[\nu]\,\|\varphi\|^2 \;\leq\; \|\varphi_\gamma-\varphi\|^2\,\left(\|g_T\|^2+\sigma^2[\nu]\right) \tag{8.59}$$

$$\text{bzw.}\quad \frac{\sigma^2[\nu]}{\|g_T\|^2+\sigma^2[\nu]} \;\leq\; \frac{\|\varphi_\gamma-\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2}\quad . \tag{8.60}$$

In den obigen Abschätzungen (8.59) und (8.60) ist es uns gelungen Ausdrücke zu vermeiden, die Ableitungen der Gesuchten f oder der Vorgegebenen g enthalten. Wie wir bereits auf Seite 131 bemerkt haben, enthalten die Untersuchungen zur Wahl des Regularisierungsparameters oftmals derartige Terme[37]. Es ist jedoch ein andere Frage, ob die Norm $\|g_T\|$ überhaupt bekannt, respektive zugänglich ist. Bezüglich der experimentellen Praxis wird man dieses wohl verneinen müssen, so daß eine praktische Anwendung dieser Ungleichung zur Abschätzung respektive Wahl des Parameters γ nicht unbedingt gegeben ist.

Es ist jedoch möglich[38], das Betragsquadrat des Skalarproduktes in (8.56) alternativ (gröber) durch

$$|\left\langle g_T,\varphi_\gamma-\varphi\right\rangle|^2 \leq \sup|g_T|^2\,\|\varphi_\gamma-\varphi\|_{L^2}^2 \tag{8.61}$$

abzuschätzen, womit wir als Alternative zu der Ungleichung (8.60) jetzt entsprechend die Ungleichung

$$\frac{\sigma^2[\nu]}{\sup|g_T|^2+\sigma^2[\nu]} \leq \frac{\|\varphi_\gamma-\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2} \tag{8.62}$$

angeben können. In diesem Audruck finden wir, jedenfalls prinzipiell, nur bekannte Größen. Um dieses tatsächlich zu erkennen, vergleichen wir die linke Seite der Ungleichung (8.62) mit den durch die *statistischen Maximumsnorm* definierten[39] *quadratischen relativen Fehler*:

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] \equiv \frac{E[\sup|g^\varepsilon-g_T|^2]}{E[\sup|g^\varepsilon|^2]} = \frac{\sigma^2[\nu]}{\sup|g_T|^2+\sigma^2[\nu]}\quad . \tag{8.63}$$

Der letzte Term in (8.63) folgt (offensichtlich) unmittelbar aus der Linearität des statistischen Mittels $E[\cdot]$ und aus der Darstellung (8.32) der Funktion g^ε. Wählen wir also den Parameter γ gemäß des modifizierten Prinzips (8.47), so ist der maximale relative quadratische statistische Fehler $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu]$ eine untere Schranke für den relativen quadratischen Fehler der regularisierten Grundfunktion φ_γ - verglichen mit den Originalfunktion φ. Wir haben somit eine einfache Bestimmungsgleichung für eine „quasioptimale“[40] Wahl γ^* des Regularisierungsparamters, wenn wir in der Ungleichung (8.62) das Gleichheitszeichen ansetzen:

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = \frac{\|\varphi_{\gamma^*}-\varphi\|^2}{\|\varphi\|^2}\quad . \tag{8.64}$$

Es ist uns also durch die Interpretation der Funktionen f und g als Distributionen und der damit verbundene Ausweitung der Untersuchungen auf den Schwarz-Raum $\mathcal{S}$, und durch die zusätzliche explizite Berücksichtigung des Datenfehlers durch stochastische Funktionen und die damit verbundene zusätzliche statistische Mittelung, gelungen eine von ihrer Struktur her einfach Bestimmungsgleichung zur „quasi optimalen“ Wahl γ^* des Regularisierungsparameters, zumindest für dessen Startwert bei seiner Wahl gemäß des modifizierten Diskrepanz-Prinzips (8.47), abzuleiten, deren Größen auch in der experimentellen Praxis als vorab bekannt vorausgesetzt werden können. Unter dem Lichte des von ARSENIN und TIKHONOV aufgestellten Satzes 8.1 und dessen Konsequenz[41], können wir ebenso *vorschlagen*, die Gleichung (8.64) als *direkte Bestimmungsgleichung des Regularisierungsparameters* aufzufassen.

---

[37] Es sei wiederum auf das Beispiel der Differentiation in Kapitel 4.2.4 (Gl. (4.58) und (4.59)) und auf die Literatur, wie beispielsweise [AT77, Lou89, Gro84, Mor84], verwiesen

[38] siehe [Doe71, Wal94, Wer95]

[39] Zur Definition und den Eigenschaften der *statistischen Maximumsnorm* siehe [AT77, Str63a].

[40] Inwiefern diese Wahl des Regularisierungsparameters mit einer quasioptimalen Wahl tatsächlich zusammenhängt, werden wir im nachfolgenden Abschnitt 8.2.5 kurz untersuchen. Wir wollen jedoch bereits jetzt darauf hinweisen, daß jenseits dieser Arbeit diesbezüglich noch weitere strenge mathematische Untersuchungen notwendig sind.

[41] siehe die Bemerkungen am Anfang dieses Kapitels auf Seite 128

Die prinzipielle Eignung des Diskrepanz-Prinzips (8.47) respektive der Gleichung (8.64) zur Wahl von γ wollen wir jetzt kurz skizzieren. Erinnern wir uns wiederum an die allgemeinen Eigenschaften der Funktion F_γ, die wir im Abschnitt 7.2 dargelegt haben, insbesondere an deren Eigenschaften, eine Grundfunktion und eine Approximation der δ-Distribution zu sein, d.h. es gilt

$$\lim_{\gamma\to 0} \left\langle F_\gamma, \varphi \right\rangle = \langle \delta, \varphi \rangle \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S} \quad , \tag{8.65}$$

woraus seinerseits unmittelbar[42]

$$\lim_{\gamma\to 0} \left\langle F_\gamma * \varphi - \varphi, \psi \right\rangle = \langle \delta * \varphi - \varphi, \psi \rangle = 0 \quad \forall\, \varphi, \psi \in \mathcal{S} \quad , \tag{8.66}$$

folgt, so sehen wir sofort, daß der laut Definition 4.5 der Regularisierung und des Parameters γ geforderten Limes (8.3),

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) = 0$$

gültig ist. Weiter ist, da sowohl $F_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+$ und $\varphi \in \mathcal{S}$ gelten soll, gewährleistet, daß $\Omega(\gamma) = \|\varphi_\gamma - \varphi\|^2$ eine stetige Funktion in γ ist.

8.2.3 Zweite Modifikation des Diskrepanz-Prinzips: Das Diskrepanzprinzip auf $\mathcal{S}$

In diesem Abschnitt wollen wir das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip (8.11) quasi puristisch auf den Schwarz-Raum $\mathcal{S}$ übertragen. Wir werden hier generell sowohl auf die Definitionen und Ergebnisse des Anhangs B, wobei wir entsprechend auf die Literatur über Distributionen wie beispielsweise [BB93, Bre65, Lig66, Wal94] verweisen wollen, als auch auf die von uns im Kapitel 7 abgeleiteten Eigenschaften der stabilisierenden Funktionen und deren Mollifier-Funktionen zurückgreifen - an den entsprechenden Stellen werden wir deswegen auf genaue Querverweise, so diese nicht zwingend notwendig zu sein scheinen, verzichten[43].

Wir betrachten also wieder die Operatorgleichung erster Art,

$$Af = g \quad ,$$

in der der Operator A als exakt bekannt vorausgesetzt sei ($h = 0$ im Diskrepanz-Funktional (8.6)). Weiter sei g eine reguläre temperierte Distribution[44], also $g \in \mathcal{S}'$ und $g \in L^1_{LOC}$. In unserem Fall können wir g zusätzlich als eine stetige und (sogar) analytische Funktion voraussetzen[45].

Es sei g^ε die fehlerbehaftete respektive nur approximativ bekannte Funktion und ebenfalls eine reguläre temperierte Distribution: $g^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ und $g^\varepsilon \in L^1_{LOC}$.

Beschränken wir uns - jedenfall vorerst - nun in dem nachfolgenden auf die Norm[46]:

$$p_{m,l}[\varphi] = \sup \left\{ \left(1 + x^2\right)^{\frac{m}{2}} \left| D^\alpha \varphi \right| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N,\ |\alpha| \le l \right\} \quad . \tag{8.67}$$

Betrachten wir nun die Abweichung der Funktion g^ε von der Funktion g, gemessen auf $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$, um die für die Modifikation notwendige Abschätzung des Datenfehlers zu erhalten. Da sowohl $g^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ als auch $g \in \mathcal{S}'$ gelten soll, gilt offensichtlich auch $g^\varepsilon - g \in \mathcal{S}'$, und wir wissen aus der Theorie der Distributionen von der Existens einer Abschätzung der (allgemeinen) Form

$$\left| \langle g^\varepsilon - g, \varphi \rangle \right| \le \varepsilon_{m,l}\ p_{m,l}[\varphi] \quad , \ \varphi \in \mathcal{S},\ g^\varepsilon,\ g \in \mathcal{S}' \quad . \tag{8.68}$$

[42] siehe allgemein Anhang B und die schon öfters erwähnten Bücher [BB93, Wal94, Lig66]

[43] Entsprechend werden wir in den nachfolgenden Abschnitten dieses Kapitels verfahren.

[44] So es zu keinen Mißverständnissen führt, werden wir den Index „T“ an der theoretischen, exakten Funktion in diesem Abschnitt fortlassen, wie hier bereits geschehen.

[45] siehe Abschnitt 2.1

[46] Ebenfalls werden wir uns implizit auf $N = 1$ beschränken. Die nachfolgenden Ergebnisse sind jedoch ebenso im $\mathbb{R}^N$ gültig.

Ohne Einschänkung des hier Notwendigen, können wir in (8.68) $l = 0$, also $\alpha = 0$ in der Norm (8.67), setzen - das Nachfolgende wird dieses noch bestätigen. Sehen wir uns jetzt die Abschätzung des Datenfehlers detailierter an:

$$\begin{aligned} |\langle g^\varepsilon - g, \varphi\rangle| &= \\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} (g^\varepsilon(x) - g(x))\ \varphi(x)\ dx \right| && (8.69)\\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} (g^\varepsilon(x) - g(x))\ (1+x^2)^{-\frac{m}{2}}\ (1+x^2)^{\frac{m}{2}}\ \varphi(x)\ dx \right| && (8.70)\\ &\leq \|g^\varepsilon - g\|_\infty\ p_{m,0}[\varphi] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}}\ dx < \infty \quad \text{für } m > 1 \quad , && (8.71) \end{aligned}$$

wobei wir in der Abschätzung (8.71) die HÖLDERsche Ungleichung[47] angewandt und danach die Definition (8.67) der Norm $p_{m,l}$ ausgenutzt haben. Es sei wieder $\|g^\varepsilon - g\|_\infty \leq \varepsilon_\infty$. Der Vergleich der Abschätzung (8.71) mit der allgemein gültigen (8.68) ergibt dann für die Größe $\varepsilon_m \equiv \varepsilon_{m,0}$:

$$\varepsilon_m = \varepsilon_\infty \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}}\ dx \quad \text{für } m > 1 \quad . \tag{8.72}$$

Wenden wir uns nun dem Integral in (8.72) zu: Es ist offensichtlich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}} = 2 \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}} \quad . \tag{8.73}$$

Die Mellintransformierte des Integranden in (8.73) ist wohlbekannt[48]:

$$\int_{0}^{\infty} \frac{x^{s-1}}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}}\ dx = \frac{1}{2}\ B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}(m-s)\right) \qquad \text{mit } 0 < \mathfrak{Re}\, s < m \quad , \tag{8.74}$$

wobei $B(x,y)$ wieder die Beta-Funktion[49] ist. Für die Stelle $s = 1$ erhalten wir einmal, direkt aus den Eigenschaften respektive der Definition der Beta-Funktion, (nochmals) die Bedingung $m > 1$ und für das Integral (8.73) den Ausdruck

$$2 \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\ \Gamma\left(\frac{1}{2}(m-1)\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)} = \sqrt{\pi}\ \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(m-1)\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)} \quad , \tag{8.75}$$

wobei wir die Darstellung[50] der Beta- durch die Gamma-Funktion und $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ ausgenutzt haben. So erhalten wir beispielsweise für $m = 2$, wenn wir noch die bekannte Eigenschaft $\Gamma(n+1) = n!$ berücksichtigen, konkret:

$$2 \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}} = \sqrt{\pi}\ \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(1)} = \pi \quad , \tag{8.76}$$

---

[47] Konkret wurde die allgemeine Version der HÖLDERschen Ungleichung nach [Wer95] benutzt; siehe auch Gl. (7.26) und (7.27) auf Seite 103.

[48] siehe [Tit67, EMOT54]

[49] siehe [AS68, EMOT53, JEL66] und hier auch Abschnitt 3.3f

[50] siehe Gleichung (3.25) auf Seite 34 und [AS68, EMOT53, WW69]

also

$$\varepsilon_2 = \pi\,\varepsilon_\infty \quad . \tag{8.77}$$

Zusammengefaßt erhalten wir somit für die Abschätzung des Datenfehlers, also der rechten Seite des Diskrepanz-Prinzips:

$$|\langle g^\varepsilon - g, \varphi\rangle| \;\leq\; \varepsilon_m\; p_{m,0}[\varphi] \tag{8.78}$$

$$\text{mit} \qquad \varepsilon_m \;=\; \varepsilon_\infty\,\sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(m-1)\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)} \quad , \tag{8.79}$$

und konkret für $m = 2$ erhalten wir:

$$|\langle g^\varepsilon - g, \varphi\rangle| \leq \pi\,\varepsilon_\infty\; p_{2,0}[\varphi] \quad . \tag{8.80}$$

Entsprechend zur Abweichung (8.69) transformiert sich jetzt die Diskrepanz von g^ε_γ, die durch die Regularisierte gewonnene, zu g^ε. Das ***zweite modifizierte Diskrepanz-Prinzip***, die puristische Übertragung auf den Raum $\mathcal{S}$ respektive auf deren Dualraum $\mathcal{S}'$, lautet also generell:

$$\left|\left\langle g^\varepsilon_\gamma - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle\right| = \varepsilon_m\; p_{m,0}[\varphi] \quad , \tag{8.81}$$

mit dem durch (8.79) gegebenen Ausdruck für ε_m, und für $m = 2$ erhalten wir noch konkret:

$$\left|\left\langle g^\varepsilon_\gamma - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle\right| = \pi\,\varepsilon_\infty\; p_{2,0}[\varphi] \quad . \tag{8.82}$$

Die wieder durch die Regularisierte erzeugte Funktion g^ε_γ sei, wie schon in den vorangegangenen Abschnitt 8.2.2, vermöge der Mollifier-Funktion F_γ durch

$$g^\varepsilon_\gamma \equiv A f^\varepsilon_\gamma = F_\gamma * g^\varepsilon \tag{8.83}$$

gegeben, woraus mit $F_\gamma \in \mathcal{S}\;\forall\,\gamma \in \mathbb{R}^+$ und $g^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ unmittelbar $g^\varepsilon_\gamma \in \mathcal{S}'\;\forall\,\gamma \in \mathbb{R}^+$ folgt. Zusätzlich folgt aus den Eigenschaften des Faltungsprodukts[51], da g^ε eine reguläre temperierte Distribution sein soll, daß dann die durch (8.83) gegebene g^ε_γ ebenso eine reguläre temperierte Distribution ist.

Entsprechendes zum Skalarprodukt (8.51) im vorangegangenen Abschnitt gilt für die linke Seite des Diskrepanz-Prinzips (8.81), und gehen wir ebenso wie eben bei der Abschätzung des Datenfehlers vor (Gleichungen (8.69) bis (8.71)), dann erhalten wir:

$$|\left\langle g^\varepsilon_\gamma - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle| \;=\; |\left\langle g^\varepsilon, \varphi_\gamma - \varphi\right\rangle| \tag{8.84}$$

$$\;=\; \left|\int_{-\infty}^{\infty} g^\varepsilon(x)\;(1+x^2)^{-\frac{m}{2}}\;(1+x^2)^{\frac{m}{2}}\;\left(\varphi_\gamma(x) - \varphi(x)\right)\;dx\right| \tag{8.85}$$

$$\leq\; \|g^\varepsilon\|_\infty\; p_{m,0}\left[\varphi_\gamma - \varphi\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^{\frac{m}{2}}}\,dx < \infty \quad \text{für } m > 1 \quad . \tag{8.86}$$

Berücksichtigen wir jetzt, daß die Integrale in (8.71) bzw. (8.78) und in der obigen Abschätzung (8.86) die gleichen sind und benutzen den Ausdruck (8.72) für ε_m, so erhalten wir als Abschätzung des Diskrepanz-Prinzips (8.81) sofort:

$$\varepsilon_\infty\; p_{m,0}[\varphi] \;\leq\; \|g^\varepsilon\|_\infty\; p_{m,0}\left[\varphi_\gamma - \varphi\right] \tag{8.87}$$

$$\text{respektive} \qquad \frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} \;\leq\; \frac{p_{m,0}\left[\varphi_\gamma - \varphi\right]}{p_{m,0}[\varphi]} \quad , \tag{8.88}$$

[51] siehe hier Anhang B.4.1

jeweils mit $m > 1$, wobei wir in (8.88) $\|g^\varepsilon - g\|_\infty \leq \varepsilon_\infty$ angewandt haben - was aber letztendlich nur eine Geschmacksfrage ist, um die letzte Zeile in eine mathematisch „eleganteren“ Form zu bringen. Bei einem entsprechenden Vorgehen erhalten wir übrigens (ebenso nicht überaschend)

$$\frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} \leq \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_m^{\mathcal{S}}}{\|\varphi\|_m^{\mathcal{S}}} \quad \text{mit } m > 1 \quad . \tag{8.89}$$

In Worten bedeuten die Abschätzungen (8.88) respektive (8.89): wird der Parameter γ gemäß des modifizierten Diskrepanz-Prinzips (8.81) gewählt, so ist der relative Fehler der regularisierten Grundfunktion größer oder gleich dem relativen Datenfehler.

Erinnern wir uns jetzt wieder an die Konsequenz[52] des Satzes 8.1, so können wir, entsprechend zur Vorgehensweise im vorangegangenen Abschnitt, alternativ zur Wahl des Parameters γ über das Diskrepanz-Prinzip (8.81) als Kriterium die obigen Abschätzungen (8.88) respektive (8.89) benutzen, indem wie die Gleichheit der beiden Seiten ansetzen. Wir *postulieren* also als Alternative und *direktes Kriterium zur Wahl des Parameters* γ:

$$\frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} = \frac{p_{m,0}\left[\varphi_\gamma - \varphi\right]}{p_{m,0}[\varphi]} \tag{8.90}$$

$$\text{bzw.} \qquad \frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} = \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_m^{\mathcal{S}}}{\|\varphi\|_m^{\mathcal{S}}} \quad , \tag{8.91}$$

jeweils mit $m > 1$.

Bezüglich der prinzipiellen Anwendbarkeit des Diskrepanz-Prinzips (8.81) und des Kriteriums (8.90) repektive (8.91) gilt zu den diesbüglichen Bemerkungen auf Seite 136 im vorangegangenen Abschnitt Entsprechendes und soll deswegen nicht nocheinmal explizit wiederholt werden.

Am Ende dieses Abschnittes wollen wir noch auf den (Ordnungs-)Zusammenhang zwischen der Norm auf $\mathcal{S}$ und der L^1-Norm hinweisen. Betrachten wir dazu wieder folgendes: Es sei $\varphi \in \mathcal{S}$ und $g \in \mathcal{S}'$, wobei g sogar eine reguläre temperierte Distribution sei. Für den Betrag des Skalarproduktes gilt, neben den obigen Abschätzungen, offensichtlich[53] ebenso:

$$\begin{aligned} |\langle g, \varphi \rangle| &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\, \varphi(x)\, dx \right| \\ &\leq \|g\|_\infty \, \|\varphi\|_{L^1} \quad . \end{aligned} \tag{8.92}$$

Für jedes $\varphi \in \mathcal{S}$ gilt jetzt, dirket aus der Definition des Raumes $\mathcal{S}$ folgend[54]:

$$|\varphi(x)| \leq \frac{\sup_x \left\{ \left(1 + x^2\right)^{\frac{m}{2}} \, |\varphi(x)| \right\}}{\left(1 + x^2\right)^{\frac{m}{2}}} \quad . \tag{8.93}$$

Somit läßt sich die Norm $\|\varphi\|_{L^1}$ durch die Norm $p_{m,l}[\varphi]$ (Gl. (8.67)) folgendermaßen abschätzen:

$$\|\varphi\|_{L^1} \leq p_{m,0}[\varphi] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\left(1 + x^2\right)^{\frac{m}{2}}} \quad . \tag{8.94}$$

Das Skalarparodukt (8.92) läßt sich hierarchisch also abschätzen zu:

$$|\langle g, \varphi \rangle| \leq \|g\|_\infty \, \|\varphi\|_{L^1} \leq \|g\|_\infty \, p_{m,0}[\varphi] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\left(1 + x^2\right)^{\frac{m}{2}}} \quad ; \tag{8.95}$$

---

[52] siehe die Bemerkungen am Anfang dieses Kapitels auf Seite 128

[53] Dieses folgt sofort aus der HÖLDERschen Ungleichung.

[54] Man erinnere sich auch an die Norm $p_{m,l}$ (Gl. (8.67)).

entsprechendes gilt für die Norm $\|\varphi\|_m^S$. Die Abschätzung des Skalarproduktes (8.92) in der L^1-Norm ist somit, bezüglich der Ordnungsrelationen der Normen, eine schärfere als die in der $\mathcal{S}$-Norm. Wir können jetzt die Norm auf $\mathcal{S}$ entsprechend der Relation (8.94) ersetzen, und so (beispielsweise) das alternative Kriterium (8.90) respektive (8.91) dementsprechend als

$$\frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} = \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_{L^1}}{\|\varphi\|_{L^1}} \tag{8.96}$$

formulieren; dieses hätte die eventuell leichtere Zugänglichkeit der L^1-Norm gegenüber der $\mathcal{S}-$Norm zum (praktischen) Vorteil. Im folgendem werden wir uns weiter hauptsächlich (8.90) respektive (8.91) zuwenden. Die Ergebnisse und Aussagen gelten dann offensichtlich, aufgrund der Ordnungsrelation (8.94), entsprechend für das Kriterium (8.96).

8.2.4 Kritik an den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien

Anknüpfend an den vorangegangenen Abschnitt, zuerst die postiven Kritikpunkte[55]:
Wie wir bereits bei der ersten Modifikation des Diskrepanz-Prinzips 8.2.2 auf Seite 136 bemerkt haben, ist ein Vorteil, wenn wir die Funktionen als Distributionen auffassen und dann konsequenterweise die Betrachtungen auf einem Grundfunktionen- und dessen Distributionenraum (Dualraum) ausweiten, die Vermeidung von Ableitungen beliebiger Ordnung der gesuchten Funktion f oder der Daten g und deren Normen[56]. Und wie aufgrund der Gemeinsamkeiten der Ansätze bei den Modifikationen nicht anders zu erwarten war, besitzt die obige Abschätzung (8.87) respektive (8.88) die gleiche Struktur wie die entsprechende Abschätzung für das erste modifizierte Prinzip, Gleichung (8.59) respektive (8.60) oder Gleichung (8.62): der relative Datenfehler, in einem Maß gemessen, wird mit dem relativen Fehler der regularisierten Grundfunktion gegenüber deren Ursprünglichen, in einem entsprechenden Maß gemessen, verglichen, d.h. wir haben es nur mit als grundsätzlich bekannt voraussetzbaren Größen zu tun. Aus diesen beiden Punkten folgt weiterhin, wenn wir anstelle der modifizierten Kriterien (8.47) und (8.81) die aus diesen geborenen alternativen Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91) anwenden, daß wir zur Bestimmung des Parameters γ auf mathematisch „einfache“ Gleichungen zurückgreifen, die es uns sogar erlauben, noch vor der eigentlichen Durchführung der Regularisierung, bei alleiniger Kenntnis der Daten und deren relativen (quadratischen) Fehlers, γ zu bestimmen. Der numerische Aufwand wird selbst bei diesen bezüglich γ als nicht-linear zu erwartenden Gleichungen, im Vergleich zu der direkten Anwendung eines Diskrepanz-Prinzips, erheblich niedriger sein.

Der wesentliche negative Kritikpunkt an den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien (8.47) und (8.81), der ebenso bei den alternativen Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91) greift, ist aber gerade deren Erweiterung auf einem Grundfunktionenraum, wodurch der Parameter γ nicht mehr nur eine Funktion der Daten und deren Fehler ist, sondern zusätzlich noch eine Funktion, genauer ein Funktional, der Grundfunktion wird:

$$\gamma = \gamma[\varepsilon, g^\varepsilon;\ \varphi] \quad . \tag{8.97}$$

Aus der Gültigkeit von

$$\lim_{\gamma\to 0} \langle F_\gamma * \varphi - \varphi, \psi\rangle = \langle \delta * \varphi - \varphi, \psi\rangle = 0, \quad F_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+,\ \forall\ \varphi, \psi \in \mathcal{S} \quad , \tag{8.98}$$

woraus sich, wie implizit desöfteren bereits erwähnt, (unmittelbar) der Limes

$$\lim_{\gamma\to 0} \left(F_\gamma * \varphi - \varphi\right) = 0, \quad F_\gamma \in \mathcal{S}\ \forall\ \gamma \in \mathbb{R}^+,\ \forall\ \varphi, \psi \in \mathcal{S} \tag{8.99}$$

[55] Der Begriff *Kritik* wird von uns in seiner allgemeinen Bedeutung verwendet. So bedeutet Kritik u.a. die Hervorhebung und Untersuchung sowohl der positiven als auch der negativen Eigenschaften.

[56] Überhaupt ermöglicht, wie schon die Ausführungen des nachfolgenden Abschnitts 8.2.5 und die des Kapitels 9 zeigen werden, die Verwendung der Theorie der Distributionen, elegante Ausdrücke respektive Abschätzungen über die Differenz zweier als Distributionen betrachteter Funktionen abzuleiten.

ergibt, folgt, daß der der laut Definition 4.5 der Regularisierung und des Parameters γ geforderten Limes (8.3), jetzt in seiner abgewandelten Form, bei der Anwendung der modifizierten Diskrepanz-Prinzipien und der alternativen Kriterien gültig ist:

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \gamma[\varepsilon, g^\varepsilon;\, \varphi] = 0 \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{8.100}$$

Der Limes (8.100) gilt, wie wir deutlich darauf hinweisen wollen, für jedes $\varphi \in \mathcal{S}$ und im Sinne der Theorie der Distributionen auch unabhängig von der Grundfunktion φ. Wir wollen auch darauf hinweisen, daß aus den Eigenschaften der Funktionen in $\mathcal{S}$ und der Normen $p_{m,l}[\varphi]$ bzw. $\|\varphi\|_m^{\mathcal{S}}$ auf $\mathcal{S}$ die Stetigkeit bezüglich γ der rechten Seite der Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91) folgt, es durch die neue Abhängigkeit von $\varphi \in \mathcal{S}$ bei der Wahl von γ somit zu keinen weiteren neuen Schwierigkeiten kommt.

Es stellt sich jetzt die Frage nach der weiteren Natur der Abhängigkeit des Parameters γ von φ. Bei der direkten Anwendung der Modifizierten (8.47) und (8.81) ist eine schwerpunktmäßig explizite Abhängigkeit zu erwarten, wohingegen bei der Anwendung der alternativen Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91) wir, weil dort relative Fehler verglichen werden, eine schwerpunktmäßig implizite Abhängigkeit vermuten - und erhoffen. Wir wollen an dieser Stelle auch eingestehen, daß es uns bisher nicht gelungen ist, die Abhängigkeiten von der Grundfunktion durch eine (geeignete) Mittelung über den Grundfunktionenraum zu beseitigen. Das größte Problem ist, wie man bereits erahnt, die konkrete Durchführbarkeit[57] einer solchen Mittelung.

Wir wollen im Hinblick dieser Abhängigkeit noch auf das folgende **hinweisen**: Das einfachste und wichtigste Beispiel einer Grundfunktion $\varphi \in \mathcal{S}$ ist die Gaußartige Funktion[58]

$$\varphi(x) = P(x)\; G(x) = P(x)\; e^{-\alpha x^2} \in \mathcal{S} \tag{8.101}$$

wobei $P(x)$ ein Polynom und $\alpha > 0$ sei. Daraus folgt, wenn eine Funktion h polynomial abschätzbar ist und $h \in L^1$ gilt, daß für das Produkt

$$\varphi(x) = h(x)\; G(x) = h(x)\; e^{-\alpha x^2} \in \mathcal{S} \tag{8.102}$$

gilt. In diesem Sinne kann man die Gaußartigen Funktionen als „Erzeugende“ von Grundfunktionen[59] in $\mathcal{S}$ betrachten, zumindest aber als einen „typischen Vertreter“ der Funktionen in $\mathcal{S}$. In diesem Sinne - und nur in diesem Sinne - können wir „typische“ Ergebnisse bei dem Ansetzen Gaußartiger Grundfunktionen in dem modifizierten bzw. alternativen Kriterien erhalten. Wir wollen der Ehrlichkeit wegen erwähnen, daß neben den in dieser Arbeit insgesamt vorgestellten Untersuchungen noch weitere bezüglich des Einflusses der Grundfunktion bei der Wahl des Regularisierungsparameters gemäß der eben vorgestellten modifizierten und alternativen Kriterien notwendig sind. Da, wie am Anfang dieses Kapitels auf Seite 127 bereits hingewiesen worden ist, die Wahl des Regularisierungsparameters in unserem exponentiell schlecht gestellten Fall nicht wirklich ein grundlegendes Problem ist, haben wir auf weitere Untersuchungen, außer den hier insgesamt vorgestellten und erwähnten, verzichtet.

8.2.5 Der Zusammenhang zwischen den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien und den Regularisierungsfehler

Bereits auf Seite 125 im Abschnitt 7.3 haben wir darauf hingewiesen, daß die Ausweitung der Untersuchungen, durch die Interpretation der Funktionen als Distributionen, auf einem dem Problem angemessenen Grundfunktionen- und dessen Distributionenraum äquivalent mit der Stabilisierung des Problems durch

[57] Die Mittelungen über den Raum $\mathcal{S}$ beinhaltenden theoretische Ausdrücke sind bisher für eine konkret praktische Anwendung leider nicht geeignet.

[58] siehe Anhang B.2.2 und [BB93, Wal94]

[59] Es ist bisher nicht bewiesen worden, daß durch Gaußfunktionen tatsächlich alle Funktionen $\varphi \in \mathcal{S}$ erzeugt respektive dargestellt werden können.

Änderung der Topologie[60] ist. Dieses berücksichtigend, betrachten wir die Diskrepanz der, auf der fehlerbehafteten Funktion $g^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ basierenden, regularisierten $f_\gamma^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ von der exakten Lösung $f_T \in \mathcal{S}'$ - im Sinne der Distributionentheorie:

$$\left\langle f_T - f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle f_T - f^\varepsilon, \varphi \right\rangle + \left\langle f^\varepsilon - f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle \quad , \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{8.103}$$

Hierbei ist $f^\varepsilon \in \mathcal{S}'$ die mit g^ε gewonnene (formale) „Lösung“, die, entsprechend des Ausdrucks (7.184) auf Seite 124 respektive der Theorie der Distributionen, durch

$$\left\langle f^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle A^{-1} g^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, (A^{-1})^* \varphi \right\rangle \tag{8.104}$$

definiert respektive gegeben ist[61]; ein entsprechender Ausdruck gilt offensichtlich[62] für f_T. Bei analogem Vorgehen erhalten wir für das Skalarprodukt der Regularisierten mit einer Grundfunktion, wobei wir mit T_γ wieder den Regularisierungs-Operator bezeichnen wollen:

$$\left\langle f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle T_\gamma g^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, T_\gamma^* \varphi \right\rangle \quad . \tag{8.105}$$

Mit den Ausdrücken (8.104) und (8.105) können wir das zu untersuchende Skalarprodukt (8.103), unter Berücksichtigung dessen Linearität, folgendermaßen umschreiben:

$$\left\langle f_T - f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle g_T - g^\varepsilon, (A^{-1})^* \varphi \right\rangle + \left\langle g^\varepsilon, \left[(A^{-1})^* - T_\gamma^* \right] \varphi \right\rangle \quad . \tag{8.106}$$

Führen wir jetzt noch, analog zur Gleichung (7.185) auf Seite 124, die Größen Λ und Λ_γ durch

$$\Lambda = \left(A^{-1}\right)^* \varphi \tag{8.107}$$

$$\text{und} \quad \Lambda_\gamma = T_\gamma^* \varphi \tag{8.108}$$

ein, so erhalten wir letztendlich das „elegantere“ Ergebnis:

$$\left\langle f_T - f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle g_T - g^\varepsilon, \Lambda \right\rangle + \left\langle g^\varepsilon, \Lambda - \Lambda_\gamma \right\rangle \quad . \tag{8.109}$$

Wie wir bereits an dem Ausdruck (8.103) hätten ablesen können, beschreibt, von seinem Wesen her, der erste Term der rechten Seite von (8.109) wieder den Einfluß des Datenfehlers und der zweite Term den reinen Einfluß der Regularisierung T_γ auf dem Gesamtfehler, der linken Seite des obigen Ausdrucks. Aus der Definition 4.5 des Regularisierungs-Operators T_γ und der Stetigkeit des Skalarprodukts in $\mathcal{S}$ folgt übrigens unmittelbar der Limes[63]

$$\lim_{\gamma \to 0} \left\langle g, \Lambda - \Lambda_\gamma \right\rangle = 0 \quad , \forall\, g \in \mathcal{S}'. \tag{8.110}$$

Beim verschwindendem Datenfehler, also $g^\varepsilon \to g_T$, und den dadurch implizierten Limes $\gamma \to 0$, folgt somit das Verschwinden der rechten Seite des Ausdrucks[64] (8.109):

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \left\langle f_T - f_\gamma^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \left(\left\langle g_T - g^\varepsilon, \Lambda \right\rangle + \left\langle g^\varepsilon, \Lambda - \Lambda_\gamma \right\rangle \right) = 0 \quad . \tag{8.111}$$

Aus der HÖLDERschen Ungleichung[65] ergeben sich nun direkt für die Terme der rechten Seite von (8.109) die beiden Abschätzungen

$$\left\langle g_T - g^\varepsilon, \Lambda \right\rangle \leq \| g_T - g^\varepsilon \|_{L^p} \, \| \Lambda \|_{L^q} \tag{8.112}$$

$$\left\langle g^\varepsilon, \Lambda - \Lambda_\gamma \right\rangle \leq \| g^\varepsilon \|_{L^p} \, \| \Lambda - \Lambda_\gamma \|_{L^q} \quad , \tag{8.113}$$

[60] siehe Abschnitt 4.2.5 und [Lou89]

[61] Mit O^* sei hier wieder das Adjungierte des Operators O bezeichnet.

[62] siehe auch die Ausführungen auf Seite 125 im Abschnitt 7.3

[63] Genauer gilt, nach Definition 4.5, $\lim_{\gamma \to 0} T_\gamma g = A^\dagger g$, wobei $A^\dagger$ die verallgemeinerte Inverse sei (siehe generell Kapitel 4). Wir können hier jedoch entweder generell den inversen Operator durch das entsprechende verallgemeinerte Inverse ersetzen - und in diesem Sinne beide kurz (und leichtfertig) als synonym betrachten - oder berücksichtigen, daß bei Entfaltungsproblemen, wie wir hier im Abschnitt 5.3.1 gezeigt haben, die beiden Operatoren identisch sind.

[64] Diesen Limes hätten wir selbstverständlich ebenso direkt aus (8.103) ableiten können.

[65] siehe [Wer95, Doe71]

mit $1 \leq p \leq \infty$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ und der Konvention $\frac{1}{\infty} = 0$, wobei wir natürlich noch g_T, $g^\varepsilon \in L^q$ und Λ, $\Lambda_\gamma \in L^p$ voraussetzen müssen. Aus der ersten Abschätzung, Gleichung (8.112), folgt übrigens die Stetigkeit des inversen Operators A^{-1} bezüglich der schwächeren Topologie[66] in $\mathcal{S}$, und mit der (vorausgesetzten) Linearität und Stetigkeit des Operators T_γ und $\varphi \in \mathcal{S}$ folgt insgesamt die Stetigkeit der Skalarprodukte in (8.103) und (8.109).

Die erste Abschätzung (8.112) ist als eine (modifizierte) Abschätzung des Fehlers der Funktion g^ε interpretierbar. Entsprechend zu der Vorgehensweise in den vorangegangenen Abschnitten 8.2.2f, können wir wiederum ein (modifiziertes) *Diskrepanz-Prinzip* durch

$$|\langle g^\varepsilon, \Lambda - \Lambda_\gamma \rangle| = \|g_T - g^\varepsilon\|_{L^p} \, \|\Lambda\|_{L^q} \tag{8.114}$$

vormulieren, und ebenso entsprechend zu der vorangegangenen Vorgehensweise, erhalten wir für dieses Diskrepanz-Prinzip die Abschätzung der Form

$$\frac{\|g_T - g^\varepsilon\|_{L^p}}{\|g^\varepsilon\|_{L^p}} \leq \frac{\|\Lambda - \Lambda_\gamma\|_{L^q}}{\|\Lambda\|_{L^q}} \quad ; \tag{8.115}$$

der relative Datenfehler ist wieder eine untere Schranke des relativen, auf die Funktion Λ bezogenen, (gesamten) Regularisierunsgsfehlers.

Wir haben auf Seite 131 nun die quasi optimale Wahl des Regularisierungsparameters eingeführt, indem wir letztendlich die Gleichheit des Einflusses der beiden Fehlerquellen in (8.109) gefordert haben, also

$$\langle g_T - g^\varepsilon, \Lambda \rangle = \langle g^\varepsilon, \Lambda - \Lambda_\gamma \rangle \quad . \tag{8.116}$$

Übertragen wir diese Vorderung direkt auf die Abschätzungen (8.112) und (8.113), so führt uns das auf eine *direkte Bestimmungsgleichung* des Parameters γ, mit der uns jetzt bereits geläufigen Struktur:

$$\frac{\|g_T - g^\varepsilon\|_{L^p}}{\|g^\varepsilon\|_{L^p}} = \frac{\|\Lambda - \Lambda_\gamma\|_{L^q}}{\|\Lambda\|_{L^q}} \quad . \tag{8.117}$$

Wir sehen, daß wir durch die Ausweitung der Untersuchungen auf den Raum $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$, die die Anwendung der Theorie der Distributionen zur Konsequenz hat, einen Zusammenhang zwischen den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien (8.47) und (8.81) einerseits und der Diskrepanz von der regularisierten f_γ^ε zur exakten Lösung f_T (Gl. (8.103)) andererseits in einer direkten Art und Weise ableiten konnten, genauer einen Zusammenhang zwischen den betreffenden Abschätzungen der relativen Fehler: die Struktur dieser Abschätzungen, die Gleichungen (8.59) respektive (8.60) oder Gleichung (8.62) für das erste modifizierte, und die Gleichungen (8.87) respektive (8.88) für das zweite modifizierte Diskrepanz-Prinzip, ist mit der Struktur der Abschätzung (8.115) des - letztendlich aus der Abweichung (8.103) geborenen - Diskrepanz-Prinzips (8.114) identisch. Der relative Datenfehler ist hier jeweils eine untere Schranke des modifizierten relativen Regularisierungsfehlers. Offensichtlich können wir sogar die gleichen Normen in diesen Abschätzungen voraussetzen, beispielsweise $p = \infty$ und $q = 1$. Wir haben so eine zusätzliche Motivation für die modifizierten Diskrepanz-Prinzipien.

Von größerer Bedeutung ist die, durch die Ergebnisse dieses Abschnitts gewonnene, zusätzliche Motivation jedoch für die zu den Diskrepanz-Prinzipien alternativ postulierten direkten Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91), in denen der Parameter γ durch die Gleichsetzung des modifizierten relativen Regularisierungsfehlers mit dem relativen Datenfehler bestimmt wird, und die dieselbe Struktur[67] wie das ebenso aus der direkten Abweichung (8.103) geborene Kriterium (8.117) aufweist. Bei der Bestimmung von γ über die Kriterien (8.64) und (8.90) respektive (8.91) können wir erhoffen, daß der so gewonnene Wert für γ von der (numerisch) gleichen Größenordnung wie der durch (8.117) gegebene „quasi optimale“ Wert ist. Die Gleichheit der Struktur dieser Kriterien ist, anders ausgedrückt, ein Indiz, natürlich noch kein Beweis, für

[66] siehe auch Abschnitt 4.2.5 und [Lou89]

[67] Die Gleichheit der generellen Strukturen liegt selbstverständlich in den von deren Wesen her identischen Ansätzen bei der Untersuchungen der Diskrepanzen begründet.

eine tatsächlich quasi optimale Wahl des Parameters γ durch diese alternativen Kriterien. Wie wir bereits bemerkt[68] haben, muß der Zusammenhang zwischen der quasi optimalen Wahl und der Wahl nach den soeben eingeführten alternativen Kriterien jedoch noch weiter und genauer mathematisch untersucht werden.

Wir wollen abschließend noch erwähnen, daß wir einen zur Abschätzung (8.115) respektive zum Kriterium (8.117) korrespondierenden Ausdruck ableiten können, wenn wir wie im Abschnitt 8.2.2 den Fehler von g^ε explizit durch eine stationäre stochastischen Funktion ν berücksichtigen und deswegen zusätzlich die statistische Maximumsnorm einbeziehen. Gehen wir also entsprechend wie im Abschnitt 8.2.2 vor, dann erhalten wir als direktes, durch statistische Größen ausgedrücktes, Kriterium für eine „quasi optimalen“ Wahl des Regularisierungsparameters:

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = \frac{\|\Lambda - \Lambda_\gamma\|^2_{L^2}}{\|\Lambda\|^2_{L^2}} \quad , \tag{8.118}$$

mit[69]

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = \frac{\sigma^2[\nu]}{\sup|g_T|^2 + \sigma^2[\nu]} \quad . \tag{8.119}$$

Für die anderen hier abgeleiteten Größen erhalten wir analoge Ausdrücke, die wir, da wir auf diese nicht explizit zurückgreifen werden, hier nicht wiedergeben wollen.

Wir wollen abschließend darauf hinweisen, daß die im direkt vorangegangenen Abschnitt 8.2.4 aufgezeigten Kritikpunkte, insbesondere die negativen, entsprechend für die Ergebnisse dieses Abschnitts gelten. Wir wollen jene deshalb an dieser Stelle nicht wiederhohlen.

8.3 Ein Konsistenzkriterium oder die Wahl des Parameters über die Schranken der integrierten Dichtefunktion

In diesem Abschnitt wollen wir ein bisher in der Literatur noch nicht erwähntes Verfahren vorstellen, das uns theoretisch zumindest einen Bereich „erlaubter“ Werte des Regularisierungsparameters γ liefert. Wie wir im Anhang D kurz darlegen, können wir neben der *direkten* numerischen Behandlung der Integralgleichung (2.13) bzw. (2.47) im Sinne einer Regularisierung, diese auch noch auf einer alternativen Art und Weise numerisch behandeln: Basierend auf dem (allgemeinen) *Markov-Krein Theorem* aus der *Theorie der Tchebycheff-Systeme* [KS66] können *rigorose obere und untere Schranken*, I^+ und I^-, für die *integrierte Verteilungsdichte I* der *exakten* Lösung p_T, welche durch die Gleichung

$$I(\tau_0) = \int_0^\infty \Theta(\tau - \tau_0)\, p_T(\tau)\, d\tau = \int_{\tau_0}^\infty p_T(\tau)\, d\tau \tag{8.120}$$

definiert ist, berechnet werden. Die Funktion $\Theta(\tau - \tau_0)$ ist die bekannte Theta-Funktion (Stufenfunktion):

$$\Theta(\tau - \tau_0) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad \tau > \tau_0 \\ 0 & \text{für} \quad \tau < \tau_0 \end{cases} \quad . \tag{8.121}$$

Aufgrund der Schrankeneigenschaften gilt unmittelbar

$$I^-(\tau_0) \le I(\tau_0) \le I^+(\tau_0) \quad \forall\ \tau_0 \in \mathbb{R}^+ \quad . \tag{8.122}$$

Wichtig zu erwähnen ist noch, daß bei der Berechnung der Schranken sowohl die Normierung der Dichtefunktion als auch das Fehlerniveau der Daten über Nebenbedingungen eingehen.

---

[68] siehe die Fußnote 40 auf Seite 136

[69] siehe auch die Definition (8.63) des quadratischen relativen Fehlers

Da es sich bei $\gamma = \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon)$ gemäß des Satzes 8.1 um eine mehrdeutige Funktion handelt, können die Schranken also prinzipiell benutzt werden, um den Wert bzw. das Intervall des Regularisierungsparameters zu bestimmen, in dem die integrierte regularisierte Dichtefunktion I_γ für fast alle τ_0 innerhalb der Schranken I^+ und I^- liegt und diesen Wert respektive dieses Intervall als zur Regularisierung zulässig betrachten. Die Grundidee ist also die Forderung der Konsistenz von integrierter regularisierter Dichtefunktion mit den Schranken der Integrierten, die jeweils auf der Basis der gleichen Daten bestimmt werden. Ausformuliert wär die Strategie zur Wahl des Parameters γ also wie folgt:

1. Ist die exakte, theoretische Funktion bekannt, ist also $g^\varepsilon \equiv g_T$, $\varepsilon = 0$, so führe man zur numerischen Behandlung in der Regularisierung numerisch den Limes $\gamma \to 0$ aus bzw.[70] setze $\gamma = 0$.

2. Es gelte $\|g^\varepsilon - g_T\| \leq \varepsilon$. Ist jetzt noch zusätzlich $\|g^\varepsilon\| \leq \varepsilon$ erfüllt, dann sei $\gamma = \infty$. Andernfalls, d.h. es sei $\|g^\varepsilon\| > \varepsilon$, sei der Wert des Parameters respektive das Intervall der möglichen Werte so gewählt, daß für die Integrierten

$$I^-(\tau_0) \leq I_\gamma(\tau_0) \leq I^+(\tau_0) \quad \text{für fast alle } \tau_0 \in \mathbb{R}^+ \quad , \tag{8.123}$$

wobei offensichtlich

$$I_\gamma(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\infty} p_\gamma(\tau)\, d\tau \tag{8.124}$$

sei, gelte.

Zu dem bisherigen ersteinmal noch einige **Bemerkungen**: Das eben vorgestellte Konsistenzkriterium ist insofern noch als ein Vorschlag zu betrachten, als das zu einem noch näher zu klären ist, was genau unter „für fast alle τ_0“ mathematisch konkret zu verstehen ist. Sowohl die Schranken $I^{(\pm)}$ als auch die integrierte I_γ werden nur numerisch (diskret) vorliegen. Eine Möglichkeit wäre beispielsweise, um das Verfahren zu testen, die Vorderung, daß mindestens 90 % der Datenpunkte von I_γ die Bedingung (8.123) erfüllen mögen. Ein weitere offene Frage ist zum anderem die nach den möglichen Formen der Schranken. So könnte es ohne weiteres sein, daß kein γ existiert, für das die Bedingung (8.123) erfüllt ist. Dieses könnte gerade dann der Fall sein, wenn beide Schranken I^+ und I^- sehr nahe beieinander liegen oder sich (numerisch) kaum voneinander unterscheiden würden. In diesen Fällen ist es denkbar die Vorderung nach der Konsistenz der integrierten Funktionen derart zu interpretieren, daß die Bedingungen

$$I_{\gamma^-}(\tau_0) \leq I^-(\tau_0) \quad \text{und} \quad I^+(\tau_0) \leq I_{\gamma^+}(\tau_0) \quad \text{für fast alle } \tau_0 \in \mathbb{R}^+ \tag{8.125}$$

gelten mögen, wobei dann als Regularisierungsparameter, um den störenderen Einfluß des Datenfehlers klein zu halten, der größere der beiden Werte $\gamma^{(\pm)}$ zu wählen ist.

Bei der Untersuchng der theoretischen Eigenschaften des Konsistenzkriteriums ist es, wie schon bei der Untersuchung der Regularisierung, praktisch, die schon oftmals erwähnte Variablentransformation $\tau = e^{-t}$ durchzuführen. Ebenso werden die mathematischen Ausdrücke wieder eleganter, und so auch handlicher, wenn wir wieder an Stelle der Funktion p die Funktion w betrachten. Für die Integrierte[71] $I_{(\gamma)}$ der Dichte $w_{(\gamma)}$ ergibt sich somit, mit $I_{(\gamma)}(e^{-t}) = \bar{I}_{(\gamma)}(t)$ und $w_{(\gamma)}(e^{-t}) = W_{(\gamma)}(t)$

$$I_{(\gamma)}(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\infty} \frac{w_{(\gamma)}(\tau)}{\tau}\, d\tau \quad \overset{\tau = e^{-t}}{\longrightarrow} \quad \bar{I}_{(\gamma)}(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} W_{(\gamma)}(t)\, dt \quad . \tag{8.126}$$

[70] Welche Vorgehensweise bei der numerischen Auswertung mit exakten Daten die sinnvollere ist, hängt von dem Grad der Schlechtgestelltheit des Problems und von den verwendeten Regularisierungsverfahren ab. Dieses alles setzt selbstverständlich voraus, daß die Lösung auch bei Vorliegen eines exakten analytischen Ausdrucks der Funktion g nur durch eine numerischen Inversion zugänglich ist.

[71] Die Bezeichnung $f_{(\gamma)}$ soll andeuten, daß es sich sowohl um die theoretische als auch um die Regularisierte respektive auf diese Funktionen basierende handelt.

Entsprechend ergibt sich für die *Verteilungsfunktion*[72] $P_{(\gamma)}$, definiert[73] durch

$$P_{(\gamma)}(\tau_0) = \int_0^{\tau_0} p_{(\gamma)}(\tau)\, d\tau = \int_0^{\tau_0} \frac{w_{(\gamma)}(\tau)}{\tau}\, d\tau \quad , \tag{8.127}$$

die entsprechende Transformation

$$P_{(\gamma)}(\tau_0) \quad \stackrel{\tau=e^{-t}}{\longrightarrow} \quad \bar{P}_{(\gamma)}(t_0) = \int_{t_0}^{\infty} W_{(\gamma)}(t)\, dt \quad . \tag{8.128}$$

Wir sehen, daß sich die Rollen der Verteilungsfunktion $P_{(\gamma)}$ und der Integrierten $I_{(\gamma)}$ unter der Transformation $\tau = e^{-t}$ gerade vertauschen.

Wir wollen an dieser Stelle nochmals die Notwendigkeit weiterer Untersuchungen, neben den hier vorgestellten, bezüglich des Konsistenzkriteriums betonen, um weitere Aussagen über dessen (praktische) Anwendbarkeit und dessen Güte zu erhalten. Einige konkrete theoretische Aussagen bei der Anwendung dieses Verfahrens auf unser Problem werden wir noch im Abschnitt 9.5.2 wiedergeben[74].

Abschließende Bemerkungen

Wie wir bereits des öfteren erwähnt haben, ist die Bestimmung des Regularisierungsparameters γ eines der beiden fundamentalen Probleme bei der Regularisierung. Ebenso wie bei der Frage nach den Regularisierungsverfahren[75], wird sich bei den Untersuchungen zur Wahl des Regularisierungsparameters, besonders in Hinblick auf die Praxis, im Falle der Entfaltungsprobleme größenteils auf die Anwendbarkeit der Fourier-Transformation, bei den metrische Räumen X und Y generell auf Hilbert- oder Banach- Räume reellwertiger Funktionen f und g und zusätzlich noch oftmals auf die Anwendung eines Stabilisators p-ter Ordnung beschränkt. Dafür sind einige Methoden zur Wahl des Regularisierungsparameters entwickelt worden, die ohne die genaue Kenntnis des Fehlers ε der bekannten Funktion g^{ε} oder der Kenntnis der Varianz $\sigma^2[\nu]$ des Rauschens ν auskommen, wie z.B die *cross-validation* Methode von WAHBA [BW82], auf die wir aufgrund der schon erwähnten Gründen hier nicht näher eingehen wollen. Für Weiterführendes und Details sei wieder auf die Literatur, wie beispielsweise auf [AT77, Dav82, Mar82, Mil74, RC82, BW82], verwiesen.

---

[72] $I_{(\gamma)}$ ist gerade die zu $P_{(\gamma)}$ komplementäre Funktion, d.h. es gilt $P_{(\gamma)}(\tau) + I_{(\gamma)}(\tau) = 1 \; \forall\, \tau \in \mathbb{R}^+$.

[73] Bezüglich der aus der Statistik stammenden Definitionen der Begriffe der *Verteilungsfunktion P* und deren *komplementären Funktion I* sei beispielsweise auf [Str63a] verwiesen.

[74] Im Abschnitt 9.5 sollen generell kurz konkrete thoeretische und praktische Ergebnisse über die Anwendbarkeit der hier vorgestellten Strategien zur Wahl von γ auf das hier behandelten Problem wiedergegeben werden.

[75] siehe die diezbezüglichen Kommentare in den Kapiteln 5 ff

Kapitel 9

Zur konkreten Regularisierung und deren Eigenschaften

In dem nun folgenden Kapitel wollen wir das bisher abgeleitete nun konkret zur Regularisierung der phänomenologischen Integralgleichung anwenden. Dabei werden wir uns natürlich hauptsächlich auf das genuin auf stabilisierenden Funktionen basierende Regularisierungsverfahren konzentrieren, wobei die im Kapitel 7 abgeleiteten Sätze 7.3 und 7.4 die Kernpunkte bilden werden. Im Rahmen dieser Abschnitte werden wir jedoch, da die Anwendung eines Spezialfalles der Mellin-Transformation zur Lösung möglich ist, auch auf die Anwendbarkeit der Tikhonov-Phillips Regularisierung und des idealen Tiefpasses eingehen, wobei wir die Darstellung dieser Regularisierungsverfahren über deren Filter betrachten werden.

Generell werden wir uns mir der Wahl des Regularisierungsparameters relativ kurz befassen, wobei das von uns eingeführte Konsistenzkriterium eine Ausnahme bildet und wir dieses etwas ausführlicher betrachten werden. Der Grund, die Wahl des Regularisierungsparameters allgemein kürzer zu behandeln, liegt vorweggenommen darin, daß das einfache „Trial and Error“-Verfahren respektive das Durchfahren des Regularisierungsparameters innerhalb eines Intervalls aufgrund der Einflüsse der einzelnen Fehlerquellen auf das Regularisierungsverfahren ausreichend sein wird.

Zuerst sollen jedoch die, für die Regularisierung nicht gerade unwichtigen, Eigenschaften der Integralgleichung zusammenfassend wiederholt werden und einige kurz Vorbetrachtung, durch die die Regularisierung „eleganter“ durchgeführt werden kann, durchgeführt werden.

9.1 Vorbetrachtungen oder Eigenschaften der Integralgleichung II

Fassen wir zuerst die wesentlichen Eigenschaften des phänomenologischen Ansatzes (2.13),

$$E^{+}(\omega) = \int_{0}^{\infty} \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, p(\tau)\, d\tau \quad ,$$

die wir bisher in den vorangegangenen Kapiteln aufgezeigt haben, zusammen:

1. Die Struktur der Integralgleichung (2.13) ist die eines *Faltungsintegrals*.
2. Da es sich bei der Integralgleichung (2.13) um eine *Fredholmsche Integralgleichung erster Art* handelt, gehört diese zu den *schlecht gestellten inversen Problemen*!

3. In der Lösung der Integralgleichung (2.13) sind die *funktionentheoretischen Eigenschaften* der gegebenen Funktion E^+ und deren *analytische Fortsetzung* (respektive Fortsetzbarkeit) *implizit involviert*!

4. Die Reziproke der Mellintransformierten des Integralkerns K^{-1} *divergiert exponentiell* an den Grenzen der (komplexen) inversen Mellin-Transformation (Gl. (2.98))! Gemäß den Ausführungen im Abschnitt 4.3 zur Klassifizierung schlecht gestellter Probleme bedeutet dieses, daß die Integralgleichung (2.13) *exponentiell schlecht gestellt* ist!

Für das Filter $\tilde{F}_\gamma$ bedeutet die exponentielle Schlechtgestelltheit des Problems, daß dieses für $s \to i\infty$ und $s \to i\infty$ für jedes $\gamma > 0$ derart exponentiell stärker als K^{-1} abfallen muß, daß notwendig[1]

$$\frac{\tilde{F}_\gamma}{K} \in L^2(c - i\infty, c + i\infty) \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \tag{9.1}$$

gelte, eine nichtgerade unerhebliche Bedingung.

Im Abschnitt 2.4.2 haben wir an Stelle von p die Funktion w durch die Gleichung (2.46),

$$p(\tau) = \frac{w(\tau)}{\tau} \quad ,$$

eingeführt, wodurch die Integralgleichung nun die Form (2.47)

$$E^+(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1 - i\tau\omega}\, \frac{w(\tau)}{\tau}\, d\tau \tag{9.2}$$

annimmt, und gezeigt, daß die Bestimmung der Funktion w völlig äquivalent zur Bestimmung der Funktion p ist, da beide Funktionen bezüglich der Mellin-Transformation identisch sind, d.h. deren Mellintransformierte funktional identisch sind. Die Lösung der Gleichung (9.2) als inverse Mellin-Transformation ist dementsprechend durch die Gleichung (2.50) gegeben,

$$w(\tau) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tau^{-s}\, \frac{\tilde{E^+}(-s)}{K(-s)}\, ds \quad , \tag{9.3}$$

ein bezüglich der Variablen s symmetrischer und „eleganterer“ Ausdruck, bei dem bestimmte Eigenschaften aufgrund von Symmetrien hier erst richtig deutlich werden; dazu kommen wir in den späteren Abschnitten.

Gemäß all des bisher Erwähnten, suchen wir also regularisierte Lösungen w_γ der Integralgleichung (9.2), und per definitionem des Regularisierungsverfahrens (5.50) erhalten wir diese durch das Einsetzen eines Filters $\tilde{F}_\gamma$, der die Bedingungen des Satzes[2] 7.3 respektive des Satzes 7.4 erfüllt, in die theoretische, durch die komplexe inverse Mellin-Transformation dargestellte, Lösung[3] (2.50):

$$w_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\, \tilde{F}_\gamma(-s)\, \frac{\tilde{E^+}(-s)}{K(-s)}\, ds \tag{9.4}$$

$$w_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{i}{x}\right)^{-s} \tilde{F}_\gamma(s)\, \frac{\sin(\pi s)}{\pi}\, \tilde{E^+}(s)\, ds \tag{9.5}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\frac{i}{x}\right)^{-s} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)}\, \tilde{E^+}(s)\, ds \quad . \tag{9.6}$$

[1] siehe Abschnitt 7.2.2, Gleichung (7.129)

[2] Für das nachfolgende sei insbesondere auf die Ausführungen im Abschnitt 7.2.2 f verwiesen.

[3] siehe auch Gl. (2.45) und man beachte den Ergänzungssatz (3.27)

Und wiederum Satz 7.3 respektive Satz 7.4 folgend, können wir diese Regularisierten mit Hilfe des *regularisierenden Kerns* Φ_γ in die für die Praxis relevante und anwendbare Form

$$w_\gamma(x) = \int_0^\infty \Phi_\gamma\left(\frac{1}{x\omega}\right) E^+(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \tag{9.7}$$

$$\text{mit} \qquad \Phi_\gamma(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)}\, z^{-s}\, ds \tag{9.8}$$

bringen, wobei hier in (9.8) gemäß des Ausdrucks (9.6) konkret $z = ix$ zu setzen ist[4].

Neben der komplexwertigen Integralgleichung (9.2) wollen wir ebenso deren Real- und Imaginärteil, also die Gleichungen (2.53) und (2.55),

$$E_1(\omega) = \int_0^\infty \frac{1}{1+(\omega\tau)^2}\, w(\tau)\,\frac{d\tau}{\tau} \tag{9.9}$$

$$E_2(\omega) = \int_0^\infty \frac{\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\, w(\tau)\,\frac{d\tau}{\tau} \quad , \tag{9.10}$$

als eigenständige Integralgleichungen betrachten und entsprechend das bisher von uns adaptierte Regularisierungsverfahren anwenden. Deren Regularisierten können wir demnach also in der Form

$$w_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\tilde{F}_\gamma(-s)\,\frac{\tilde{E}_1(-s)}{K_1(-s)}\, ds \tag{9.11}$$

$$\text{und} \quad w_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\tilde{F}_\gamma(-s)\,\frac{\tilde{E}_2(-s)}{K_2(-s)}\, ds \tag{9.12}$$

angeben respektive mit den dazugehörenden regularisierenden Kerne Φ_γ^1 und Φ_γ^2, per definitionem wiederum als

$$\Phi_\gamma^1(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{K_1(s)}\, z^{-s}\, ds \tag{9.13}$$

$$\text{und} \qquad \Phi_\gamma^2(z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{K_2(s)}\, z^{-s}\, ds \tag{9.14}$$

gegeben, durch die praktisch anwendbaren Formeln

$$w_\gamma(x) = \int_0^\infty \Phi_\gamma^1\left(\frac{1}{x\omega}\right) E_1(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \tag{9.15}$$

$$w_\gamma(x) = \int_0^\infty \Phi_\gamma^2\left(\frac{1}{x\omega}\right) E_2(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \tag{9.16}$$

[4]Offensichtlich können wir in den hier behandelten Problem durch eine geeignete Variablensubstitution die regularisierenden Kerne immer in die Form (9.8) bzw. in die nachfolgenden Form (9.21) bringen, so daß wir uns tatsächlich nur auf diese Ausdrücke für Φ_γ zu beschränken brauchen.

darstellen, wobei die Mellintransformierten der Integralkerne explizit durch die Gleichungen (2.64) und (2.65),

$$K_1(s) = \frac{1}{2}\,\frac{\pi}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \quad 0 < \Re\mathrm{e}\, s < 2 \tag{9.17}$$

$$K_2(s) = \frac{1}{2}\,\frac{\pi}{\cos\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \quad -1 < \Re\mathrm{e}\, s < 1 \tag{9.18}$$

gegeben sind[5].

Die Gleichung (9.7) für die komplexe Integralgleichung und die Gleichungen (9.15) und (9.16) für die Integralgleichungen des Real- und des Imaginärteils, die durch die Sätze 7.3 und 7.4 begründet sind, bilden zusammengefaßt also, zusammen mit den entsprechenden Ausdrücken für die regularisierten Kerne, die wir offensichtlich in der allgemeinen Form (9.21) darstellen können, die Ausgangsbasis für die praktische Anwendung des von uns vorgestellten, entwickelten respektive adaptierten Regularisierungsverfahrens.

Zusätzlich zu der Ausgangsgleichung (9.16) zur Regularisierung der Imaginärteil-Integralgleichung, werden wir bei jener ebenso, aufgrund der Darstellung[6] (2.72) deren Lösung, das auf der Fourier-Transformation basierende Regularisierungsverfahren[7] (5.47) anwenden, wodurch es uns u.a. möglich sein wird auf einer einfachen Art und Weise verschiedene Regularisierungsverfahren zu vergleichen[8].

9.2 Filter zur Regularisierung der phänomenologischen Integralgleichung

Wenden wir uns nun dem konkreten Filter $\tilde{F}_\gamma$ zur Regularisierung der Integralgleichung (9.2), gemäß Gleichung (9.4) respektive der durch Φ_γ dargestellten regularisierten (9.7), zu. Das nachfolgende gilt entsprechend übrigens selbstverständlich auch für die Integralgleichungen des Real- und des Imaginärteils der phänomenologischen, die obigen Gleichungen (9.9) und (9.10), so daß wir jene nur dann explizit erwähnen oder behandeln werden, wenn gesonderte oder abweichende Aussagen für diese gelten, so insbesondere im Fall der Integralgleichungen des Imaginärteils[9].

Wie wir oben bereits erwähnt habe, müssen die geeigneten Filter die exponentielle Divergenz der Reziproken der Transformierten $\tilde{k}$ unter der Bedingung (9.1) kompensieren. Da wir den regularisierenden Kern, der per definitionem durch die untenstehenden Formel (9.21) gegeben ist, notwendigerweise analytisch berechnen[10] müssen, um das Regularisierungsverfahren entsprechend des Satzes 7.4 respektive 7.3 anwenden zu können, sind wir notwendiger oder gezwungener Weise auf Gaußsche Terme in $\tilde{F}_\gamma$ angewiesen, d.h. Gaußartige Filter sind die „einfachsten“ und „minimalsten“ Filter zur Regularisierung, auf der Basis einer komplexen Umkehrformel[11], exponentiell schlechtgestellter Probleme, mit denen wir tatsächlich *analytisch* den Kern Φ_γ berechnen können.

Denkbar wären noch Filter, deren Mollifier-Funktionen auf der sogenannten Beta-2 Dichte[12] basieren und

[5] An jenen können wir unmittelbar, müßig zu erwähnen, die zu erwartende exponentielle Schlechtgestelltheit der beiden Integralgleichungen (9.9) und (9.10) ablesen.

[6] siehe Abschnitt 2.4.3, Seite 19

[7] siehe Abschnitt 5.3.2, Seite 77

[8] Dieses wird im Kapitel 10 durchgeführt werden.

[9] siehe auch die Ausführungen im Abschnitt 2.4.3 zur Lösbarkeit der Integralgleichungen des Imaginärteils durch die Fourier-Transformation

[10] Dieses schließt auch den Fall ein, daß wir Φ_γ zwar als einen „geschlossenen“ Ausdruck, wie beispielsweise als Reihe dargestellt, angeben können, diesen jedoch bei der praktischen Regularisierung selbst noch numerisch auswerten müssen.

[11] Bei dem auf der Fourier-Transformation basierende Verfahren (5.47) ist das „einfachste“ Filter für die Behandlung von exponentiell schlechtgestellten Problemen offensichtlich der ideale Tiefpaß (6.4).

[12] siehe [MS78, Str63a]

deren einfachsten Varianten im Fourier-Laplace- bzw. Mellin-Raum die Darstellung

$$\tilde{F}_\gamma(s) = C \prod_{j=1}^{m} \Gamma(\alpha - j\gamma s)\Gamma(\alpha + j\gamma s) \tag{9.19}$$

besitzen, wobei $\alpha \in \mathbb{R}$ ein Parameter und C die Normierungskonstante, die die Normierung der Mollifier-Funktion F_γ sicherstellt, sei. Die Problematik an dieser Stelle ist jedoch, damit der obige Ausdruck (9.19) tatsächlich ein Filter für ein exponentiell schlechtgestelltes Problem ist, daß wir ein *unendliches Produkt* ansetzen müssen, denn ansonsten würde das Integral für Φ_γ,

$$\Phi_\gamma(z) = \bar{C}\, \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s}\, \frac{\prod_{j=1}^{m} \Gamma(\alpha - j\gamma s)\Gamma(\alpha + j\gamma s)}{\Gamma(s)\Gamma(1-s)}\, ds \quad , \tag{9.20}$$

wobei wir in $\bar{C}$ alle verbleibenden Konstanten einbezogen haben, nicht für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ konvergieren, sondern nur konvergent bis zu einem von m abhängenden Wert $\gamma_m \in \mathbb{R}^+$, mit $0 < \gamma_m \leq \gamma$, sein. Dieses folgt übrigens unmittelbar aus den Existenz- und Konvergenzeigenschaften der Mellin-Barnes Integrale respektive der Foxschen H-Funktion, und um ein solches Integral handelt es sich bekanntlich beim Ausdruck (9.20), wie wir sie im Anhang A kurz wiedergegeben haben[13]. Die Auswertung der komplexen Umkehrformel (9.20) würde dann Φ_γ, entsprechend der Reihendarstellungen (A.14) und (A.15) eines Mellin-Barnes Integrals bzw. der Foxschen H-Funktion[14] quasi durch eine „unendliche Reihe von unendlichen Reihen" darstellen; wir müssen also eine (unendliche) Reihe von Reihen über die (unendlichen) Residuuen der Gamma-Funktion auswerten, deren numerische Berechnung, neben der Frage der Konvergenz des unendlichen Produktes in (9.20), ein weiteres größeres Problem darstellen würde[15].

Ebenso denkbar wäre jetzt zwar noch, Filter auf der Basis Höher Transzendenter Funktionen zu konstruieren, doch würde dieses wiederum auf große Schwierigkeiten bei der dann notwendigen numerischen Auswertung von Φ_γ führen; der numerische Aufwand wäre für eine praktische Anwendung schlicht und ergreifend zu groß. Das Fazit ist, daß wir tatsächlich für eine praktikable Anwendung des von uns untersuchten Regularisierungsverfahrens Gaußsche Anteile in $\tilde{F}_\gamma$ ansetzen müssen. Dem Rechnung tragend, werden wir im noch folgenden Abschnitt 9.2.2 die „Multifilter" oder regularisierende Folgen einführen, die es uns theoretisch erlauben von Gaußfilter ausgehend weitere Filter eines (exponentiell) schlechtgestellten Problems zu konstruieren.

9.2.1 Gaußfilter

Das in Hinblick auf die Möglichkeit einer analytischen Berechnung der Funktion

$$\Phi_\gamma(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, z^{-s}\, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, z^{-s}\, ds \tag{9.21}$$

als stabilisierenden Kern und einer anschließenden numerischen Realisierung „einfachste" und „minimale" Filter, das die in den vorangegangenen Abschnitt 7.2.2 respektive 7.2.3 ausgearbeiteten Eigenschaften erfüllt, ist also ein Gaußfilter der Form

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \quad , \tag{9.22}$$

[13] Bezüglich Mellin-Barnes Integrale und der Foxschen H-Funktion sei auch, neben den Anhang A und den dortigen Referenzen, hier auf den Abschnitt 3.4 verwiesen

[14] siehe Anhang A auf der Seite 341f und [MS78]

[15] Wir wollen auf die Bemerkungen zur Numerik hintereinander geschachtelter Reihen in [PTVF92, KF87] und insbesondere zur Numerik der Mellin-Barnes Integrale respektive der Foxschen H-Funktion in [MS78, EMOT53] hinweisen.

dessen Mollifier-Funktion bezüglich der Fourier-Laplace Transformation als

$$F_\gamma(t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{1}{\gamma}\,\exp\left(-\frac{1}{4}\frac{t^2}{\gamma^2}\right) = \mathfrak{L}_{II}^{-1}\tilde{F}_\gamma \tag{9.23}$$

und bezüglich der Mellin-Transformation als

$$F_\gamma(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\,\frac{1}{\gamma}\,\exp\left(-\frac{1}{4}\frac{\ln^2 x}{\gamma^2}\right) = \mathfrak{M}^{-1}\tilde{F}_\gamma \tag{9.24}$$

gegeben ist[16] , also wie erwartet selbst wieder eine Gaußfunktionen darstellt.

Die im Satz 7.3 geforderten Eigenschaften I bis VI sind offensichtlich erfüllt: die Gaußfunktion ist bekanntlich der typische Verdrehter einer Grundfunktion[17] $\varphi \in \mathcal{S}$ und offensichtlich ist diese exponentiell Abschätzbar und gehört zur Klasse[18] $\mathfrak{A}_{II}$, d.h. es gilt $F_\gamma \in \mathcal{S} \cap \mathfrak{A}_{II} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$; entsprechend sind soweit die Bedingungen des Satzes 7.4 erfüllt. Wie wir ebenso sofort sehen können, erfüllt das Gaußfilter tatsächlich die aus I bis VI abgeleiteten Eigenschaften (a) bis (d).

Genauso leicht sehen wir, daß die Bedingung VII.a des Satzes 7.3 erfüllt. Die Funktion $\tilde{\Phi}_\gamma$ ist hier konkret[19]:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_\gamma(s) &= \exp\left(\gamma^2 s^2\right)\,\frac{\sin(\pi s)}{\pi} \\ &= \exp\left(\gamma^2 s^2\right)\,\frac{1}{\pi 2i}\,\left(\exp(i\pi s) - \exp(-i\pi s)\right) \quad .\end{aligned} \tag{9.25}$$

Diese ist, mit $s = x + iy$, in jeden endlichen Vertikalstreifen $x_1^\gamma \le x \le x_2^\gamma$ eine analytische Funktion, womit $\tilde{\Phi}_\gamma$ und $\tilde{E^+}$ sicher einen gemeinsamen Vertikalstreifen besitzen werden, in dem diese analytische Funktionen sind, und erfüllt dort die folgende Abschätzung:

$$\left|\tilde{\Phi}_\gamma(s)\right| \le \frac{1}{2\pi}\,e^{\gamma^2 x^2}\,e^{-\gamma^2 y^2}\,\left|\left(e^{-\pi y} - e^{\pi y}\right)\right| \tag{9.26}$$

Daraus folgt für $|y| \to \infty$ die (asymptotische) Abschätzung:

$$\left|\tilde{\Phi}_\gamma(s)\right| \le \frac{1}{2\pi}\,e^{\gamma^2 x^2}\,e^{-\gamma^2 y^2 + \pi y} \tag{9.27}$$

$$\le C_\gamma\, e^{-\gamma^2\left(y - \frac{\pi}{2\gamma^2}\right)^2} \tag{9.28}$$

$$\le C_\gamma\, e^{-\gamma^2 y} \quad , \tag{9.29}$$

$$\text{mit} \quad C_\gamma = \frac{1}{2\pi} e^{\gamma^2 x^2 - \frac{\pi^2}{4\gamma^4}} \quad .$$

Aus den Abschätzungen (9.26) bis (9.29) folgt bekanntlich unmittelbar, daß

$$\frac{\tilde{F}_\gamma}{K} \in L^2(c - i\infty, c + i\infty) \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$$

gilt, und bereits aus der Abschätzung (9.26) können wir die exponentielle Abschätzbarkeit ablesen, woraus also

$$\tilde{\Phi}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II}\ \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$$

folgt.

---

[16] siehe beispielsweise [Doe71, EMOT53, Tit67]

[17] siehe [Bre65, Lig66, Wal94]

[18] siehe [Doe71]

[19] Wir haben, wie bereits in (9.4) und (9.6) angedeutet, den Term i^s zu x^{-s} in der komplexen Umkehrformel hinzugezogen; wir müssen somit tatsächlich die verallgemeinerten Integraltransformationen mit der komplexen Variablen $z = i/x$ verwenden.

9.2.2 „Multifilter“ oder die regularisierende Folge

Die Gaußsche stabilisierende Funktion (9.22) kann jetzt, zumindest theoretisch, als Ausgangsbasis für weitere stabilisierende Funktionen des exponentiell schlechtgestellten Problems (9.2) dienen. Betrachten wir dazu ersteinmal ganz allgemein, unabhängig vom Grad der Schlechtgestelltheit, das folgende: Wir führen im Fourier-Laplace- bzw. Mellin-Raum folgendermaßen die von uns so genannte *„Multifilter Funktion“*, kurz *„Multifilter“* oder auch *„Multifilter Stabilisator“*, $\tilde{F}_{\gamma,n}$ ein:

$$\tilde{F}_{\gamma,n}(s) = \tilde{\varphi}_{\gamma,n}(s)\, \tilde{F}_{\gamma}(s) = \tilde{\varphi}\left(\frac{\gamma}{n}\, s\right)\, \tilde{F}(\gamma s) \quad . \tag{9.30}$$

Hierbei sei $\tilde{\varphi}_n,\ n \in \mathbb{N}$, die Fourier-Laplace- respektive Mellintransformierte eines Elementes einer aus Grundfunktionen $\varphi \in \mathcal{S}$ bestehenden regularisierenden Folge[20] $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}} \in \mathcal{S}$, die den Satz 7.2 bzw. 7.3 respektive 7.4 erfüllen möge, und $\tilde{F}_\gamma$ sei eine die Eigenschaften I bis VI dieses Satzes erfüllende Funktion, das „eigentliche“ Filter; insbesondere gelte demnach (mit $\tilde{k}$ sei wieder die Transformierte des Integralkerns bezeichnet):

$$\frac{\tilde{\varphi}_{\gamma,n}}{\tilde{k}} \in L^2(c - i\infty, c + i\infty) \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad \text{und} \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad . \tag{9.31}$$

In anderen Worten sei $\varphi_{\gamma,n}$ respektive $\tilde{\varphi}_{\gamma,n}$ eine den Bedingungen I bis VII erfüllende Funktion, wohingegen $\tilde{F}_\gamma$ nur die Eigenschaften I bis VI des betreffenden Satzes aufweisen muß.

Die zu $\tilde{F}_{\gamma,n}$ korrespondierende Mollifier-Funktion können wir nun als Faltung der zu $\tilde{\varphi}_{\gamma,n}$ und $\tilde{F}_\gamma$ gehörenden Originalfunktionen $\varphi_{\gamma,n}$ und F_γ darstellen[21]:

$$F_{\gamma,n}(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\gamma,n}(t_0 - t)\, F_\gamma(t)\, dt \quad . \tag{9.32}$$

Das Faltungsintegral (9.32) ist mit $\varphi_{\gamma,n} \in \mathcal{S}$ und $F_\gamma \in \mathcal{S}$, jeweils für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ und alle $n \in \mathbb{N}$, wohldefiniert und es gilt [BB93, Wal94]:

$$F_{\gamma,n} \in \mathcal{S} \quad \forall \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad \text{und} \quad n \in \mathbb{N} \quad . \tag{9.33}$$

Gehen wir jetzt analog wie im betreffenden Beweis im Kapitel 7.2 vor, so können wir sehen, daß das obige durch (9.32) gegebene $F_{\gamma,n}$ eine Approximation der Deltadistribution darstellt:

$$\lim_{\substack{n\to\infty \\ \gamma\to 0}} \left\langle F_{\gamma,n}, \varphi \right\rangle = \langle \delta, \varphi \rangle \quad \forall \varphi \in \mathcal{S} \quad , \tag{9.34}$$

wobei hier bei den Limites zu beachten ist, daß wir tatsächlich zuerst $n \to \infty$ und anschließend $\gamma \to 0$ auszuführen haben; beide Limites müssen mathematisch streng getrennt ausgeführt werden. Dieses hängt damit zusammen, daß die Multiplikation zweier Distributionen nicht definiert ist [BB93, Lig66, Wal94]. Nichtdestotrotz ist der Limes (9.34), also die getrennte Limesbildung $n \to \infty$ und $\gamma \to 0$, im Sinne der Theorie der Distributionen wohldefiniert, da sowohl $\varphi_{\gamma,n} \in \mathcal{S}$ als auch $F_\gamma \in \mathcal{S}$ gelten soll.

Desweiteren läßt sich leicht zeigen, daß wir mit dem so konstruierten $\tilde{F}_{\gamma,n}$ und dessen Mollifier-Funktion $F_{\gamma,n}$ approximative, regularisierte Lösungen erhalten können, indem wir bei festgehaltenen Regularisierungsparameter den Limes $n \to \infty$ bilden. Da diese Limesbildung numerisch immer nur approximativ durchführbar sein wird, d.h. konkret numerisch wird n immer endlich bleiben, erhalten wir so tatsächlich auch für jedes endlich γ eine regularisierte Lösung.

Offensichtlich können wir „Multifilter“ für das Entfaltungsproblem (2.50) konstruieren, wenn wir für $\tilde{\varphi}_{\gamma,n}$ wieder eine Gaußfunktion ansetzen:

$$\tilde{F}_{\gamma,n}(s) = \exp\left(\frac{\gamma}{n} s\right)^2\, \tilde{F}_\gamma(s) \quad . \tag{9.35}$$

---

[20] siehe [BB93, Wal94] und Anhang B.4.3

[21] Wir beschränken uns im folgendem auf die Ausdrücke bezüglich Fourier-Laplace Transformation. Die Aufrücke für die Mellin-Transformation ergeben sich dann wir gewohnt.

Für $\tilde{F}_\gamma$ können wir jetzt eine beliebige, die Eigenschaften I bis VI des betreffenden Satzes erfüllende, Funktion einsetzen[22].

Ein Beispiel einer Funktion $\tilde{F}_\gamma$, die ansonsten nicht für alle γ eine stabilisierende Funktion sein würde, wäre die aus der sogenannten *Beta Type-2 Dichte* [MS78] erzeugte[23]:

$$F_\gamma(t) = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma^2(\alpha)} \frac{1}{\gamma} \frac{\exp\left(-\frac{\alpha}{\gamma}t\right)}{\left(1+\exp\left(-\frac{t}{\gamma}\right)\right)^{2\alpha}} \tag{9.36}$$

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \frac{1}{\Gamma^2(\alpha)} \Gamma(\alpha+\gamma s)\,\Gamma(\alpha-\gamma s) \quad , \tag{9.37}$$

wobei $\alpha \in \mathbb{R}^+$, $\alpha > 0$ zu gelten habe und vor der Regularisierung als konstant zu wählen ist.

Desweiteren wäre es mit der „Multifilter Funktion“ möglich, Mollifier-Funktionen F_γ zur Regularisierung zu benutzen, dessen Transformierten $\tilde{F}_\gamma$ analytisch nicht oder nur schwer zugänglich sind. Es seien

$$\tilde{\Phi}_{\gamma,n}(s) = \frac{\tilde{\varphi}_{\gamma,n}(s)}{\tilde{k}(s)} \tag{9.38}$$

$$\tilde{g_\gamma}(s) = \tilde{F}_\gamma(s)\,\tilde{g}(s) \quad , \tag{9.39}$$

so können wir die Regularisierte $f_{\gamma,n}$ durch die Faltung

$$f_{\gamma,n}(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\gamma,n}(t_0-t)\, g_\gamma(t)\, dt \quad , \tag{9.40}$$

$$\text{mit} \quad g_\gamma(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t_0-t)\, g(t)\, dt \quad , \tag{9.41}$$

darstellen, wobei wiederum die Funktionen $\Phi_{\gamma,n}$, F_γ und g die Originalfunktionen der Transformierten $\tilde{\Phi}_{\gamma,n}$, $\tilde{F}_\gamma$ und $\tilde{g}$ sein. Wir sehen also an der Darstellung (9.40) und (9.41) der durch das „Multifilter“ erzeugte Regularisierten, daß die analytische Kenntnis des Filters $\tilde{F}_\gamma$ gar nicht notwendig ist, sondern nur dessen Existenz und Eindeutigkeit gewährleistet sein muß. Ein Beispiel für eine derartige Mollifier-Funktionen wäre der sogenannte *Friedrichsche Glättungsoperator*[24]:

$$T_\gamma f(t) := \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\rho_\gamma(t_0-t)\, dt \quad , \tag{9.42}$$

dessen Kern[25] ρ_γ durch

$$\rho_\gamma(t) = \begin{cases} C\exp\left(-\frac{1}{1-\left(\frac{t}{\gamma}\right)^2}\right) & \text{für} \quad \left|\frac{t}{\gamma}\right| < 1 \\ 0 & \text{für} \quad \left|\frac{t}{\gamma}\right| \geq 1 \end{cases} \quad , \tag{9.43}$$

mit der Normierungskonstante C, gegeben ist. Es gilt[26] $\rho_\gamma \in \mathcal{D} \quad \forall \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ und wie wir leicht sehen,

[22] Tatsächlich können wir die Bedingungen an die Funktion F_γ und deren Integraltransformierten $\tilde{F}_\gamma$ sogar dahingehend lockern, daß wir die Eigenschaft, eine Grundfunktion zu sein, aufheben können; F_γ muß die Eigenschaften einer Dichtefunktion aufweisen, die vermöge der anzuwendenden Integraltransformation eineindeutig mit $\tilde{F}_\gamma$ verbunden ist und die Eigenschaften eines Faltungsatzes genüge. Auch dann ist übrigens der Limes (9.34) im Sinne der Distributionentheorie wohl definiert; siehe diesbezüglich [BB93, Wal94].

[23] Zur Berechnung der Fourier-Laplace- respektive Mellintransformierten $\tilde{F}_\gamma$ der Beta-Dichten siehe [Doe71, Tit67, MS78, EMOT53]

[24] siehe [BB93, Wal94, Wer95] und Anhang B

[25] Der Integralkern des Friedrichschen Glättungsoperators wird in der mathematischen Literatur konventionell mit ρ_γ bezeichnet; siehe [BB93, Bre65, Wer95]. Hier gilt also (trivial) $F_\gamma = \rho_\gamma$.

[26] siehe [BB93, Bre65, Wal94] und hier Anhang B.2.1

genügt ρ_γ einer Exponentialabschätzung, es gilt also ebenso $\rho_\gamma \in \mathfrak{A}_{II} \quad \forall \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$.

Abschließend wollen wir jedoch bemerken, daß der Ansatz über den „Multifilter“ (9.35) zwar grundsätzlich geeignet ist, für das exponentiell schlecht gestellte Problem (9.2) weitere stabilisierende Funktionen zu erzeugen, doch sehen wir bereits an dem konkreten Ausdruck (9.35), daß das asymptotische Verhalten der Funktion $\tilde{F}_{\gamma,n}$ für $\gamma \to 0$ und $n \to \infty$ im wesentlichen durch den Gaußterm bestimmt sein wird. Wir werden darauf, dieses wird auch durch die Numerik[27] bestätigt, in den nachfolgenden Abschnitt 9.3 (zumindest implizit) kurz eingehen.

9.3 Das asymptotische Verhalten der Filter

In diesem Abschnitt werden wir uns dem asymptotischen Verhalten der Filter $\tilde{F}_\gamma$ respektive des auf diesem basierenden Regularisierungsverfahren für $\gamma \to 0$ zuwenden. Wie wir bereits im Abschnitt 4.2.4 dargelegt[28] haben, können wir bei *linearen* Regularisierungs-Operatoren T_γ - auf jene wollen wir uns in dieser Arbeit auch beschränken - den *gesamten Regularisierungsfehler* in einem Anteil, der den *Einfluß des Datenfehlers* (auf die Regularisierung) und in einem Anteil, der den (reinen) *Fehler des Regularisierungsverfahren* beschreibt, aufteilen[29]:

$$\| f_\gamma^\varepsilon - f_T \| \leq \| \left(T_\gamma - A^\dagger \right) g \| + \| T_\gamma (g^\varepsilon - g) \| \quad , \tag{9.44}$$

oder kurz symbolisch als

$$\|\Delta_\gamma\| \leq \|\Delta_\gamma^r\| + \|\Delta_\gamma^\varepsilon\| \tag{9.45}$$

geschrieben. Das *generelle Verhalten* für $\gamma \to 0$ der beiden Anteile $\|\Delta_\gamma^r\|$ und $\|\Delta_\gamma^\varepsilon\|$, respektive Δ_γ^r und $\Delta_\gamma^\varepsilon$, für einem „beliebigen“ linearen Regularisierungs-Operator T_γ, wurde in der Literatur bereits ausführlich diskutiert[30] und von uns hier bereits exemplarisch am Beispiel der Differentiation im Abschnitt 4.2.4 auf der Seite 60ff demonstriert. Wir wollen deswegen diebezüglich nur kurz die wichtigsten Ergebnisse zusammenfassen. Generell gilt nun für $\gamma \to 0$ folgendes:

$$\|\Delta_\gamma^r\| \quad \to \quad 0 \tag{9.46}$$

$$\text{und} \qquad \|\Delta_\gamma^\varepsilon\| \quad \to \quad C \quad , \tag{9.47}$$

allgemein gilt sogar

$$\Delta_\gamma^r \quad \to \quad 0 \tag{9.48}$$

$$\text{und} \qquad \Delta_\gamma^\varepsilon \quad \to \quad C \quad , \tag{9.49}$$

wobei in (9.47) bzw. (9.49) C jeweils ein konstanter Wert oder sogar unendlich sein kann. In Worten heißt das[31]: Der reine Regularisierungsfehler geht für $\gamma \to 0$ generell gegen Null, wobei der Einfluß des Datenfehlers in der Regularisierung wenn nicht divergiert, so aber mindestens gegen einen konstanten Wert konvergiert. Die Funktionen Δ_γ^r und $\Delta_\gamma^\varepsilon$ sind, wenn T_γ linear und stetig ist[32], dann übrigens monotone Funktionen in γ.

---

[27] Wir werden uns deshalb im Abschnitt 10.2 auf die Wiedergabe eines typischen Ergebnisses der Anwendung eines „Multifilters“ beschränken.

[28] siehe auch die Bemerkungen zur Gleichung (4.48) auf Seite 60

[29] $A^\dagger$ bezeichnet hier wieder den Operator der Moore-Penrose Lösung, die im Fall von Faltunggleichungen, siehe Abschnitt 5.3.1, mit den „üblichen“ Lösungsbegriff identisch ist.

[30] Wir wollen diesbezüglich besonders auf [AT77, Iva76, Lav67, Lou89, Mor84], und insbesondere im Fall der Tikhonov-Phillips Regularisierung noch auf [Gro84], verweisen.

[31] Dieses generelle Verhalten der beiden Fehlerquellen können wir uns bereits aufgrund der Definitionen des „schlecht gestellten Problems“ und der „Regularisierung“ klar machen. Graphisch haben wir jenes übrigens schon in der Abbildung 4.1 auf der Seite 61 verdeutlicht.

[32] siehe auch die Bemerkung zur Definition 4.5 der Regularisierung auf der Seite 60

Explizite Ausdrücke für Δ_γ^r und $\Delta_\gamma^\varepsilon$ habe wir schon im Abschnitt 5.3.3, als wir über die allgemeinen Eigenschaften des genuin auf $\tilde{F}_\gamma$ basierenden Verfahrens gesprochen haben, abgeleitet. Zwar haben wir dort konkret nur die Ausdrückt für das auf der Fourier-Transformation basierende Verfahren angegeben, doch wie wir dort ebenso bereits erwähnt haben, sind die Regularisierungsverfahren (5.47), das auf der Fourier-Transformation, das Verfahren (5.49), das auf der Fourier-Laplace Transformation und (5.50), das auf der Mellin-Transformation basierende, bezüglich deren *formalen* Struktur völlig *äquivalent*, so daß für die jeweiligen Regularisierungsverfahren entsprechende Ausdrücke existieren. Da wir im nachfolgenden explizit das auf der Fourier-Laplace- bzw. auf der Mellin-Transformation basierende Verfahren untersuchen werden, wollen wir an dieser Stelle nun die entsprechenden Ausdrücke für Δ_γ^r und $\Delta_\gamma^\varepsilon$ angeben. Es gilt also für das auf der *Fourier-Laplace Transformation basierende Verfahren* (5.49):

$$\Delta_\gamma^r(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\tilde{F}_\gamma(s)-1\right)\ \tilde{f}_T(s)\, e^{st}\, ds \quad , \tag{9.50}$$

$$\Delta_\gamma^\varepsilon(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\ \tilde{\nu}(s)\, e^{st}\, ds \quad , \tag{9.51}$$

und entsprechend gilt für das auf der *Mellin-Transformation basierende Verfahren* (5.50):

$$\Delta_\gamma^r(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \left(\tilde{F}_\gamma(s)-1\right)\ \tilde{f}_T(s)\, x^{-s}\, ds \tag{9.52}$$

$$\Delta_\gamma^\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\ \tilde{\nu}(s)\, x^{-s}\, ds \quad . \tag{9.53}$$

Eine Bemerkung zu den verwendeten Bezeichnungen: Wir haben hier wieder die Notation des Abschnitts 5.3, die wir in dieser Arbeit durchgängig verwendet haben, benutzt. Demzufolge bezeichnet $\tilde{\Phi}_\gamma$ die Transformierte des regularisierenden Kernes, definiert[33] durch

$$\tilde{\Phi}_\gamma(s) = \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \quad , \tag{9.54}$$

wobei $\tilde{k}$ die Transformierte des (Faltungs-)Integralkernes k sei. Die Funktion $\tilde{\nu}$ symbolisiere wieder die Transformierte des Datenfehlers, wobei wir die fehlerbehaftete Funktion, wie schon in den vorangegangenen Untersuchungen, wieder als

$$g^\varepsilon = g_T + \nu$$

darstellbar betrachten. Dementsprechend werden wir für den Einfluß des Datenfehlers ebenso die im Abschnitt 5.3.3 eingeführte Bezeichnung Δ_γ^ν verwenden, d.h. es gilt in dieser Arbeit $\Delta_\gamma^\varepsilon \equiv \Delta_\gamma^\nu$.

Die Gleichungen (5.55) und (5.56) respektive (9.50) und (9.51) bzw. die Gleichungen (9.52) und (9.53) bilden also die Ausgangsbasis für die nun nachfolgenden Untersuchungen.

9.3.1 Das asymptotische Verhalten von Δ_γ^r

Bevor wir uns nun konkret der Asymptotik von Δ_γ^r für $\gamma \to 0$ zuwenden, wollen wir noch darauf hinweisen, daß wir in diesem und den nachfolgenden Abschnitten auf die schon bekannten Eigenschaften des Filters $\tilde{F}_\gamma$ respektive dessen Mollifier-Funktion F_γ, die wir im Kapitel 6 dargelegt haben, und auf die hier von uns im Kapitel 7, und insbesondere dort im Abschnitt 7.2, abgeleiteten Eigenschaften zurückgreifen werden.

[33] siehe auch Gleichung (5.53) und die entsprechenden Ausführungen

Dementsprechend werden wir in diesen Abschnitten auf explizite Querverweise bezüglich der verwendeten Eigenschaften, es sei denn, daß jene Notwendig zu sein scheinen, verzichten.

Im Abschnitt 5.3.3 haben wir aufgezeigt, daß wir den *reinen Einfluß* des von uns betrachteten *Regularisierungsverfahrens* als eine Mittelung der exakten Lösung mit der Mollifier-Funktionen betrachten können[34]. Es gilt demnach

$$f_\gamma^T(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t-t_1)\ f_T(t_1)\ dt_1 \quad , \tag{9.55}$$

$$\text{bzw.} \qquad f_\gamma^T(x) = \int_0^{\infty} F_\gamma\left(\frac{x}{\xi}\right)\ f_T(\xi)\ \frac{d\xi}{\xi} \quad , \tag{9.56}$$

oder, in anderen Worten, es gilt im Fourier-Laplace- respektive Mellinraum

$$\tilde{f}_\gamma^T = \tilde{F}_\gamma(s)\ \tilde{f}_T(s) \quad . \tag{9.57}$$

In den Abschnitt (7.2.1) respektive (7.2.2)f haben wir gezeigt, daß für das Filter die Darstellung[35]

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \tilde{F}(\gamma s) \tag{9.58}$$

gilt. Desweiteren haben wir gezeigt, daß $\tilde{F}_\gamma$ eine gerade Funktion ist, $\tilde{F}_\gamma(s) = \tilde{F}_\gamma(-s)$ und das $\tilde{F}_\gamma(0) = 1$ gilt. Bedeutender ist allerdings die Eigenschaft von $\tilde{F}_\gamma$, in einem Vertikalstreifen $x_1^\gamma \leq \mathfrak{Re}\, s \leq x_2^\gamma$ eine analytische Funktion zu sein[36]. Aufgrund dieser Eigenschaften möge also die folgende Reihendarstellung des Filters $\tilde{F}_\gamma$ gelten:

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\ (\gamma s)^{2n} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n\ (\gamma s)^{2n} \quad , \tag{9.59}$$

wobei $c_n \in \mathbb{C}\ \forall n \in \mathbb{N}$ und (offensichtlich) speziell $c_0 = 1$ sei. Zusätzlich setzen wir die absolute Konvergenz der Reihe (9.59) für $|s| < \infty$ voraus. Setzen wir die Reihendarstellung (9.59) nun in (9.57) ein und bilden die inverse Mellin-Transformation, die wir uns nun zuerst zuwenden wollen, um einen weiteren Ausdruck für die (reine) regularisierte Lösung zu erhalten:

$$f_\gamma^T(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n\ (\gamma s)^{2n} \right)\ \tilde{f}_T(s)\ ds \tag{9.60}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \gamma^{2n}\ \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\ s^{2n}\ \tilde{f}_T(s)\ ds \quad , \tag{9.61}$$

wobei wir bei dem Übergang von (9.60) zu (9.61) die absolute Konvergenz der Reihe (9.59) ausgenutzt haben. Aus der Theorie der Mellin-Tranformation kennen wir die folgende Zuordnung[37]:

$$\left(x\frac{d}{dx}\right)^n f(x) \quad \overset{\mathfrak{M}}{\longleftrightarrow} \quad (-1)^n\ s^n \tilde{f}(s) \quad . \tag{9.62}$$

---

[34] siehe Gleichung (5.61) und Gleichung (5.62) auf Seite 79f

[35] siehe beispielsweise die Ableitung der Gleichung (7.114)

[36] siehe Eigenschaft a) von $\tilde{F}_\gamma$ auf Seite 113; wir wollen darauf hinweisen, hierbei x_1^γ und x_2^γ nicht mit der hiesigen Variablen x der Mellin-Transformation zu verwechseln.

[37] Bezüglich weitere Details und „Rechenregel“ siehe [Doe71, Tit67]. Wir verwenden hier wieder die folgende Notation:

$$\left(x\frac{d}{dx}\right)^n f(x) = \underbrace{x\frac{d}{dx}\left(x\frac{d}{dx}\left(\cdots\left(x\frac{d}{dx}f(x)\right)\right)\right)}_{n-mal} \quad .$$

Wenden wir die obige „Rechenregel“ (9.62) auf die inverse Mellin-Transformation (9.61) an, wir können dort offensichtlich den Term $(-1)^{2n}$ ergänzen, dann erhalten wir für f_γ^T letztendlich die Reihendarstellung:

$$\begin{aligned} f_\gamma^T(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \left(x\frac{d}{dx} \right)^{2n} f_T(x) \\ &= f_T(x) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \left(x\frac{d}{dx} \right)^{2n} f_T(x) \quad . \end{aligned} \tag{9.63}$$

Aus der obigen Reihe (9.63) folgt somit unmittelbar der für $\gamma \to 0$ und, streng genommen[38], $x \to 0$ asymptotische Ausdruck:

$$f_\gamma^T(x) \approx f_T(x) + \sum_{n=1}^{m} c_n \gamma^{2n} \left(x\frac{d}{dx} \right)^{2n} f_T(x) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \tag{9.64}$$

wozu offensichtlich im Mellin- respektive Fourier-Laplace Raum der Ausdruck

$$\tilde{f}_\gamma^T(s) \approx \tilde{f}_T(s) + \sum_{n=1}^{m} c_n (\gamma s)^{2n} f_T(x) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \tag{9.65}$$

korrespondiert. Anders ausgedrückt heißt dieses: Existiert im Mellin- respektive Fourier-Laplace Raum ein für $\gamma \to 0$ asymptotischer Ausdruck der Form (9.65), dann gilt im ursprünglichem Raum eine Asymptotik der Form (9.64).

Um einen asymptotischen Ausdruck für den Fall der Fourier-Laplace Transformation zu erhalten, gehen wir entsprechend vor, wobei wir jetzt die Zuordnung

$$\frac{d^n}{dt^n} f(t) \quad \overset{\mathfrak{L}_{II}}{\longleftrightarrow} \quad s^n \tilde{f}(s) \tag{9.66}$$

verwenden. Basierend auf der Reihendarstellung (9.59) erhalten wir nun

$$f_\gamma^T(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{st} \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n (\gamma s)^{2n} \right) \tilde{f}_T(s)\, ds \tag{9.67}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} f_T(t) \tag{9.68}$$

$$= f_T(t) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} f_T(t) \quad , \tag{9.69}$$

woraus sich entsprechend unmittelbar die für $\gamma \to 0$ die asymptotischen Formelpaare

$$\begin{aligned} \tilde{f}_\gamma^T(s) &\approx \tilde{f}_T(s) + \sum_{n=1}^{m} c_n (\gamma s)^{2n} \tilde{f}_T(s) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \\ \text{und} \qquad f_\gamma^T(t) &\approx f_T(t) + \sum_{n=1}^{m} c_n \gamma^{2n} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} f_T(t) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \end{aligned} \tag{9.70}$$

wobei bei der letzten Asymptotik (9.70) noch $t \to 0$ zu berücksichtigen ist, ergeben.

Bevor wir die asymptotischen Formelpaare (9.65) und (9.64) sowie (9.65) und (9.70) weiter untersuchen bzw. für Gaußsche Filter konkretisieren, wollen wir noch auf das folgende aufmerksam machen: Im Abschnitt 5.3.3 haben wir gezeigt, daß wir die wiederum durch die regularisierte Lösung f_γ gewonnene Funktion g_γ, definiert durch

$$g_\gamma = k * f_\gamma \quad , \tag{9.71}$$

[38] Bezüglich des asymptotischen Verhaltens der Fourier-Laplace- und Mellin-Transformationen und deren komplexen Umkehrformel wollen wir insbesondere auf [Doe72], aber auch noch auf [Doe71, Tit67] verweisen.

ebenso als Faltung mit der Mollifier-Funktionen F_γ darstellen können[39]:

$$g_\gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\gamma(t-t_1)\, g(t_1)\, dt_1 \quad , \tag{9.72}$$

$$\text{bzw.} \qquad g_\gamma(x) = \int_0^{\infty} F_\gamma\left(\frac{x}{\xi}\right)\, g(\xi)\, \frac{d\xi}{\xi} \quad . \tag{9.73}$$

Daraus folgen sofort die für $\gamma \to 0$ zu obigen entsprechenden asymptotischen Formelpaare:

$$\tilde{g}_\gamma \approx \tilde{g} + \sum_{n=1}^{m} c_n (\gamma s)^{2n} \tilde{g}(s) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \tag{9.74}$$

$$\text{für } \mathfrak{L}_{II}: \qquad g_\gamma(t) \approx g(t) + \sum_{n=1}^{m} c_n \gamma^{2n}\, \frac{d^{2n}}{dt^{2n}}\, g(t) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \tag{9.75}$$

$$\text{für } \mathfrak{M}: \qquad g_\gamma(x) \approx g(x) + \sum_{n=1}^{m} c_n \gamma^{2n}\, \left(x\frac{d}{dx}\right)^{2n} g(x) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad . \tag{9.76}$$

Die eben abgeleiteten asymptotischen Ausdrücke gelten sicherlich für **Gaußsche Filter**[40] $\tilde{F}_\gamma$:

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \exp(\gamma s)^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\gamma s)^{2n}}{n!} \quad . \tag{9.77}$$

Wie beispielsweise DOETSCH in [Doe72] im Rahmen der Untersuchung der Asymptotik der Fourier-Laplace- und der Mellin-Transformation schön darlegt, ist die obige Reihenentwicklung (9.77) der Gaußfunktion, die bekanntlich für $|s| < \infty$ absolut konvergiert, ein (wichtiges) Beispiel für eine Gleichheit der Reihendarstellung und einer asymptotischen Entwicklung; (9.77) bildet also ebenso die asymptotische Entwicklung für $\gamma \to 0$. Daraus folgt dann - offensichtlich - die Gültigkeit respektive Existenz von asymptotischen Formelpaaren der Form (9.65) und (9.64) sowie (9.65) und (9.70), je nach anzuwendender Integraltransformation. Konkret erhalten wir also für Gaußsche Filter die folgenden asymptotischen Ausdrücke:

$$\tilde{f}_\gamma^T(s) \approx \tilde{f}_T(s) + \sum_{n=1}^{m} \frac{(\gamma s)^{2n}}{n!}\, \tilde{f}_T(s) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \tag{9.78}$$

$$\text{für } \mathfrak{M}: \qquad f_\gamma^T(x) \approx f_T(x) + \sum_{n=1}^{m} \frac{\gamma^{2n}}{n!}\, \left(x\frac{d}{dx}\right)^{2n} f_T(x) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \tag{9.79}$$

$$\text{für } \mathfrak{L}_{II}: \qquad f_\gamma^T(t) \approx f_T(t) + \sum_{n=1}^{m} \frac{\gamma^{2n}}{n!}\, \frac{d^{2n}}{dt^{2n}}\, f_T(t) + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \quad , \tag{9.80}$$

jeweils für $\gamma \to 0$ und $x \to 0$ bzw. $t \to 0$. Entsprechend gelten die obigen Asymptotischen (9.78) und (9.79) bzw. (9.80) für die wiederum durch die regularisierte erzeugte Funktion $\tilde{g}_\gamma$ respektive g_γ.

Betrachten wir die asymptotischen Ausdrücke nun genauer. Wie wir sofort feststellen können, erhalten diese nicht nur die gesuchte Funktion f_T, sondern auch deren Ableitungen beliebiger (endlicher) Ordnung - ein genereller Umstand, auf den wir bereits des öfteren hingewiesen haben[41]. Die Ausdrücke (9.78) und (9.79)

[39] siehe Gleichung (5.73) auf Seite 80

[40] siehe auch Gleichung (9.22) und die Gleichungen (9.23) und (9.24) für dessen Mollifier-Funktionen.

[41] Diesbezüglich wollen wir insbesondere auf die Bemerkung auf Seite 136 zur ersten Modifikation des Diskrepanz-Prinzips, ebenso auf die allgemeinen Bemerkungen in den Abschnitten 8.2.2 bis 8.2.4 und den dortigen Querverweise, sowie auf die Literatur, [AT77, Lou89, Gro84, Mor84], hinweisen.

bzw. (9.80) sind also dann mathematisch sinnvoll[42], wenn f_T Ableitungen bis zur Ordnung $2(m+1)$ besitzt, wobei die Ableitungen bis zur Ordnung $2m$ stetig sein müssen. Entsprechendes gilt selbstverständlich bezüglich der Asymptotischen für g_γ. Im Abschnitt 2.1 am Anfang dieser Arbeit haben wir wiedergegeben, daß im unserem Fall die Funktion[43] $g_T \equiv E^+$, die (entsprechend normierte) Dielektrizitätsfunktion, in der oberen komplexen Halbebene, einschließlich der reellen Achse, eine analytische Funktion[44] ist. Im Fall der theoretischen Dielektrizitätsfunktion E^+ gelten die asymptotischen Ausdrücke also sogar für beliebige Ordnungen in m, es gelten somit ebenso Ausdrücke der obigen Formen (9.63) respektive (9.69), dort f_T durch E^+ ersetzt:

$$E_\gamma^+(x) = E^+(x) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \left(x \frac{d}{dx} \right)^{2n} E^+(x) \tag{9.81}$$

$$\text{bzw.} \qquad \bar{E}_\gamma^+(t) = \bar{E}^+(t) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \gamma^{2n} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}} \bar{E}^+(t) \quad , \tag{9.82}$$

wobei hier $E^+(x = e^{-t}) = \bar{E}^+(t)$ sei.

Gehen wir jetzt in der Asymptotik bis zur niedrigsten Ordnung in γ, also bis zur zweiten, dann erhalten wir sofort:

$$\tilde{f}_\gamma^T(s) \approx \tilde{f}_T(s) + (\gamma s)^2 \tilde{f}_T(s) + O\left(\gamma^4\right) \tag{9.83}$$

$$\text{für } \mathfrak{M}: \qquad f_\gamma^T(x) \approx f_T(x) + \gamma^2 x \left(\frac{d}{dx} f_T(x) + x \frac{d^2}{dx^2} f_T(x) \right) + O\left(\gamma^4\right) \quad , \tag{9.84}$$

$$\text{für } \mathfrak{L}_{II}: \qquad f_\gamma^T(t) \approx f_T(t) + \gamma^2 \frac{d^2}{dt^2} f_T(t) + O\left(\gamma^4\right) \quad , \tag{9.85}$$

mit $x, t \to 0$. Am asymptotischen Ausdruck (9.84) für die Mellin-Transformation erkennen wir, was wir ebenso bereits an der Asymptotik (9.79) beobachten können, nun deutlich die prinzipielle Reproduktion der Asymptotik der gesuchten f_T für $x \to 0$ unter der Bedingung, daß (offensichtlich) $\gamma^2 x \ll 1$ gelten muß. Die im Abschnitt 3.6 bereits erwähnte wichtige Fragestellung nach der Asymptotik der Dichte p respektive w für kleine Relaxationszeiten, die wie dort für die wesentlichsten Modelldichten untersucht haben, wird also, anders ausgedrückt, durch den reinen Regularisierungsfehler Δ_γ^r im Falle des auf der Mellin-Transformation basierenden Verfahrens (5.50) nicht oder nur gering beeinflußt, solange, wie erwähnt, $\gamma^2 x \ll 1$ gilt.

Aus (9.84) respektive (9.85) folgt nun unmittelbar für Δ_γ^r die Asymptotik in niedrigster Ordnung in γ für $\gamma \to 0$ und $x \to 0$ respektive $t \to 0$:

$$\text{für } \mathfrak{M}: \qquad \Delta_\gamma^r(x) \approx \gamma^2 x \left(\frac{d}{dx} f_T(x) + x \frac{d^2}{dx^2} f_T(x) \right) + O\left(\gamma^4\right) \quad , \tag{9.86}$$

$$\text{für } \mathfrak{L}_{II}: \qquad \Delta_\gamma^r(t) \approx \gamma^2 \frac{d^2}{dt^2} f_T(t) + O\left(\gamma^4\right) \quad . \tag{9.87}$$

Vorweggenommen wollen wir deshalb auf die Abbildung 9.27, in der wir die Cole-Davidson Dichte[45] und deren, auf Gaußfilter basierende, reine Regularisierte darstellen, hinweisen, welche die prinzipielle Reproduktion der Asymptotik für verschwindende Relaxationszeiten, also für $\tau \to 0$, exemplarisch[46] demonstrieren. An der Asymptotik (9.86) können wir nun sofort ablesen, daß für den (reinen) Fehler des auf

[42] Dieses gilt, wie wir bereits erfahren haben, solange wir die Funktionen nicht als Distributionen auffassen. Den Fall, daß wir die Funktionen als Distributionen auffassen, werden wir im Anschluß besprechen.

[43] siehe Gleichung 2.9 auf der Seite 9

[44] siehe beispielsweise auch [Jac75, Roo69, Ell83]

[45] siehe Abschnitt 3.3

[46] Die entsprechenden Abbildungen im nachfolgenden Abschnitt 9.5 von Modelldichte und deren, auf der Mellin-Transformation basierenden, reinen Regularisierten würden die Reproduktion der Asymptotik ebenso demonstrieren, wenn wir dort nicht $t = -\ln x$ gegen $w(e^{-t}) = W(t)$ aufgetragen hätten.

der Mellin-Transformation basierenden Regularisierungsverfahrens (5.50), so wir die Stetigkeit der Ableitungen bis zur zweiten Ordnung der gesuchten f_T voraussetzen, für $\gamma^2 x \to 0$ zumindest gilt:

$$\Delta_\gamma^r(x) = O\left(\gamma^2\, x\right) \quad . \tag{9.88}$$

Erinnern wir uns jetzt aber an die im Abschnitt 3.6 betrachtete Asymptotik der Dichten p der in der Praxis zumeist angewandten phänomenologischen Modelle[47] für E^+, insbesondere des Cole-Cole-, des Cole-Davidson- und des, diese beiden Modelle beinhaltende, Havriliak-Negami Modells, so sehen wir, daß der Ausdruck (9.88) aufgrund der schwachen Divergenz dieser Dichten für $\tau \to 0$ nicht gültig sein kann. Betrachten wir aber an Stelle der Dichte p die Dichte w, die, zur Erinnerung,[48] über

$$p(\tau) = \frac{w(\tau)}{\tau} \tag{9.89}$$

definiert ist, so sehen wir unmittelbar, daß für jene Dichten der Ausdruck (9.88) gültig ist, denn diese streben jetzt für die betrachteten Modellen für $\tau \to 0$ offensichtlich gegen Null. Wie wir auch später zur Abbildung 9.27 hinweisen werden, sind wir gerade so bei der Berechnung der (reinen) Regularisierten p_γ des Cole-Davidson Modells vorgegangen, d.h. wir haben die (reine) Regularisierte w_γ bestimmt und dann über

$$p_\gamma(\tau) = \frac{w_\gamma(\tau)}{\tau} \tag{9.90}$$

die Funktion p_γ. Diese Vorgehensweise begünstigt schließlich noch die Reproduktion des asymptotischen Verhaltens der Dichte p für $\tau \to 0$.

Wir wollen aber nicht unerwähnt lassen, daß die asymptotischen Ausdrücke (9.79) bzw. (9.84), und somit auch (9.86), auch im Fall der schwache Divergenzen aufweisende phänomenologischen Dichten p gilt. In diesem Fall gelten die Ausdrücke mit Außname des Nullpunktes, denn tatsächlich müssen wir bei diesen Dichten bereits in der komplexen Umkehrformel der Mellin-Transformation, hier konkret in den Gleichungen (9.52) oder (9.60), den Punkt $x = 0$ ausschließen - gerade begründet durch eine mögliche (schwache) Divergenz[49] der Umkehrformel aufgrund des Terms x^{-s} für $x \to 0$.

Die eben abgeleiteten, auf Gaußsche $\tilde{F}_\gamma$ respektive F_γ basierende, asymptotischen Ausdrücke gelten selbstverständlich auch dann, wenn wir die Funktionen f_T und g, entsprechend des Ansatzes im Kapitel 7 zur Ableitung der Eigenschaften des Filters und der Mollifier-Funktion, als (temperierte) Distributionen[50] auffassen, mehr noch, jene Ausdrücke gelten dann sogar für die „fehlerbehafteten“ (temperierten) Distributionen f^ε und g^ε. Im Rahmen der Distributionentheorie gelten für diese sogar die Reihendarstellung der Form (9.68) respektive (9.63), genauer gilt für jede temperierte Distribution[51] $f \in \mathcal{S}'$:

$$\left\langle f_\gamma, \varphi \right\rangle = \left\langle \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma^{2n}}{n!}\, D^{2n}\, f \right), \varphi \right\rangle = \left\langle f, \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{2n} \frac{\gamma^{2n}}{n!}\, D^{2n}\, \varphi \right) \right\rangle \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{9.91}$$

[47] Es sei auf die jeweiligen Bemerkungen und Querverweise der im Kapitel 3 behandelten Modelle verwiesen.

[48] siehe Gleichung 2.46 auf Seite 15

[49] Bezüglich des möglichen Ausschlusses des Nullpunktes in der komplexen Umkehrformel der Mellin-Transformation respektive des Mellin-Barnes Integrals sei auf [Doe71, MS78, Tit67, WW69], und dort besonders auf deren allgemeinen Eigenschaften, verwiesen. Implizit wurde dieser Ausschluß übrigens bereits bei der Berechnung der Dichten im Kapitel 3 getan. Desweiteren sei hier noch auf den **Anhang A Mellin-Barnes Integrale und die Fox'sche H-Funktion** verwiesen.

[50] Zur Theorie der Distributionen siehe die Verweise im Kapitel 7 sowie Anhang B. Wir wollen an dieser Stelle noch darauf hinweisen, daß die Ausdrücke im Rahmen der Distributionentheorie wieder auf der t-Skaler zu betrachten sind, d.h. in den Gleichungen für die Mellin-Transformation wiederum die Substitution $x = e^{-t}$ durchzuführen ist.

[51] Aufgrund der Inklusion

$$\mathcal{D}\left(\mathbb{R}^N\right) \subset \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right) \subset L^1\left(\mathbb{R}^N\right)$$

gilt die folgende Reihe auch für Distributionen $f \in \mathcal{D}'$. Bezüglich der Definition der Ableitung einer (temperierten) Distribution siehe hier Anhang B und die dort angegebene Literatur. Letztlich wollen zusätzlich darauf hinweisen, daß aufgrund der absoluten Konvergenz der Reihendarstellung der Exponentialfunktion der Satz B.6 gilt.

Wie angedeutet, können wir hier für f die fehlerlose, theoretische Lösung, als Distribution betrachtet, f_T, die exakten Daten g_T, die fehlerbehaftet Lösung f^ε, definiert[52] durch

$$\langle f^\varepsilon, \varphi \rangle = \left\langle A^{-1} g^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, \left(A^{-1}\right)^* \varphi \right\rangle \tag{9.92}$$

und ebenso die fehlerbehafteten Daten g^ε, auf deren Basis gemäß obigen Ausdrucks (9.92) die Distribution f^ε definiert ist, einsetzen. Die Reihe (9.82) existiert respektive gilt somit - im diesen Sinne - auch für die fehlerbehaftete Funktion $\bar{E}^+ = \bar{E}_T^+ + \nu$, auch wenn dieses, wie wir gleich sehen werden, ein vorwiegend theoretisch interessantes Ergebnis ist.

Erinnern wir uns nun an das im Kapitel 8.2 vorgestellte MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzips und dessen Modifikationen, insbesondere dessen puristische Adaption auf $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$ im Abschnitt 8.2.3. Auf der Basis der Reihendarstellung (9.91) können wir jetzt sofort einen für $\gamma \to 0$ asymptotischen Ausdruck der im jenem Prinzip zentralen Differenz $g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon$ angeben. Für Gaußsche Filter und deren Gaußschen Mollifier-Funktion gilt also die Reihendarstellung

$$\left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi \right\rangle = \left\langle \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma^{2n}}{n!} D^{2n} g^\varepsilon \right), \varphi \right\rangle = \left\langle g^\varepsilon, \left(\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{2n} \frac{\gamma^{2n}}{n!} D^{2n} \varphi \right) \right\rangle \quad , \tag{9.93}$$

aus der sich unmittelbar die Asymptotik

$$\left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi \right\rangle \approx \gamma^2 \left\langle D^2 g^\varepsilon, \varphi \right\rangle + \left\langle \left(\sum_{n=2}^{m} \frac{\gamma^{2n}}{n!} D^{2n} g^\varepsilon \right), \varphi \right\rangle + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \tag{9.94}$$

$$\approx \gamma^2 \left\langle g^\varepsilon, D^2 \varphi \right\rangle + \left\langle g^\varepsilon, \left(\sum_{n=2}^{m} \frac{\gamma^{2n}}{n!} D^{2n} \varphi \right) \right\rangle + O\left(\gamma^{2(m+1)}\right) \tag{9.95}$$

für $\gamma \to 0$ ergibt. Wie nicht anders zu erwarten war, beginnt die obige asymptotische Entwicklung, bezüglich der niedrigsten Ordnung des Regularisierungsparameters, mit γ^2. Die Entwicklungen (9.94) und (9.95) basieren auf der asymptotischen der Form (9.80), bei der wir noch korrekterweise $t \to 0$ berücksichtigen müssen, so daß wir als Konsequenz dessen die Entwicklung nicht einfach mit der niedrigsten Ordnung in γ beenden dürfen, sondern für $\gamma \to 0$ noch die dort nachfolgenden Summen als „Korrekturterme“ berücksichtigen müssen. Würden wir die Summen in (9.94) und (9.95) nicht mehr berücksichtigen, wäre die Gültigkeit der dann resultierenden Ausdrücke durch die Forderung $\gamma t \ll 1 \; \forall \, t \in \mathbb{R}$ beschränkt.

Die asymptotische Entwicklung (9.94) bzw. (9.95) zeigt also, daß das im Abschnitt 8.2.3 untersuchte, auf $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$ adaptierte Diskrepanzprinzip, für $\gamma \to 0$, bei einem auf einem Gaußfilter basiereden Regularisierungsverfahren, von der Ordnung $O\left(\gamma^2\right)$ ist - ähnlich dem reinen Fehler dieses Regularisierungsverfahrens. So liegt auch gerade darin der Wert dieser asymptotischen Entwicklung, jenes Verhalten für verschwindenden Regularisierungsparameter aufzuzeigen. Für eine wirkliche praktische Anwendung sind beide Entwicklungen (9.94) und (9.95) denkbar ungeeignet, da diese zum einen explizit von einer Grundfunktion[53] φ abhängen und zum anderen noch Ableitungen, im günstigsten Fall der Grundfunktion, bis zur $2m$-ten Ordnung beinhalten.

Als nächstes wollen wir uns dem **idealen Tiefpaß**[54],

$$\tilde{F}_\gamma(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad |\xi| \leq \gamma^{-1} \\ 0 & \text{für} \quad |\xi| > \gamma^{-1} \end{cases} \quad , \tag{9.96}$$

[52] siehe auch Gleichung (8.104) auf Seite 143

[53] Wir wollen diesbezüglich auf den **Abschnitt 8.2.4 Kritik an den modifizierten Diskrepanz-Prinzipien** hinweisen. Der wesentlichste Kritikpunkt ist gerade die explizite Abhängigkeit jener im Rahmen der Distributionentheorie abgeleiteten Ausdrücke von einer Grundfunktion.

[54] siehe Gleichung (6.4) im Abschnitt 6.1; wir haben in (9.96) gegenüber (6.4) $\gamma \to \gamma^{-1}$ gesetzt, damit wir der Limes $\gamma \to 0$ für alle verwendeten Regularisierungsparametern erhalten bleibt.

zuwenden, dessen Mollifier-Funktion F_γ für $t \in \mathbb{R}$ durch Gleichung (6.8),

$$F_\gamma(t) = \frac{\sin \gamma^{-1} t}{\pi t} \quad , \tag{9.97}$$

gegeben ist[55]. Im Abschnitt 6.2 haben wir zwar gezeigt, daß wir den idealen Tiefpaß nur unter stark einschränkenden Bedingungen auf das auf der Fourier-Laplace- respektive auf der Mellin-Transformation basierende Verfahren mathematisch übertragen können, doch wollen wir diesen Filter aufgrund dessen Bedeutung in der Anwendung des auf der Fourier-Transformation basierenden Regularisierungsverfahrens (5.47) kurz behandeln, uns sogar nur auf die Wiedergabe der wesentlichen, aber schon lange bekannten Ergebnisse[56], beschränken. Zusätzlich sei daran erinnert[57], daß wir die Integralgleichung des Imaginärteils, Gleichung[58] (9.10), ebenso unter Anwendung der Fourier-Transformation lösen können und somit dort den idealen Tiefpaß direkt anwenden können - und später auch werden.

Betrachten wir also nun den, auf der Fourier-Transformation basierenden, Ausdruck (5.55) für Δ_γ^r:

$$\Delta_\gamma^r(x) = (2\pi)^{-N/2} \int\limits_{\mathbb{R}^N} (\tilde{F}_\gamma(\xi) - 1)\ \tilde{f}_T(\xi)\ e^{i\langle x,\xi\rangle}\ d\xi \tag{9.98}$$

Es sei nun $f_T \in H^\beta\left(\mathbb{R}^N\right)$, mit $\beta \geq 0$, wobei wir mit H^β wieder einen *Sobolev-Raum*[59] bezeichnen wollen. Dann gilt für den reinen Regularisierungsfehler, genauer für den Filterfehler des idealen Tiefpasses, gemessen in der L^2-Norm:

$$\left\|\Delta_\gamma^r\right\|_{L^2} \leq \gamma^\beta\ \|f_T\|_{H^\beta} \quad . \tag{9.99}$$

Der reine Regularisierungsfehler ist beim idealen Tiefpaß also proportional γ^β, also gilt, anders ausgedrückt, $\left\|\Delta_\gamma^r\right\|_{L^2} = O\left(\gamma^\beta\right)$.

Vergleichen wir jetzt (9.99) mit den asymptotischen Ausdruck (9.87) des Gaußfilters, der ebenso für das auf der Fourier-Transformation[60] basierende Regularisierungsverfahren gilt. Stellen wir dafür nun analoge Voraussetzung wie zu den obigen an die gesuchte f_T, konkret sei $f_T \in H^2\left(\mathbb{R}^N\right)$, und messen wir Δ_γ^r ebenso in der L^2-Norm, dann sehen wir unmittelbar die Gültigkeit[61] von:

$$\left\|\Delta_\gamma^r\right\|_{L^2} \approx \gamma^2\ \|f_T\|_{H^2} + O\left(\gamma^4\right) \quad . \tag{9.100}$$

Der Vergleich der Ausdrücke (9.99) und (9.100), diese beiden können wir nur sinnvollerweise miteinander vergleichen, zeigt also, daß der Filterfehler des Gaußfilters, wie auch nicht anders zu erwarten war, asymptotisch proportional zu γ^2 ist und der Fehler des idealen Tiefpasses, nicht nur asymptotisch sondern generell, proportional zu γ^β ist. Je nach Betrag von β und der Norm $\|f_T\|_{H^2}$ bzw. $\|f_T\|_{H^\beta}$ wird, offensichtlich, das Gaußfilter also in einem asymptotischen Sinne bezüglich des reinen Filterfehlers günstiger sein als der ideale Tiefpaß. Bedenken wir noch, daß wir den idealen Tiefpaß im Falle der Fourier-Laplace- respektive Mellin-Transformation, wie oben bereits erwähnt, ohne große Restringtionen bezüglich des inversen Problems anwenden können, so scheint das Gaußfilter nicht nur keine schlechtere Wahl zur Regularisierung zu sein, sondern für jene Verfahren ein Art „Ersatz“ für den idealen Tiefpaß darzustellen.

---

[55] Zwar geben wir die nachfolgenden Ergebnis allgemeiner für $t \in \mathbb{R}^N$ an, doch richtet sich unser Hauptinteresse auf $t \in \mathbb{R}^N$, welches für unser Problem relevant ist.

[56] Die nun folgende und weitere, für diese Arbeit nur tertiär relevante, Ergebnisse und Eigenschaften des idealen Tiefpasses werden beispielsweise in [AT77, Lav67, Lou89] diskutiert. Wir werden deswegen auch keine Beweise angeben.

[57] siehe Abschnitt 2.4.3

[58] siehe auch Gl. (2.55) auf Seite 16

[59] Zur Definition der *Sobolev-Räume* sei auf [Lou89, Iva76, Wer95] verwiesen; bezüglich der Wahl $f \in H^\beta\left(\mathbb{R}^N\right)$ sei auch auf die Bemerkung respektive Fußnote 37 zur Klassifizierung schlecht gestellter Probleme - Abschnitt 4.3 - hingewiesen.

[60] Die kürzeste Begründung ist hier, die Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ als einen Spezialfall der (allgemeineren) Fourier-Laplace Transformation $\mathfrak{L}_{II}$ zu interpretieren; diesbezüglich sie insbesondere auf [Doe71] verwiesen.

[61] Dieses folgt unmittelbar aus der Definition des Sobolev-Raums und der Isometrie der $\mathcal{F}$-Transformation in L^2; siehe [Doe71, Lou89, Wer95].

Beenden wir den theoretischen Vergleich zwischen Gaußfilter und idealen Tiefpaß, indem wir die auf deren Mollifier-Funktionen basierende Darstellung der reinen Regularisierung, also die Mittelung respektive Faltung $f_\gamma^T = F_\gamma * f_T$, in diesem Kapitel Gleichung (9.55), betrachten, woraus sich letztendlich ein Vergleich der Mollifier-Funktionen (9.23), die des Gaußfilters, und (9.97), die des idealen Tiefpasses, ergibt. Wir sehen sofort, da die Mollifier-Funktion des Gaußfilters selber wieder eine Gaußfunktion ist, daß die auf diese basierende reine Regularisierte f_γ^T eine glatte, mitunter „verwaschene“ Funktion sein wird, wohingegen die auf der Mollifier-Funktion (9.97) basierende aufgrund deren, insbesondere für $\gamma \to 0$, stark oszillierenden Charakters selber oszillatorische Anteile aufweisen wird, selbst wenn die theoretisch exakte Lösung f_T selbst keine solchen Anteile aufweisen würde. Der unbestreitbare Vorteil des Gaußfilters gegenüber des idealen Tiefpasses ist also, bezüglich der reinen Regularisierung glatte Regularisierte f_γ^T zu liefern. Die artefaktisch oszillierenden Anteile in der (reinen) Regularisierten f_γ^T sind, anders ausgedrückt, gerade der große Nachteil des idealen Tiefpasses. Doch solange wir noch nicht den Einfluß des Datenfehlers bei diesen beiden Filtern untersucht respektive diskutiert haben, sollten wir noch keine Aussagen über ein grundsätzliches Abraten des idealen Tiefpasses und demgegenüber eine Empfehlung des Gaußfilters zur Regularisierung unseres Problems tätigen.

Als nächstes werden wir das im Abschnitt 6.2.2 in der Gleichung (6.38) vorgestellten Filter der **Tikhonov-Phillips Regularisierung**,

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \frac{|\tilde{k}(s)|^2}{|\tilde{k}(s)|^2 + \gamma^2 |\tilde{b}(s)|^2} \quad , \tag{9.101}$$

untersuchen. Wir haben in jenen Abschnitt bereits auf die Problematiken bei der direkten Anwendung des Filters der Tikhonov-Phillips Regularisierung hingewiesen, insbesondere auf die Problematik der numerischen Auswertung der komplexen Umkehrformeln der Fourier-Laplace- und Mellin-Transformation und auf der Schwierigkeit der analytischen Berechnung der komplexen Umkehrformel, die Ausdrücke der Form des Tikhonov-Phillips Filters (9.101) beinhalten[62], also die Gleichungen zur Berechnung der zum Filter $\tilde{F}_\gamma$ korrespondierenden Mollifier-Funktion F_γ und zur Berechnung des regularisierenden Kerns Φ_γ. Aufgrund der einerseits schon fundamental zu nennenden Bedeutung der Tikhonov-Phillips Regularisierung[63] und da bezüglich der Anwendbarkeit dieses Verfahrens auf die Integralgleichung des Imaginärteils (9.10) entsprechendes gilt wie bezüglich der oben erwähnten Anwendbarkeit[64] des idealen Tiefpasses, soll jene jedoch trotzdem kurz untersucht werden. Konkret werden wir wiederum bekannte Ergebnisse aus der Literatur, ohne (genaue) Angabe der Beweise, wiedergeben.

Wir werden nun die hier interessierenden allgemeinen Aussagen über Δ_γ^r, gemessen in der L^2-Norm, wiedergeben. Da die nun folgenden Aussagen, genauer Kolloras, auf der Darstellung[65] (5.17) des Tikhonov-Phillips Funktionals basieren, gelten diese für beliebige Hilberträume. Es können die nun folgenden Korollars über das *globale* Konvergenzverhalten der reinen Tikhonov-Phillips Regularisierung, bezüglich des Parameters γ, bewiesen werden[66]:

Korollar 9.1
Es sei[67] *für ein* $\alpha \in \mathbb{R}^+$ *mit* $0 < \alpha \leq 1$*:* $A^\dagger g \in \mathcal{R}\left((A^*A)^\alpha\right)$*. Dann gilt:*

$$\left\|\Delta_\gamma^r\right\|_{L^2} = O\left(\gamma^{2\alpha}\right) \quad . \tag{9.102}$$

Korollar 9.2
Es sei $A^+ g \in \mathcal{R}(A^*)$*. Dann gilt*

$$\left\|\Delta_\gamma^r\right\|_{L^2} = O(\gamma) \quad . \tag{9.103}$$

[62] siehe die jeweilig entsprechenden Ausführungen im Abschnitt 6.2.2 und noch die Fußnote 25 auf der Seite 93

[63] Wir wollen bezüglich der Tikhonov-Phillips Regularisierung wiederum auf die Ausführungen des Abschnitts 5.2 und dessen Quellenangaben, insbesondere nochmal explizit auf [AT77, Gro84, Lou89, TGSY95], verweisen.

[64] siehe die Bemerkung auf der vorherigen Seite und wiederum Abschnitt 2.4.3

[65] siehe Abschnitt 5.2, Seite 71

[66] Die Beweise dieser beiden Korollars sind beispielsweise in [Gro84] zu finden.

[67] Mit $f = A^\dagger g$ bezeichnen wir wieder die Moore-Penrose Lösung; siehe diesbezüglich auch Abschnitt 4.2.3 und 5.3.1

Am Korollar 9.1 sehen wir, daß der Filterfehler der Tikhonov-Phillips Regularisierung höchstens von der Ordnung γ^2 sein kann und zwar auch nur dann, wenn für die Moore-Penrose Lösung $A^\dagger g \in \mathcal{R}(A^*A)$ gilt. Tatsächlich kann jetzt gezeigt[68] werden, daß, mit der notwendigen Bedingung $A^\dagger g \in \mathcal{R}(A^*A)$, maximal tatsächlich „nur“

$$\left\| \Delta_\gamma^r \right\|_{L^2} = O\left(\gamma^2\right) \tag{9.104}$$

möglich ist. Der konkrete Wert des Parameter α im Korollar 9.102 wird übrigens, wie wir nicht unerwähnt lassen wollen, in der Praxis zumeist unbekannt bzw. nur mit Mühe zu ermitteln sein[69]. Ebenso wollen wir an dieser Stelle die Gültigkeit der Korollars 9.1 und 9.2 für beliebige Stabilisatoren der Ordnung p betonen, d.h. die Ordnung in γ ist unabhängig von der Ordnung p der Stabilisatoren.

9.3.2 Das asymptotische Verhalten von Δ_γ^ν

Wenden wir uns nun den Einfluß des Datenfehlers, Δ_γ^ν, in der Regularisierung zu. Wir wollen am Anfang darauf hinweisen, daß in den nachfolgenden Untersuchungen das Fehlerniveau der Daten als konstant vorausgesetzt wird.

Bereits in [Ros95] haben wir einen Ausdruck der Form (9.53) untersucht, genauer haben wir den folgenden, auf diesem basierenden Ausdruck für die Varianz $\sigma^2[\nu_\gamma]$ des „regularisierten“ stochastischen Prozesses ν_γ, definiert[70] durch

$$\sigma^2[\nu_\gamma] = \left\langle \left(\Delta_\gamma^\nu\right)^2 \right\rangle_{ST} \quad , \tag{9.105}$$

abgeleitet[71]:

$$\sigma^2[\nu_\gamma] = \frac{\pi}{(2\pi i)^2} \int\limits_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} ds \int\limits_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} ds' \left\{ \frac{\tilde{F}_\gamma(s)\,\tilde{F}_\gamma(s')}{\tilde{k}(s)\,\tilde{k}(s')} x^{-(s+s')}\ \tilde{S}[\nu; s+s'] \right\} \quad . \tag{9.106}$$

Die Funktion $S[\nu;\omega]$, definiert[72] durch

$$S[\nu;\omega] := 2\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} \left\langle \nu(0), \nu(\tau) \right\rangle_{ST} d\tau = 2\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau}\, \mathfrak{K}[\nu;\tau,0]\, d\tau \quad , \tag{9.107}$$

ist die *spektrale Dichte* der wiederum als *stationär* vorausgesetzten *stochastischen Funktion* ν, mit $\tilde{S}[\nu;s]$ sei deren Mellintransformierte bezeichnet, weiter bezeichne $\mathfrak{K}[\nu;\tau_1,\tau_2] = \mathfrak{K}[\nu;\tau_1-\tau_2]$ die *Korrelationsfunktion* der stationären Stochastischen und mit $\langle\cdot\rangle_{ST}$ sei die *stochastische Mittelung* bezeichnet.

Mit (9.106) besitzen wir zwar einen konkreten Ausdruck des Einflusses des Datenfehlers in der Regularisierung, gemessen in einer experimentell abschätzbaren stochastischen Norm, doch beinhaltet dieser offensichtlich ebenso einige „Schwierigkeiten“. Um diesen Ausdruck sowohl für theoretische als auch praktische

---

[68] siehe [Gro84, Mor84]

[69] Diesbezüglich sei auch auf die theoretischen Untersuchungen in [Gro84, Mor84] verwiesen, woraus sich dieser Umstand unmittelbar ergibt.

[70] siehe beispielsweise [Lou89, Str63a, Str63b] und hier die Bemerkungen und Ausführungen zu stochastischen Funktionen im Abschnitt 8.2.2

[71] Die Ableitung des Ausdrucks (9.106) ist bereits aus den entsprechenden Darstellungen in [AT77], unter Verwendung der Ausführungen in [Str63a] bezüglich stationärer stochastischer Funktionen, abzulesen, wenn wir an Stelle der dort verwendeten Fourier-Transformation die Mellin-Transformation ansetzen.

[72] Wir wollen darauf hinweisen, daß in der Literatur verschiedene Definitionen der spektralen Dichte existieren, die sich jedoch lediglich im Vorfaktor des Fourierintegrals respektive der Fourier-Transformation unterscheiden; so „fehlt“ in einigen der Faktor zwei. Wir verwenden hier, wie auch in [AT77], die in [Str63a] angegebene Definition. Für weitere generelle Eigenschaften der spektralen Dichte $S[\nu;\omega]$, wie auch stationärer stochastischen Funktionen ν und deren Autokorrelationsfunktionen $\mathfrak{K}[\nu;\tau_1,\tau_2]$ sei wiederum auf [Str63a, Str63b] verwiesen.

Aussagen auswerten zu können müssen Voraussetzungen an die stochastische ν respektive deren spektrale Dichte $S[\nu;\omega]$ respektive deren Mellintransformierten $\tilde{S}[\nu;s]$ aufgestellt werden, die meistens experimentell nicht zugänglich sind, und einige sogar zu restringtiv sein würden. Ebenso sei nicht unerwähnt, daß die dann auf der Basis von (9.106) erhaltenen Ausdrücke analytisch nur mit großem Aufwand, so überhaupt, auswertbar sind. Diese analytischen Ausdrücke, die dann - wie zu erwarten - explizit Eigenschaften der spektralen Dichte, wie beispielsweise deren asymptotischen Verhalten, beinhalten, bestätigen dann letztendlich nur das generelle Verhalten von Δ_γ^ν respektive $\left\|\Delta_\gamma^\nu\right\|$, mit einer geeignet gewählten Norm. Beeindruckende Beispiele, die das eben erwähnte bestätigen, geben die entsprechenden Untersuchungen von ARSENIN und TIKHONOV in [AT77], wobei sie konkret die den Einfluß des Datenfehlers im, auf der Fourier-Transformation basierendem, Verfahren (5.47) betrachten. Zusätzlich zu den generellen Bemerkungen zur Wahl des Regularisierungsparameters im Kapitel 8 auf der Seite 127, sehen wir jetzt einen zusätzlichen Grund, Ausdrücke der Form (9.106) nicht unbedingt detailierter zu betrachten - solange dieses nicht, um wesentliche Ergebnisse und Eigenschaften zu erhalten, zwingend notwendig zu sein scheint.

Tatsächlich genügen im unseren Fall des exponentiell schlecht gestellten Problems (9.2) die Betrachtung weit weniger „komplizierter“ Ausdrücke als solcher wie der Gleichung (9.106), um das relevante Verhalten von Δ_γ^ν, insbesondere bezüglich der Numerik, zu erhalten. Betrachten wir deswegen zuerst folgendes, ohne einen konkreten Filter $\tilde{F}_\gamma$ oder Kern $\tilde{k}$ anzusetzen, sondern nur deren allgemeinen Eigenschaften ausnutzend, um erste allgemeine Aussagen über das Verhalten des Datenfehlers zu erhalten: Im Fourier-Laplace- respektive Mellinraum gilt für den Datenfehler, entsprechend den Ausdrücken (9.51) und (9.53), offensichtlich die Darstellung

$$\tilde{\Delta}_\gamma^\nu = \tilde{\Phi}_\gamma \, (\tilde{g}^\varepsilon - \tilde{g}_T) \quad , \tag{9.108}$$

wobei $\tilde{\Phi}_\gamma$ wieder durch (9.54) gegeben sei und wir diesmal $\tilde{\nu} = \tilde{g}^\varepsilon - \tilde{g}_T$ angewandt[73] haben. Betrachten wir nur die L^2-artige Abweichung[74] der Form

$$\left\|\Delta_\gamma^\nu(x_0)\right\|^2 = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Delta}_\gamma^\nu(x_0+iy)\right|^2 dy \quad . \tag{9.109}$$

Aus der Dreiecksungleichung und der Parsevalschen Formel[75] für die $\mathfrak{L}_{II}$-Transformation, diese wollen wir jetzt wiederum zuerst betrachten, folgt direkt, mit $s = x + iy$:

$$\begin{aligned} \left\|\Delta_\gamma^\nu(x_0)\right\|^2 &\leq \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Phi}(x_0+iy)\right|^2 dy \\ &\cdot \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{g}^\varepsilon(x_0+iy) - \tilde{g}_T(x_0+iy)\right|^2 \, dy \qquad (9.110) \\ &\leq \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Phi}(x_0+iy)\right|^2 dy \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left|g^\varepsilon(t) - g_T(t)\right|^2 dt \quad . \qquad (9.111) \end{aligned}$$

Es gelte nun die Abschätzung

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left|g^\varepsilon(t) - g_T(t)\right|^2 dt \leq \varepsilon^2(x_0) \quad , \tag{9.112}$$

mit der wir also die rechte Seite von (9.111) ihrerseits zu

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Phi}(x_0+iy)\right|^2 dy \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_0 t} \left|g^\varepsilon(t) - g_T(t)\right|^2 dt \leq \varepsilon^2(x_0) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\Phi}(x_0+iy)\right|^2 dy \tag{9.113}$$

[73] Genauer benutzen wie anstelle der symbolischen Schreibweise $\tilde{\nu}$ für die Transformierte des Datenfehlers jetzt die mathematisch „korrektere“ $\tilde{g}^\varepsilon - \tilde{g}_T$.

[74] Die Normzeichen gelten in mathematischer Strenge, wenn in den folgenden, betrachteten Gleichungen x_0 identisch gleich ist.

[75] siehe Gleichung (7.128) auf Seite 116 und bezüglich des Parsevalschen Theorems [Doe71, Tit67]

abschätzen können. Für transformierte $\tilde{\Phi}_\gamma$ des regularisierenden Kernes gilt nun $\tilde{\Phi}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II}$, jene genügt somit per definitionem einer Exponentialabschätzung, und da jetzt ebenso sowohl $\tilde{F}_\gamma \in \mathfrak{a}_{II}$ also auch $\tilde{k} \in \mathfrak{a}_{II}$ gelten soll, wird für die Transformierte $\tilde{\Phi}_\gamma$ eine Exponentialabschätzung der Form

$$\left| \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)} \right| \leq Ce^{-(\eta(\gamma)-\rho)|y|} \tag{9.114}$$

gelten, wobei wir, der Einfachheit wegen und ohne die Allgemeinheit tatsächlich wesentlich einzuschränken, die symmetrischen Exponentialabschätzungen

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \leq C_1\, e^{-\eta(\gamma)|y|} \tag{9.115}$$

$$\left|\tilde{k}(s)\right| \leq C_2\, e^{-\rho|y|} \tag{9.116}$$

vorausgesetzt haben - ansonsten gelten entsprechende Exponentialabschätzungen für $y \geq 0$ und $y < 0$ - wobei $\rho \in \mathbb{R}$ eine positive Konstante sei und $\eta = \eta(\gamma)$ eine reelle, nicht negative Funktion des (reellen) Regularisierungsparameters γ sei. Mit all dem erhalten wir nun zusammengefaßt für den Einfluß des Datenfehlers die Abschätzung

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \leq C\,\varepsilon^2(x_0) \int_0^\infty e^{-2(\eta(\gamma)-\rho)|y|} \quad , \tag{9.117}$$

woraus unmittelbar und letztendlich

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \leq C\,\frac{\varepsilon^2(x_0)}{\eta(\gamma)-\rho} \tag{9.118}$$

folgt. Natürlich gilt die eben hergeleitete Abschätzung (9.118) nur unter der Bedingung

$$\eta(\gamma) > \rho \quad \forall\, \gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\} \quad , \tag{9.119}$$

die jedoch per definitionem[76] des regularisierenden Filters $\tilde{F}_\gamma$ erfüllt sein wird; ansonsten wäre $\tilde{F}_\gamma$ kein regularisierendes Filter bezüglich des transformierten Kerns $\tilde{k}$. Wie wir im Abschnitt 7.2.2 gezeigt haben, weist das Filter $\tilde{F}_\gamma$ die folgenden Eigenschaften auf:

i) Es gilt $\tilde{F}_{\gamma=0} = 1$.

ii) Der Limes $\lim_{\gamma\to 0} = 1$ ist stetig.

Aus diesen beiden Eigenschaften i) und ii) und weil per definitionem einer stabilisierenden Funktion die Bedingung (9.119) erfüllt ist folgt nun, daß in einem *asymptotischen Sinn* der Limes

$$\eta(\gamma) \to \rho \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \tag{9.120}$$

gelten sollte, was in Worten bedeutet, daß $\eta(\gamma)$ für beliebig kleine, aber endliche, Werte von γ beliebig nahe an ρ kommt, jedoch immer größer als ρ ist:

$$\eta(\gamma) - \rho \leq \delta \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \quad \text{mit} \quad 0 \leq \delta \in \mathbb{R} \quad . \tag{9.121}$$

Die Konsequenz aus dem ist nun offensichtlich der asymptotische Limes:

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \leq C\,\frac{\varepsilon^2(x_0)}{\eta(\gamma)-\rho} \sim \infty \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \quad . \tag{9.122}$$

Aufgrund der allgemeinen Eigenschaften der hier relevanten Funktionen, besonders der exponentiellen Abschätzbarkeit respektive Schlechtgestelltheit von $\tilde{k}$, können wir demnach, im asymptotischen Sinne, eine *Divergenz* von $\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|$ für $\gamma \to 0^+$, den Einfluß des Datenfehlers, erwarten.

[76] An dieser Stellte wollen wir auf die Definition 4.5 der Regularisierung und auf die im Kapitel 7 abgeleiteten Eigenschaften von $\tilde{F}_\gamma$ hinweisen.

Natürlich sind die Ausführungen zum (asymptotischen) Limes (9.122) jetzt nicht als Beweise im mathematisch strengen Sinn zu verstehen, sondern sollten, wie an deren Anfang erwähnt, dazu dienen, erste allgemeine respektive zu erwartenden Eigenschaften von $\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}$ zu erhalten. Betrachten wir jetzt, um konkretere Ergebnisse zu erhalten, denn die Funktion $\eta(\gamma)$ im Limes (9.122) ist i.A. unbekannt, **Gaußsche Filter**[77] respektive für $\gamma \to 0^+$ *asymptotisch Gaußsche Filter*[78], es möge nun also die, bei asymptotisch Gaußschen somit im zumindest für $\gamma \to 0^+$ asymptotischen Sinne gültige, Abschätzung

$$\left|\tilde{F}_\gamma(s)\right| \leq e^{-\gamma^2 y^2} \tag{9.123}$$

für das Filter $\tilde{F}_\gamma$ gelten. Für die Transformierte $\tilde{\Phi}_\gamma$ folgt daraus, wenn wir für $\tilde{k}$ wieder die Exponentialabschätzung[79] (9.116) annehmen, die Abschätzung:

$$\left|\frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\right| \leq C\, e^{-\left(\gamma^2 y^2 - \rho|y|\right)} \quad . \tag{9.124}$$

Analog zur Gleichung (9.117), erhalten wir jetzt für $\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|$, die wir wiederum betrachten wollen, den Ausdruck:

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \leq 2\, C\, \varepsilon^2(x_0) \int_0^\infty e^{-2\left(\gamma^2 y^2 - \rho|y|\right)}\, dy \quad . \tag{9.125}$$

Das Integral in (9.125) ist nun wohlbekannt[80] und unter Berücksichtigung der Definition[81] der Error-Funktion Erf,

$$\mathrm{Erf}\,(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2}\, dt \quad , \tag{9.126}$$

erhalten wir dann letztendlich die Abschätzung:

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \leq C \sqrt{\frac{\pi}{2}}\, \frac{\varepsilon^2(x_0)}{\gamma}\, \exp\left(\frac{\rho^2}{2\gamma^2}\right) \left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\gamma}\right)\right] \quad . \tag{9.127}$$

Bereits jetzt können wir an der obigen Abschätzung die *Divergenz* von $\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|$ für $\gamma \to 0$ ablesen. Berücksichtigen wir jetzt noch den Limes[82]

$$\lim_{\gamma \to 0} \mathrm{Erf}\left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\gamma}\right) = 1 \quad , \tag{9.128}$$

so erhalten wir die asymptotische Abschätzung,

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \lesssim C \sqrt{2\pi}\, \frac{\varepsilon^2(x_0)}{\gamma}\, \exp\left(\frac{\rho^2}{2\gamma^2}\right) \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \quad , \tag{9.129}$$

aus der wir das divergente Verhalten noch deutlicher ablesen können. Im Fall unserer phänomenologischen Gleichung (9.2) können wir übrigens noch konkret angeben:

$$\begin{aligned} C &= (2\pi)^{-1} \\ \rho &= \frac{3}{2}\pi \end{aligned}$$

---

[77] siehe auch Gleichung (9.22)

[78] Somit schließen wir in den nachfolgenden Betrachtung implizit die im Abschnitt 9.2.2 vorgestellten „Multifilter“ oder regularisierenden Folgen mit ein.

[79] Wir wollen nochmals darauf hinweisen, daß aufgrund der implizit vorausgesetzten exponentiellen Schlechtgestelltheit $\tilde{k}$ so per definitionem exponentiell abschätzbar ist.

[80] Da die Berechnung des Integrals in (9.125) im wesentlichen „elementar“ ist, wollen wir auf deren Details verzichten und stattdessen auf beispielsweise [AS68, BS76, EMOT54, WW69] sowie sogar auf Standardwerke zur Integration verweisen.

[81] siehe [AS68, EMOT54]; in der Literatur wird die Error-Funktion Erf und deren komplementären Erfc (siehe Seite 191) ebenso auch ohne den Vorfaktor $2/\sqrt{\pi}$ eingeführt, wie beispielsweise in [EMOT53].

[82] siehe auch [AS68, EMOT54]

Als asymptotische Abschätzung für den Einfluß des Datenfehlers erhalten wir für die hier behandelte Gleichung (9.2) somit konkret:

$$\left\|\Delta_\gamma^\nu(x_0)\right\|^2 \lesssim (2\pi)^{-1/2}\,\frac{\varepsilon^2(x_0)}{\gamma}\,\exp\left(\frac{9\pi^2}{8\gamma^2}\right) \quad \text{für} \quad \gamma\to 0^+ \quad . \tag{9.130}$$

Wir können also zusammenfassen: Anhand der Abschätzung (9.127), und noch deutlicher anhand der asymptotischen Abschätzung (9.129) bzw. (9.130), erkenne wir ein *exponentiell divergentes* Verhalten des Einflusses des Datenfehlers für $\gamma\to 0^+$ bei Gaußartige respektive asymptotisch Gaußartige $\tilde{F}_\gamma$, so $\tilde{k}$ exponentiell abschätzbar ist. In anderen Worten bedeutet dieses, da wir in der praktischen Anwendung zur Regularisierung exponentiell schlecht gestellter Probleme, so wir die auf der Fourier-Laplace- bzw. auf der Mellin-Tranformation basierenden (5.49) bzw. (5.50) anwenden müssen, auf einen Gaußartigen Term in $\tilde{F}_\gamma$ angewiesen sind[83], denn ansonsten würde sich die analytische Berechnung des regularisierenden Kernes Φ_γ eventuell als praktisch schwer oder sogar unmöglich erweisen, daß der Einfluß des Datenfehlers ein kontrolliertes exponentiell divergentes Verhalten für $\gamma\to 0^+$ aufweisen wird; ein Umstand, der letztendlich die Manifestation der exponentiellen Schlechtgestelltheit des Problems in den genuin auf Filter basierenden Verfahren ist, denn der Ursprung des Faktors

$$\exp\left(\frac{\rho^2}{2\gamma^2}\right) \tag{9.131}$$

in den asymptotischen Abschätzungen ist gerade die exponentielle Abschätzung (9.116) der Transformierten $\tilde{k}$. Ein Faktor der obigen Form (9.131) werden wir, was nicht unerwähnt bleiben soll, auch dann erhalten, wenn wir Δ_γ^ν unter Beinhaltung der übrigen Voraussetzungen in der Supremumsnorm messen würden.

Dieses hat jetzt offensichtlich bei der Anwesenheit von Datenfehlern[84] zur Konsequenz, daß das asymptotische Verhalten der gesuchten Dichte w, respektive p, für $x\to 0$, obwohl jenes durch das reine Regularisierungsverfahren prinzipiell reproduziert[85] wird, nun durch eben jenen Fehler überlagert wird, wodurch jene Asymptotik nicht nur eventuell verfälscht, sondern im ungünstigsten Fall in der Regularisierten gar nicht mehr ablesbar sein wird. Wir werden darauf, neben weiteren Aspekten der Numerik des genuin auf Filter basierenden Regularisierungsverfahrens, näher im Kapitel 10 eingehen.

Wenden wir uns jetzt dem **idealen Tiefpaß**, Gleichung (9.96), und den dortigen Einfluß des Datenfehlers, wiederum insbesondere bei exponentiell schlecht gestellten Problemen, zu. Betrachten wir demnach den auf der Fourier-Transformation basierenden Ausdruck[86] (5.56), der jetzt die konkrete Form

$$\Delta_\gamma^\nu(x) = (2\pi)^{-N/2}\int\limits_{|\xi|\le\gamma^{-1}} \frac{1}{\tilde{k}(\xi)}\,\left(\tilde{g}^\varepsilon(\xi)-\tilde{g}_T(\xi)\right)\,e^{i\langle x,\xi\rangle}\,d\xi \tag{9.132}$$

annimmt. Weiter setzen wir voraus, daß $g^\varepsilon\in L^2\left(\mathbb{R}^N\right)$ sei, so daß $\|g^\varepsilon-g_T\|_{L^2}\le\varepsilon$ gelte. Wegen der Isometrie[87] der Fourier-Transformation in L^2, erhalten wir für den Einfluß des Datenfehlers, gemessen in der L^2-Norm, offensichtlich die generelle (triviale) Abschätzung

$$\left\|\Delta_\gamma^\nu\right\|_{L^2} \le \sup_{|\xi|\le\gamma^{-1}}\left|\tilde{k}(\xi)\right|^{-1}\,\varepsilon \quad , \tag{9.133}$$

woraus sich unmittelbar mit der vorausgesetzten exponentiellen Abschätzbarkeit der Reziproken der Transformierten $\tilde{k}$,

$$\left|\tilde{k}(\xi)\right|^{-1} \le C\,e^{\rho|\xi|}\,, \quad \rho\in\mathbb{R}^+ \tag{9.134}$$

[83] siehe die Ausführungen am Anfang dieses Abschnitts 9.2, Seite 152f

[84] Wir wollen bemerken, daß wir an dieser Stelle keinerlei Aussagen über die Natur der Datenfehler gemacht haben, d.h. dieser sich bereits in einer reinen numerischen Diskretheit erschöpfen kann.

[85] siehe diesbezüglich Seite 161ff

[86] siehe Abschnitt 5.3.3 auf Seite 78

[87] siehe [Doe71, Tit67, Lou89, Wer95]

letztendlich

$$\left\|\Delta_\gamma^\nu\right\|_{L^2} \leq \varepsilon\, C\, \exp\left(\frac{\rho}{\gamma}\right) \tag{9.135}$$

ergibt[88]. Ebenso wie im Fall des Gaußfilters, *divergiert* der Einfluß des Datenfehlers *exponentiell* bei kleiner werdenden Regularisierungsparameter γ, was letztendlich offensichtlich wiederum eine Manifestation der unterliegenden exponentiellen Schlechtgestelltheit des inversen Problems ist.

Wenden wir uns jetzt der **Tikhonov-Phillips Regularisierung** zu. Wie im vorangegangenen Abschnitt, auf der Seite 166, werden wir uns mehr den allgemeinen, *globalen* Aussagen über den Einfluß des Datenfehlers zuwenden. Wie schon die Korollars 9.1 und 9.2 im vorangegangenen Abschnitt, basiert das nachfolgende wiederum auf der Darstellung[89] (5.17) des Tikhonov-Phillips Funktionals - und somit für beliebige Hilberträume.

Es sei wiederum g^ε die fehlerbehaftete Funktion und es gelte $\|g^\varepsilon - g_T\| \leq \varepsilon$, wobei wir mit $\|\cdot\|$ hier, wie im vorangegangenen Abschnitt, wieder eine (beliebige) Hilbertraum Norm bezeichnen wollen. Über den Datenfehlereinfluß gibt nun das folgende Korollar Auskunft[90]:

Korollar 9.3
Es sei, wie eben erwähnt, $\|g^\varepsilon - g_T\| \leq \varepsilon$ und γ der Regularisierungsparameter. Dann gilt für den Einfluß des Datenfehlers die Abschätzung:

$$\left\|\Delta_\gamma^\nu\right\| \leq \frac{\varepsilon}{\gamma} \quad . \tag{9.136}$$

Ist jetzt $A^+ g \in \mathcal{R}(A^*)$ und existiert ein $A \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$ derart, daß $\gamma = A\varepsilon$ gilt, dann gilt für den Gesamtfehler der Regularisierung Δ_γ:

$$\left\|\Delta_\gamma\right\| = O(\varepsilon) \quad . \tag{9.137}$$

Ebenso wie der Gaußfilter und der ideale Tiefpaß, *divergiert* im Tikhonov-Phillips Verfahren der Datenfehlereinfluß entsprechend des obigen Korollars[91] 9.3 für $\gamma \to 0^+$, jedoch nicht exponentiell, sondern wie $O(1/\gamma)$. Diese „globale“ Divergenz ist jedoch, worauf wir hinweisen wollen, unabhängig von Grad der Schlechtgestelltheit des inversen Problems und, wie im Fall des reinen Fehlers des Regularisierungsverfahrens[92], ebenso unabhängig von Grad p des verwendeten Stabilisators (mit konstanten Koeffizienten).

Eine weitere Abschätzung des *Gesamtfehlers der Tikhonov-Phillips Regularisierung*, die wir nicht unerwähnt lassen wollen, liefert das nun folgende Korollar[93]:

Korollar 9.4
Es sei, für ein $\alpha \in \mathbb{R}^+$ mit $0 < \alpha \leq 1$, $A^\dagger g \in \mathcal{R}\left((A^*A)^\alpha\right)$ und es sei

$$\gamma^2 = A\, \varepsilon^{\frac{2}{2\alpha+1}} \quad . \tag{9.138}$$

Dann gilt für den Gesamtfehler:

$$\left\|\Delta_\gamma\right\| = O\left(\varepsilon^{\frac{2\alpha}{2\alpha+1}}\right) \quad . \tag{9.139}$$

Die schnellste Konvergenzrate für den Gesamtfehler der Tikhonov-Phillips Regularisierung, die also durch das Korollar 9.4 garantiert wird, ist somit

$$\left\|\Delta_\gamma\right\| = O\left(\varepsilon^{2/3}\right) \quad . \tag{9.140}$$

---

[88] Am Ausdruck (9.132) erkennen wir übrigens sofort, daß wir eine entsprechende Abschätzung erhalten werden, wenn wir Δ_γ^ν in der Supremumsnorm messen würden.

[89] siehe Abschnitt 5.2, Seite 5.17

[90] siehe beispielsweise [Gro84, Mor84]

[91] Wir wollen auf die diesbezüglichen Diskussionen in [AT77, Gro84, Mor84] hinweisen.

[92] siehe die Bemerkungen zu den Korollars 9.1 und 9.2, Seite 167

[93] siehe wiederum [Gro84, Mor84]; mit $f = A^\dagger g$ bezeichnen wir wieder die Moore-Penrose Lösung.

Wie wir bereits bezüglich des Korollars 9.1 erwähnt haben, wird in der Praxis der Wert des Parameters α unbekannt oder nur mit Mühe zu ermitteln sein. Nichtsdestotrotz sind die hier wiedergegebenen Korollars aufgrund ihrer Aussagen über das maximal mögliche Fehlerverhalten von großen Wert.

Ein weiterer „Nachteil“ der beiden Korollars 9.3 und 9.4 sind deren Annahmen über die funktionale Beziehung zischen den Regularisierungsparameter γ und den Datenfehler ε. Fassen wir jedoch die Aussagen der Korollare 9.2 und 9.3 zusammen, und setzen dafür die Gültigkeit von $A^+g \in \mathcal{R}(A^*)$ voraus, so ergibt sich für den Gesamtfehler der Tikhonov-Phillips Regularisierung, bei $0 < \gamma$, das folgende Bild:

$$\left\|\Delta_\gamma\right\| \leq C\gamma + \frac{\varepsilon}{\gamma} \quad , \tag{9.141}$$

wobei C wieder eine positive, von Null verschiedene, Konstante sei.

9.3.3 Zusammenfassung und Resumee zum asymptotischen Verhalten

Den Abschnitt über das asymptotische Verhalten abschließend, wollen wir, trotz der Redundantz[94], die wichtigsten Ergebnis kurz zusammenfassen und Resumee ziehen, insbesondere bezüglich Asymptotik der Gaußfilter und insbesondere bezüglich der Anwendung der Filter auf exponentiell schlechtgestellten Problemen.

Die Ergebnisse zum **idealen Tiefpaß** sind, die Gleichungen (9.99) und (9.135) zusammengefaßt:
Sei $f_T \in H^\beta\left(\mathbb{R}^N\right)$, mit $\beta \geq 0$, und $g^\varepsilon \in L^2\left(\mathbb{R}^N\right)$ so, daß $\|g^\varepsilon - g_T\|_{L^2} \leq \varepsilon$ gelte. Dann gilt für den Gesamtfehler:

$$\left\|\Delta_\gamma\right\|_{L^2} \leq \gamma^\beta \ \|f_T\|_{H^\beta} + \varepsilon\, C\, \exp\left(\frac{\rho}{\gamma}\right) \quad . \tag{9.142}$$

Die Ergebnisse für die **Tikhonov-Phillips Regularisierung** haben wir bereits in der obigen Gleichung (9.141) auf dieser Seite zusammengefaßt:

$$\left\|\Delta_\gamma\right\|_{L^2} \leq \frac{\varepsilon}{\gamma} + O(\gamma) \quad . \tag{9.143}$$

Und letztendlich, erhalten wir für den Gesamtfehler eines **Gaußfilters** respektive Gaußartigen Filters, die Gleichungen (9.80), (9.99) und (9.127) zusammengefaßt:

$$\begin{aligned} \left\|\Delta_\gamma(x_0)\right\| \quad &\leq \quad \sum_{n=1}^{m} \frac{\gamma^{2n}}{n!} \ \left\|D^{2n} f_T(x_0)\right\| + O\left(\gamma^{4(m+1)}\right) \\ &+ \quad \sqrt{C}\, \left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{4}} \ \frac{\varepsilon(x_0)}{\sqrt{\gamma}} \ \exp\left(\frac{\rho^2}{4\gamma^2}\right) \ \sqrt{\left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\gamma}\right)\right]} \quad , \end{aligned} \tag{9.144}$$

woraus sich die in kleinster Ordnung in γ asymptotische Entwicklung[95]

$$\left\|\Delta_\gamma(x_0)\right\| \lesssim \gamma^2 \ \left\|f_T''(x_0)\right\| + \sqrt{C}\, (2\pi)^{\frac{1}{4}} \ \frac{\varepsilon(x_0)}{\sqrt{\gamma}} \ \exp\left(\frac{\rho^2}{4\gamma^2}\right) \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \tag{9.145}$$

ergibt.

Die Ausdrücke für den idealen Tiefpaß und der Tikhonov-Phillips Regularisierung gelten für alle $\gamma \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}$, wohingegen die Ausdrücke für das Gaußfilter, insbesondere der Ausdruck (9.145), als asymptotische (Entwicklungen) für $\gamma \to 0^+$ zu interpretieren sind.

---

[94] Dieser Abschnitt ist für all diejenigen gedacht, die ohne Details an den wesentlichen Ergebnissen interessiert sind.

[95] siehe auch die Gleichungen (9.85), Seite 162 und (9.129), Seite 170

Wir können aufgrund der obigen Ausdrücken (9.142) bis (9.145) nun folgendes festhalten:
Der größte Einfluß des Datenfehlers weist in diesen Abschätzungen der Gaußfilter auf, gefolgt vom idealen Tiefpaß. Da diese beiden Filter exponentiell anwachsende Terme für $\gamma \to o^+$ aufweisen, wohingegen deren reine Filterfehler asymptotisch proportional γ^2 bzw. γ^β sind, können wir erwarten, daß der Datenfehlereinfluß bei einer Variation des Regularisierungsparameters, beispielsweise gemäß des „Trial and Error"-Verfahrens[96], sobald dieser in der Größenordnung des reinen Filterfehlers kommt, sich deutlich im Graphen der Regularisierten bemerkbar machen wird. Bei der Bewertung der Tikhonov-Phillips Regularisierung sollten wir bedenken, daß der Ausdruck (9.143) von seinem Wesen her das „globale" Verhalten in einem Hilbertraum dieses Verfahrens beschreibt[97]. Der Einfluß des reinen Filterfehlers und des Datenfehlers scheinen also entsprechend den obigen Ausdrücken von der gleichen Größenordnung zu sein. Wir werden später im Kapitel 10 jedoch sehen, daß das „Trial and Error"-Verfahren zur Wahl von γ im unserem Fall auch bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung ausreichen wird.

Abschließend ist es, nach den bisherigen Ausführungen, müßig zu erwähnen, daß die in den gesamten Abschnitt 9.3 abgeleiteten (asymptotischen) Ausdrücke zu einer praktischen Wahl des Regularisierungsparameters nicht respektive nur sehr eingeschränkt verwendet werden können, insbesondere aufgrund der die Funktion f_T beinhaltenden Terme, die in der Praxis unbekannt sein dürften.

9.4 Die regularisierenden Kerne

Nachdem wir uns den konkreten Filtern zur Regularisierung der Integralgleichungen (9.2), (9.9) und (9.10) gewidmet haben, wenden wir uns jetzt deren, auf diesen Filtern basierenden respektive durch diese Filter erzeugten, regularisierenden Kerne, die, zur Erinnerung, bei dem auf der Mellin-Transformation basierenden Regularisierungsverfahren (5.50) allgemein durch die Gleichung (9.21),

$$\Phi_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \tilde{\Phi}_\gamma(s)\, x^{-s}\, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{\tilde{k}(s)}\, x^{-s}\, ds \quad , \tag{9.146}$$

definiert[98] sind, zu.

Berechnen[99] wir zuerst den regularisierenden Kern für unserer Ausgangsgleichung, die (komplexwertige) **phänomenologischen Integralgleichung** (2.47) der Dichtefunktion w. Die Mellintransformierte K deren Integralkerns k ist, zur Erinnerung, durch den Ausdruck[100] (2.40), also durch

$$i^s\, \frac{\pi}{\sin(\pi s)} = i^s\, \Gamma(s)\, \Gamma(1-s) \quad , \quad \text{mit} \quad 0 < \Re\mathrm{e}\, s < 1 \quad , \tag{9.147}$$

analytisch gegeben. Als Filter $\tilde{F}_\gamma$ setzen wir, gemäß der bisherigen Ausführungen, das Gaußfilter (9.22),

$$\tilde{F}_\gamma(s) = \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \quad , \tag{9.148}$$

an, wodurch wir also unmittelbar für die Mellintransformierte $\tilde{\Phi}_\gamma$

$$\tilde{\Phi}_\gamma(s) = \frac{\tilde{F}_\gamma(s)}{K(s)} = i^{-s}\, \exp\left(\gamma^2 s^2\right)\, \frac{\sin(\pi s)}{\pi} \tag{9.149}$$

[96] siehe Abschnitt 8.1

[97] Entsprechendes gilt zwar formal auch für den Ausdruck (9.142) des idealen Tiefpasses, doch erkennen wir ohne Probleme, aufgrund der Darstellungen im vorangegangenen Abschnitt, daß eine Abschätzung in der Supremumsnorm für den Datenfehlereinfluß ebenso einen exponentiellen Faktor der Form $\exp(\rho/\gamma)$ liefern würde.

[98] siehe in diesem Kapitel Seite 153, aber auch Abschnitt 5.3.3 und insbesondere Kapitel 7

[99] Aufgrund der fundamentalen Bedeutung des regularisierenden Kerns Φ_γ in den von uns hier abgeleiteten Regularisierungsverfahren, wollen wir übrigens dessen Berechnung etwas ausführlicher wiedergeben, obwohl wir letztendlich wiederum auf schon in der Literatur bekannte Integrale respektive inverse Transformationen geführt werden.

[100] siehe auch Gleichung (9.6) im Abschnitt 9.1 und die Ausführungen zur Lösung der Integralgleichung im Abschnitt 2.4.2

erhalten, also der regularisierende Kern durch

$$\Phi_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} (ix)^{-s} \, \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \, \frac{\sin(\pi s)}{\pi} \, ds \tag{9.150}$$

gegeben ist. Setzen wir in diesen Ausdruck nun $z = ix$ und transformieren, der Einfachheit wegen, $\Phi_\gamma(x) \to \Phi_\gamma(z)$ und nutzen den Zusammenhang zwischen der Sinus- und der Exponentialfunktion, respektive die *Definition*[101] *der Sinusfunktion*,

$$\sin(z) = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i} \quad , \tag{9.151}$$

aus, so erhalten wir:

$$\Phi_\gamma(z) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s} \, \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \left(\exp(i\pi s) - \exp(-i\pi s)\right) \, ds \quad . \tag{9.152}$$

Es sei auf den nicht unwesentlichen Umstand hingewiesen, daß wir mit der Substitution $x \in \mathbb{R} \to z \in \mathbb{C}$ den Übergang von der „herkömmlichen“ Mellin-Transformation mit der reellen Variablen x zu der *verallgemeinerten Mellin-Transformation*[102],

$$\left(\mathfrak{M}^{(\vartheta)} f\right)(s) \equiv \int\limits_0^{\infty(\vartheta)} z^{s-1} f(z) \, dz = \tilde{f}(s) \quad , \tag{9.153}$$

zu der die *(verallgemeinerte) komplexe Umkehrformel*

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s} \, \tilde{f}(s) \, ds \tag{9.154}$$

gehört, vollzogen haben. Hierbei ist jetzt $\arg z = \vartheta$ in dem Winkelraum $\vartheta_1 \leq \vartheta \leq \vartheta_2$, in dem f eine analytische Funktion ist, ein für allemal stetig festzulegen und in (9.153) und (9.154) dementsprechend $z = e^{\ln\rho + i\vartheta}$, also

$$z^{s-1} = e^{(s-1)(\ln\rho + i\vartheta)}, \quad z^{-s} = e^{s(\ln\rho + i\vartheta)} \quad , \tag{9.155}$$

zu setzen. Der Grund für den Übergang zur verallgemeinerten Mellin-Transformation ist übrigens, daß so eine elegantere, analytische Berechnung der regularisierenden Kerne möglich ist.

Betrachten wir jetzt die Exponentialfunktionen: mit einer (einfachen) quadratischen Ergänzung können wir diese sofort zu

$$\exp\left[(\gamma s)^2 \pm i\pi s\right] = \exp\left[\frac{\pi^2}{4\gamma^2}\right] \, \exp\left[\left(\gamma s \pm \frac{i\pi}{2\gamma}\right)^2\right] \tag{9.156}$$

zusammenfassen, d.h. wir müssen die inverse Mellin-Transformation der Form

$$I_\pm(z) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s} \, \exp\left[\gamma^2 \left(s \pm \frac{i\pi}{2\gamma^2}\right)^2\right] \, ds \tag{9.157}$$

berechnen. Substituieren wir nun in den obigen Ausdruck (9.157) $\tilde{s} = s \pm \frac{i\pi}{2\gamma^2}$ und nutzen die Formel $z^{\pm a} = e^{\pm a \ln z}$ aus, so erhalten wir als zu invers-transformierende Funktion eine Gaußfunktion der Art des

[101] siehe beispielsweise [AS68, BS76, Tit86]; es existieren je nach Kontext in der mathematischen Literatur bekanntermaßen auch alternative Definitionen der Sinusfunktion

[102] Die *verallgemeinerte Mellin-Transformation* haben wir bereits im Abschnitt 7.2.3, Seite 121, eingeführt. Detailiert wird jene in [Doe71] behandelt, wobei wir ebenso noch auf [Tit86, Tit67] verweisen wollen.

Filters (9.148). Diese verallgemeinerte inverse Mellin-Transformation mit der komplexen Variablen z ist (selbstverständlich) ebenso wohlbekannt und soll deswegen auch nicht detailiert[103] vorgeführt werden. Für die inverse Mellin-Transformation (9.157) erhalten wir so, analog zur Mollifier-Funktion des Gaußfilters, Gleichung (9.24) auf Seite 154:

$$I_{\pm}(z) = \frac{1}{2\gamma\sqrt{\pi}} \exp\left[\pm\frac{i\pi}{2\gamma^2}\ln z\right] \exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z)\right] \quad . \tag{9.158}$$

Setzen wir jetzt das obige Ergebnis (9.158) in die Gleichung (9.152) für Φ_γ ein und berücksichtigen wieder die Formel (9.151), so erhalten wir zusammengefaßt:

$$\Phi_\gamma(z) = \frac{1}{2\gamma\pi^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{\pi^2}{4\gamma^2}\right] \exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z)\right] \sin\left[\frac{\pi}{2\gamma^2}\ln(z)\right] \quad . \tag{9.159}$$

Für die numerische Anwendung benötigen wir den Ausdruck (9.159) in der reellen Variablen x. Beachten wir, daß für den Logarithmus mit $z \in \mathbb{C}$ bekanntlich

$$\ln(z) = \ln\left(|z|e^{i\theta}\right) = \ln|z| + i(\theta + 2k\pi) \tag{9.160}$$

gilt[104], und beschränken[105] wir uns auf den *Hauptzweig der Logarithmus Funktion*, also auf $k = 0$ in (9.160), so erhalten wir mit $z = ix$ jetzt konkret:

$$\ln(ix) = \ln|x| + i\frac{\pi}{2} \quad . \tag{9.161}$$

Setzen wir dieses jetzt in (9.159) ein, so erhalten wir für den auf *Gaußfilter basierenden regularisierenden Kern der (komplexwertigen) Integralgleichung* (2.47) letztendlich:

$$\Phi_\gamma(x) = \frac{1}{2\gamma\pi^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{\pi^2}{4\gamma^2}\right] \exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln(x) + i\frac{\pi}{2}\right)^2\right] \sin\left[\frac{\pi}{2\gamma^2}\left(\ln(x) + i\frac{\pi}{2}\right)\right] . \tag{9.162}$$

Als nächstes werden wir uns den regularisierenden Kern Φ^1_γ der **Integralgleichung des Realteils**, Gleichung (9.9) auf Seite 151, zuwenden. Die Mellintransformierte K_1 des Integralkerns k_1 dieser Integralgleichung ist, wie bereits mehrfach erwähnt, durch den Ausdruck[106] (9.17),

$$K_1(s) = \frac{\pi}{2}\,\frac{1}{\sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \quad 0 < \mathfrak{Re}\, s < 2 \quad , \tag{9.163}$$

gegeben. Wir erhalten also als Ausgangsgleichung für Φ^1_γ, wobei wir selbstverständlich wieder den Gaußfilter (9.148) anwenden:

$$\Phi^1_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \frac{2}{\pi} \sin\left(\frac{1}{2}\pi s\right) ds \quad . \tag{9.164}$$

Ersetzen wir jetzt wieder, wie eben, die Sinusfunktion durch die Gleichung (9.151), so gelangen wir zu

$$\Phi^1_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \frac{1}{i\pi}\left[\exp\left(i\frac{1}{2}\pi s\right) - \exp\left(-i\frac{1}{2}\pi s\right)\right] ds \tag{9.165}$$

$$= \frac{1}{i\pi}\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp\left(\gamma^2 s^2\right) \left(\left(\frac{x}{i}\right)^{-s} - (ix)^{-s}\right) ds \quad , \tag{9.166}$$

[103] siehe dazu [Doe71, Tit67, EMOT54]

[104] siehe beispielsweise [AS68, BS76, Tit86]

[105] siehe diesbezüglich auch die obigen Bemerkung zur Gleichung (9.155)

[106] siehe auch Gleichung (2.64) auf Seite 17

und mit der Variablensubstitution $z_1 = \frac{x}{i}$ und $z_2 = ix$, wobei wir den Kern (zwischenzeitlich) zu $\Phi^1_\gamma(x) \rightarrow \Phi^1_\gamma(z_{1,2})$ transformieren, erhalten wir alsdann das wichtige Zwischenergebnis:

$$\Phi^1_\gamma(z_{1,2}) = \frac{1}{i\pi}\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp\left(\gamma^2 s^2\right)\ \left(z_1^{-s} - z_2^{-s}\right)\ ds \quad , \tag{9.167}$$

d.h. wir wenden zur Berechnung wiederum die verallgemeinerte Mellin-Transformation an. Die obigen Gleichung (9.167) ist wieder die altbekannte inverse Mellin-Transformation einer (reinen) Gaußfunktion[107] und so erhalten wir also zusammengefaßt:

$$\Phi^1_\gamma(z_{1,2}) = \frac{1}{i\pi}\ \frac{1}{2\gamma\sqrt{\pi}}\ \left\{\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z_1)\right] - \exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z_2)\right]\right\} \quad . \tag{9.168}$$

Wiederum benötigen wir für eine numerische Anwendung den obigen Ausdruck (9.168) des Kerns Φ^1_γ in der reellen Variablen x. Wir gehen jetzt ebenso wie eben vor, d.h. wir wenden die Formel (9.160) unter Berücksichtigung der Gleichung (9.155) an, um den Logarithmus mit komplexen auf einen mit reellen Argumenten umzuschreiben. Beschränken wir uns dementsprechend wieder auf den Hauptzweig der Logarithmusfunktion, also auf $k = 0$ in (9.160), so erhalten wir diesmal:

$$\ln(z_1) \quad = \ln\left(\tfrac{x}{i}\right) = \quad \ln|x| - i\frac{\pi}{2} \tag{9.169}$$

$$\text{und} \qquad \ln(z_2) \quad = \ln(ix) = \quad \ln|x| + i\frac{\pi}{2} \quad . \tag{9.170}$$

Setzen wir abschließend (9.169) und (9.170) in (9.168) ein, bilden dann das Quadrat im Argument der Exponentialfunktionen, fassen die geeigneten Terme zusammen und berücksichtigen anschließend wieder die Definition (9.151), so erhalten wir für den auf *Gaußfilter basierenden regularisierenden Kern der Integralgleichung des Realteils* letztendlich:

$$\Phi^1_\gamma(x) = \frac{1}{\gamma\pi^{\frac{3}{2}}}\ \sin\left[\frac{\pi}{4\gamma^2}\ln(x)\right]\ \exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln^2(x) - \frac{\pi^2}{4}\right)\right] \quad . \tag{9.171}$$

Zum Schluß wenden wir uns den regularisierenden Kern Φ^2_γ der **Integralgleichung des Imaginärteils**, Gleichung (9.10) auf Seite 151, zu. Die Mellintransformierte K_2 ihres Integralkerns ist durch die Gleichung (9.18),

$$K_2(s) = \frac{1}{2}\ \frac{\pi}{\cos\left(\frac{1}{2}\pi s\right)} \qquad -1 < \Re e\, s < 1 \quad , \tag{9.172}$$

gegeben. Mit dem Gaußfilter (9.148) erhalten wir also als Ausgangsgleichung für Φ^2_γ:

$$\Phi^2_\gamma(x) = \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\ \exp\left(\gamma^2 s^2\right)\ \frac{2}{\pi}\ \cos\left(\frac{1}{2}\pi s\right)\ ds \quad . \tag{9.173}$$

Gehen wir jetzt entsprechend wir bei der Berechnung des Kerns Φ^1_γ vor: Benutzen wir diesmal die *Definition*[108] *der Cosinusfunktion*,

$$\cos(z) = \frac{1}{2}\left(e^{iz} + e^{-iz}\right) \quad , \tag{9.174}$$

[107] siehe wiederum Gleichung (9.24) auf Seite 154 und [Doe71, EMOT53, Tit67]

[108] siehe beispielsweise wiederum [AS68, BS76, Tit86]; ebenso wie im Fall der Sinusfunktion, existieren in der mathematischen Literatur bekanntermaßen kontextabhängig alternative Definitionen der Cosinusfunktion.

um den Cosinus-Term in (9.173) wieder auf Exponentialfunktionen umzuschreiben, so erhalten wir sofort:

$$\Phi_\gamma^2(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\exp\left(\gamma^2 s^2\right)\,\frac{1}{\pi}\,\left[\exp\left(i\frac{1}{2}\pi s\right)+\exp\left(-i\frac{1}{2}\pi s\right)\right]\,ds \tag{9.175}$$

$$\Phi_\gamma^2(z_{1,2}) = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}\exp\left(\gamma^2 s^2\right)\,\left(z_1^{-s}+z_2^{-s}\right)\,ds \quad . \tag{9.176}$$

Beim Übergang von Gleichung (9.175) zur Gleichung (9.176) sind wir ebenso wie gerade beim Übergang von der Gleichung (9.165) bis zur Gleichung (9.167) zur Berechnung des Kerns Φ_γ^1 vorgegangen: wir habe also wiederum die Variablensubstitution $z_1 = \frac{x}{i}$ und $z_2 = xi$ und die Transformation $\Phi_\gamma^2(x) \to \Phi_\gamma^2(z_{1,2})$ durchgeführt.

Der eben abgeleitete Ausdruck (9.176) unterscheidet sich von den entsprechenden Ausdruck (9.167) nur durch das Pluszeichen in den Klammerausdruck der Variablen z_1 und z_2, d.h. wir erhalten sofort als wichtiges Ergebnis:

$$\Phi_\gamma^2(z_{1,2}) = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{2\gamma\sqrt{\pi}}\,\left\{\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z_1)\right]+\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\ln^2(z_2)\right]\right\} \quad , \tag{9.177}$$

woraus bei zur obiger analogen Vorgehensweise beim Umschreiben auf die reelle Variablen x, wobei wir anschließend entsprechen die Definition (9.174) der Cosinusfunktion anwenden, sich für den auf *Gaußfilter basierenden regularisierenden Kern der Integralgleichung des Imaginärteils* letztendlich

$$\Phi_\gamma^2(x) = \frac{1}{\gamma\pi^{\frac{3}{2}}}\,\cos\left[\frac{\pi}{4\gamma^2}\ln(x)\right]\,\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln^2(x)-\frac{\pi^2}{4}\right)\right] \tag{9.178}$$

ergibt.

Unterziehen wir nun die eben abgeleiteten, auf Gaußfilter basierenden, Ausdrücke der regularisierenden Kerne, also der Gleichung (9.162) für Φ_γ, der Gleichung (9.171) für Φ_γ^1 und der Gleichung (9.178) für Φ_γ^2, einer **kritischen Betrachtung:**
Als erstes fällt auf, daß der Gaußfilter, wie nicht anders erwartet, im Mellin-Raum sich in einem Gaußterm in den Kernen niederschlägt. Desweiteren erkennen wir, daß sich die *exponentielle Schlechtgestelltheit* der Integralgleichungen ebenso in den Kernen manifestiert - die regularisierenden Kerne hängen schließlich von den Transformierten der Integralkerne ab - und zwar in Form der *oszillierenden Terme*. Diesen Sachverhalt erkennen wir sofort, wenn wir uns die eben durchgeführte Ableitung der Kerne nochmals vor Augen führen und dabei insbesondere auf den Ursprung der Sinus- bzw. Cosinusterme achten, welcher gerade die Mellintransformierten der Kerne der Integralgleichungen ist. Weiter sehen wir, daß wir für $\gamma \to 0$ aufgrund der Gaußterme zwar immer schmaler werdenden Regularisierende erwarten können, doch daß dann ebenso die oszillierenden Terme an Dominanz gewinnen werden, und zwar zum einen aufgrund der für $\gamma \to 0$ stärker werdenden Oszillationen, die „Frequenz“ der oszillierenden Terme nimmt dann offensichtlich zu, zum anderen aufgrund des für $\gamma \to 0$ divergierenden Faktors $\exp\left[\frac{\pi^2}{4\gamma^2}\right]$ in (9.162) bzw. $\exp\left[\frac{\pi^2}{16\gamma^2}\right]$ in (9.171) und (9.178), woraus also unmittelbar die *Divergenz* der Regularisierenden für $\gamma \to 0$ folgt.

Als Konsequenz all dessen erwarten wir bei der numerischen Realisierung des genuin auf Filter basierenden Regularisierungsverfahrens die fundamentale Problematik[109] der numerischen Integration über (stark) oszillierenden Funktionen. Auf dieses und weitere Probleme in der Numerik des Regularisierungsverfahrens werden wir detailierter im auf diesem nachfolgenden **Kapitel 10 Zur numerischen Realisation und deren Ergebnisse** eingehen.

[109] Bezüglich der Problematik der numerischen Integration über (stark) oszillierenden Funktionen sei bereits an dieser Stelle beispielsweise auf [DR84, KF87, PTVF92] verwiesen.

9.5 Die Wahl des Regularisierungsparameters

In diesem Abschnitt werden wir uns der Anwendung der im Kapitel 8 vorgestellten Methoden zur Wahl des Regularisierungsparameters auf unser Problem zuwenden. Entsprechend den einleitenden Bemerkungen dieses Kapitels, auf der Seite 127, werden wir uns generell kurz halten, obwohl wir auch einige interessante Ergebnisse, die in der Praxis nicht unbedingt eine direkte Anwendung besitzen, erwähnen werden.

9.5.1 Das MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip

Bevor wir auf die praktische Anwendung der in den Abschnitten 8.2.2ff vorgestellten modifizierten Diskrepanz-Prinzipien eingehen werden, wollen wir noch kurz eine Abschätzung des MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzips, wie wir es im Abschnitt 8.2 vorgestellt haben[110], bei Verwendung eines Gaußfilters zur Regularisierung exponentiell schlechtgestellter Probleme, angeben. Entsprechend zu den Betrachtungen des Einflusses des Datenfehlers im vorangegangenen Abschnitt 9.3.2, wir verwenden auch hier die dortigen Bezeichnungen, wurde das Diskrepanz-Prinzip, mit der in der Gleichung (9.109) eingeführten Norm $\|f(x_0)\|$, konkret als

$$\left\| (g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0) \right\|^2 = \varepsilon^2(x_0) \quad , \tag{9.179}$$

wobei

$$\begin{aligned} \|(g^\varepsilon - g_T)(x_0)\|^2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{g}^\varepsilon(x_0 + iy) - \tilde{g}_T(x_0 + iy)|^2 \, dy & (9.180) \\ &\leq \varepsilon^2(x_0) & (9.181) \end{aligned}$$

und $Af_\gamma^\varepsilon = g_\gamma^\varepsilon$ gelten soll, formuliert. Die linke Seite des so formulierten Prinzips (9.179) läßt sich jetzt ersteinmal durch

$$\begin{aligned} \left\| (g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0) \right\| &\leq \left\| (g_\gamma^\varepsilon - g_T)(x_0) \right\| + \|(g_T - g^\varepsilon)(x_0)\| & (9.182) \\ &\leq \left\| (g_\gamma^\varepsilon - g_T)(x_0) \right\| + \varepsilon(x_0) & (9.183) \end{aligned}$$

abschätzen. Erinnern wir uns jetzt an die Darstellung im Fourier-Laplace- respektive Mellin-Raum,

$$\tilde{g}_\gamma^\varepsilon(s) - \tilde{g}_T(s) = \tilde{k}(s) \, \left(\tilde{f}_\gamma^\varepsilon(s) - \tilde{f}_T(s) \right) \quad , \tag{9.184}$$

und setzen diese in die Norm gemäß der Gleichung (9.180) ein, so können wir die Norm auf der rechten Seite der Abschätzung (9.183) ihrerseits durch

$$\left\| (g_\gamma^\varepsilon - g_T)(x_0) \right\| \leq \sqrt{2\pi} \, \|k(x_0)\| \, \left\| (f_\gamma^\varepsilon - f_T)(x_0) \right\| \tag{9.185}$$

abschätzen, womit zusammengefaßt die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \left\| (g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0) \right\| &\leq \sqrt{2\pi} \, \|k(x_0)\| \, \left\| (f_\gamma^\varepsilon - f_T)(x_0) \right\| + \varepsilon(x_0) & (9.186) \\ \text{und} \quad \left\| (g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0) \right\| &\leq \sqrt{2\pi} \, \|k(x_0)\| \left(\left\| \Delta_\gamma^r(x_0) \right\| + \left\| \Delta_\gamma^v(x_0) \right\| \right) + \varepsilon(x_0) & (9.187) \end{aligned}$$

folgen; in den Schritt zur Ungleichung (9.187) haben wir noch die Gleichungen (9.44) und (9.45) verwendet. Auf der Basis der Darstellung (9.184) können wir den reinen Regularisierungsfehler Δ_γ^r auf die theoretische g_T umschreiben, so daß wir mit den Ergebnissen des vorengegangenen Abschnitts 9.3, insbesondere der zusammenfassenden Gleichung (9.144) respektive (9.145), letztendlich als Abschätzung der linken Seite

[110] Wir wollen nochmals darauf hinweisen, daß es sich bei den dort benutzten Norm prinzipiell um beliebige handelt; historisch wurde das Diskrepanz-Prinzip auf Hilberräumen formuliert [AT77, Lou89, Mor84].

des Prinzips (9.179)

$$\begin{aligned}\left\|(g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0)\right\| &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma^{2n}}{n!} \left\|D^{2n} g_T(x_0)\right\| \\ &+ \varepsilon(x_0) \left(1 + \tilde{C}\, \frac{\|k(x_0)\|}{\sqrt{\gamma}}\, \exp\left(\frac{\rho^2}{4\gamma^2}\right) \sqrt{\left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\gamma}\right)\right]}\right) \end{aligned} \tag{9.188}$$

und analog die für $\gamma \to 0^+$ asymptotische

$$\begin{aligned}\left\|(g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon)(x_0)\right\| &\lesssim \gamma^2 \left\|g_T''(x_0)\right\| \\ &+ 2\,\varepsilon(x_0)\,\tilde{C}\, \frac{\|k(x_0)\|}{\sqrt{\gamma}}\, \exp\left(\frac{\rho^2}{4\gamma^2}\right) \end{aligned} \tag{9.189}$$

erhalten, wobei wir in $\tilde{C}$ die konstanten Vorfaktoren zusammengezogen haben. In den obigen Abschätzungen (9.188) und (9.189) weist also der Einfluß des Datenfehlers dasselbe Gewicht wie in den Abschätzungen zum Gesmatregularisierungsfehler auf, was letztendlich ein Hinweis darauf sein dürfte, daß bei der Wahl des Regularisierungsparameters nach dem Diskrepanz-Prinzip (9.179) der Datenfehler einen analogen Einfluß haben sollte wie in der Regularisierung. Dieses ist übrigens auch die Kernaussage jener Abschätzungen, und in jener Aussage liegt auch die Bedeutung der Abschätzungen, denn für eine praktische Anwendung sind diese aufgrund der Unkenntnis der Ableitungen der Funktion g_T denkbar ungeeignet.

Setzen wir nun in den beiden Abschätzungen (9.188) und (9.189) das Diskrepanz-Prinzip (9.179) ein, so erhalten wir sofort für den nach diesem Prinzip gewählten Wert γ_0, wobei wir uns auf den asymptotischen Ausdruck beschränken wollen:

$$\varepsilon(x_0) \lesssim \gamma_0^2 \left\|g_T''(x_0)\right\| + 2\,\tilde{C}\,\varepsilon(x_0)\, \frac{\|k(x_0)\|}{\sqrt{\gamma_0}}\, \exp\left(\frac{\rho^2}{4\gamma_0^2}\right) \quad \text{für} \quad \gamma_0 \to 0^+ \quad . \tag{9.190}$$

Nicht erst aufgrund des obigen Ausdrucks (9.190) können wir vermuten, daß es sich bei den eben abgeleiteten Ausdrücken (9.188) und (9.189) um Überabschätzungen der linken Seite des Dikrepanz-Prinzips handeln dürfte. Tatsächlich haben wir bereits bei der Vorstellung des Diskrepanz-Prinzips im Abschnitt 8.28 mit der Gleichung (8.28),

$$\left\|g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\right\|_\infty \leq \gamma\, m_1[F]\, \|g^{\varepsilon\prime}\|_\infty \quad ,$$

es sei $\|g^\varepsilon - g_T\|_\infty \leq \varepsilon_\infty$, eine formal „einfachere“ Abschätzung in der Supremumsnorm abgeleitet. Im Falle des hier verwendeten Gaußfilters[111] nimmt die Funktion[112] $m_1[F]$ die konkrete Form

$$m_1[F] = \int_{-\infty}^{\infty} |t|\, \exp\left(\frac{1}{4}t^2\right)\, dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \tag{9.191}$$

an, so daß wir hier die konkrete Abschätzung

$$\left\|g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon\right\|_\infty \leq \gamma\, \frac{2}{\sqrt{\pi}}\, \left\|g^{\varepsilon\prime}\right\|_\infty \tag{9.192}$$

erhalten. Für den nach dem in der Supremumsnorm formulierten Diskrepanz-Prinzip gewählten Parameter γ_∞ folgt somit, gemäß der Gleichung (8.30) auf der Seite 132:

$$\gamma_\infty \geq \frac{\sqrt{\pi}}{2}\, \frac{\varepsilon_\infty}{\|g^{\varepsilon\prime}\|_\infty} \quad . \tag{9.193}$$

---

[111] Es sei auf Abschnitt 9.2.1, besonders Gleichungen (9.22) und (9.23) und insbesondere noch auf die Darstellungen des Filters und dessen Mollifier-Funktion im Kapitel 7 hingewiesen.

[112] siehe auch Gleichung (8.27) auf Seite 132 und [Str63a].

Die Abschätzung (9.192) des in der Supremumsnorm formulierten Diskrepanz-Prinzips scheint nur mit der Abschätzung (9.188) bzw. mit der asymptotischen Abschätzung (9.189) nicht konsistent zu sein. Wir sollten bei einen Vergleich dieser Ausdrücke aber die Verwendung zweier höchst unterschiedlicher Normen bedenken, so daß uns nicht der Fehler unterläuft, hier „Äpfel mit Birnen“ zu vergleichen. Auch wenn der Parameter γ in den Ausdrücken recht unterschiedlich vorkommt, das Vorgehen in den beiden Abschätzungen ist ebenso recht unterschiedlich gewesen, so hängen diese doch ähnlich sensitiv vom Datenfehler ab, denn je nach Nivau des Datenfehlers, wird die Norm $\left\|g^{\varepsilon'}\right\|_\infty$ entsprechend stark variieren[113]. Ebenso sollten wir bedenken, setzen wir die Gültigkeit der Darstellung der Funktion g_T über ein (exponentiell) schlecht gestelltes Problem voraus, so ist diese Schlechtgestelltheit entsprechend implizit[114] in der (Supremums)-Norm, genauer in der Ableitung der vorgegebenen Funktion, enthalten.

9.5.1.1 Die Modifikationen des Diskrepanz-Prinzips

In den Abschnitten 8.2.2f haben wir uns Modifikationen des MOROZOVschen Diskrepanz-Prinzips zugewandt, genauer haben wir dieses Prinzip auf dem Schwarz-Raum $\mathcal{S}$ respektive dessen Dualraum $\mathcal{S}'$ übertragen, wobei wir in 8.2.2 noch zusätzlich eine statistische Mittelung, um die stochastische Natur der Datenfehler Rechnung zu tragen, eingeführt haben, und im darauffolgenden Abschnitt 8.2.3 haben wir dann das Diskrepanz-Prinzips puristisch auf $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$ übertragen. Dementsprechend wollen wir uns zu erst der ersten Modifikation zuwenden.

Im Abschnitt 8.2.2 haben wir also gezeigt, daß wir das modifizierte Prinzip (8.47)

$$E\left[\left|\left\langle g_\gamma^\varepsilon - g^\varepsilon, \varphi\right\rangle\right|^2\right] = \sigma^2[\nu]\,\|\varphi\|^2 \quad , \tag{9.194}$$

wobei wiederum mit $g_\gamma^\varepsilon \equiv A f_\gamma^\varepsilon$, $\varphi \in \mathcal{S}$ gelte und mit $E[\cdot]$ die stochastische Mittelung bezeichnet sei, durch die Ungleichung (8.60) respektive (8.62) abschätzen können:

$$\frac{\sigma^2[\nu]}{\|g_T\|_{L^2}^2 + \sigma^2[\nu]} \quad \leq \quad \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_{L^2}^2}{\|\varphi\|_{L^2}^2} \quad , \tag{9.195}$$

$$\text{respektive} \qquad \sigma_{\text{rel}}^2[\nu] \quad \leq \quad \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_{L^2}^2}{\|\varphi\|_{L^2}^2} \quad , \tag{9.196}$$

wobei $\sigma_{\text{rel}}^2[\nu]$ der relative stochatische Fehler der vorgegebenen g^ε sei[115].

Im Abschnitt 8.2.4 haben wir bereits deutlich die explizite Abhängigkeit der Abschätzungen, die wir für die auf den Raum $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$ übertragenene Prinzipien erhalten, wie beispielsweise die obigen (9.195) und (9.196), von der Grundfunktion kritisiert. Ebenso habe wir dort jedoch darauf hingewiesen[116], daß die Gaußfunktion bzw. Gaußartige Funktionen als „typische“ Funktion in $\mathcal{S}$ betrachtet werden kann; so kann die Gleichung (8.102) als, auf Gaußfunktionen basierende, „erzeugende Gleichung“[117] für Grundfunktionen $\varphi \in \mathcal{S}$ betrachtet werden. Um also in diesen Sinne „typische“ Ergebnisse zu erziehlen, werden wir in den Abschätzungen wie den obigen beiden Gaußartige φ ansetzen.

Wenden wir also jetzt dem „typischen“ Ausdruck für die rechte Seite der Abschätzung (9.195) respektive (9.196) zu, natürlich bei der Anwendung eines Gaußfilters. Aufgrund der Isometrie[118] der $\mathcal{F}$-Transformation

---

[113] Wir sollten nicht vergessen, daß die Differentiation zu den schwach schlechtgestellten Problemen gehört; siehe die Abschnitte 4.2.4 und 4.3 und [Lou89].

[114] Wir verweisen diesbezüglich auf die Bemerkungen in der mathematischen Literatur, insbesondere wiederum auf [AT77, Gro93, Gro84, Iva76, Sab90, TGSY95], verweisen.

[115] siehe auch Gleichung (8.63) auf Seite 136

[116] siehe die Bemerkungen ab Seite 142f

[117] Wir wollen auf die Bemerkungen zum Wesen dieser „Erzeugenden“ auf der Seite 142 hinweisen.

[118] siehe [Doe71, Lou89, Wer95]

in L^2, und insbesondere weil die Fourier-Transformation ein Automorphismus[119] in $\mathcal{S}$ ist, werden wir, der Vereinfachung wegen, die Normen $\|\varphi\|_{L^2}$ und insbesondere

$$\left\|\varphi_\gamma - \varphi\right\|_{L^2} = \left\|\varphi * F_\gamma - \varphi\right\|_{L^2}$$

im Fourierraum berechnen. Der Gaußfilter (9.22) nimmt im Fourier-Raum, man erinnere sich auch an dessen Mollifier-Funktion (9.23), offensichtlich die Gestallt

$$\tilde{F}_\gamma(\omega) = \exp\left(-\gamma^2\omega^2\right) \quad , \tag{9.197}$$

wir beschränken uns hier auf die ein-dimensionale Fourier-Transformation, also auf $t, \omega \in \mathbb{R}$, an. Die Fouriertransformierte $\tilde{\varphi}$ der Gaußschen Grundfunktion, die bekanntermaßen selbst wiederum eine Gaußfunktion ist, möge jetzt die konkrete Form

$$\tilde{\varphi}(\omega) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\omega^2\right) \tag{9.198}$$

annehmen. Wir habe die Grundfunktion $\tilde{\varphi} \in \mathcal{S}$ also derart angesetzt, daß

$$\|\varphi\|_{L^2} = \|\tilde{\varphi}\|_{L^2} = 1 \tag{9.199}$$

gilt. Für die zweite Norm, die Differenz von φ_γ zu φ, erhalten wir, wie die gradlinige Rechnung zeigt[120]:

$$\begin{aligned}
\left\|\varphi_\gamma - \varphi\right\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\varphi}(\omega)\tilde{F}_\gamma(\omega) - \tilde{\varphi}(\omega)\right|^2 \, d\omega && (9.200)\\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-(\gamma^2+1)\omega^2} - e^{-\omega^2}\right)^2 \, d\omega && (9.201)\\
&= 1 + \frac{1}{\sqrt{\gamma^2+1}} - \frac{2^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\gamma^2+2}} \quad . && (9.202)
\end{aligned}$$

Zusammengefaßt erhalten wir also die konkrete Abschätzung, respketive wenn wir das zum Diskrepanz-Prinzip (9.194) alternative Kriterium (8.64), die sozusagen „quasi optimalen“ Wahl γ_{qo} des Regularisierungsparameters[121] anwenden:

$$\begin{aligned}
\sigma^2_{\text{rel}}[v] &\leq 1 + \frac{1}{\sqrt{\gamma^2+1}} - \frac{2^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\gamma^2+2}} && (9.203)\\
\sigma^2_{\text{rel}}[v] &= 1 + \frac{1}{\sqrt{\gamma^2_{qo}+1}} - \frac{2^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\gamma^2_{qo}+2}} \quad . && (9.204)
\end{aligned}$$

Die Gleichung (9.202) stellt also in einem gewissen Sinne, nach dem bisher erwähnten, eine „universelle“ rechte Seite der obigen Abschätzungen respektive der „quasi optimalen“ Wahl bei Gaußschen Grundfunktionen φ und Gaußfiltern $\tilde{F}_\gamma$ dar, denn offensichtlich können wir mit geeigneten Skalierungen die entsprechenden Ausdrücke auf einen „universellen“ Graphen abbilden. Diese „Universalität“ ist natürlich keine wirkliche, da jene sich nur auf reine Gaußfunktionen bezieht. In Sinne einer Asymptotik, gilt die Norm (9.202), und somit die Gleichungen 9.203) und (9.204), auch dann, wenn wir es mit asymptotisch Gaußschen Filtern, wie beispielsweise bei Gaußtermen in den „Multifiltern“, zu tun haben.

Betrachten wir also diese „Universalität“ bezüglich der reinen Gaußartigen Ansätze, die wir in der Abbildung 9.1 auf der nächsten Seite visualisiert haben; genauer haben wir dort die Gleichung (9.204) graphisch

[119] siehe Satz B.10 im Anhang B, auf Seite 366

[120] Solange es zu keinen Mißverständnissen kommen kann, werden wir im folgendem den Index „L^2“ an den Normsymbol forlassen.

[121] siehe Seite 136 und die betreffenden Ausführungen des Abschnitts 8.2

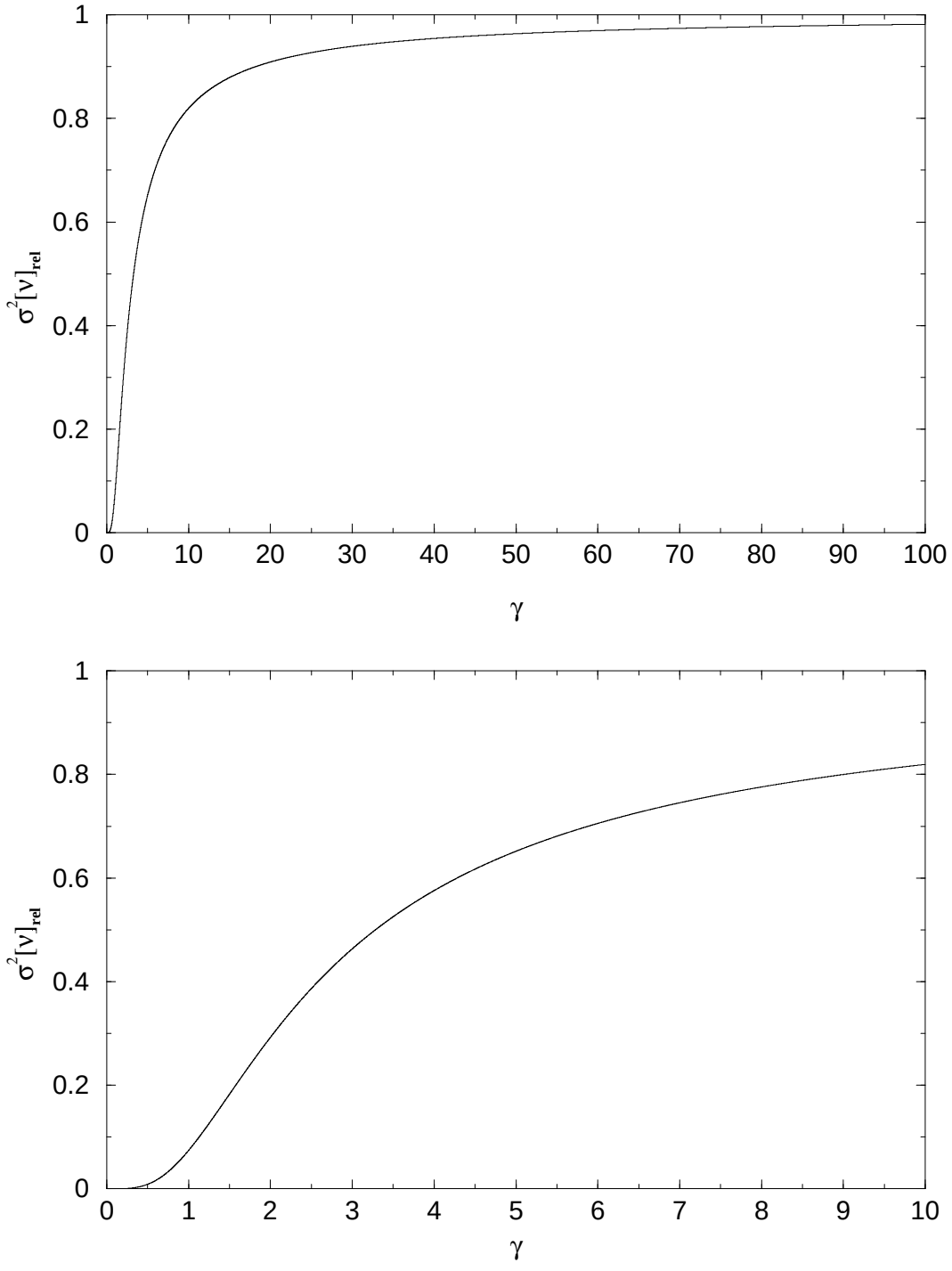

Abbildung 9.1: Das „universelle“ Verhalten bei Gaußschen φ und $\tilde{F}_\gamma$.

dargestellt, d.h. den relativen (quadratischen) Datenfehler $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu]$ gegen den Parameter γ aufgetragen:
Als erstes fällt uns natürlich bereits an den Ausdrücken (9.203) und (9.204) die in hohem Maße Nicht-Linearität bezüglich des Regularisierungsparameters auf. Wesentlicher ist jedoch die Tatsache, daß die rechte Seite dieser Gleichungen eine monotone, bijektive Funktion in γ ist, und setzen wir in diesen Ausdrücken $\gamma = 0$, so erhalten wir für die rechten Seiten tatsächlich den Wert Null, so daß, nach der Definition 4.5 der Regularisierung, die Vorderung der Gültigkeit des Limes (8.3),

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) = 0 \quad ,$$

erfüllt ist; genauer gilt jetzt die erweiterte Vorderung (8.100),

$$\lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ g^\varepsilon \to g_T}} \gamma[\varepsilon, g^\varepsilon;\, \varphi] = 0 \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S} \quad .$$

Der Vollständigkeit halber wollen wir noch erwähnen, daß nach den Ausdrücken (9.203) und (9.204) der Limes $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] \to 1$ für $\gamma \to \infty$ gilt; die Abschätzung (9.203) liegt also genau in der Größenordnung des relativen Fehlers.

Das nächste, das uns an den Graphen 9.1 aufällt, ist, daß der größte Teil des Intervalls der (praktisch) möglichen Werte bereits bei $\gamma = 20$, wobei dieser Wert zu $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.9$ korrespondiert, endet[122], d.h. die Variation des Parameters wird praktisch bereits vollständig in den Intervall $[0,\ 20]$ liegen. Bei einem Wert von $\gamma = 3.5$ ist $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.5$, und für $\gamma = 10$ ist bereits $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.8$, woraus folgt, daß im Intevall $[0,\ 10]$ die vergleichsweise größte Variation von γ stattfindet. Gehen wir davon aus, daß in der Praxis Daten mit einem Fehler von $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.5$ von vornherein verworfen[123] werden, so können wir demnach also erwarten, daß für den Wert des Regularisierungsparameters, so wir diesen gemäß (9.204) wählen, $\gamma \leq 3.5$ gelten wird.

Neben den Ausdrücken (9.203) und (9.204) sollten wir somit auch deren Asymptotik für $\gamma \to 0$ untersuchen, wobei wir uns jetzt explizit auf den Ausdruck für den „quasi optimalen“ Wert beschränken wollen; die Ausdrücke für die Abschätzung folgen dann trivialer weise. Eine Möglichkeit[124] ist jetzt, um eine asymptotische Entwicklung der rechten Seite dieser Ausdrücke zu erhalten, (wiederum) die entsprechende asymptotische, auf der Reihendarstellung der Gaußfunktion basierende, Entwicklung im Fourier-Raum auszuwerten. Der naheliegendere Weg ist jetzt jedoch, alternativ (9.203), respektive (9.204), nach γ zu entwickeln[125]. Betrachten wir zuerst die niedrigste Ordnung der (asymptotischen) Entwicklung für (9.204) in γ, entwickeln wir also dessen Wurzelterme und fassen die so erhaltenen Terme inklusive $O\left(\gamma^4\right)$ zusammen, dann erhalten wir:

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] \quad \approx \quad \frac{3}{16}\,\gamma^4 + o\left(\gamma^6\right) \quad \text{für} \quad \gamma \to 0 \quad . \tag{9.205}$$

Die eben hingeschriebene Asymptotik (9.205) wird aufgrund der Natur dieser Einwicklung für $\gamma \ll 1$, maximal jedoch für $\gamma < 1$ gelten[126]. Tatsächlich gilt für diesen asymptotischen Ausdruck bei $\gamma = 1$ (offensichtlich) $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = \frac{3}{16} = 0.1875$, wohingegen der exakte Ausdruck (9.204) $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.0741$ liefert. Gehen wir also in der asymptotischen Entwicklung noch eine Ordnung in γ höher, entwickeln wir also die Wurzelterme der rechte Seite von (9.204) bis zu $O\left(\gamma^6\right)$, so erhalten wir nun zusammengefaßt:

$$\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] \approx \frac{3}{16}\,\gamma^4\,\left(1 - \frac{5}{4}\gamma^2\right) + o\left(\gamma^8\right) \quad \text{für} \quad \gamma \to 0 \quad . \tag{9.206}$$

In der Abbildung 9.2 auf der nächsten Seite vergleichen wir graphisch die beiden asymptotischen Entwicklungen (9.205) und (9.206) mit den exakten Ausdruck (9.204). Wie erwartet, weichen diese schon deutlich

[122] Genauer korrespondiert $\gamma = 20$ hier zu $\sigma^2_{\text{rel}}[\nu] = 0.908869$. Da es uns aber um die Größenordnung der betreffenden Werte geht, werden wir im folgendem auf die Angabe der genauen Nachkommestellen verzichten.

[123] Wir wollen darauf hinwiesen, daß dann der relative statistische Datenfehler ca. 70% beträgt.

[124] siehe beispielsweise die allgemeinen Ausführungen zu asymptotischen Entwicklungen in [Doe72]

[125] siehe entsprechend a.a.o.

[126] Dieses folgt unmittelbar aus der Entwicklung der Wurzelterme.

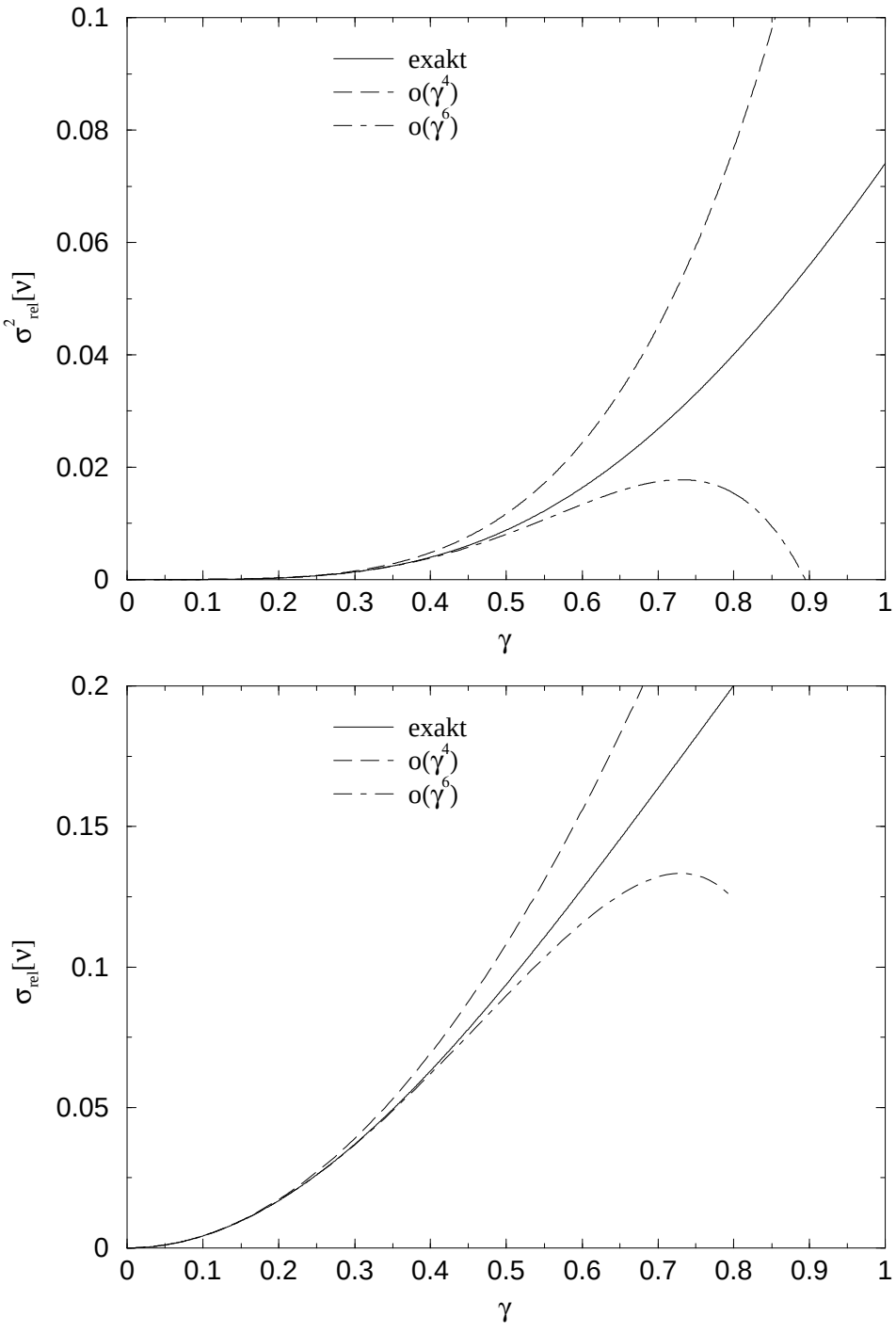

Abbildung 9.2: Der „quasi optimale“ Wert und dessen Asymptotik

vor $\gamma \sim 1$ von den exakten Ausdruck ab[127]. Während die Entwicklung in der niedrigsten Ordnung in γ, nach deren Übereinstimmung mit den exakten Ausdruck, generell über diesen liegt, liegt die nächst höhere anschließend unter den exakten und ab $\gamma = 0.895$ nimmt dieser Ausdruck sogar negative Werte an; diese asymototische Entwicklung bricht hier also zusammen. Gestehen wir jetzt den asymptotischen Entwicklungen bis zur ihrer Verwerfung eine Abweichung von $\delta = 10^{-3}$ von den exakten Ausdruck zu, so gilt die Entwicklung (9.205), die niedrigste Ordnung in γ, für $\gamma \leq 0.4$, was zu $\sigma^2_{\text{rel}}[v] \leq 0.004$ korrespondiert, und die in γ nächst höhere (9.206) gilt dann für $\gamma \leq 0.52$, wozu $\sigma^2_{\text{rel}}[v] \leq 0.01$ gehört. In anderen Worten bedeutet dieses, daß wir, unter der obigen Voraussetzung, die Asymptotik (9.205) für relative Datenfehler $\sigma_{\text{rel}}[v] \leq 6.0\%$ und die Asymptotik (9.206) für relative Fehler $\sigma_{\text{rel}}[v] \leq 10\%$, anstelle des exakten Ausdrucks (9.204), benutzen können - und wir deswegen auch keine höheren Ordnungen in γ in der asymptotischen Entwicklung betrachten werden.

Wir wollen nochmals bemerken: Die eben angegeben Werte von γ und die gemäß der Gleichung (9.204) dazu korrespondierenden Werte von $\sigma^2_{\text{rel}}[v]$ bezüglich der Variations- und Gültigkeitsbereiche sind nicht absolut, sondern als Größenordnungen zu betrachten, denn, wie wir bereits zur Gleichung (9.202) bemerkt haben, werden sich diese „absoluten“ Werte ändern, so wir die Gaußschen Grundfunktionen φ anders als durch (9.198) ansetzen. Wie der Leser sich aber leicht selbst klarmachen kann, wird es dabei jedoch nicht zu (wesentlich) qualitativ anderen Ergebnissen kommen. Günstiger wären natürlich über den Raum $\mathcal{S}$ gemittelte Ausdrücke, die bisher jedoch, wie bereits zur Kritik[128] an der expliziten Abhängigkeit von φ bemerkt, für eine praktische Anwendung ungeeignet sind. Letztendlich sind, wie ebenso dort bereits erwähnt, weitere Unersuchungen der hier vorgestellten Modifikationen notwendig. Desweiteren sollten wir uns nochmals die Bemerkungen auf der Seite 127 am Anfang des Kapitels 8 in das Gedächnis zurückrufen, daß die Wahl des Regularisierungsparameters, wie wir jetzt bereits deutlich gezeigt haben dürften, nicht das wesentliche Problem bei der Regularisierung unser exponentiell schlecht gestellten Problems (2.47) respektive dessen Real- (9.9) und Imaginärteil-Integralgleichungen (9.10) ist. Die numerischen Ergebnisse des Kapitels 10 scheinen, vorweggenommen, zu demonstrieren, daß die obige quasi „ad hoc“ Wahl der Funktion φ und die auf dieser basierenden konkreten Ausdrücke zu „quasi optimalem“ Wahl (9.204) und deren asymptotischen Entwicklungen (9.205) und (9.206) tatsächlich akzeptable und ausreichende Ergebnisse[129] bei der Wahl des Parameters γ liefern würden.

Mehr der Vollständigkeit, denn aufgrund einer praktischen Anwendung wegen, wollen wir uns jetzt recht kurz dem im Abschnitt 8.2.3 vorgestellten, auf $\mathcal{S}$ respektive $\mathcal{S}'$ puristisch adaptierten Diskrepanz-Prinzip zuwenden. Konkret betrachten wir das, aufgrund der leichteren Zugänglichkeit der L^1-Norm, durch die Gleichung (8.96),

$$\frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} = \frac{\|\varphi_\gamma - \varphi\|_{L^1}}{\|\varphi\|_{L^1}} \quad , \tag{9.207}$$

formulierte Prinzip, wobei wir daran erinnern wollen, daß wir die L^1-Norm durch die Norm $p_{m,0}[\varphi]$ respektive $\|\varphi\|^{\mathcal{S}}_m$ auf $\mathcal{S}$ entsprechend des Ausdrucks (8.94) abschätzen[130] können, bezüglich dieser Ordnungrelation der Normen die Abschätzungen in der L^1-Norm also sogar schärfere sind.

Betrachten wir diesmal als „typischen“ Repräsentanten der Funtionen $\varphi \in \mathcal{S}$ die Gaußfunktion der konkreten Form

$$\varphi(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-t^2} \quad , \tag{9.208}$$

die wir also ananlog zur Mollifier-Funktion (9.23) des von uns konkret angesetzten Gaußfilters gewählt haben, und für die $\|\varphi\|_{L^1} = 1$ gilt. Mit dem Gaußfilter (9.22) bzw. dessen Mollifier-Funktion, erhalten wir

[127] Die Bemerkung von $\gamma < 1$ bezog sich nur auf den grundsätzlich maximal möglichen Gültigkeitsbereich der asymptotischen Entwicklungen.

[128] siehe Abschnitt 8.2.4, Seite 141

[129] Wir wollen darauf hinweisen, daß wir in dem Kapitel 10 die Wahl des Regularisierungsparameters, aus den bekannten Gründen, nur am Rande behandeln werden, auch um den Unfang dieser Arbeit in einem noch erträglichen Rahmen zu halten; weitere Untersuchungen wären deswegen noch von Nöten.

[130] siehe Abschnitt 8.2.3, Seite 140

für die regularisierte Grundfunktion φ_γ den konkreten Ausdruck[131]:

$$\varphi_\gamma(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1+4\gamma^2}} \exp\left(-\frac{t^2}{1+4\gamma^2}\right) \quad . \tag{9.209}$$

Auf der Basis der Ausdrücke (9.208) und (9.209) läßt sich jetzt die Norm $\left\|\varphi_\gamma - \varphi\right\|_{L^1}$ explizit berechnen, und wir erhalten letztendlich für das „quasi optimale“ Prinzip (9.207):

$$\begin{aligned} \frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} &= 2\left[\mathrm{Erf}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(\ln(1+4\gamma^2)\right)\left(\frac{1}{4\gamma^2}+1\right)}\right\}\right. \\ &- \left.\mathrm{Erf}\left\{\frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{\ln(1+4\gamma^2)}{8}}\right\}\right] \end{aligned} \tag{9.210}$$

Hierbei ist Erf die Error-Funktion[132], die bekanntlich eine (streng) monotone Funktion ist. Die Argumente der beiden Error-Funktionen in (9.210) sind offensichtliche ebenso monotone Funktionen in γ und da das Argument der ersten stets größer oder gleich das der zweiten ist, ist der obige Ausdruck also insgesamt eine monotone Funktion in γ.

Die obige implizite, nichtlineare Bestimmungsgleichung (9.210) des Parameters γ ist für eine praktische Anwendung jedoch nur bedingt geeignet, insbesondere aufgrund der Error-Funktionen, und aufgrund der eben wieder in die Erinnerung zurückgerufene Bemerkung zur Wahl des Parameters γ, habe wir darauf verzichtet, diese Bestimmungsgleichung für eine praktische Wahl tatsächlich anzuwenden. Hinzu kommt noch, weil die erste Modifikation des Diskrepanz-Prinzips den (relativen) Datenfehler in der experimentell zugänglichen stochastischen Norm[133] ausdrückt, daß wir bezüglich einer praktischen Anwendung im Rahmen dieser Arbeit unser Hauptaugenmerkt (ersteinmal) auf jenes Prinzip beschränkt haben.

Wir haben allerdings noch kurz das für $\gamma \to 0$ asymptotische Verhalten des obigen Ausdrucks (9.210) untersucht. Gehen wir zur Gewinnung einer asymptotischen Entwicklung nun analog wie bei denen der Filterfehler[134] vor, setzen wir also im Fourier-Laplace Raum die Entwicklung des Gaußfilters ein und bilden die inverse Transformation, so erhalten wir letztendlich als Ausgangsgleichung:

$$\left\|\varphi_\gamma - \varphi\right\|_{L^1} = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma^{2n}}{n!} \varphi^{(2n)}(t) \right| dt \quad . \tag{9.211}$$

Mit dem Gaußschen φ aus (9.208), erhalten wir jetzt in niedrigster Ordnung in γ die asymptotische[135]:

$$\frac{\|g^\varepsilon - g\|_\infty}{\|g^\varepsilon\|_\infty} \approx \frac{2^{\frac{5}{2}}}{\sqrt{e\pi}} \gamma^2 + O\left(\gamma^4\right) \quad \text{für} \quad . \tag{9.212}$$

Der obige asymptotische Ausdruck (9.212) gilt für $\gamma \to 0$, und insbesondere unter der Bedingung $\gamma \ll 1$.

9.5.2 Das Konsistenzkriterium

Wenden wir uns jetzt dem von uns im Abschnitt 8.3 eingeführten *Konsistenzkriterium* zu. Um einen ersten Eindruck über die möglichen Formen und die im jenen Abschnitt bereits erwähnten daraus resultierenden

[131] Da es sich bei den nachfolgenden Berechnungen um elementare, und dementsprechend auch um bekannte, handelt, wollen wir auf deren Details verzichten; ansonsten sei bsplw. auf [BS76, CH68a, CH68b, WW69] verwiesen.

[132] zur Definition siehe Gleichung (9.225) auf Seite 191 und zusätzlich bezüglich deren Eigenschaften [AS68, EMOT54]

[133] Zumindest ist experimentell eine *Abschätzung* des statistischen, stochastischen Fehlers zugänglich; siehe bsplw. [Str63a, WW99]

[134] siehe Abschnitt 9.3

[135] Hierbei ist tatsächlich $e = e^1$.

möglichen Probleme[136] zu erhalten, zeigen wir in der Abbildung 9.3 auf der nächsten Seite die Schranken $I^{(\pm)}$ der integrierten Dichtefunktion für die **Delta-Dichte des Drudemodells**[137]

$$p(\tau) = \frac{w(\tau)}{\tau} = \frac{\delta(\tau)}{\tau} \quad ,$$

wobei die einzigen Fehlerquellen in den Daten deren (numerische) Diskretheit und deren endliche Darstellbarkeit auf einem Computer sein mögen. Konkret basieren die Schranken $I^{(\pm)}$ auf den Real- und Imaginärteil der ursprünglichen Integralgleichung (Gl. (2.17) und Gl. (2.18)) und einem Datensatz von 1024 in dem Intervall $t \in [-10, 10]$ gleichdistanzierte Datenpunkten, wobei wir die schon öfters durchgeführte Variablensubstitution $\tau = e^{-t}$ respektive $t = -\ln\tau$ zur Erhöhung der numerischen Stabilität[138] bei der Berechnung der Schranken durchgeführt haben. Da sich die auf den Real- oder Imaginärteil basierenden Schranken numerisch kaum voneinander unterscheiden, zeigen wir im nachfolgenden nur die auf den Realteil basierenden.

Die Integrierte $I(\tau_0)$ respektive die auf die Variable t_0 substituierte Integrierte $\bar{I}(t_0) = I(e^{-t_0})$ ist gemäß der Theorie der Distributionen durch

$$\bar{I}(t_0) = \Theta(t_0) \tag{9.213}$$

gegeben[139]. Dort wird gezeigt, daß die Ableitung der Theta-Funktion, die ihrerseits eine Distribution darstellt, die Delta-Funktion ist[140]. Dementsprechend wird das Integral

$$I(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\infty} \frac{\delta(\tau)}{\tau}\, d\tau \quad \stackrel{\tau=e^{-t}}{\longrightarrow} \quad \bar{I}(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \delta(t)\, dt \quad , \tag{9.214}$$

als die Theta-Funktion interpretierbar.

Betrachten wir also die Abbildung 9.3. Wir haben dort $-t_0$ anstatt t_0 gegen $I(t_0)$ aufgetragen um den ursprünglichen Charakter der Integrierten I visuell zu erhalten[141]. Es ist als erstes festzuhalten, daß wie erwartet tatsächlich Gleichung (8.122),

$$I^-(t_0) \leq I(t_0) \leq I^+(t_0) \quad \forall\, t_0 \in \mathbb{R} \quad , \tag{9.215}$$

gilt.

Als nächstes sehen wir, daß die Schranken, anders als vielleicht erwartet, trotz fehlerlose Daten, außer den oben erwähnten Fehlerquellen, nicht übereinander liegen und mit der exakten Integrierten übereinstimmen. Auch mit einer Erhöhung der Datendichte und Vergrößerung des Datenintervalls erhalten wir keine anderen Schranken; tatsächlich unterscheiden diese sich numerisch nur minimal, quasi innerhalb der numerischen (Maschinen-)Genauigkeit. Ziehen wir die allgemeinen Ergebnisse der numerichen Regularisierung exakter Daten[142] hinzu, so können wir vermuten, daß die exponentielle Schlechgestelltheit der Integralgleichung (2.13) sich ebenso in der Berechnung der Schranken auswirkt. Zusätzlich müssen wir an dieser Stelle jedoch auch noch berücksichtigen, daß es sich bei den Distributionen δ und Θ um numerisch „pathologische“ Funktionen handelt, so daß es allein aufgrund dessen auch nicht verwunderlich ist, daß die Schranken hier

[136] siehe Seite 146ff

[137] siehe Abschnitt 3.1

[138] Es ist bisher nur ein Erfahrungswert, daß die Berechnung der Schranken in der Variablen t numerisch stabiler ist als in der Variablen τ. Bei der Anwesenheit „realer“ (stochastischer) Datenfehler ist ab einer Größenordnung des relativen Fehlers von $\sigma_{\text{rel}} \geq 1\%$ der Unterschied in der Stabilität jedoch nur noch marginal.

[139] Soweit es zu keinen Mißverständnissen führt, werden wir im folgendem in diesem Abschnitt anstatt $\bar{I}(t)$ ebenso $I(t)$, für andere Funktionen gelte entsprechendes, schreiben. So sind wir auch schon stillschweigend in der Beschriftung der Abbildung 9.3 verfahren.

[140] siehe [BB93, Bre65, Lig66, Wal94]

[141] siehe die Bemerkung zum Verhalten der Integrierten I unter der obigen Variablensubstitution auf Seite 147 (Abschnitt 8.3)

[142] siehe Kapitel 10

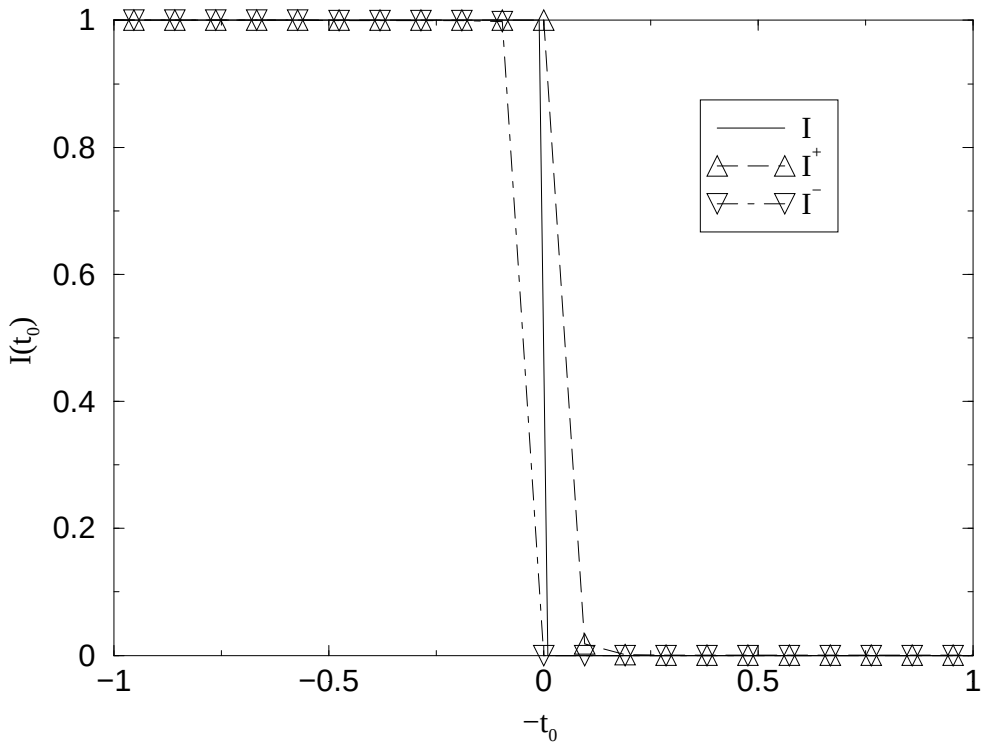

Abbildung 9.3: Schranken der Integrierten I des Drudemodells

nicht mit der exakten Integrierten übereinstimmen; die δ-Distribution selber ist bekanntlich keine reguläre Distribution, woraus deren Nichtdarstellbarkeit durch herkömmliche Funktionen folgt[143].

Da nun die Schranken nicht übereinander liegen, können wir aus jenen nur, wie im Anhang D darauf hingewiesen wird, so wir die exakte Lösung nicht kennen würden, indirekte Informationen über die gesuchte Dichte erhalten. Eine Ableitung der Schranken selber ist nur bedingt hilfreich, da die so gewonnen „Dichten“ selber selbstverständlich allgemein keine Schrankeneigenschaften aufweisen werden. Dieses wollen wir kurz mit der Abbildung 9.4 auf der nächsten Seite verdeutlichen[144].

In dieser Abbildung bezeichnet $w_T = \delta$, die theoretische Deltadichte, w^+ ist die Ableitung der oberen Schranke I^+ und entsprechend ist w^- die Ableitung der Funktion I^-, es ist also

$$w^{(\pm)}(t_0) = \frac{dI^{(\pm)}(t_0)}{dt_0} \quad ; \tag{9.216}$$

die Bezeichnung $w^{(\pm)}$ soll jedoch keine Schranken der Funktion w suggerieren, sondern auf deren Ursprung hinweisen. Konkret wurden die Ableitungen numerisch gemäß des zentralen Differenzquotienten (4.51)

$$D_h I^{(\pm)}(t_0) = \frac{I^{(\pm)}(t_0+h) - I^{(\pm)}(t_0-h)}{2h},\ h > 0 \quad , \tag{9.217}$$

wobei h hier, der Einfachheit wegen, der Abstand der diskreten Datenpunkte von $I^{(\pm)}$ ist.

Bei näherer Betrachtung der Abbildung 9.4 sehen wir, daß die Ableitung der Schranken in dem Sinne hilfreich sein könnten grob den Bereich, indem die gesuchte Funktion von Null verschieden ist, zu ermitteln;

[143] siehe [BB93, Wal94] und Anhang B

[144] Wir sollten darauf hinweisen, daß die Ableitung der Schranken $I^{(\pm)}(t_0)$ selbstverständlich zur Dichte $w(t_0)$ und nicht zur Dichte $p(t_0)$ korrespondiert; dieses folgt unmittelbar aus der Definition (2.46) von w und der Variablensubstitution $\tau = e^{-t}$.

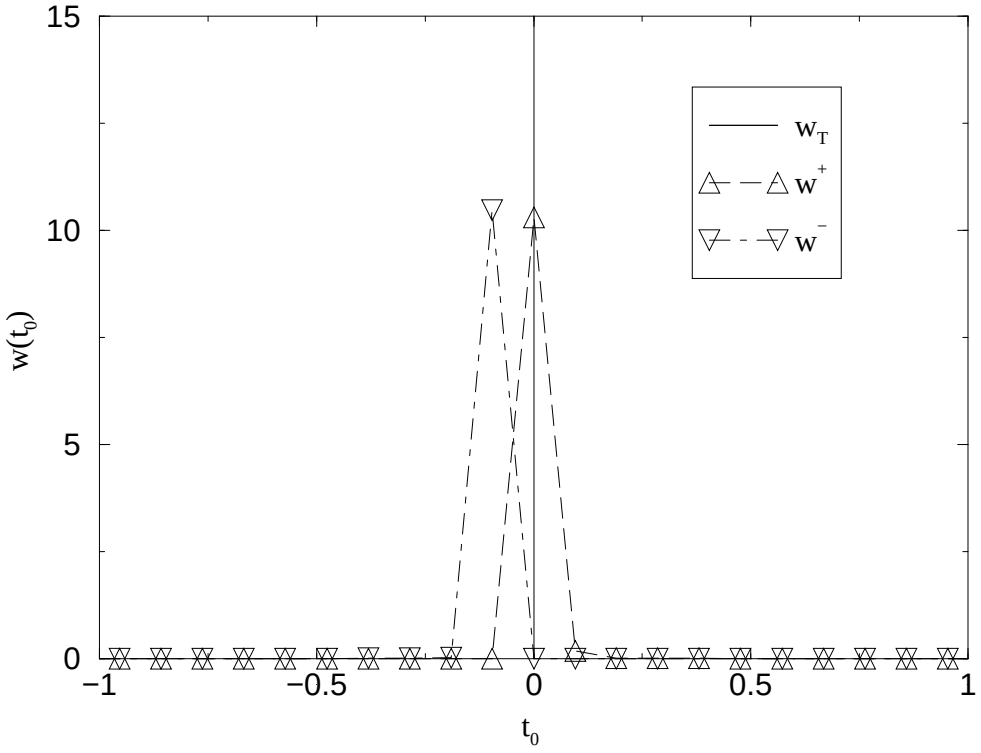

Abbildung 9.4: Ableitung der Schranken

eine Information, die wir jedoch bereits ebenso grob aus den Schranken ablesen können. Über die Lage von Extrema können diese Ableitung aufgrund ihres Ursprungs natürlich keine verlässlichen Aussagen treffen - sofern die Schranken sich nicht marginal unterscheiden. So ist die numerische Übereinstimmung des Zentrums der Funktion w^+ mit den der Deltadichte w_T hier nur als purer Zufall zu bewerten.

Wenden wir uns nun, da wir die vorgebene Funktion als prinzipiell exakt bekannt vorausgesetzt haben, der reinen Regularisisierung zu. Aus den bekannten Gründen wählen wir wiederum als Filter den Gaußfilter (9.22) und dessen Mollifier-Funktion (9.23)

$$F_\beta(t) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t^2\right) \quad , \tag{9.218}$$

wobei wir bezüglich des Regularisierungsparameters die offensichtlich sich hier anbietende Substitution

$$\beta = \frac{1}{2\gamma} \tag{9.219}$$

durchgeführt haben. Die (reine) Regularisierte ist, zur Erinnerung[145] im allgemeinen durch

$$w_\beta(t_0) = (w * F_\beta)(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} w(t) F_\beta(t_0 - t)\, dt \tag{9.220}$$

und im speziellen Fall der obigen Delta-Dichte (offensichtlich) durch

$$w_\beta(t_0) = (\delta * F_\beta)(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) F_\beta(t_0 - t)\, dt = F_\beta(t_0) \tag{9.221}$$

[145] siehe Abschnitt 5.3.3 und Kapitel 6f

gegeben, so daß wir mit der Gaußschen Mollifier-Funktion letztendlich bei

$$w_\beta(t_0) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t_0^2\right) \tag{9.222}$$

angelangen. Somit ist die Integrierte I_β, im allgemeinen Fall der reinen Regularisierung durch

$$I_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} w(t_1) F_\beta(t - t_1)\, dt_1 \right) dt \tag{9.223}$$

gegeben, hier sofort als

$$I_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} F_\beta(t)\, dt = \int_{-\infty}^{t_0} \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t^2\right) dt \tag{9.224}$$

gegeben. Unter Berücksichtigung der Definition der komplementären Error-Funktion,

$$\mathrm{Erfc}\,(x) \equiv 1 - \mathrm{Erf}\,(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2}\, dt \quad , \tag{9.225}$$

wobei Erf wieder die Error-Funktion, definiert[146] durch die Gleichung (9.126),

$$\mathrm{Erf}\,(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2}\, dt \quad , \tag{9.226}$$

ist, erhalten wir nach einer einfachen Rechnung für die Integrierte (9.224)

$$I_\beta(t_0) = \frac{1}{2}\,\mathrm{Erfc}\,(-\beta t_0) = \frac{1}{2}\,(1 + \mathrm{Erf}\,(\beta t_0)) \quad . \tag{9.227}$$

Ausdrücke wie (9.227), in denen die Error-Funktion und die komplementäre Error-Funktion vorkommen, sind in der Statistik wohlbekannt [Str63a, AS68]. So folgt bereits unmittelbar aus den Definitionen (9.225) und (9.226) die Eigenschaft

$$\lim_{t_0 \to \infty} I_\beta(t_0) = 1 \quad \forall\, \beta \in \mathbb{R}^+ \quad . \tag{9.228}$$

Ein weitere, gerade im Rahmen der Distributionentheorie leicht nachzuweisende, Eigenschaft der Integrierten (9.227) der reinen Regularisierten des Drude-Modells ist

$$\lim_{\beta \to \infty} I_\beta(t_0) = \Theta(t_0) \quad , \tag{9.229}$$

denn es gilt bekanntlich

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \to \infty} I_\beta(t_0) &= \lim_{\beta \to \infty} \int_{-\infty}^{t_0} \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t^2\right) dt \\ &= \int_{-\infty}^{t_0} \delta(t)\, dt \quad . \end{aligned}$$

In den nun nachfolgenden Abbildungen wollen wir den Ausdruck (9.227) für I_β für einige Werte des Parameters β mit den Schranken vergleichen.

[146] siehe Seite 191 und [AS68, EMOT54]

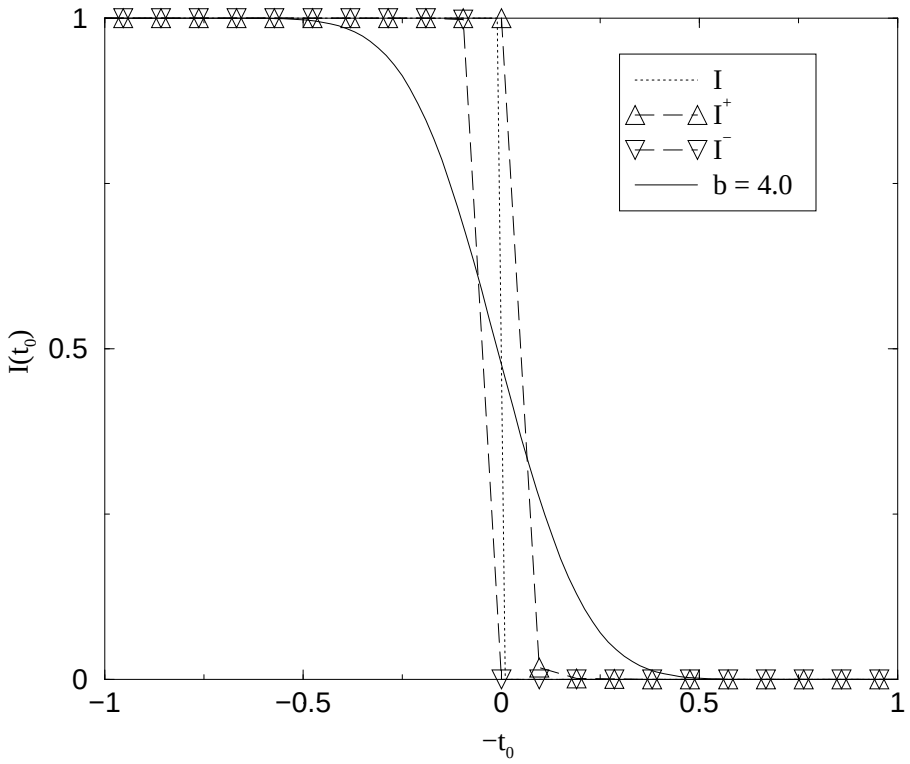

Abbildung 9.5: I_β für $\beta = 4.0$

Die Abbildung 9.5 auf dieser Seite ist an dieser Stelle ersteinmal nur als eine zusätzliche Information zu verstehen, doch markiert der Wert $\beta = 4.0$ gerade den maximalen Wert des Parameters bis zu dem numerische Stabilität bei der Anwendung des Gaußfilters (9.22) und dessen Mollifier-Funktion (9.23) bzw. (9.218) vorliegt - unabhängig von der Art der numerischen Implementierung[147].

Die Abbildung 9.6 auf der nächsten Seite und besonders die Abbildung 9.7 auf Seite 194 demonstrieren nun die prinzipielle Anwendbarkeit des Konsistenzkriteriums bei der Kenntnis der exakten Vorgegebenen. Bei einem Wert von $\beta = 10.0$ sei das Kriterium der Konsitenz von Schranken $I^{(\pm)}$ und integrierter I_β noch nicht zufriedenstellend erfüllt - die Flanken der Integrierten liegen noch außerhalb der Schranken, wohingegen wir bei einem Wert ab $\beta = 15.0$ schon die Bedingung von „fast allen t_0's" als gegeben betrachten können.

Ab einen Wert von $\beta = 20.0$ ist die Forderung nach Konsistenz auch numerisch tatsächlich für alle t_0's, soweit numerisch verfügbar, erfüllt. Die zu diesen Werten des Parameters β respektive Integrierten korrespondierenden (reinen) Regularisierten w_β (Gl. (9.222)) sind in der Abbildung 9.8 auf Seite 194 kurz wiedergegeben.

Kritisch sollte an dieser Stelle bemerkt werden, daß wir alleine aus den bisherigen Kenntnissen über den Schranken $I^{(\pm)}$ und der integrierten I_β der regularisierten Lösung, bei den bisherigen Werten des Regularisierungsparameters β, noch nicht auf das eigentliche Wesen der exakten Dichte w_T schließen könnten; die Frage, ob es sich bei dieser Funktion um eine schmale Gaußdichte oder tatsächlich um eine Delta-Dichte handelt, ist mit den bisherigen Wissen offensichtlich nicht zu klären, ein Umstand, der im Hinblick auf die numerischen „pathologischen" Eigenschaften der Delta-Dichte und der schmalen Gaußdichte, die ihrerseits eine Approximation der Delta-Funktion ist, auch nicht wirklich verwundert. Ein wichtiges Kriterium zur Beantwortung dieser Frage wäre hier zwar die reine Regularisierte w_β, die in der Praxis aber unbekannt sein

[147] Dieses gilt strenggenommen nur solange wir nicht auf sogenannte „Multiprecision-Routinen" zurückgreifen. In der Praxis werden jedoch Meßwerte sellten mehr als „doppeltgenaue Zahlen" vorliegen; siehe auch Kapitel 10

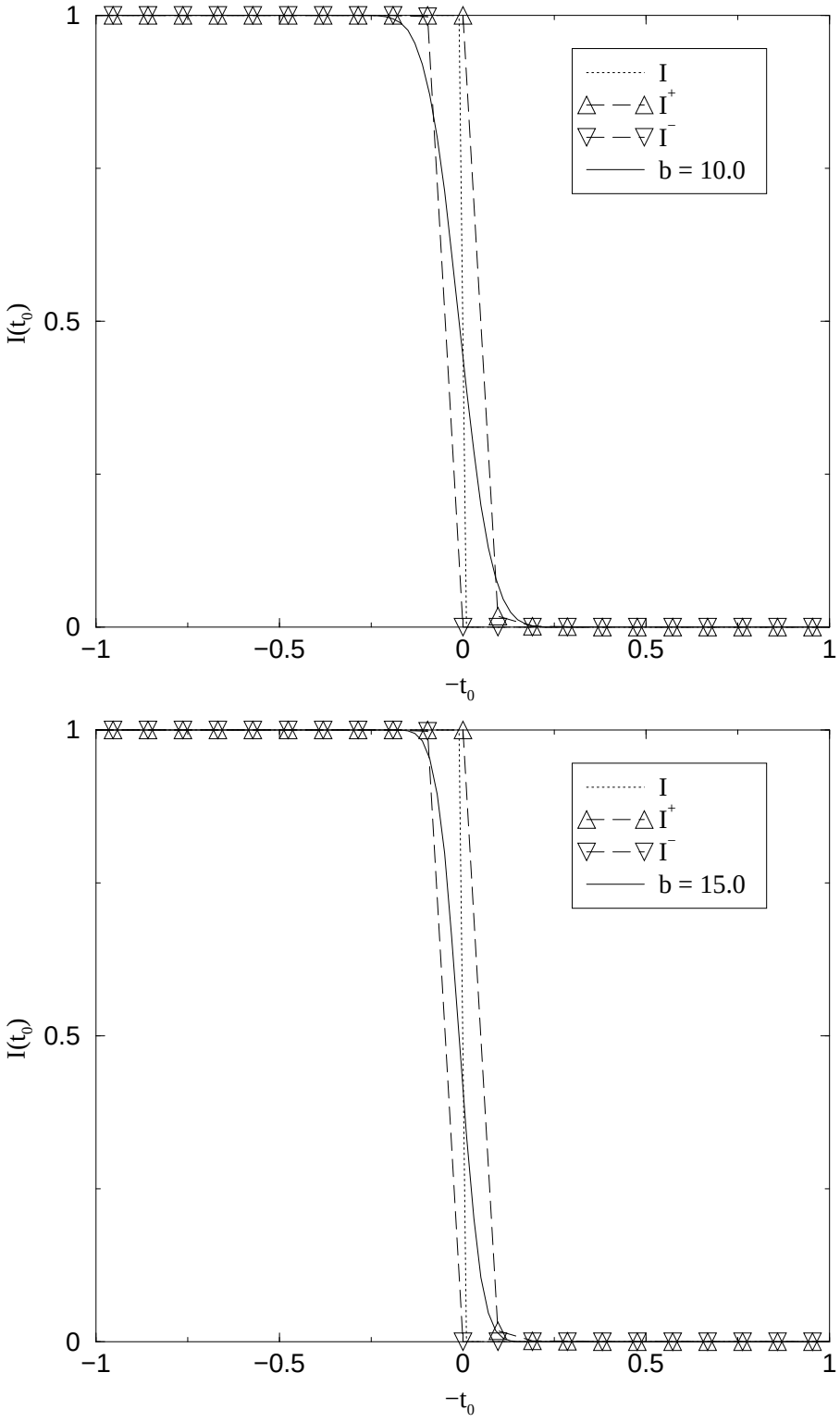

Abbildung 9.6: I_β für $\beta = 10.0$ und $\beta = 15.0$

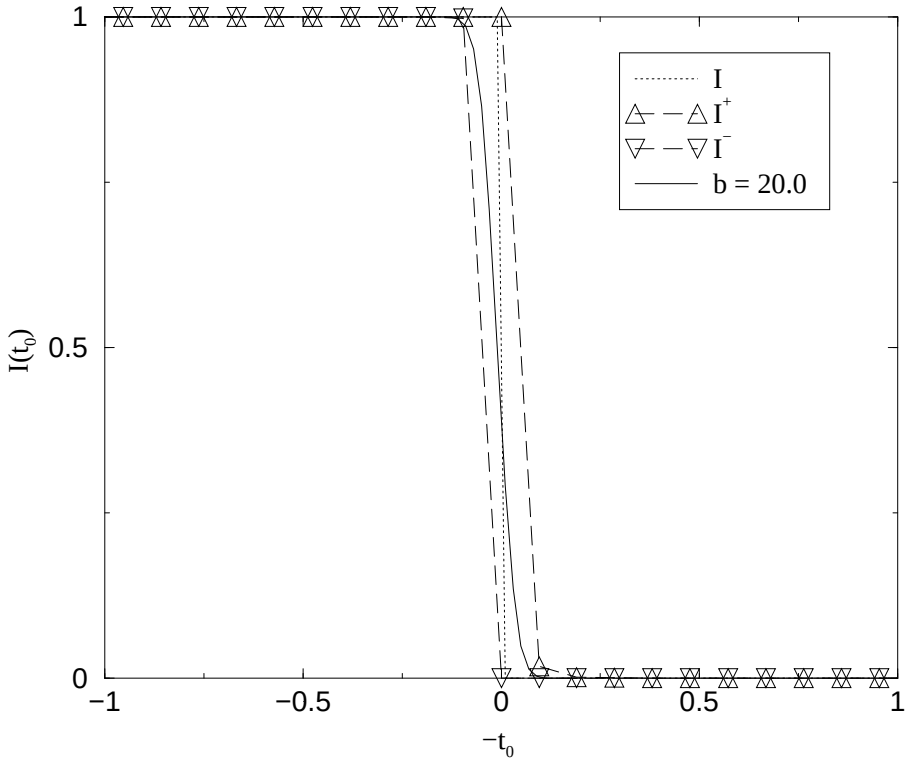

Abbildung 9.7: I_β für $\beta = 20.0$

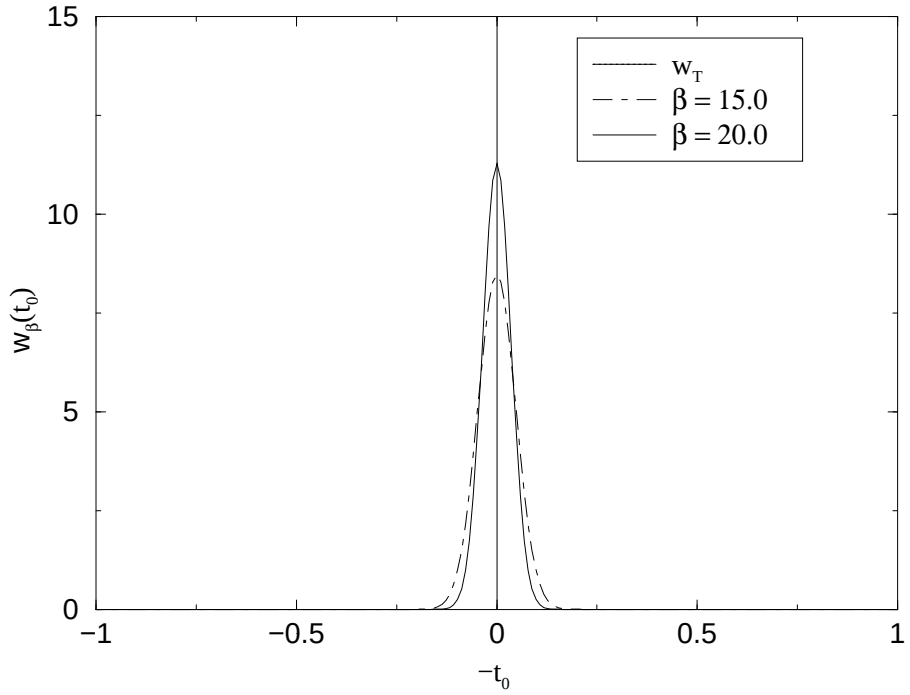

Abbildung 9.8: w_β für $\beta = 15.0,\ 20.0$

dürfte.

Doch sollten wir aber ebenso bereits an dieser Stelle erwähnen, daß die Frage nach dem mathematisch exakten Wesen[148] der gesuchten Dichte nicht nur aufgrund jener eventuellen mahematischen und numerischen „patologischen“ Eigenschaften sondern schon wegen der exponentiellen Schlechtgestelltheit der Ausgangsgleichung und des daraus folgenden generellen Einflusses des Datenfehlers in der Regularisierung selbst bei einem relativen mittleren Datenfehler von $\sigma_{\text{rel}} \approx 1\%$ kaum möglich sein wird[149].

Wenden wir uns nun als nächstes Beispiel einer weniger pathologischen Dichte zu, der **Gaußdichte** respektive der des **Gauß-Modells**,

$$w_T(t) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\alpha^2 (t - t_1)^2\right) \quad , \tag{9.230}$$

die wir o.B.d.A. entsprechend der Gaußschen stabilisierenden Funktion gewählt haben. Hierbei sind α und t_1 Modellparameter, wobei wir, vorweggenommen, hier in der numerischen Auswertung $t_1 = 0$ gesetzt haben.

Zuerst wollen wir uns jedoch noch kurz einigen (einfachen) theoretischen Ergebnissen zuwenden. Die reine Regularisierte w_β, wieder auf den Gaußschen Filter und dessen Mollifier-Funktion (9.218) basierend, ist durch (9.220) gegeben:

$$w_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha\beta}{\pi} \exp\left(-\alpha^2 (t - t_1)^2\right) \exp\left(-\beta^2 (t - t_0)^2\right) dt \quad ; \tag{9.231}$$

hier sei wiederum $\beta = 1/(2\gamma)$ der (reziproke) Regularisierungsparameter. Den Ausdruck (9.231) zu berechnen ist eine relativ einfache Übung, und so erhalten wir für die Regularisierte:

$$w_\beta(t_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \exp\left(-\frac{(\alpha\beta)^2}{\alpha^2 + \beta^2} (t_0 - t_1)^2\right) \tag{9.232}$$

bzw. mit der Setzung

$$\alpha(\beta) = \frac{\alpha\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \tag{9.233}$$

erhalten wir letztendlich den nicht überaschenden Ausdruck

$$w_\beta(t_0) = \frac{\alpha(\beta)}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-[\alpha(\beta)]^2 (t_0 - t_1)^2\right) \quad . \tag{9.234}$$

Entsprechend zur Integrierten (9.227) der regularisierten der Delta-Dichte, ergibt sich die Integierte der Gaußdichte (9.230) zu

$$I(t_0) = \frac{1}{2} \operatorname{Erfc}\left[-\alpha(t_0 - t_1)\right] = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{Erf}\left[\alpha(t_0 - t_1)\right]\right) \quad . \tag{9.235}$$

Ebenso entsprechend erhalten wir für die Integrierte I_β der (reinen) Regularisierten (9.234) die Ausdrücke:

$$I_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \frac{\alpha(\beta)}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-[\alpha(\beta)]^2 (t_0 - t_1)^2\right) dt \tag{9.236}$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{Erfc}\left[-\alpha(\beta)(t_0 - t_1)\right] \tag{9.237}$$

$$= \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{Erf}\left[\alpha(\beta)(t_0 - t_1)\right]\right) \quad . \tag{9.238}$$

[148] Ein anderes Wesen ist auch nicht möglich zu ergründen; siehe [Haa83]

[149] Details siehe Abschnitt 9.3 und Kapitel 10

In den Abbildungen 9.9 bis 9.11 zeigen wir die Integrierte (9.235) des Gauß-Modells und deren Schranken, wobei wir als Modellparameter jeweils $\alpha = 1.0$ (Abbildung 9.9 auf der nächsten Seite), $\alpha = 3.0$ (Abbildung 9.10 auf Seite 198) und $\alpha = 10.0$ (Abbildung 9.11 auf Seite 199) sowie - wie bereits erwähnt - $t_1 = 0$ gewählt haben. Wiederum seien die Funktionen E_1 und E_2 des Gauß-Modells als prinzipiell exakt bekannt vorausgesetzt gewesen, d.h. die einzigen Fehlerquellen bei der Berechnung der Schranken seien die numerische Diskretheit der Daten und die endliche Darstellung der Zahlen in den Computer. Desweiteren gilt bezüglich der Berechnung der Schranken dasselbe wie bei der Berechnung jener des Drude-Modells. Wir haben hier sowohl die auf den Real- (2.17) als auch die auf den Imaginärteil (2.18) basierenden Schranken wiedergegeben um zu demonstrieren, daß sich die so gewonnen hier tatsächlich nur geringfügig unterscheiden. Ebenso haben wir uns entschieden, sowohl τ gegen $I(\tau)$, also die ursprüngliche Skalierung des Problems, als auch $-t_0$, um die Charakteristik von I visuell zu erhalten, gegen $I(t_0)$ aufzutragen[150].

Wie schon im Beispiel der Delta-Dichte, fallen auch hier trotz fehlerloser Daten die Schranken nicht mit der exakten Integrierten zusammen. Die Form und Lage der Schranken erinnern auf der t_0 Skala an einer Art Parallelverschiebung der exakten Integrierten. Ebenso sehen wir, daß die Schranken mit wachsendem Parameter α sich der exakten Integrierten nähern, diese quasi „immer enger umschließen“. Vergleichen wir jetzt die Abbildung 9.11 mit der entsprechenden 9.3 der Delta-Dichte, wie in der Abbildung 9.12 auf Seite 200 verdeutlicht durchgeführt, so können wir einen numerischen Trend zur Konvergenz der jeweiligen Schranken vermuten - wie also die Gauß-Dichte für $\alpha \to \infty$ bekanntermaßen im Sinne der Distributionentheorie gegen die Delta-Distribution konvergiert, so scheint eine entsprechende Konvergenz bei den Schranken vorzuliegen[151].

Wir wollen nun anhand der Abbildung 9.13 auf Seite 201 die Ableitung der Schranken des Gauß-Modells diskutieren. Bezüglich der Bezeichnungen gilt das entsprechende wie bei der Ableitung der Schranken im Falle der Delta-Dichte (Abb. 9.4 auf Seite 190). Wie bei jenen, geben die Ableitungen (grob) den Bereich an, indem die exakte Dichte liegt - eine Information, die wir aber wiederum bereits von den Schranken direkt erhalten können. Ebenso wie im Beispiel der Delta-Dichte, ist die Form der Ableitungen ein vages Bild der tatsächlichen Linienform - was uns aufgrund der Schrankennatur auch nicht verwundert. Am ehesten können wir die Gaußform der Dichte bei dem Modellparameter $\alpha = 3.0$ erahnen, die Ableitungen für den Modellwert $\alpha = 1.0$ sind tatsächlich nur ein vages Abbild einer Gaußkurve und für den Wert $\alpha = 10.0$ ist eine Information über die Kurvenform ehrlicherweise kaum erhältlich. Es ist müßig zu erwähnen, daß die Abbleitungen selbstverständlich keine Informationen über die Lage der Extrema beinhalten können. Sie beinhalten also nur bedingt mehr (direkte) Informationen über die gesuchte Dichte als die Schranken selber und sind so gesehen (bisher) ein netter Zusatz.

Ziehen wir also in der Betrachtung der Abbildungen 9.9 bis 9.11 und den Ableitungen der Schranken (Abb. 9.13) noch die obigen Schranken der Delta-Dichte (Abb. 9.3) und deren Ableitungen (Abb. 9.4) hinzu, so erkennen wir, daß die Schranken der ungestörten Daten implizit Informationen über die Kurvenform enthalten; dieses läßt sich ebenso, wie eben erwähnt, an den Ableitungen der Schranken ablesen. Jedoch sehen wir auch an den Vergleich der Schranken der Delta-Dichte und der Gauß-Dichte für $\alpha = 10.0$, Abb. 9.12, daß die alleinige Kenntnis der Schranken trotz Fehlerlosigkeit der eingebrachten Funktionen keine Entscheidung ermöglicht, ob es sich um eine relativ schmale Gauß-Dichte, wie jene es für den Parameter $\alpha = 10.0$ ist, oder tatsächlich um eine Delta-Dichte handelt. Ein Umstand, der uns aufgrund der mathematischen Verwandtschaft von Delta- und Gauß-Dichten auch nicht verwundert.

Wenden wir uns nun den (reinen) Regularisierten, genauer deren Integrierten I_β (Gl. 9.238) zu und vergleichen diese mit den zu den Modellen gehörenden Schranken um wiederum zu untersuchen, ob und wenn für welche Werte des Regularisierungsparameters β das Konsistenskriterium anwendbar sein wird.

Im Fall des Gauß-Modells mit $\alpha = 1.0$ sehen wir in der Abbildung 9.14 auf Seite 202, daß zwar bei dem Wert $\beta = 1.0$ des Regularisierungsparameters die Integrierte I_β der regularisierten Lösung die Bedingungen

[150] zur Erinnerung: $I(\tau = e^{-t_0}) \to I(t_0)$

[151] Das die Integrierten I_α respektive P_α des Gauß-Modells für $\alpha \to \infty$ gegen die Integrierten der Delta-Funktion konvergieren, folgt aus der Eigenschaft der Gaußfunktion, eine Approximation der Delta-Funktion zu sein. Die numerische Konvergenz der Schranken haben wir jedoch, da jene zwar ein interessantes Nebenergebnis dieser Arbeit ist, für das eigentlichen Thema aber nur bedingt wichtig, nicht weiter untersucht.

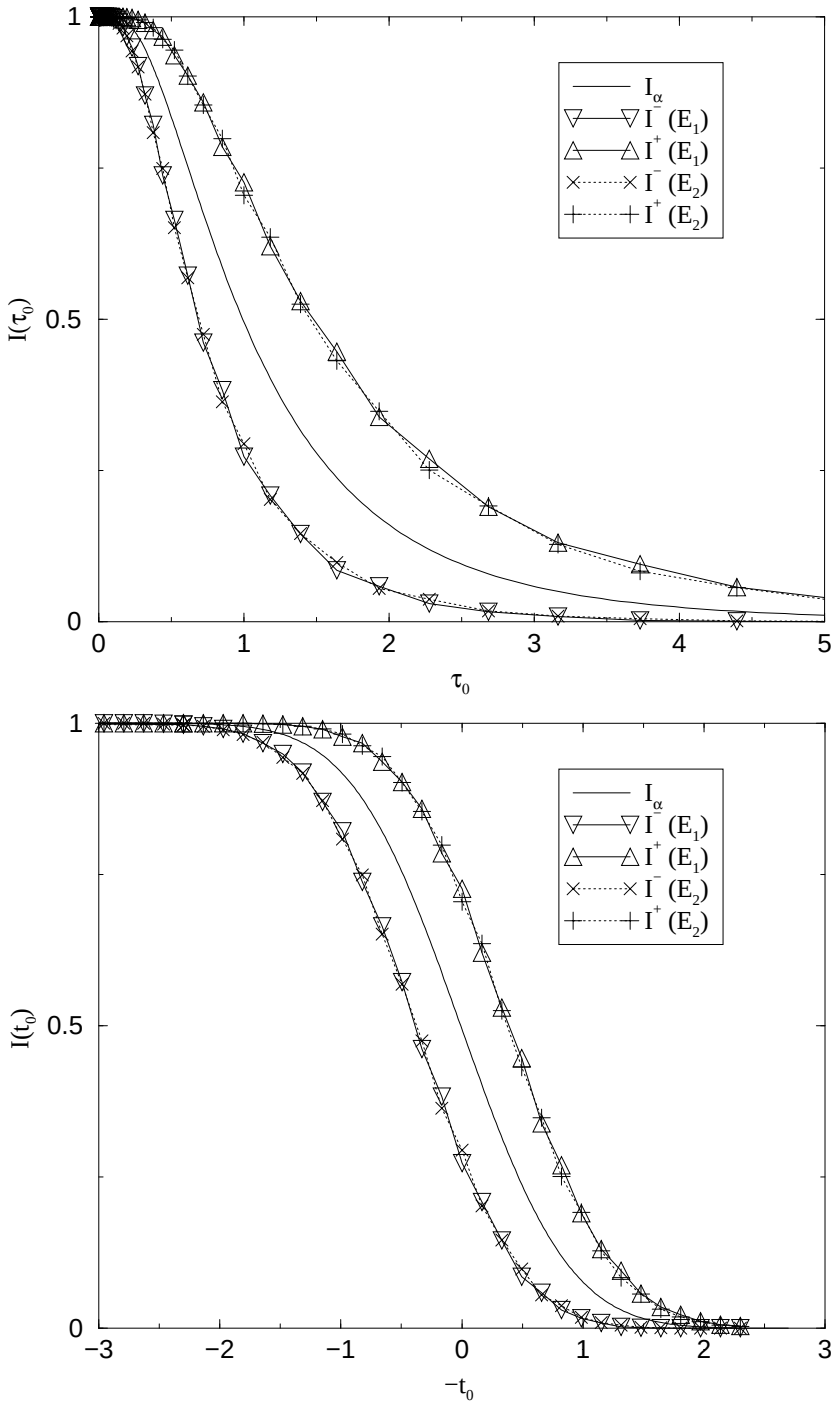

Abbildung 9.9: Integrierte I_α und deren Schranken für $\alpha = 1.0$

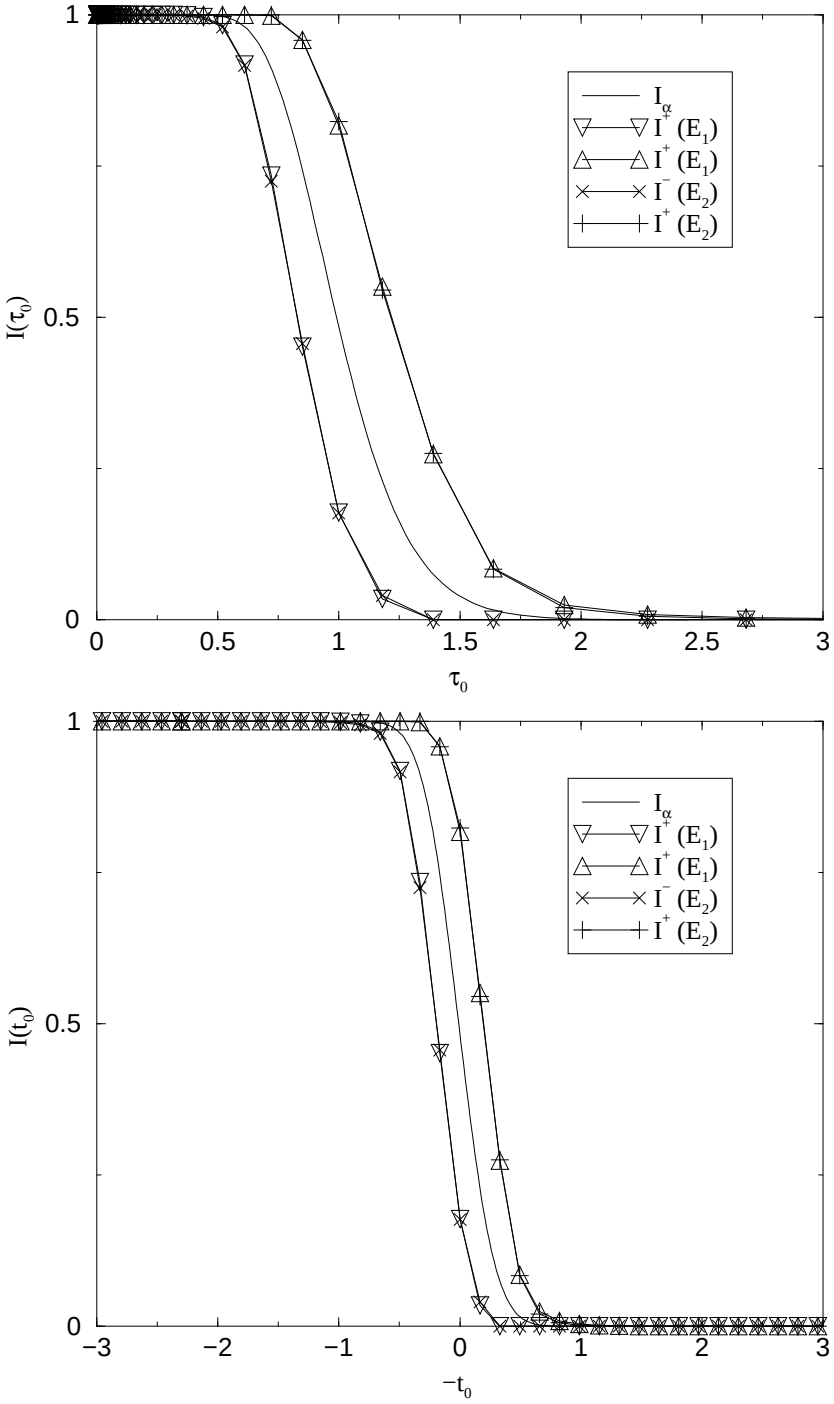

Abbildung 9.10: Integrierte I_α und deren Schranken für $\alpha = 3.0$

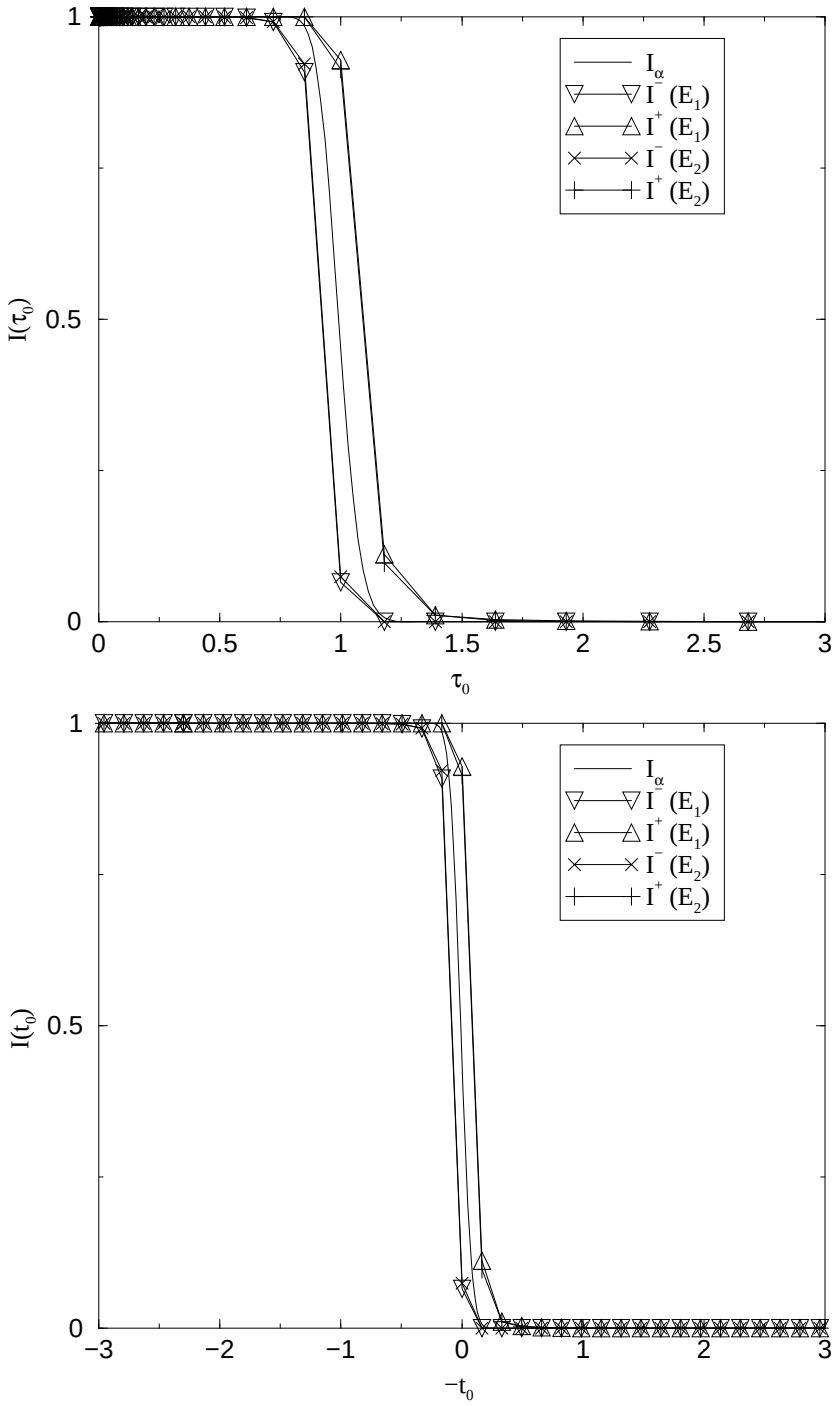

Abbildung 9.11: Integrierte I_α und deren Schranken für $\alpha = 10.0$

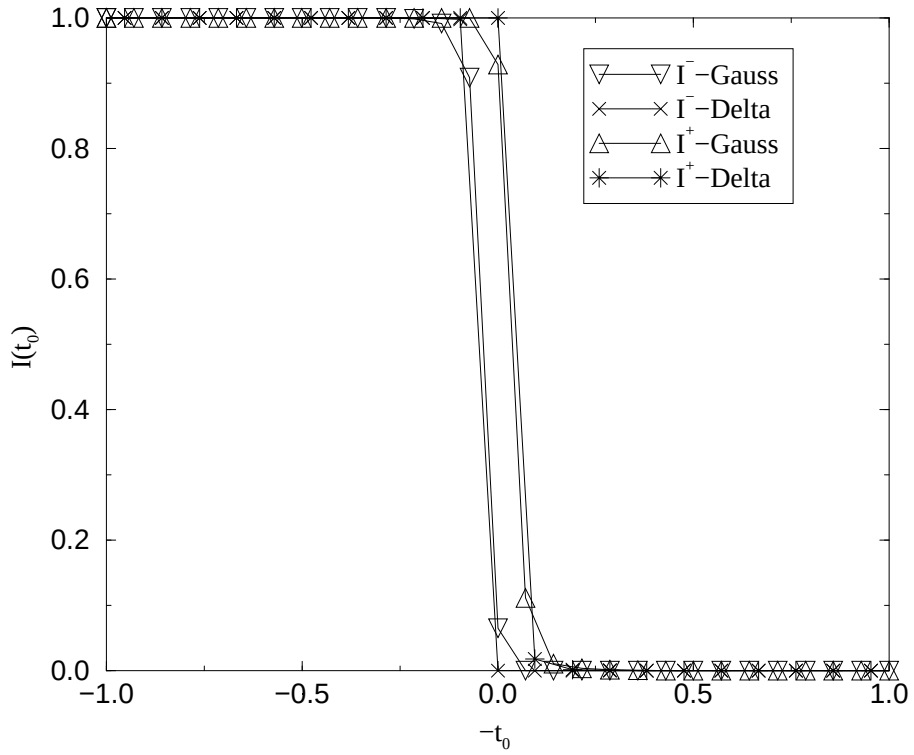

Abbildung 9.12: $I^{\pm}$ der Delta- und der Gauß-Dichte ($\alpha = 10.0$)

des Konsistenzkriteriums noch nicht zufriedenstellend erfüllt sind, bei einem Wert von $\beta = 2.0$ jene jedoch schon vollständig erfüllt sind; es gilt sogar tatsächlich die Ungleichung (8.123) des Konsitenzkriteriums. Für das Gauß-Modell mit $\alpha = 3.0$ ergibt sich ein, gemäß der Abbildung 9.15 auf Seite 203, analoges Bild bei den Werten $\beta = 2.0$ und $\beta = 3.0$: bei ersteren ist das Konsistenzkriterium noch nicht vollständig, ab dem letzteren für alle (verfügbaren) Werte von t_0 vollständig erfüllt.

Wie wir bereits im Beispiel der Delta-Dichte an dieser Stelle bemerkt haben, markiert der Wert $\beta = 4.0$ für Gaußsche stabilisierende Funktionen das Ende der numerischen Stabilität der Regularisierung[152]. Wir stellen somit fest, daß das hier vorgestellte Konsistenzkriterium für diese beiden Gauß-Modelle im Fall fehlerloser Daten im Bereich der numerischen Anwendbarkeit liegt[153]. In der Abbildung 9.17 auf Seite 205 zeigen wir die zu diesen Regularisierungsparameter korrespondierenden regularisierten Lösungen, wobei wir ebenso die Regularisierte für den Wert $\beta = 4.0$ in die Graphen aufgenommen haben.

Die Abbildung 9.16 auf Seite 204 zeigt nun die Entwicklung der Integrierten I_β im Fall des Gauß-Modells mit $\alpha = 10.0$ bei wachsenden β : erst ab $\beta = 6.0$ ist das Konsistenzkriterium für „fast alle t_0“ erfüllt; nur in den Flanken liegt die Integrierte I_β etwas jenseits der Schranken. Bei einem Wert von $\beta = 8.0$ ist das Kriterium (8.123) numerisch für alle t_0-Werte follständig erfüllt. Zusätzlich habe wir noch die Integrierte für $\beta = 10.0$ angegeben, einen Wert, bei der die entsprechende Integrierte der Delta-Dichte das Konsistenzkriterium nicht erfüllt hat[154]. Die zu den Regularisierungsparametern $\beta = 6.0,\ 8.0$ und 10.0 korrespondierenden Lösungen haben wir, der Vollständigkeit wegen, in der Abbildung 9.18 auf Seite 205 wiedergegeben.

Diese Abbildungen zusammengefaßt demonstrieren somit auch im Fall des Gauß-Modells die prinzipielle

[152] für Details siehe Kapitel 10

[153] Da wir jedoch die Dichte des Gauß-Modells exakt berechnen können, stellen die Grenzen der numerischen Stabilität keine Einschränkungen dar.

[154] siehe Abbildung 9.6 auf Seite 193

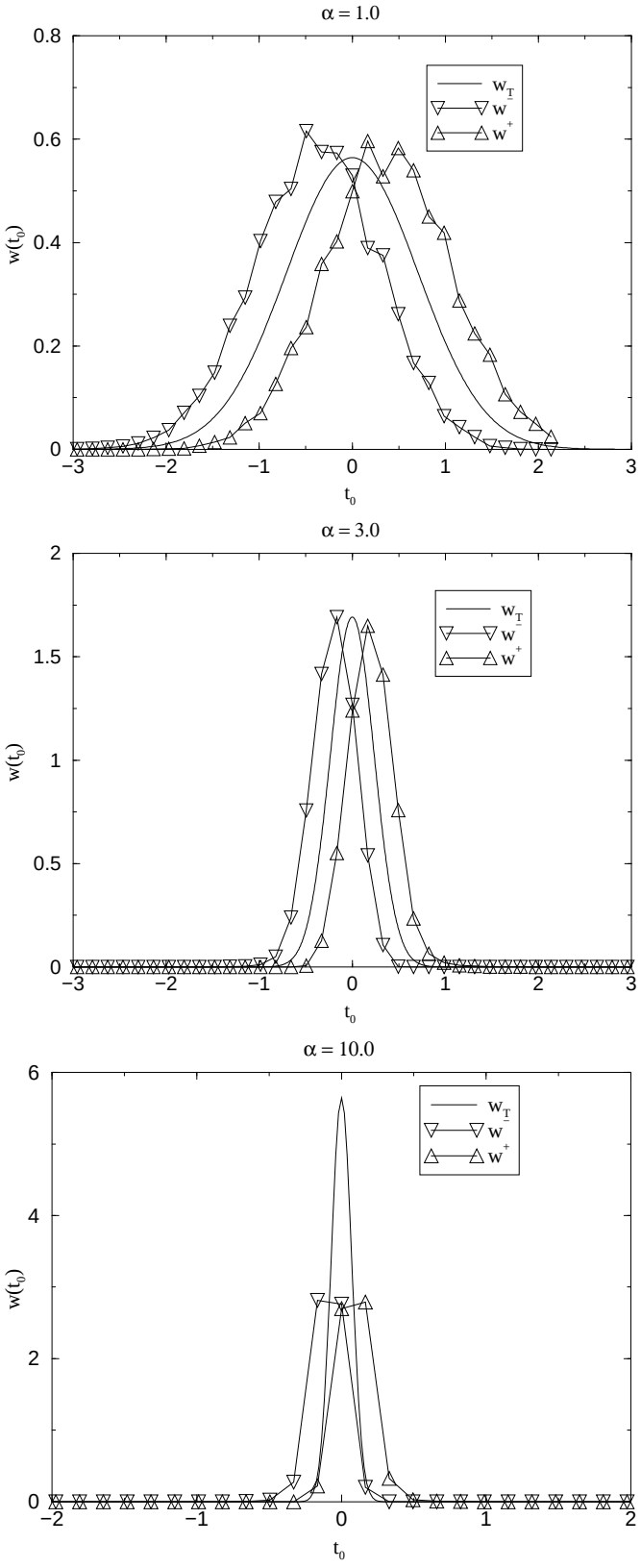

Abbildung 9.13: Ableitung der Schranken des Gauß-Modells

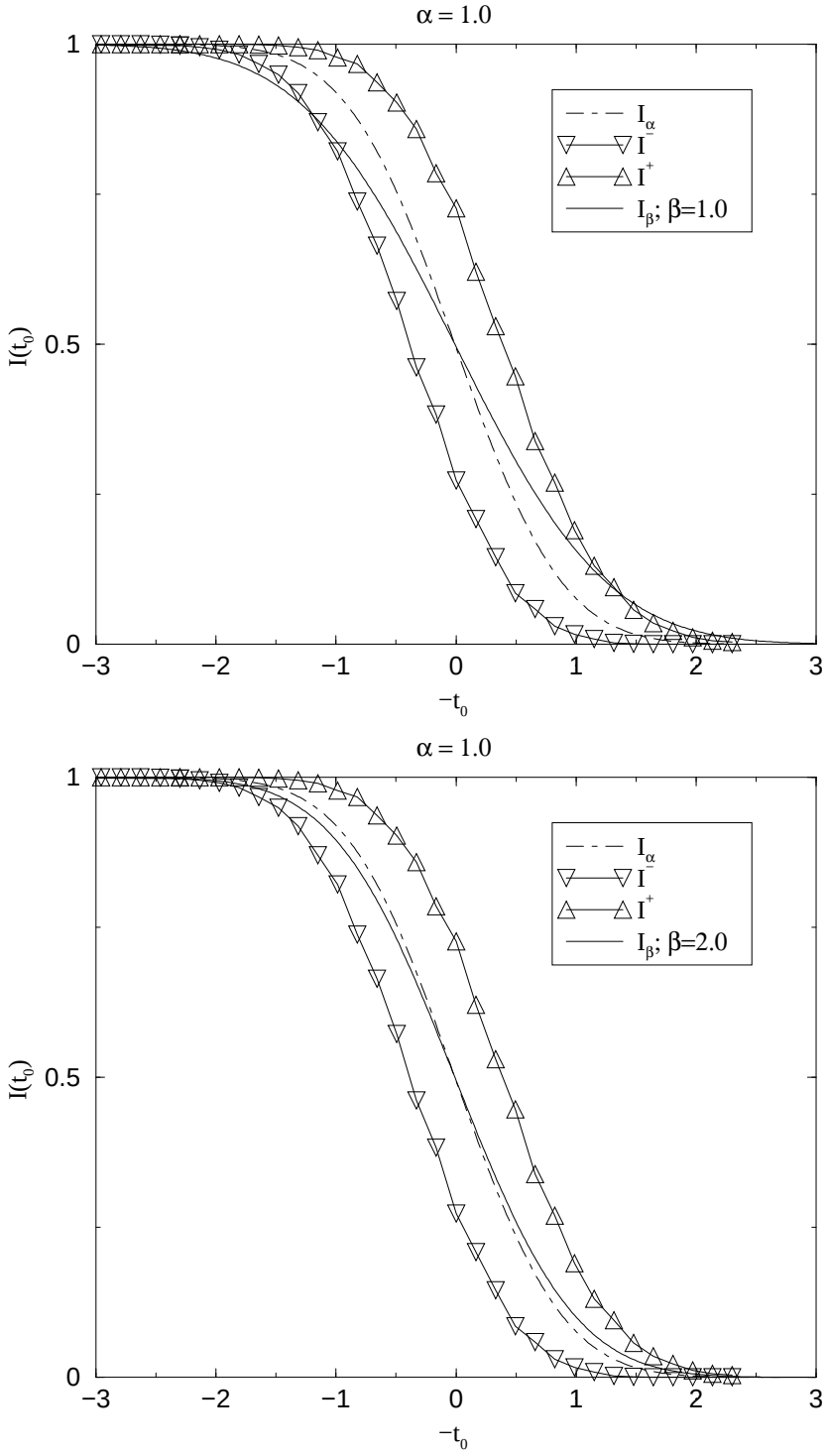

Abbildung 9.14: I_β für das Gauß-Modell; $\alpha = 1.0$

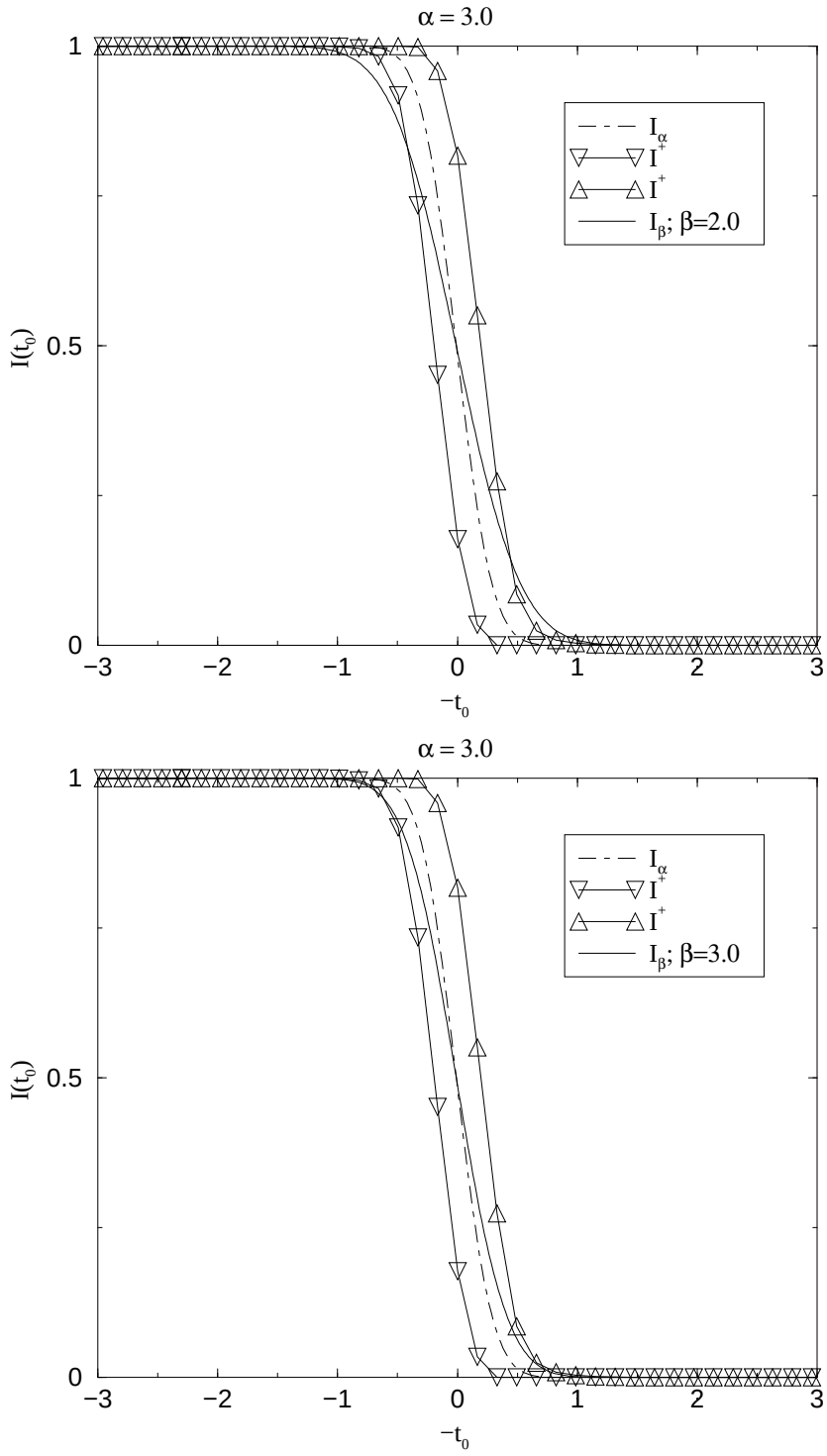

Abbildung 9.15: I_β für das Gauß-Modell; $\alpha = 3.0$

Anwendbarkeit des Konsistenzkriteriums zur Wahl des Regularisierungsparameters - bei exakt vorgegebenen Daten.

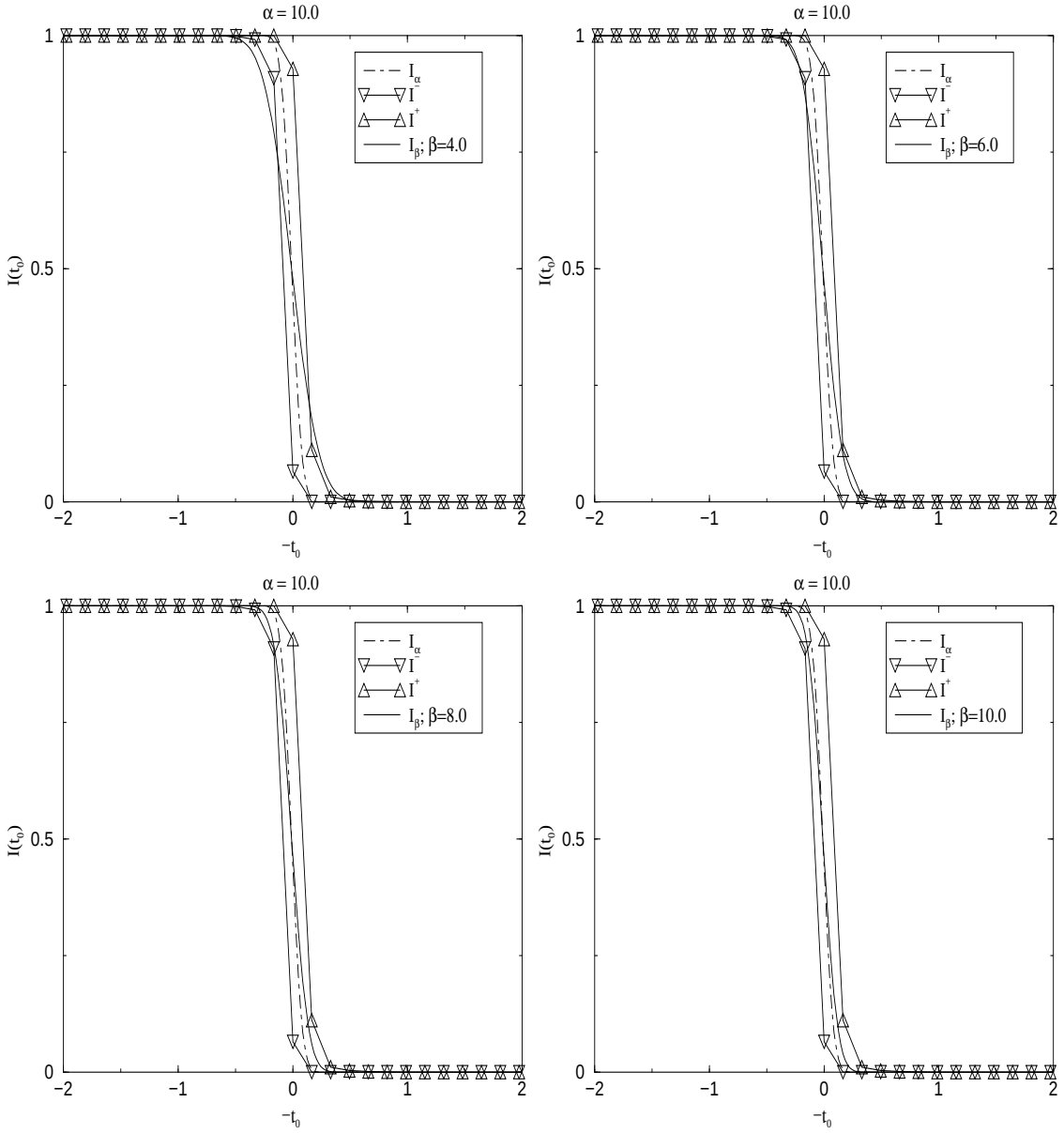

Abbildung 9.16: I_β für das Gauß-Modell; $\alpha = 10.0$

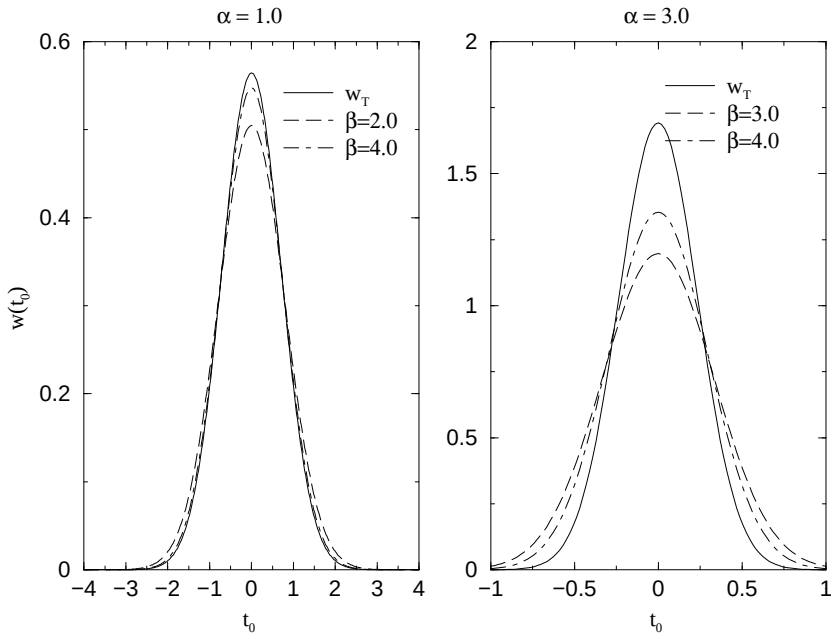

Abbildung 9.17: Gaußdichten und deren reine Regularisierten, für $\alpha = 1.0;\ 3.0$

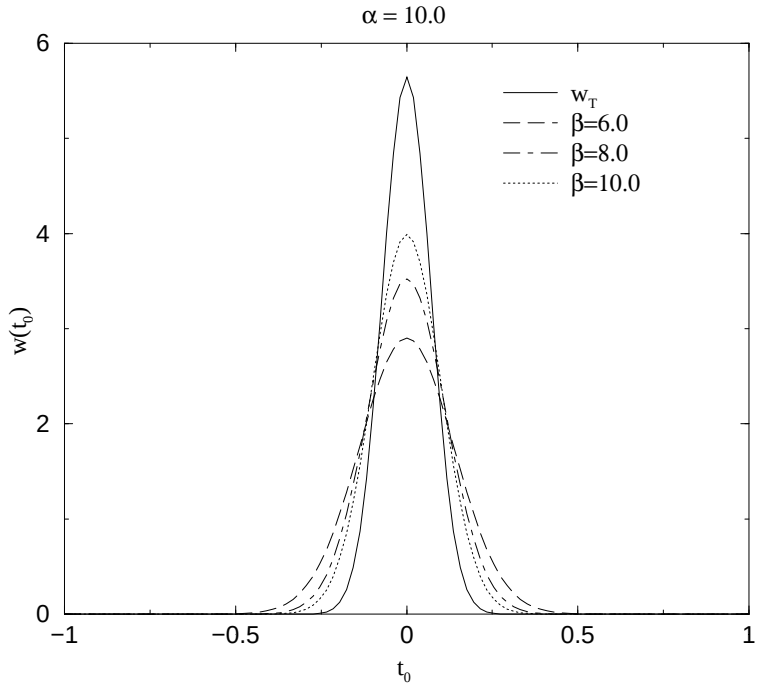

Abbildung 9.18: Gaußdichte und deren reine Regularisierten, für $\alpha = 10.0$

Das letzte Modell, an dem wir die grundsätzliche Anwendbarkeit und einige grundsätzliche Eigenschaften des Konsistenzkriteriums untersucht haben, ist die Dichte des **Cole-Davidson Modells** (Gl. 3.33)[155]:

$$p_{CD}(\tau) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi}\ \frac{1}{\tau}\ \left(\frac{\tau}{\tau_{CD}-\tau}\right)^{\alpha} & \text{für} \quad 0 < \frac{\tau}{\tau_{CD}} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < \frac{\tau}{\tau_{CD}} < \infty \end{cases} \quad , \tag{9.239}$$

mit $\mathfrak{Re}\ \alpha < 1$. Für $\alpha \to 1$ konvergiert das Cole-Davidson Modell gegen das Drude-Modell und entsprechend konvergieren auch deren Dichten. Wir wir im Abschnitt 3.6 dargelegt haben, weist die Dichte des Cole-Davidson Modells sowohl für $\tau \to 0$ als auch für $\tau \to \tau_0$ eine schwache Divergenz auf[156]:

$$\begin{aligned} & p_{CD}(\tau) \;=\; O\left(\tau^{\alpha-1}\right) \quad \text{für} \quad \tau \to 0 \\ \text{und} \qquad & p_{CD}(\tau) \;=\; O\left((\tau_0-\tau)^{-\alpha}\right) \quad \text{für} \quad \tau \to \tau_0 \quad . \end{aligned}$$

Dieses asymptotische Verhalten und vor allem der Umstand, daß das Modell in der Praxis zur Interpretation von Meßdaten benutzt wird[157], haben uns bewogen, neben der Delta- und der Gauß-Dichte zusätzlich noch die Dichte dieses Modells in den Untersuchungen aufzunehmen.

Die Verteilungsfunktion P_{CD} der Cole-Davidson Dichte ist per definitionem durch

$$\begin{aligned} P_{CD}(\tau_0) \;&=\; \int_0^{\tau_0} p_{CD}(\tau)\ d\tau \\ &=\; \int_0^{\tau_0} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi}\ \frac{1}{\tau}\ \left(\frac{\tau}{\tau_{CD}-\tau}\right)^{\alpha}\ d\tau \end{aligned} \tag{9.240}$$

gegeben. Unter Berücksichtigung der *unvollständigen Beta-Funktion* $B_x(a,b)$, definiert durch

$$B_x(a,b) = \int_0^x t^{a-1}\ (1-t)^{b-1}\ dt \quad , \tag{9.241}$$

und deren Eigenschaften[158], erhalten wir nach einigen einfachen Umformungen sofort[159]:

$$P_{CD}(\tau_0) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi}\ B_{\tau_0/\tau_{CD}}(\alpha,\ 1-\alpha) & \text{für} \quad \tau < \tau_{CD} \\ 1 & \text{für} \quad \tau > \tau_{CD} \end{cases} \quad . \tag{9.242}$$

Die Integrierte I_{CD} ist dann per definitionem durch $I_{CD} = 1 - P_{CD}$ gegeben. Die unvollständige Beta-Funktion in (9.242) läßt sich nun problemlos[160] numerisch berechnen.

Es folgen nun die Schranken für die Integrierte des Cole-Davidson Modells. Als Werte der Modellparameter haben wir hier $\alpha = 0.25$, $\alpha = 0.5$ und $\alpha = 0.9$ und $\tau_{CD} = 1.0$ gewählt. Bezüglich der Berechnung der Schranken gilt dasselbe wie bei der Berechnung der Vorangegangenen; entsprechend wurden die Daten als fehlerlos vorausgesetzt, wenn wir von den bereits oben mehrfach erwähnten Fehlerquellen absehen. Dieses schließt, wir wollen es an dieser Stelle ausdrücklich erwähnen, auch die vollständige Kenntnis des Verlaufs der Funktion E^+ ein.

---

[155] siehe Abschnitt 3.3 und [DC51]

[156] siehe Gleichungen (3.72) und (3.73)

[157] siehe beispielsweise [Bec88, DC51]

[158] siehe [AS68, EMOT53]

[159] Tatsächlich wurde die Verteilungsfunktion P_{CD} der Cole-Davidson Dichte p_{CD} von COLE und DAVIDSON berteits in [DC51] angegeben.

[160] Es exisitieren (schon länger) ausgereifte Routinen zur numerischen Berechnung der Funktion $B_x(a,b)$; siehe beispielsweise [PTVF92].

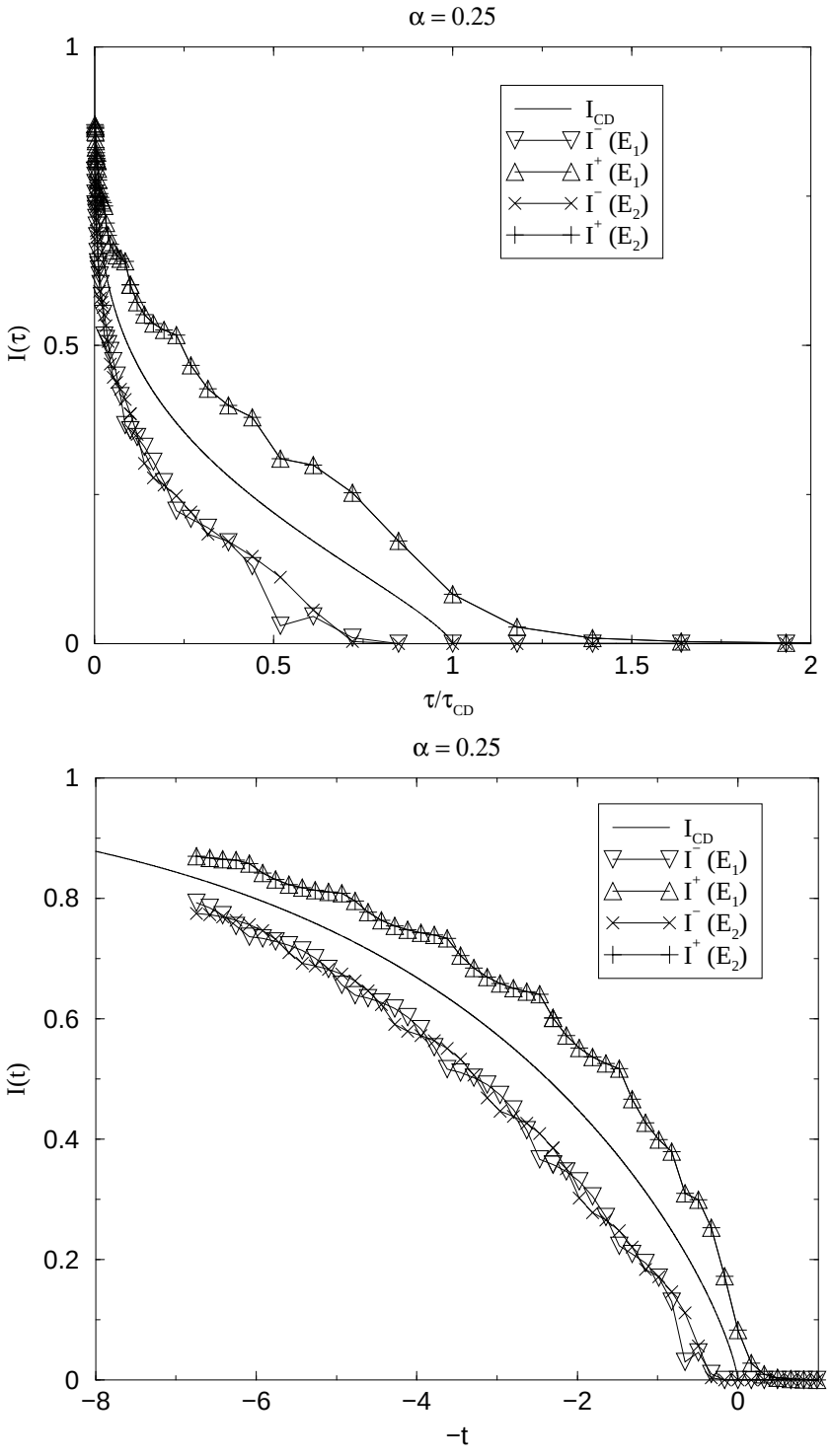

Abbildung 9.19: Integrierte I_{CD} und deren Schranken; $\alpha = 0.25$

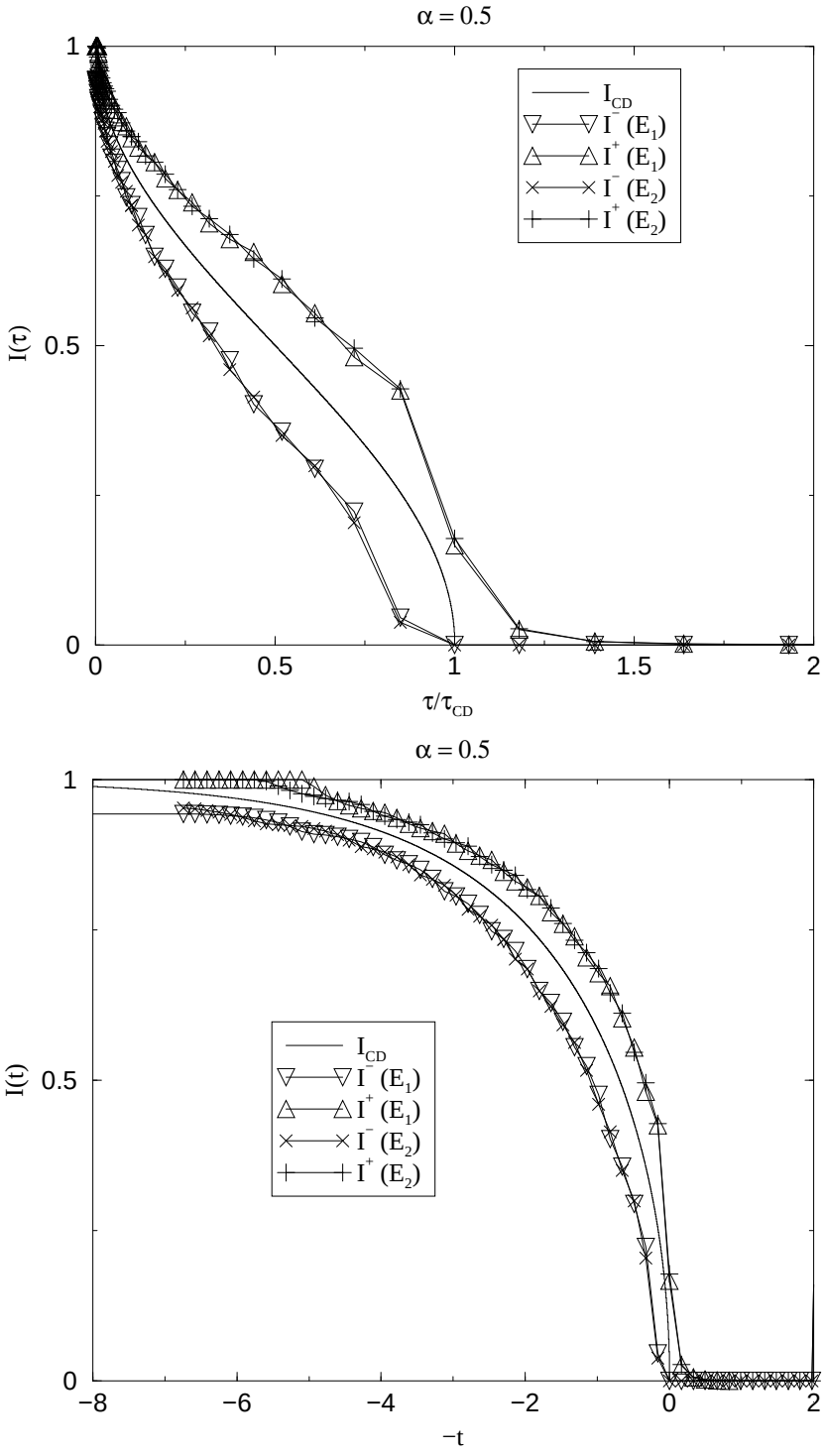

Abbildung 9.20: Integrierte I_{CD} und deren Schranken; $\alpha = 0.5$

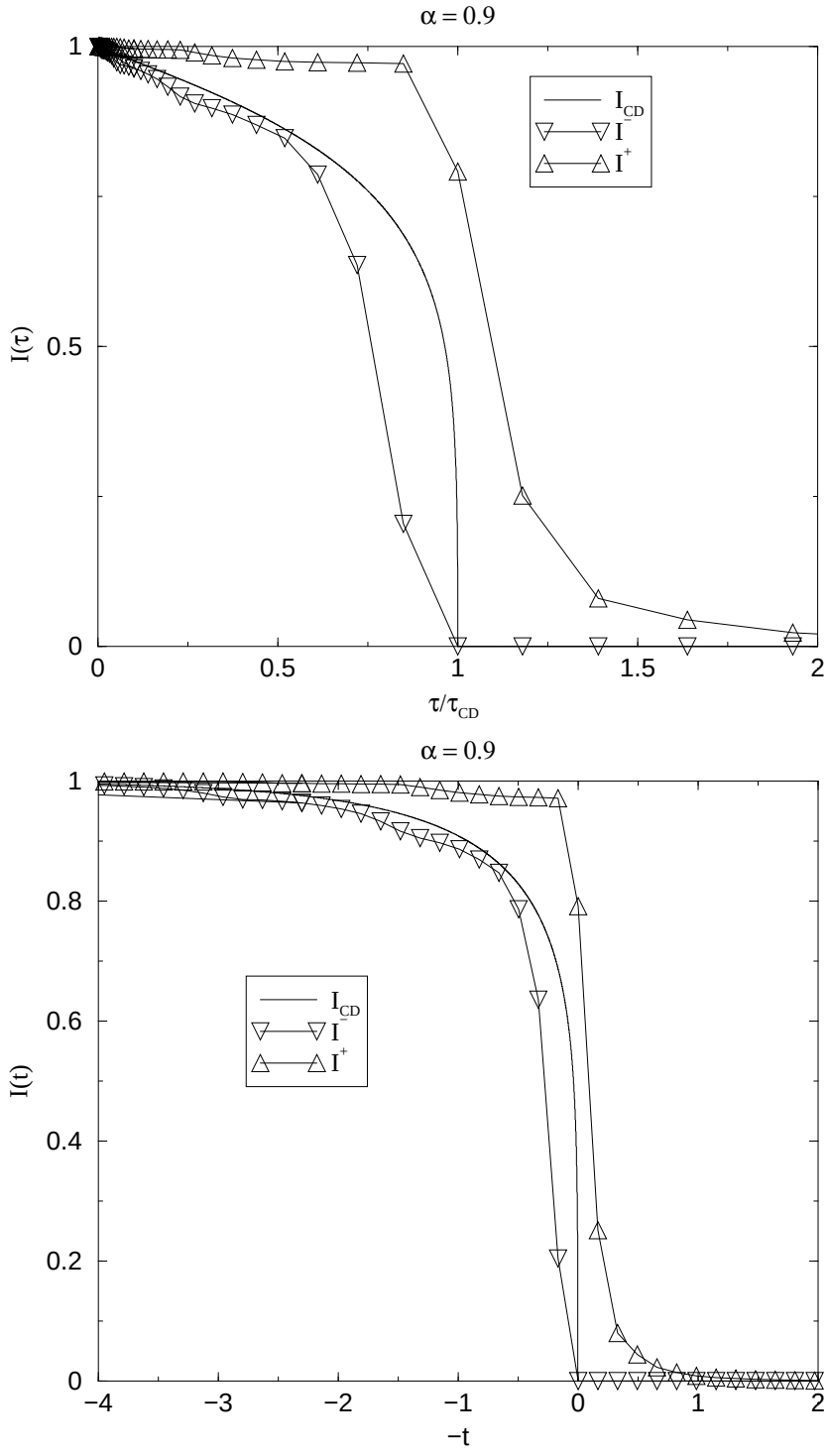

Abbildung 9.21: Integrierte I_{CD} und deren Schranken; $\alpha = 0.9$

Bei den Schranken für die Modellparameterwerte $\alpha = 0.25$ und $\alpha = 0.5$, die Abbildungen 9.19 auf Seite 207 und 9.19 auf Seite 207, haben wir sowohl die auf den Real- als auch die auf den Imaginärteil basierenden wiedergegeben. Im Gegensatz zu den Schranken der Delta- und der Gauß-Dichte, unterscheiden sich jene so gewonnen hier numerich generell geringfügig, abgesehen von der Stelle bei $\tau/\tau_{CD} \approx 0.5$ in den unteren Schranken I^- bei $\alpha = 0.25$, die sich hier wesentlich unterscheiden. Vermutlich handelt es sich bei diesem Punkt in der auf den Realteil basierenden Schranke um einen „numerischen Ausreißer“. In der Abbildung 9.21 auf der vorherigen Seite, die Schranken bei $\alpha = 0.9$, haben wir nur die auf den Realteil beruhenden wiedergegeben, da sich hier die beiden Schrankenpaare wieder überaschenderweise numerisch nicht unterscheiden. Ebenso haben wir die Schranken sowohl auf der ursprünglichen τ-Skalar als auch auf der $t = -\ln(\tau/\tau_{CD})$-Skalar wiedergegeben und bei letzterem, um wiederum den Charakter der Funktion I zu erhalten, $-t$ gegen die Integrierte aufgetragen. Bei $\alpha = 0.25$ und $\alpha = 0.5$ wird auch der mögliche Nutzen, beide Skalen zu betrachten, deutlich: erst auf der t-Skalar sehen wir, daß wir bei der Berechnung der Schranken noch nicht den gesamten Bereich der Integrierten abgedeckt haben. Wir haben jedoch darauf verzichtet den Bereich dieser Schranken zu vergrößern um zu untersuchen, ob die Kenntnis der abgebildeten Schranken für eine Anwendung bereits ausreicht. Die wesentlichen Charakteristika der Integrierten I_{CD} werden im übrigen bereits durch diese Schranken eingeschlossen.

Wie man aufgrund der vorangegangenen Schranken bereits vermuten könnte, fallen auch hier beide nicht mit der exakten Integrierten I_{CD} zusammen. Desweitern sehen wir an den Abbildungen 9.19 bis 9.21, daß die unterliegende Form der Schranken, im Gegensatz im Fall der Gauß-Dichte[161], bei prinzipiell exakt vorgegebenen Daten nicht mit der Form der theoretischen Integrierten identisch ist, die Schranken also nicht vermöge geeigneter Transformationen und Umskalierungen auf die exakte konkruent abgebildet werden können; die oberen Schranken für $\alpha = 0.25$ sind sogar merklich keine glatten Funktionen. Ein weiterer Gegensatz zur Gauß-Dichte ist, daß wir bei den Schranken für I_{CD} bei steigendem Modellparameter α keine generelle Tendenz für ein engeres Einschließen der exakten Integrierten durch die Schranken erkennen können[162]. Wir hätten ein derartiges generelles Verhalten erwartet, da beide Modelle mit wachsendem Parameter gegen die Delta-Dichte konvergieren, genauer das Cole-Davidson Modell für $\alpha \to 1$ gegen das Drude-Modell respektive die Dichte gegen die Delta-Dichte konvergiert[163].

Sind die Ableitungen der Schranken der Delta- und der Gauß-Dichten noch (eventuell) von Nutzen, so sehen wir bereits an der Form der Schranken der Cole-Davidson Dichte, daß deren Ableitungen keine weiteren Informationen enthalten werden. Dieses sollen auch exemplarisch die Abbildungen 9.22 auf der nächsten Seite und 9.23 auf der nächsten Seite der Ableitung der Schranken für die Modellparameter $\alpha = 0.25$ und $\alpha = 0.9$ zeigen.

Wir haben uns entschieden, sowohl die „ursprüngliche“ Funktion p auf der τ-Skalar als auch die Dichte w auf der t-Skalar abzubilden. Wir wollen nochmals daran erinnern, daß die Bezeichnungen $p^{(\pm)}$ respektive $w^{(\pm)}$ keine Schrankeneigenschaften suggerieren sollen, sondern deren Ursprung als Ableitung der Funktion $I^{(\pm)}$ kennzeichnen. Bei dem Parameter $\alpha = 0.25$ wurden konkret die auf den Imaginärteil basierenden Schranken abgeleitet, bei $\alpha = 0.9$ die auf den Realteil basierenden. Auf die Wiedergabe der entsprechenden Ableitung bei $\alpha = 0.5$ wurde verzichtet, weil deren Qualität zwischen denen von $\alpha = 0.25$ und $\alpha = 0.9$ liegt, die letzteren also gerade die beiden „Endpunkte“ in Form und Qualität, in Rahmen unserer Untersuchungen, repräsentieren.

Bei den Schranken für $\alpha = 0.25$, Abbildung 9.19, lassen bereits aufgrund deren merklichen nichtglatten Form erahnen, daß die entsprechenden numerischen Ableitungen keine weiteren Informationen über die gesuchte Dichte enthalten und selber durch unterliegendes „numerisches Rauschen“ dominiert werden[164]. Würden wir die theoretische Dichte für $\alpha = 0.25$ nicht kennen, so könnten wir also aus den Ableitungen

[161] siehe Abbildungen 9.9 bis 9.11

[162] Es ist jedoch nicht auszuschleißen, daß in einem Bereich $0.9 \leq \alpha < 1$ eine derartige Tendenz zu erkennen sein könnte; wir haben dieses jedoch aufgrund der nicht allzugroßen Relevanz bezüglich der eigentlichen Ziele unserer Untersuchungen nicht weiter verfolgt.

[163] siehe auch Abschnitt 3.3

[164] Wie wir bereits auf Seite 64 erwähnt haben, gehört die Ableitung einer Funktion zu den schwach schlechtgestellten Problemen; siehe auch die Abschnitte 4.1.1.1 und 4.2.4. Wir haben hier, wie erwähnt, die einfachste Strategie zur Regularisierung bei diskret gegebenen Daten gewählt und gemäß des zentralen Differenzquotienten (4.51) die reinen Datenpunkte der Schranken eingesetzt.

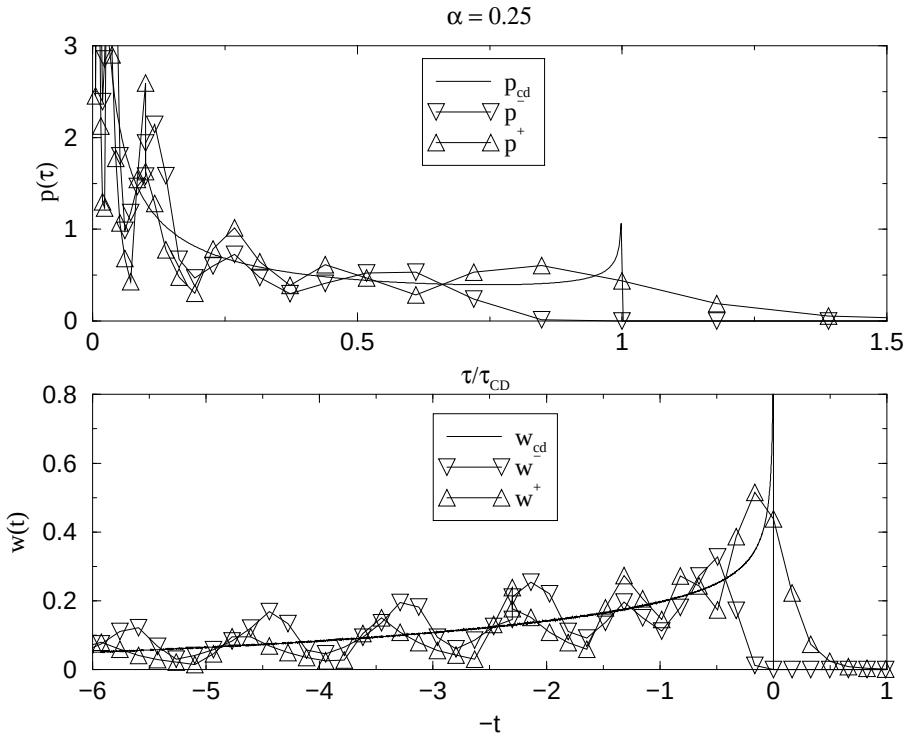

Abbildung 9.22: Ableitung der Schranken des Cole-Davidson Modells; $\alpha = 0.25$

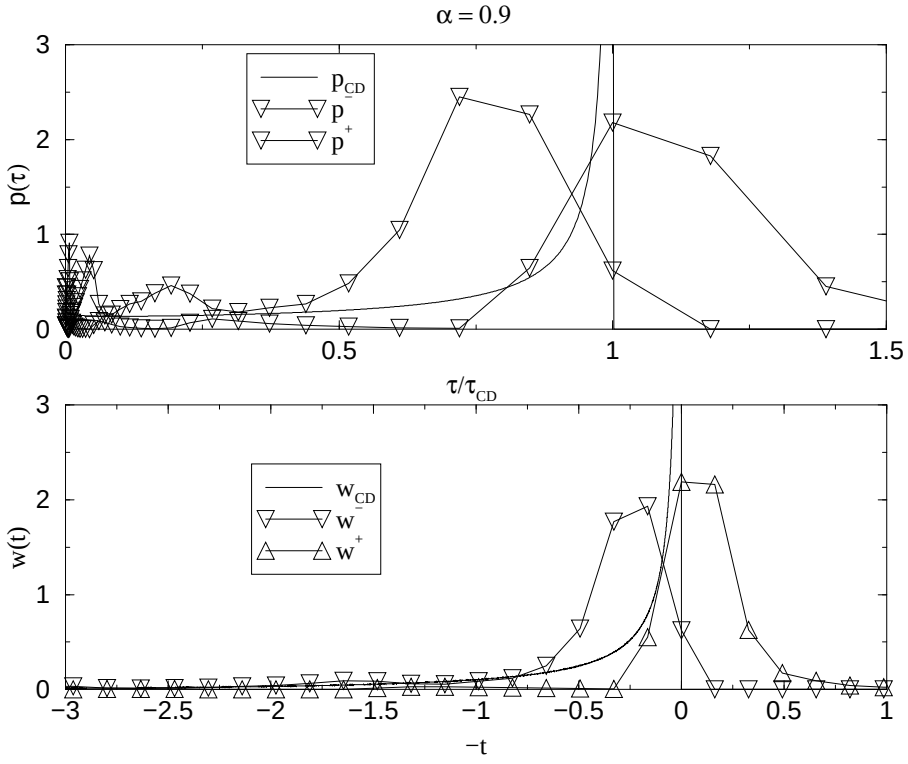

Abbildung 9.23: Ableitung der Schranken des Cole-Davidson Modells; $\alpha = 0.25$

überhaupt keine Aussagen über die mögliche Form tätigen - im Gegensatz zu den entsprechenden Ableitungen des Gauß-Modells (Abb. 9.13 auf Seite 201), bei denen wir die Linienform der Dichte zumindest ansatzweise erahnen können.

Etwas hilfreicher sind, gemäß Abbildung 9.23, die Ableitungen für $\alpha = 0.9$. Ebenso wie die vorangegangenen Ableitungen, markieren diese hier, bis auf die Stelle $\tau = \tau_{CD}$, an der die theoretische Dichte eine schwache Divergenz aufweist, grob den Bereich, in dem die gesuchte Dichte liegt. Über die Linienform lassen sich hier jedoch ebenso keine klaren Aussagen treffen. Auf die (schwache) Divergenz läßt sich, selbst bei großzügiger Interpretation, nicht schließen.

Fassen wir die Abbildungen der Schranken 9.19 bis 9.21 und die Ableitungen für das Cole-Davidson Modell zusammen, so sehen wir, daß diese trotz fehlerloser Daten weniger Informationen über die exakten Funktionen beinhalten als die entsprechenden in den vorangegangenen Fällen. Dieses ist insofern auch nicht verwunderlich, als daß die Dichte p_{CD} und somit auch deren Integrierten I_{CD} bei $\tau = 0$ und $\tau = \tau_{CD}$ keine analytische Funktionen sind und die Numerik, auch wenn es sich hier um schwache, integrable Divergenzen in p_{CD} handelt, dieses Verhalten nicht zufriedenstellend respektive ohne größeren Aufwand[165] erkannbar nachbilden kann. Die Schranken alleine, und deren Ableitungen schon gar nicht, lassen zwar die Vermutung, insbesondere bei $\alpha = 0.9$, aber keinen eindeutigen Schluß zu, ob es sich bei der gesuchten Funktion tatsächlich um eine Cole-Davidson Dichte handelt.

Nichtdestotrotz beinhalten die Schranken, so wir (aus anderen Quellen) wüßten, daß es sich um die des Cole-Davidson Modells handeln, bezüglich des Parameters τ_{CD}, der maximalen Relaxationszeit im Modell, eine wesentliche Information: der Nulldurchgang τ_{CD}^{-} der unteren Schranke I^{-}, also

$$\tau_{CD}^{-} = \inf_{\tau} \left\{ \tau \in \mathbb{R}^{+} : I^{-}(\tau) = 0 \right\}$$

ist offensichtlich[166] eine *untere Schranke für* τ_{CD}:

$$\tau_{CD}^{-} \leq \tau_{CD} \quad . \tag{9.243}$$

Als nächstes wollen wir uns der reinen Regularisierten der Cole-Davidson Dichte und deren Integrierten zuwenden. Wiederum benutzen wir die Gaußsche Mollifier-Funktion (9.218) zur Regularisierung. Die reine Regularisierte w_β wurde nun gemäß der allgemeinen Gleichung (9.220),

$$w_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} w_{CD}(t)\, F_\beta(t_0 - t)\, dt \quad ,$$

und anschließend deren Integrierte I_β gemäß (9.223),

$$I_\beta(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} w_{CD}(t_1) F_\beta(t - t_1)\, dt_1 \right) dt \quad ,$$

numerisch berechnet, wobei hier die Funktion w_{CD} nach (9.239) offensichtlich die konkrete Form

$$w_{CD}(t) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi} \left(\frac{e^{-t}}{\tau_{CD} - e^{-t}} \right)^{\alpha} & \text{für} \quad 0 < \frac{e^{-t}}{\tau_{CD}} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < \frac{e^{-t}}{\tau_{CD}} < \infty \end{cases} \quad , \tag{9.244}$$

annimmt.

[165] Wir wollen an dieser Stelle eingestehen, daß es uns bisher nicht gelungen ist, mit größeren Datensätzen als 1024 Datenpunkte qualitativ andere Schranken zu erhalten. Wir haben dieses aber aufgrund des vermuteten Einflusses der exponentiellen Schlechtgestellheit der Integralgleichung auf die Berechnung der Schranken nicht weiter verfolgt, da dann bei der Anwesenheit von Fehlern ein höherer numerischen Aufwand keine verbesserten Ergebnisse liefern würde.

[166] Dieses folgt direkt aus der Schrankeneigenschaft von I^{-}.

In der Abbildung 9.24 auf der nächsten Seite, in der wir die Integrierte I_β mit den auf den Realtail basierenden Schranken vergleichen, zeigen wir die Ergebnisse für den Modellparameter $\alpha = 0.25$. Bei den Wert 1.0 des Regularisierungparameters β liegt die Integrierte I_β für $t < 0$ jenseits der Schranken[167], so daß wir in diesem Fall das Konsistenzkriterium als noch nicht hinreichend erfüllt betrachten können. Es fällt aber die jetzt schon minimale Abweichung der Integrierten I_β von der theoretischen Integrierten I_{CD} für $t \geq 0.5$ auf. Bei einem Wert von $\beta = 2.0$ ist das Konsistenzkriterium bereits für fast alle t-Werte erfüllt, bei $\alpha = 3.0$ ist es tatsächlich für alle t-Werte erfüllt. Bei den letzten beiden Werten ist ein Unterschied zwischen I_{CD} und I_β, außer in dem erwarteten Bereich um den nicht analytischen Punkt $t = 0$, visuell kaum noch zu erkennen.

Die Abbildung 9.25 auf Seite 215 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für den Modellparameter $\alpha = 0.5$. Als Schranken haben wir wiederum die auf den Realteil basierenden gewählt. Hier können wir für $\beta = 2.0$ das Konsistenzkriterium, da auch hier (grob) für negative t-Werte I_β jenseits der Funktionen $I^\pm$ liegt, als noch nicht zufriedenstelltend erfüllt betrachten. Bei $\beta = 3.0$ ist jenes für fast alle, und bei $\beta = 4.0$ für alle t-Werte erfüllt. Zusätzlich sehen wir das Vorliegen einer generellen größeren Abweichung der Funktionen I_{CD} und I_β voneinander.

Den direkten Vergleich von Integrierten und Schranken abschließend, zeigen wir in der Abbildung 9.26 auf Seite 216 die Ergebnisse für den Modellparameter $\alpha = 0.9$. Bei $\beta = 2.0$ liegt wieder der Fall vor, bei den wir die Bedingungen des Konsistenzkriteriums als noch nicht hinreichend erfüllt betrachten können. Für die Werte $\beta = 3.0$ und $\beta = 4.0$ ist das Kriterium bereits für alle t-Werte erfüllt. Die Abweichung der Funktionen I_{CD} und I_β voneinander ist erwartungsgemäß in den Bereich um $t = 0$ am größten.

Die Abbildungen 9.24 bis 9.26 demonstrieren also die prinzipielle Anwendbarkeit des Konsistenzkriteriums, bei exakt vorgegebenen Daten, selbst bei „pathologischen Dichten“ wie der Cole-Davidson Dichte p_{CD}, einer Dichte mit schwachen Divergenzen. Ebenso legen die Abbildungen den Schluß nahe, daß nicht die Notwendigkeit der Kenntniss der Schranken über den vollständigen Verlauf der Integrierten besteht, sondern daß es auszureichen scheint, daß jene die wesentlichen Charakteristika der theoretischen Integrierten einschließen müssen, wie hier bei den Modellparametern $\alpha = 0.25$ und $\alpha = 0.5$.

Diese Untersuchungen soweit nun abschließend, wollen wir noch in der Abbildung 9.27 auf Seite 217, in der wir τ gegen die ursprünglichen Dichte p aufgetragen haben, die zu diesen Regularisierungsparametern korrospondierenden (reinen) Regularisierten wiedergeben, wobei wir darauf hinweisen, daß wir die Funktion w_β berechnet haben und die dazu gehörende regularisierte Dichte p_β dann durch

$$p_\beta(\tau) = \frac{w_\beta(\tau)}{\tau}$$

gegeben ist. Dementsprechend verwundert es auch nicht, daß die regularisierte Lösung zwar die schwache Divergenz für $\tau \to 0$ der Cole-Davidson Dichte p_{CD} reproduzieren kann, die Funktion w_{CD} strebt für $\tau \to 0$ gegen Null, nicht aber die schwache Divergenz für $\tau \to \tau_{CD}$.[168]. Letztere wird mathematisch nur durch $\beta \to \infty$ vollkommen korrekt reproduziert, eine numerisch nicht respektive schlecht durchführbare Limesbildung.

9.5.2.1 Zusammenfassung der Untersuchungen zum Konsistenzkriterium

Wir haben hier das von uns im Abschnitt 8.3 eingeführte Konsistenzkriterium, die Konsistenz von Integrierter I_β der Regularisierten mit den Schranken $I^{(\pm)}$ der theoretischen Integrierten der gesuchten Dichte, zur Wahl des Regularisierungsparameters γ respektive β, bei exakt vorliegenden Daten am Beispiel der Delta-Dichte (Drude Modell), der Gauß-Dichte und der Cole-Davidson Dichte, bei der Verwendung Gaußscher stabilisierender Funktionen, untersucht und dabei festgestellt, daß das Kriterium prinzipiell tatsächlich anwendbar ist. Wesentlich ist bei allen Modellen die Beobachtung, daß das Kriterium selbst bei exakten Daten nicht einen (eindeutigen) Wert für den Regularisierungsparameter liefert, sondern einen Bereich der möglichen und im Sinne des Kriteriums zulässigen Werte für β. Rekapitulieren wir die Abbildungen, die

[167] Der Leser möge beachten, daß wir aus den bekannten Gründen wieder $-t$ gegen $I(t)$ aufgetragen haben.

[168] Nähers zu den Eigenschaften der reinen Regularisierung, insbesondere bei Gaußartigen $\tilde{F}_\gamma$, siehe Abschnitt 9.2f.

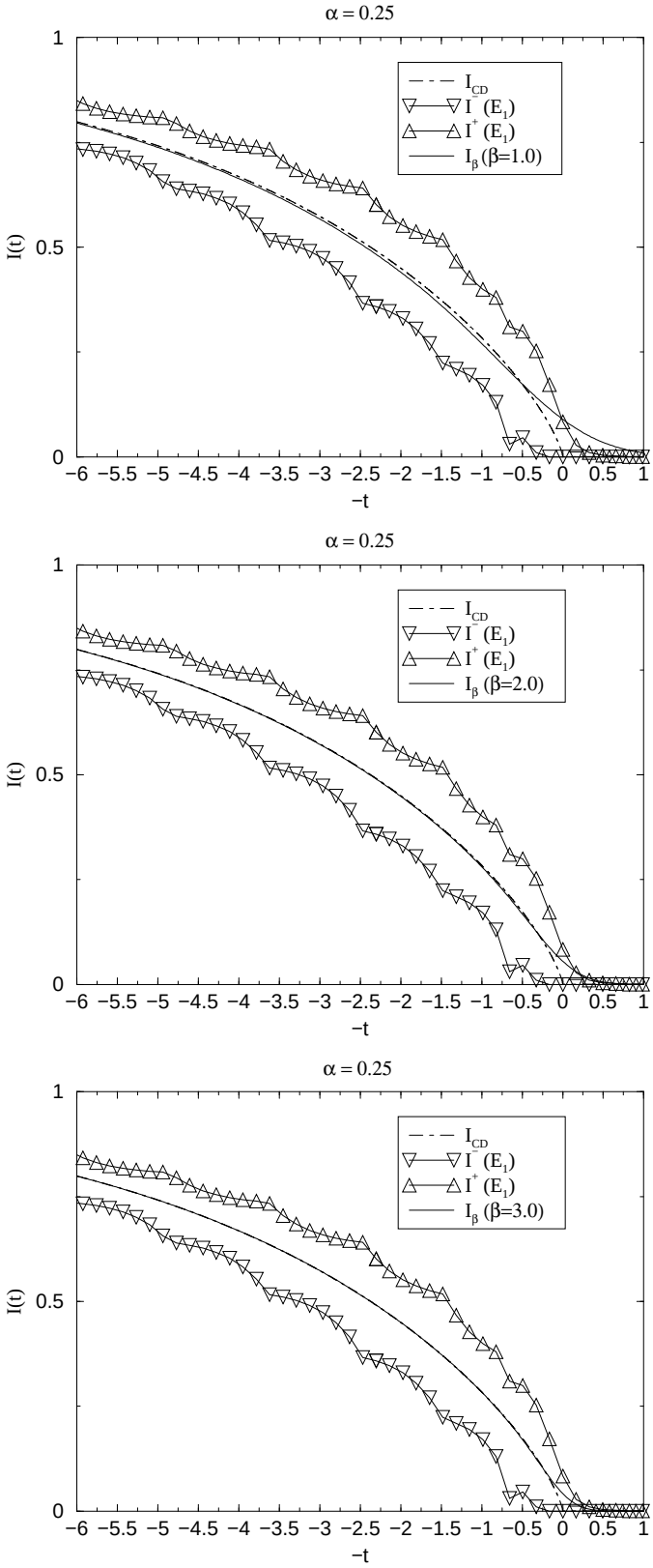

Abbildung 9.24: I_β für das Cole-Davidson Modell; $\alpha = 0.25$

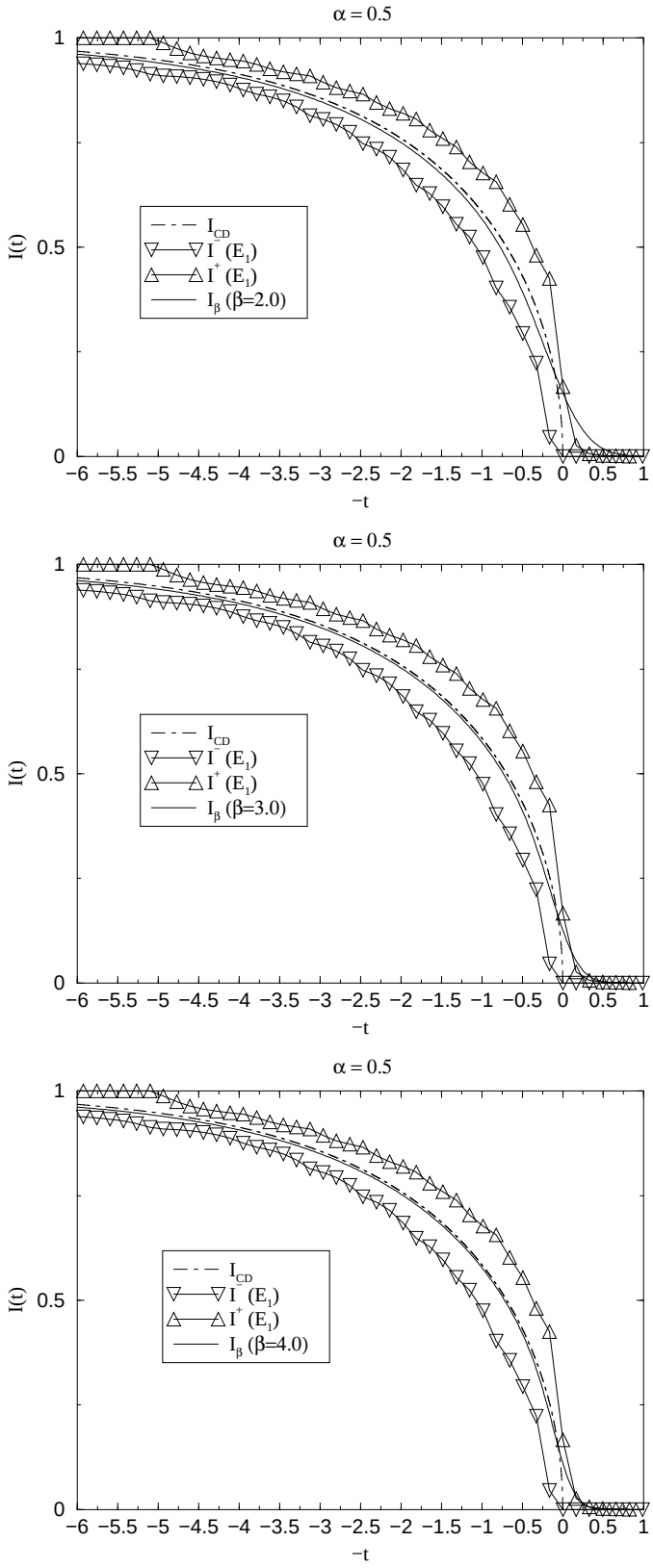

Abbildung 9.25: I_β für das Cole-Davidson Modell; $\alpha = 0.5$

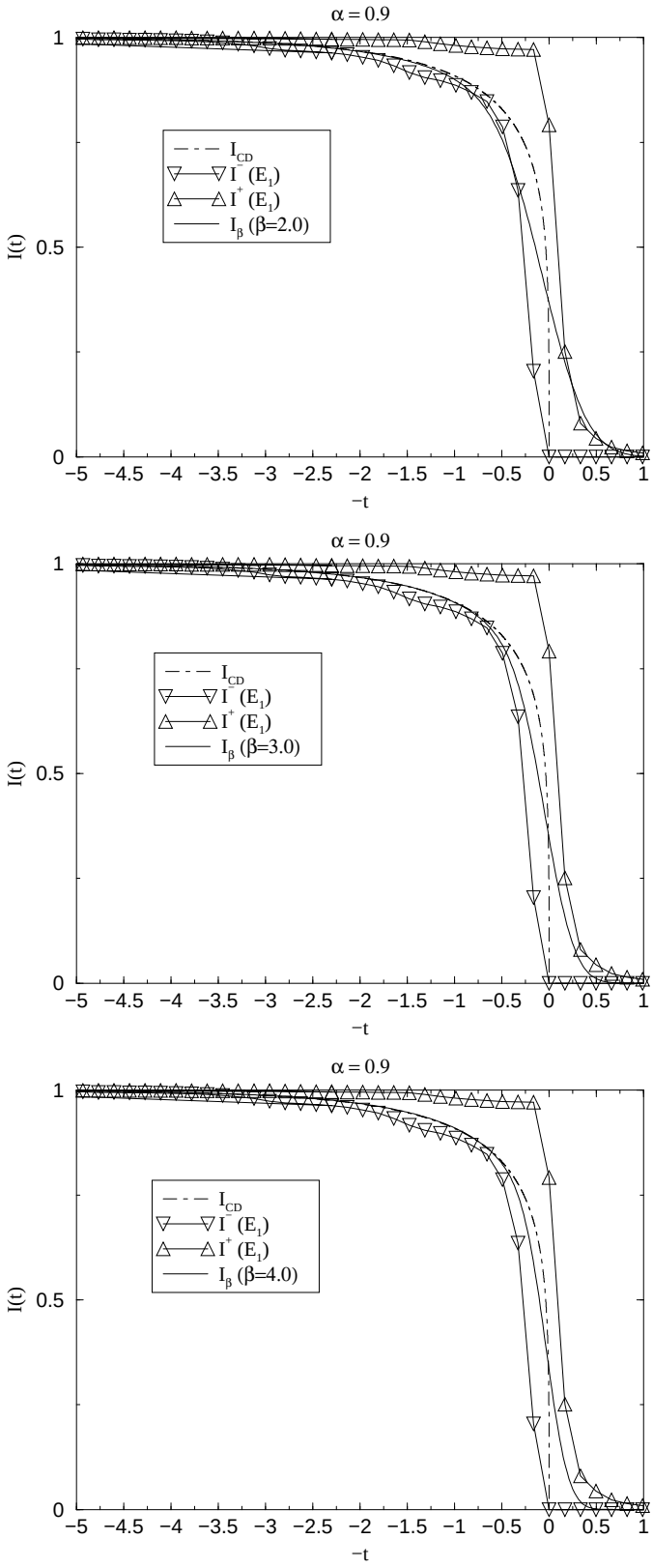

Abbildung 9.26: I_β für das Cole-Davidson Modell; $\alpha = 0.9$

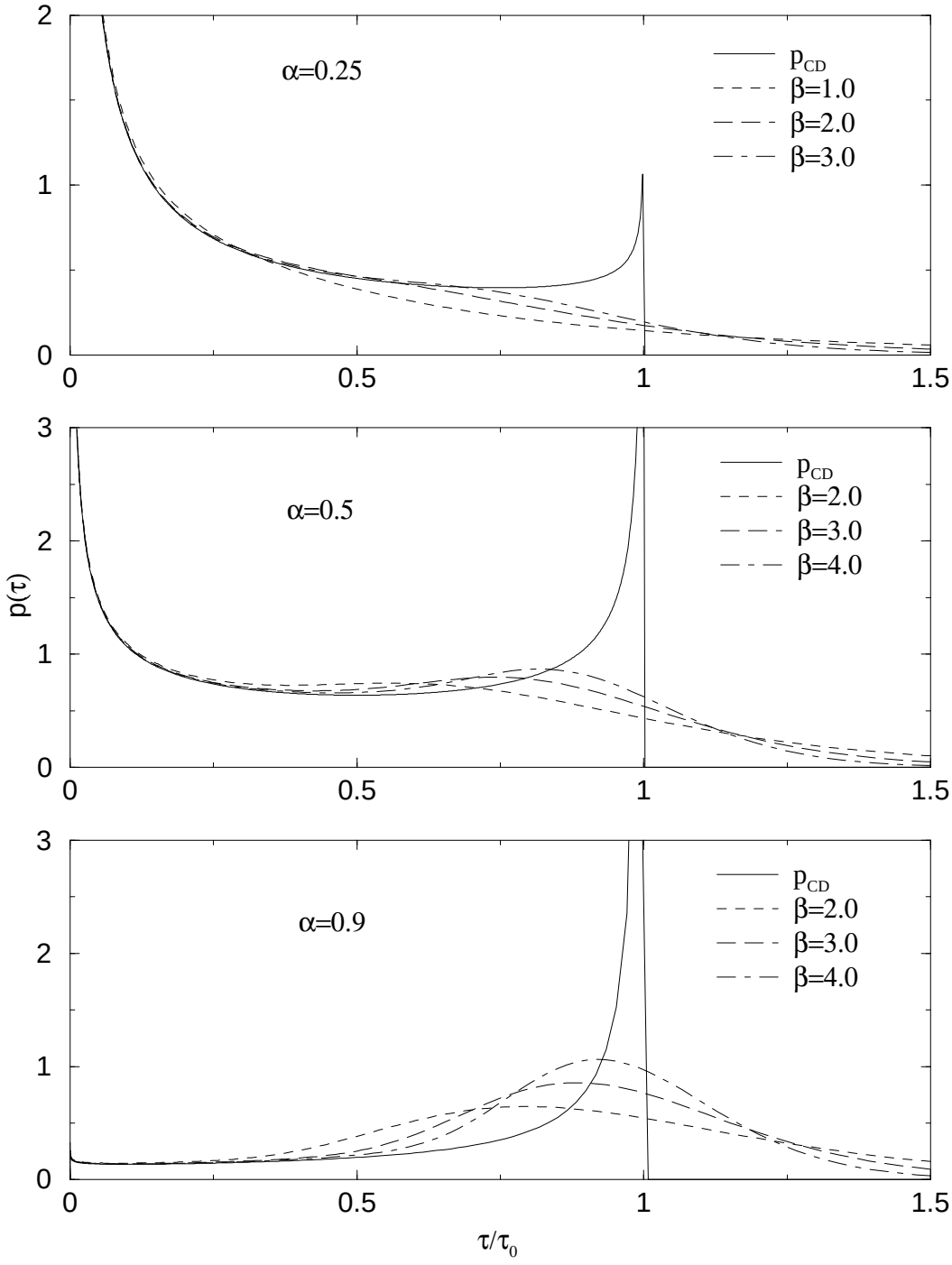

Abbildung 9.27: Die Cole-Davidson Dichte und deren reinen Regularisierten

die Schranken $I^{(\pm)}$ mit der Integrierten I_β vergleichen, so liefert offensichtlich unser Kriterium bei exakten Daten einen unteren Wert β^- des Regularisierungsparameters, ab dem das Kriterium gilt. Dieses, zu erwartende, Ergebnis unterstreicht nochmals die prinzipielle, oder an dieser Stelle besser theoretische, Anwendbarkeit des Kriteriums.

Wir wollen auch nicht unerwähnt lassen, daß die Untersuchungen an den im Rahmen der Numerik exakten Daten nicht nur von rein theoretischer Natur sein müssen, denn in den hier behandelten Problem der Integralgleichung (2.13) bzw. (2.47) bedeuten exakte Daten strenggenommen tatsächlich die Kenntnis der Funktion E^+ an beliebigen Stellen auch numerisch beliebig genau! Letztendlich hat dieses die Notwendigkeit des Vorliegens eines mathematisch analytischen Ausdrucks der Funktion E^+ zur Konsequenz, um in Sinne der Regularisierung korrekt von exakten Daten sprechen zu können. Daraus folgt also, wenn wir beispielsweise die Dichte des Gauß-Modells nicht exakt ausrechnen könnten oder die Funktion E^+ aus Simmulationen numerisch beliebig genau bekannt sein würde[169], so müssten wir zur numerischen Regularisierung der im diesen Sinne exakten Daten tatsächlich Strategien zur Wahl des Regularisierungsparameters anwenden, ein Umstand, den wir erst im Kapitel 10 aufzeigen werden.

Die wesentlich Kritik an dem Konsistenzkriterium, die wir nicht unerwähnt lassen wollen und die wir eigentlich bereits schon nach dessen Präsentation hätten formulieren können, ist aber gerade dessen Eigenschaft, selbst bei exakten Daten keinen eindeutigen Wert des Regularisierungsparameters zu liefern, wie dieses i.A. die übrigen Strategien gewärleisten, sondern einen Bereich, nur im Sinne des Kriteriums, zulässiger Werte. Die Schranke alleine garantieren, gemäß den eben präsentierten Untersuchungen, somit nicht den laut Definition 4.5 geforderten Limes

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ g^\varepsilon\to g_T}} \gamma(\varepsilon, g^\varepsilon) = 0 \quad , \tag{9.245}$$

der Zusatz im Konsistenzkriterium[170],

> „Ist die exakte, theoretische Funktion bekannt, ist also $g^\varepsilon \equiv g_T$, $\varepsilon = 0$, so führe man zur numerischen Behandlung in der Regularisierung numerisch den Limes $\gamma \to 0$ aus bzw. setze $\gamma = 0$.“,

ist also ein notwendiger. Diese Ergebnisse bedenkend sind wir fern davon, daß von uns präsentierte Konsistenzkriterium als eine „überlegende“ Alternative oder gar als eine „Revolution“ bei der Wahl des Regularisierungsparameters zu proklamieren.

Nichtsdestotrotz sind, und das zeigen ebenso die oben dargelegten Untersuchungen, sowohl die Schranken selber als auch der Vergleich von integrierter I_β mit den Schranken $I^{(\pm)}$ von Nutzen. Die Schranken selbst beinhalten, je nach deren Qualität, wertvolle Informationen über die gesuchte Dichte, zumindest können diese den Bereich (grob) abstecken, in dem die Gesuchte von Null verschieden ist, und der Vergleich selber könnte als Kriterium über die Qualität der gewonnen regularisierten Lösung dienen, besonders dann, wenn die Funktionen bezüglich ihrer Kurvenformen vergleichbar[171] sind, wie in den hier gebrachten Beispielen.

Abschließend wollen wir noch eine Vermutung, die aus der Betrachtung der Abbildungen der Ableitungen der Schranken, besonders diejenigen des Gauß-Modells (Abb. 9.13 auf Seite 201), beruht, wobei die Ableitungen beim Cole-Davidson Modell außer für $\alpha = 0.9$ eine Außnahme darstellen, wiedergeben: die Abbildungen legen die Möglichkeit der Berechnung von Schranken $p^{(\pm)}$ für die gesuchte Dichtefunktion aus den Schranken $I^{(\pm)}$ nahe, wobei Stellen, an denen die gesuchte Funktion keine analytische Funktion ist, Ausnahmen bilden. Wie SIMON in [Sim93] darlegt, lassen sich derartige (rigorose) Schranken für die unterliegende Dichtefunktion aus den (rigorosen) Schranken der Verteilungs- bzw. integrierten Funktion dann berechnen, wenn jene strickt konvex sind, eine Bedingung, die die Schranken hier offensichtlich nicht

[169] Diese wirklich recht konstruiert wirkende Beispiele sollen eine wesentlichen Problematik exponentiell schlechtgestellter Probleme verdeutlichen, daß „exakte Daten“ synonym mit „analytischen Ausdruck“ ist.

[170] siehe Abschnitt 8.3

[171] Ein Gegenbeispiel wäre eine oszillierende Funktion I_β, wie jene bei der Verwendung des idealen Tiefpasses entstehen können, man erinnere sich an dessen Mollifier-Funktion (6.8), innerhalb keine Oszillationen aufweisenden Schranken.

erfüllen. Bisher ist es uns aber nicht gelungen einen Ausdruck derartig auf $I^{(\pm)}$ basierenden Schranken $p^{(\pm)}$ abzuleiten; weitere Untersuchungen diesbezüglich und bezüglich des Konsistenzkriteriums sind also von Nöten.

Kapitel 10

Zur numerischen Realisation und deren Ergebnisse

Nachdem wir bisher das genuin auf Filtern basierende Regularisierungsverfahren rein theoretisch untersucht haben, wollen wir uns in diesem Kapitel jetzt der Praxis, genauer der numerischen Realisation dieses Verfahrens, zuwenden. Hierbei sollen zum einen natürlich dessen generell numerisch Eigenschaften und Grenzen an "kontinuierlichen Modellen", d.h. die vorgegebene Funktion sei prinzipiell an beliebig vielen Stellen bekannt, und zum anderen die numerischen Eigenschaften und Grenzen im praktischen Fall endlicher Datensätze, wobei die Daten sowohl fehlerlos als auch fehlerbehaftet sein können, untersucht werden. Wir werden uns, wie desöfteren bereits erwähnt, dabei sowohl der (komplexwertigen) phänomenologischen Integralgleichung (9.2) als auch deren Real- und Imaginärteil als eigenständige, separate Integralgleichung, also den Gleichungen (9.9) und (9.10), zuwenden. Ebenso werden wir in den numerischen Untersuchungen verschieden Modelldichten betrachten, wobei wir insbesondere auf die Delta-, die Cole-Davidson-, aber auch auf keine mathematischen Pathologien aufweisende wie die Cole-Cole- und die Gauß-Dichte, zurückgreifen[1] werden.

Innerhalb der Darlegung der numerischen Eigenschaften des hier untersuchten Regularisierungsverfahrens, soll dieses ebenso mit denen im Kapitel 5 vorgestellten verglichen werden, inbesondere mit der Tikhonov-Phillips Regularisierung. Dabei wird, vorweggenommen, hauptsächlich die Regularisierung der Integralgleichung des Imaginärteils, die durch das auf der Fourier-Transformation basierende Verfahren[2] (5.47), welches seinerseits durch die Lösung jener Gleichung als inverse Fourier-Transformation begründet ist[3], gewonnen wird, herangezogen werden.

Wie wir bereits am Anfang des Kapitels 8 bemerkt haben[4] und wie die Ausführungen der Abschnitte 9.3, jene bezüglich des für $\gamma \to 0$ asymptotischen Verhaltens der (Gauß-)Filter, und 9.5, jene bezüglich der Konkretisierung der Wahl des Regularisierungsparameters auf unserem Entfaltungsproblem, schon gezeigt haben könnten, bestehen die fundamentalen Schwierigkeit (der Numerik) nicht in der angemessenen, geeigneten Wahl des Regularisierungsparameters. Die nachfolgenden numerischen Ergebnisse werden dieses noch bestätigen, doch werden wir nichtsdestotrotz kurz auf einen Vergleich zwischen den im Kapitel 8 vorgestellten verschiedenen Strategien zur Parameterwahl eingehen.

[1] Bezüglich der Modelldichten und deren Eigenschaften sei auf das Kapitel 3 verwiesen.

[2] siehe Abschnitt 5.3.2

[3] siehe Abschnitt 2.4.3, Gleichung (2.72) auf Seite 19 und die Bemerkungen dazu im Abschnitt 9.1, Seite 152

[4] siehe Seite 127

10.1 Zusammenfassung oder Die Ausgangsgleichungen

Wenden wir uns jetzt den Ausgangsgleichungen für die numerische Realisierung des genuin auf Filter und durch regularisierende Kerne darstellbaren Regularisierungsverfahrens zu, so wie wir es im Kapitel 9 speziell auf die hier behandelte Integralgleichung konkretisiert haben, wobei wir ebenso auf die Verweise und Zitate jenes Kapitels verweisen[5] wollen.

Die konkrete Ausgangsgleichung zur Regularisierung der phänomenologischen[6] (9.2), ist, gemäß des bisherigen, durch den Ausdruck (9.4) gegeben, wobei der regularisierende Kern Φ_γ bei der notwendigen Verwendung Gaußscher stabilisierender Funktionen[7] seinerseits durch den Ausdruck (9.162) gegeben ist. Dem entsprechend sind die regularisierten Lösungen der Integralgleichung[8] des Realteils, Gleichung (9.9), und die des Imaginärteils, Gleichung (9.10), durch die Ausdrücke (9.15) bzw. (9.16) gegeben, wobei deren, ebenso notwendigerweise auf Gaußfiltern basierende, regularisierenden Kerne konkret durch die Gleichung (9.171) für den Kern Φ^1_γ des Realteils und durch die Gleichung (9.178) für den Kern Φ^2_γ des Imaginärteils gegeben sind. Fassen wir diese Ausdrücke also explizit zusammen, so erhalten wir als, im Sinne des notwendigen Gaußfilters, einfachste regularisierte Lösung für die phänomenologische Integralgleichung konkret

$$\begin{aligned} w_\gamma\left(\frac{1}{\tilde{x}}\right) &= \int_0^\infty \Phi_\gamma\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right) E^+(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \\ &= \frac{1}{2\gamma\pi^{\frac{3}{2}}}\,\exp\left[\frac{\pi^2}{4\gamma^2}\right]\int_0^\infty\left\{\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)+i\frac{\pi}{2}\right)^2\right]\right. \\ &\quad\cdot\left.\sin\left[\frac{\pi}{2\gamma^2}\left(\ln\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)+i\frac{\pi}{2}\right)\right]E^+(\omega)\right\}\frac{d\omega}{\omega}\quad, \end{aligned} \tag{10.1}$$

für die Integralgleichung des Realteils erhalten wir dann konkret

$$\begin{aligned} w_\gamma\left(\frac{1}{\tilde{x}}\right) &= \int_0^\infty \Phi^1_\gamma\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right) E_1(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \\ &= \frac{1}{\gamma\pi^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty \sin\left[\frac{\pi}{4\gamma^2}\ln\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln^2\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)-\frac{\pi^2}{4}\right)\right]E_1(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega}\,, \end{aligned} \tag{10.2}$$

und für die Integralgleichung des Imaginärteils erhalten wir entsprechend konkret die Gleichung

$$\begin{aligned} w_\gamma\left(\frac{1}{\tilde{x}}\right) &= \int_0^\infty \Phi^2_\gamma\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right) E_2(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega} \\ &= \frac{1}{\gamma\pi^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty \cos\left[\frac{\pi}{4\gamma^2}\ln\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)\right]\exp\left[-\frac{1}{4\gamma^2}\left(\ln^2\left(\frac{\tilde{x}}{\omega}\right)-\frac{\pi^2}{4}\right)\right]E_2(\omega)\,\frac{d\omega}{\omega}\,. \end{aligned} \tag{10.3}$$

In den obigen Gleichungen (10.1) bis (10.3) für die Regularisierten haben wir, um den Mellinschen Faltungscharakter zu bewahren, $\tau = 1/\tilde{x}$ gesetzt.

[5] Insbesondere sei an die Ausführungen der Kapitel 5ff erinnert.

[6] siehe auch Gleichung (2.47), Seite 15

[7] siehe diesbezüglich die Ausführungen des Abschnitts 9.2

[8] siehe auch die Gleichungen (2.53) und (2.55), Seite 16 und 16

10.2 Vorbetrachtungen zur Numerik

Vor der eigentlichen numerischen Realisierung, sollten wir die obigen Gleichungen (10.1) bis (10.3) bezüglich der numerischen Integration einer kritischen Betrachtung unterziehen:
Wir könnten jetzt jene Gleichungen ohne weitere Veränderungen numerisch implementieren, doch würden wir dann auf eine der Schwierigkeiten der numerischen Integration Mellinscher Faltungsgleichungen[9] stoßen: bei der Diskretisierung gilt für das Differential der obigen Gleichungen offensichtlich:

$$\frac{d\omega}{\omega} \to \frac{\Delta\omega_i}{\omega_i} \quad , \tag{10.4}$$

wobei $\Delta\omega_i$ die i-te Schrittweite der numerischen Integration und ω_i den i-ten ω-Wert bedeuten möge. Wir erkennen sofort die Probleme, die wir bei der numerischen Integration der obigen Ausdrücke an der unteren Integralgrenze unzweifelhaft bekommen würden: die ω_i-Werte werden gegen Null streben, wohingegen die Schrittweite $\Delta\omega_i$ endlich bleiben wird. Zwar ist es jetzt prinzipiell möglich, die Numerik derart auszuführen, daß die Divergenz des Ausdrucks (10.4) für $\omega_i \to 0$ durch das gegen Null streben der regularisierenden Kerne bei gleichen Limes kompensiert wird, und wir so eine numerisch stabile Integration erhalten[10], doch können wir in diesen Fällen sogar ohne einen solchen programmiertechnisch größeren Aufwand eine numerische Stabilität erreichen, in dem wir die hier nun schon routiniert eingesetzte Variablensubstitution $\omega = e^{-t}$ und $\tilde{x} = e^{-t_0}$ durchführen, wodurch wir die Gleichungen (10.1) bis (10.3) nun bekanntlich in die, numerisch stabilere, bekannte Faltungsstruktur

$$W_\gamma(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\Phi}_\gamma^{1,2}(t_0 - t)\, \hat{E}_{1,2}^{+}(t)\, dt \quad , \tag{10.5}$$

mit den (offensichtlichen) Substitutionen $w(e^{-t}) = W(t)$, $\Phi_\gamma^{1,2}(e^{-t}) = \hat{\Phi}_\gamma^{1,2}(t)$ und $E_{1,2}^{+}(e^{-t}) = \hat{E}_{1,2}^{+}(t)$, transformieren können. Es ist müßig zu erwähnen, daß in der Form (10.5) die obigen Regularisierten (10.1) bis (10.3) subsumiert sind, d.h. mit $\hat{\Phi}_\gamma^{1,2}$ und $\hat{E}_{1,2}^{+}$ seien die jeweilig entsprechenden regularisierenden Kerne und vorgegebenen Funktionen bezeichnet.

Beispielsweise nimmt jetzt die derart transformierte regularisierte Lösung des komplexwertigen phänomenologischen Ansatzes (9.2) die konkrete Gestalt

$$\begin{aligned} W_\beta(t) \quad = \quad & \frac{\beta}{\pi^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\beta^2\pi^2\right] \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\beta^2 \left((t - t_0) + i\frac{\pi}{2} \right)^2 \right] \right. \\ & \cdot \quad \left. \sin\left[2\pi\beta^2 \left((t - t_0) + i\frac{\pi}{2} \right) \right] \hat{E}^{+}(t) \right\} dt \quad , \end{aligned} \tag{10.6}$$

an, wobei wir zusätzlich bezüglich des Regularisierungsparameters die Substitution

$$\beta = \frac{1}{2\gamma} \quad , \tag{10.7}$$

die eine bequemere[11] numerische Untersuchung ermöglicht, durchgeführt haben. Die transformierten Regularisierten der Integralgleichung des Real- und des Imaginärteils folgen jetzt entsprechend, so daß wir jene jetzt nicht explizit angeben wollen.

Desweiteren ist zu bemerken: Der Integrand in (10.6) ist längs des Integrationsintervalls eine analytische Funktion[12], dieses gilt hier generell für den allgemeinen Ausdruck (10.5), so daß es also diesbezüglich

[9] Auf diese und andere Probleme bei der numerischen Integration Mellinscher Faltungsgleichung sei auf [DR84, PTVF92, Sto99, SB00] und allgemein auf den Band [KF87] verwiesen

[10] siehe a.a.O.

[11] Wir wollen eingestehen, daß diese Substitution mehr eine Geschmacksfrage ist.

[12] Bezüglich der Analytizitätseigenschaften der Funktion E^+ sei auf den Abschnitt 2.1 und beispielsweise auf [AM76, Jac75, Roo69] verwiesen.

in der numerischen Integration keine Probleme geben wird. Wie wir jedoch bereits im Abschnitt 9.4 auf Seite 178 kritisch angemerkt haben, erwarten wir aufgrund der oszillatorischen Anteile in den regularisierenden Kernen, die für $\gamma \to 0$, also $\beta \to \infty$, an Dominanz zunehmen werden, Probleme bei einer numerischen Integration, denn tatsächlich ist die Integration über stark oszillierenden Funktionen ein aktuelles Problem der numerischen Mathematik[13].

Tatsächlich handelt es sich hier bei der Integration über die oszillierenden Terme um ein nicht zu vernachlässigendes und sogar schwerwiegendes Problem. Dieses wollen wir mit der Abbildung 10.1 auf der nächsten Seite verdeutlichen, in der wir exemplarisch die Graphen der Kerne $\hat{\Phi}^1_\beta$ und $\hat{\Phi}^2_\beta$ für verschiedene β-Werte zeigen[14]. In der linken Spalte haben wir die Graphen des Kerns $\hat{\Phi}^1_\beta$, in der rechten die des Kerns $\hat{\Phi}^2_\beta$ aufgetragen, jeweils für die Parameterwerte $\beta = 1.0,\ 2.0,\ 3.0,\ 4.0$. Wie aufgrund der Ausdrücke für jene Kerne auch nicht anders erwartet, nehmen die Oszillationen mit wachsendem Wert für β zu. Es ist jetzt zusätzlich noch besonders auffällig, daß aufgrund des Gaußterms der Bereich bzw. das Intervall der Oszillationen mit wachsendem Parameter zwar kleiner wird, die Amplitude dafür aber (ebenso aufgrund jenes Terms) exponentiell ansteigt - was wir wiederum aufgrund der Gleichungen (10.1) bis (10.3) erwartet haben. Wir sehen jedoch, daß selbst bei einer Variation des Parameters β innerhalb des relativ kleinen Intervalls $[1,\ 4]$, das Ende dieses Intervalls liegt selbst numerisch noch jenseits des „Wertes“ Unendlich[15], es zu sehr großen Variationen der Graphen der Kerne kommt. Tatsächlich zeigen die Graphen der Abbildung 10.1, daß es sogar bereits zu großen Variationen innerhalb der Schrittweite eins, also beispielsweise zwischen $\beta = 1$ und $\beta = 2$, kommt.

In der Abbildung 10.2 auf Seite 226 haben wir noch, um die Graphen zu vervollständigen, die Kerne für $\beta = 5$ und $\beta = 10$ abgebildet. Diese Abbildung demonstriert wiederum die starke Variation der Graphen der Kerne $\hat{\Phi}^1_\beta$ und $\hat{\Phi}^2_\beta$ bei einer kleinen Variation des Parameters, wenn wir die Graphen für $\beta = 4$ und $\beta = 5$ vergleichen. Der Graph für den Wert $\beta = 10$, der zu $\gamma = 0.05$ korrespondiert, soll zusätzlich die große Schwierigkeit, die wir bei einer numerischen Integration über diese Funktionen erhalten werden, demonstrieren, insbesondere unter Berücksichtigung des Limes $\beta \to \infty$ ($\gamma \to 0$) bei der Bereitstellung immer exakterer Daten. Besonders an diesem Graphen wird nochmals deutlich, daß wir nicht nur auf die Problematik, über stark oszillierende Funktionen zu integrieren, stoßen, sondern das zusätzlich die Amplitude jener Oszillationen stark zunimmt, in anderen Worten der Wert der Integranden in (10.1) bis (10.3) respektive in (10.6) sehr starke oszillatorische Schwankungen, und je nach Wert von β sogar über Dekaden, unterworfen ist - unabhängig von den Wert der Daten.

Erinnern wir uns jetzt an den Ursprung der oszillatorischen Terme[16] in den regularisierenden Kernen. Jener liegt gerade in der Verwendung eines Gaußfilters zur Kompensierung der exponentiellen Divergenzen der Funktion $\tilde{k}^{-1}$. Es ist also konkret die inverse Mellin-Transformation der Form[17]

$$I_\pm(z) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{c-i\infty}^{c+i\infty} z^{-s} \, \exp\left[\gamma^2 (s \pm i\alpha)^2\right] \, ds \tag{10.8}$$

der Ursprung jener Terme. Wir wollen darauf hinweisen, daß wir die als inverse Mellin-Transformation dargestellten Kerne Φ^1_γ und Φ^2_γ ebenso auf der Basis der allgemeinen Form (10.8) berechnen können - was an den Ausdrücken (9.166) und (9.175) unmittelbar ablesbar ist. Die Notwendigkeit, Gaußfilter respektive Filter mit Gaußartigen Termen zur Regularisierung des exponentiell schlecht gestellten Problems zu verwenden, führt somit in den regularisierenden Kernen zu oszillatorischen Anteilen, die ihrerseits zu numerischen Problemen führen dürften. Demzufolge werden wir auch dann mit Oszillationen in den Kernen zu rechnen haben, wenn sich das Filter für $\beta \to \infty$ ($\gamma \to 0$) asymptotisch Gaußartig verhält. Wir werden diese

[13] Für allgemeine Darstellungen siehe beispielsweise [DR84, KF87, Sto99, SB00].

[14] Für die Graphen des komplexwertigen Kerns $\hat{\Phi}_\beta$ gilt bezüglich dessen Real- und Imaginärteils entsprechendes.

[15] Der Wert $\beta = 4.0$ korrespondiert zu $\gamma = 0.125$, welcher numerisch noch weit von Null entfernt liegt.

[16] Es sei auf die Ausführungen des Abschnitts 9.4 verwiesen.

[17] siehe auch Gleichung (9.157), Seite 175

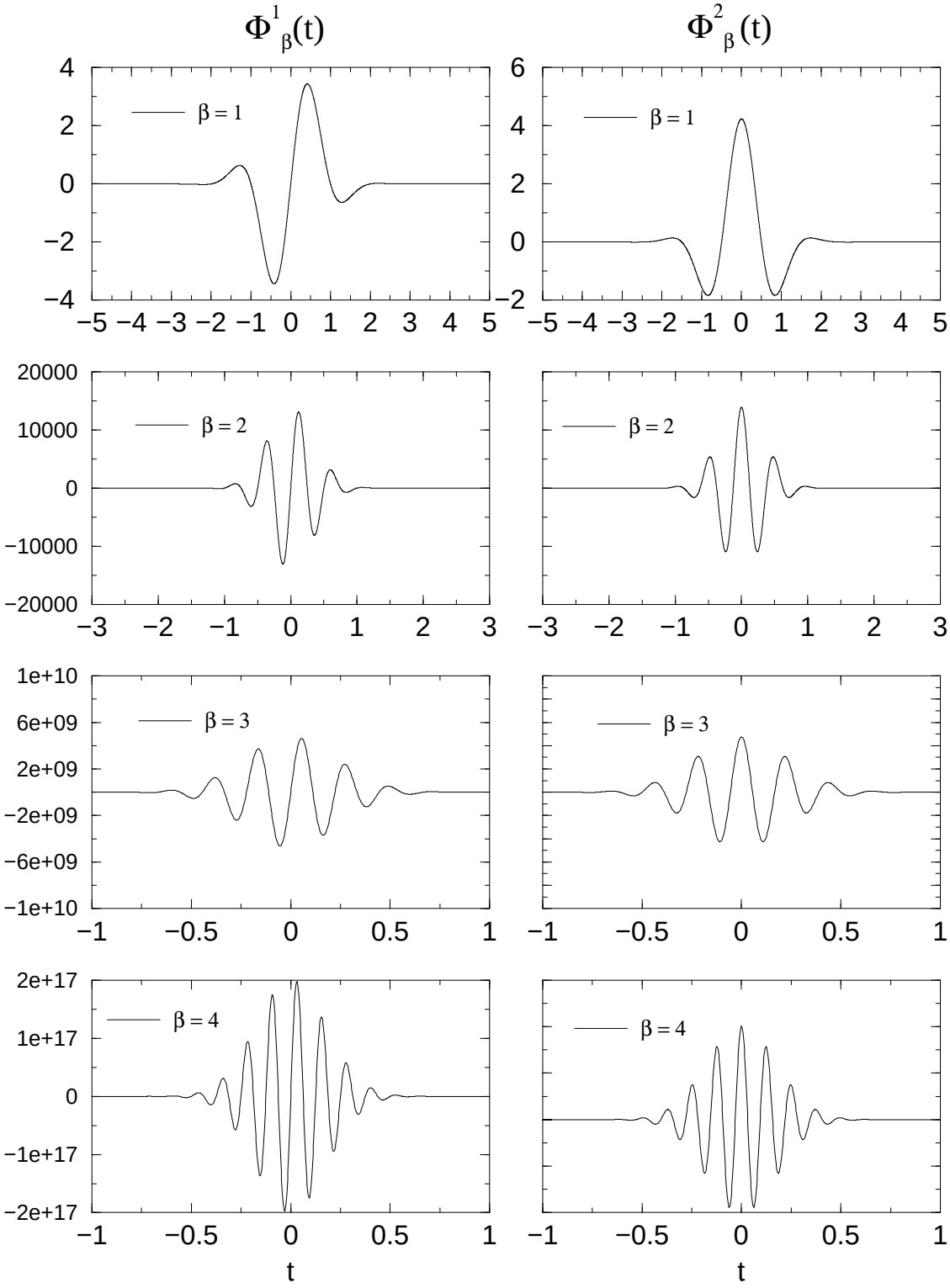

Abbildung 10.1: Die Kerne $\hat{\Phi}^1_\beta$ und $\hat{\Phi}^2_\beta$; $1.0 \leq \beta \leq 4.0$

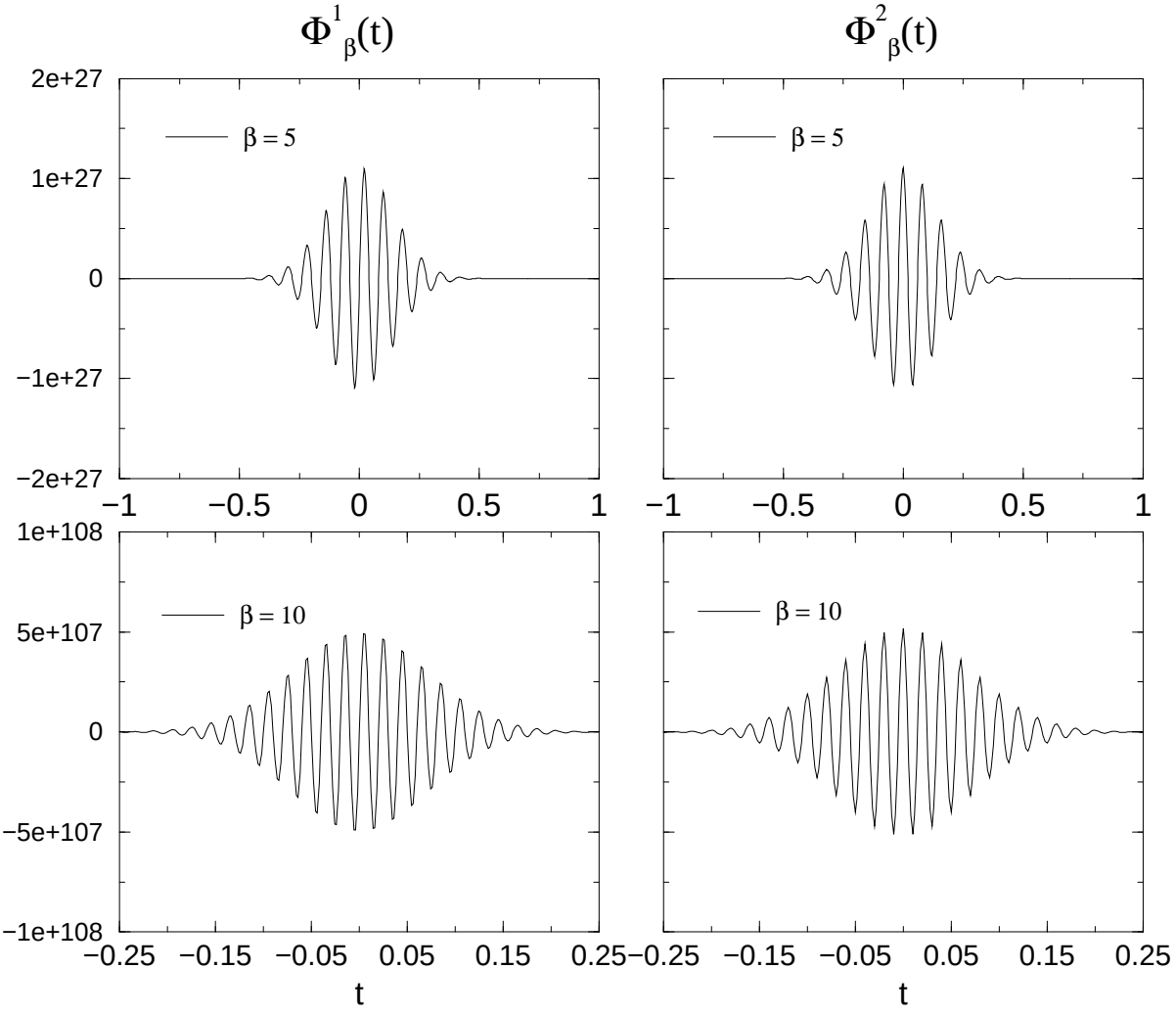

Abbildung 10.2: Die Kerne $\hat{\Phi}^1_\beta$ und $\hat{\Phi}^2_\beta$; $\beta = 5;\ 10$

Oszillationen somit auch bei der Verwendung eines „Multifilters“[18] nicht umgehen können, sondern jene höchstens „dämpfen“: die hier zu verwendende konkrete Form eines „Multifilters“ ist im Mellin- respektive Fourier-Laplace Raum durch den Ausdruck (9.35),

$$\tilde{F}_{\gamma,n}(s) = \exp\left(\frac{\gamma}{n}s\right)^2 \tilde{F}_\gamma(s) \quad , \tag{10.9}$$

gegeben, an den wir das Dilemma ablesen können, daß zwar für kleine $n \in \mathbb{N}$ die Oszillationen durch das Filter $\tilde{F}_\gamma$ quasi geglättet werden, wohingegen für $n \to \infty$ jene Terme wieder an Dominanz gewinnen. Die Anwendung des „Multifilters“ (10.9) kann so zu einer numerischen Stabilisierung unter Inkaufnahme einer eventuell schlechteren regularisierten Lösung führen. Entsprechendes würden wir aber schon bei der Wahl eines kleineren Wertes für β - respektive eines größeren für γ - erreichen. Dieses sei hier, die numerischen Ergebnisse vorweggenommen, exemplarisch mit der Abbildung 10.3 auf der nächsten Seite demonstriert, in der wir die Ergebnisse der Anwendung eines auf dem Friedrichschen Glättungsoperator[19] basierenden „Multifilters“ dargestellt haben, angewandt auf die Integralgleichung des Real- und des Imaginärteils. Als Modell haben wir die Cole-Davidson Dichte[20] angesetzt, die Anzahl *MD* der diskreten Daten betrug 2048 in dem Intervall $[-30;\ 30]$ und der mittlere relative Datenfehler war $\sigma_{\text{rel}} = (1.5 \pm 0.9)\%$. Der Wert des Regularisierungparameters des Friedrichschen Operators war $\gamma = 0.5$. In der Tabelle 10.1 sind die jeweiligen Regularisierungs- und der Datenfehler, beide in der L^2-Norm ausgedrückt[21], aufgelistet.

n	$\|W_{CD} - W^1_{\beta,n}\|^2_{L^2}$	$\|W_{CD} - W^2_{\beta,n}\|^2_{L^2}$	ε_1^2	ε_2^2
1	0.0144	0.0145		
2	0.0109	0.0114	$5.6 \cdot 10^{-05}$	$9.0 \cdot 10^{-05}$
2	0.0114	0.0114		

Tabelle 10.1: Fehler der auf den Friedrichschen Glättungsoperator basierende Multifilterregularisierung: $\beta = 0.5$; $MD = 2048$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.5 \pm 0.9)\%$

In der Abbildung 10.3, und so auch in der Tabelle 10.1, sind nur die Ergebnisse der regularisierten Folge bis $n = 3$ wiedergegeben, da bei $4 \leq n$ die Numerik bereits wieder zusammengebrochen[22] ist. Der Beginn des Zusammenbruchs deutet sich bereits in den Graphen der regularisierten $W^1_{\beta,n}$ der Integralgleichung des Realteils bei $n = 3$ an. Vergleichen wir jetzt die Graphen mit den entsprechenden, noch vorzustellenden, der Abschnitten 10.4.2 und 10.5.2, so bestätigt[23] sich die obige pessimistische Bemerkung zur Anwendung eines „Multifilters“. Wir halten es trotzdem für angebracht, die „Multifilter“ noch weiter zu untersuchen, insbesondere bezüglich deren Anwendung auf andere schlecht gestellte Probleme der Physik, deren Grad der Schlechtgestelltheit nicht exponentiell sonderen geringer ist.

Beenden wir jetzt die eingeschobenen Ergebnisse der „Multifilter“ und führen die vorherigen Betrachtungen fort. Im Sinne des eben dargelegten können wir somit zusammenfassend sagen, daß die Oszillationen in den regularisierenden Kernen eine weiter Manifestation der exponentiellen Schlechtgestelltheit des Ausgangsproblems ist. Dieses gilt, wiederum in Sinne des eben gesagten, strenggenommen nur solange wie wir Gaußanteile in den Filtern $\tilde{F}_\gamma$ verwenden, doch wie wir im Abschnitt 9.2 bereits dargelegt haben, führt zumindest bezüglich einer praktischen Anwendung[24] kein Weg an diesen Terme vorbei. Wir wollen an dieser

[18] siehe Abschnitt 9.2.2

[19] a.a.0. Gleichungen (9.42) und 9.43; siehe auch [BB93, Wal94, Wer95]

[20] Die Gründe für die Betrachtung des eine schwachen Divergenz aufweisenden Cole-Davidson Modells werden in folgenden geklärt werden.

[21] siehe diesbezüglich Fußnote 56 auf Seite 242

[22] Das Zusammenbrechen der Numerik und den Datenfehlereinfluß werden wir in folgenden detailierter untersuchen.

[23] Es wurde deswegen die Anwendung der „Multifilter“ numerisch nicht weiter detailierter untersucht.

[24] Wir wollen in diesem Zusammenhang insbesondere auf die Darlegung zu dem auf der Beta-2 Dichte basierenden Filter (9.19), Seite 153, hinweisen.

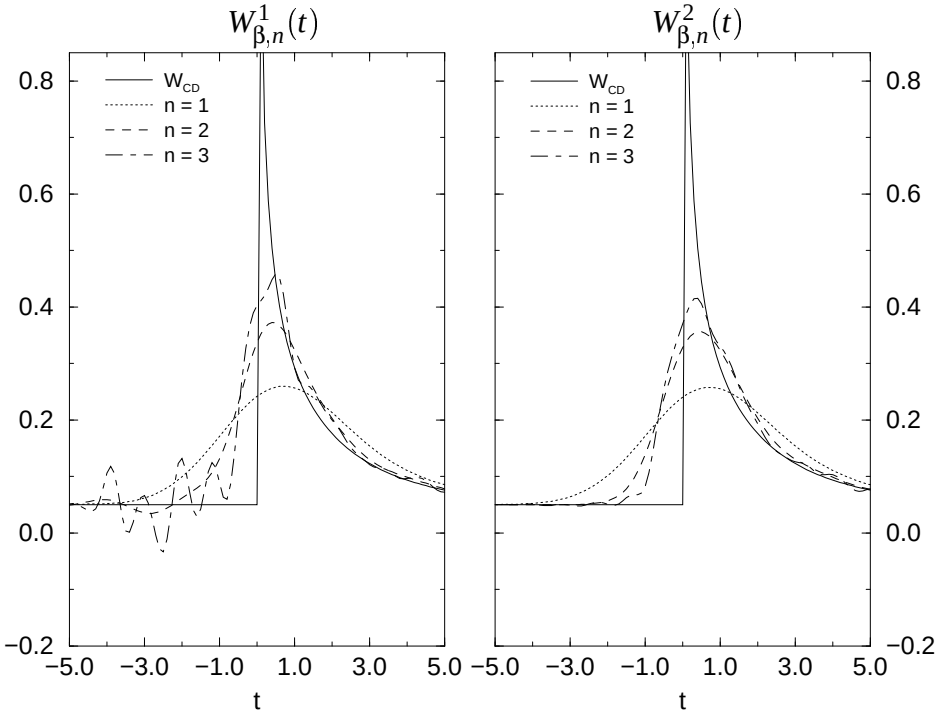

Abbildung 10.3: Ergebnisse des auf dem Friedrichschen Glättungsoperator basierenden Multifilters: $\beta = 0.5$; $MD = 2048$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.5 \pm 0.9)\%$

Stelle bereits darauf hinweisen, daß wir auch in der Tikhonov-Phillips Regularisierung Oszillationen erhalten werden, wobei sich jene direkt in der regularisierten Lösung manifestierten, d.h. bertreits ein Artefakt des reinen Regularisierungsferfahren sind.

Wie eben schon erwähnt, ist die numerische Integration über (stark) oszillierenden Funktionen ein aktuelles Problem der numerischen Mathematik und es existieren einige Ansätze, dieses Problem zu behandeln. Allgemeine Ansätze werden, wie bereits verwiesen, in [DR84, KF87, PTVF92, Sto99] erläutert, deren Anwendung in unserem Fall jedoch nur einen geringen Erfolg bringt. Ohne jetzt auf Details einzugehen, bricht die Numerik bei einer Variation des Parameters β bei Anwendung jener Verfahren leider nur geringfügig später zusammen als bei der Anwendung einer „herkömmlichen“ Integrationsroutine, insbesondere im Vergleich mit dem Trapezverfahren oder dem Gaußverfahren[25]. Ein vielversprechendes Verfahren wird übrigens von HSU und ZHOU in [HZ87] vorgeschlagen. Die Nachteile, oder besser die Schwierigkeiten, dieses Verfahrens bei dessen konkreten Anwendung auf unsere Gleichungen sind jedoch zum einen, die Gültigkeit der Voraussetzungen des Verfahrens immer zu garantieren und zum anderen ein nicht unerheblicher Aufwand bezüglich einer tatsächlichen, programmierten Realisierung.

Es hat sich aber für uns überraschend gezeigt, und das ist auch der eigentliche Grund, daß wir hier das von HSU und ZHOU vorgestellte Verfahren bezüglich einer Anwendung nicht weiter untersucht haben, daß wir die numerische Integration ohne einen weiteren größeren, programmiertechnischen Aufwand durch die Verwendung sogenannter „multiprecision“ Algorithmen stabilisieren können[26]. Konkret wird, von der programmiertechnischen Seite her, durch die Einbindung entsprechender Bibliotheken nur der Datentyp zu „Multipräzisionszahl“ geändert und auf die „herkömmlichen“ Integrationsroutinen zurückgegriffen. Beson-

[25] Diese sind beispielsweise in [PTVF92, Sto99, SB00] hervorragend dargestellt.

[26] Wir wollen an dieser Stelle auf eine Darstellung der verwendeten „multiprecision“ Algorithmen verzichten, dieses würde den Rahmen dieser Arbeit bei weitem sprengen, und stattdessen auf die allgemeinen Darstellungen in der Literatur, wie beispielsweise in [DR84, PTVF92, Sto99, SB00], verweisen.

Name	Description	Type	Dynamic?	Default
mpipl	Maximum and initial precision, in digits	int	no	100
mpiou	Initial output precision, in digits	int	no	56
mpiep	$\log_{10}$ of initial MP epsilon	int	no	10−mpipl
mpwds	Maximum and initial precision, in words	int	no	$\frac{\texttt{mpipl}}{7.227472}+1$
mpoud	Current output precision, in digits	int	yes	mpiou
mpeps	Current MP epsilon value	mp_real	yes	$10^{\texttt{mpiep}}$
mpl02	$\log 2$	mp_real	no	$\log 2$
mpl10	$\log 10$	mp_real	no	$\log 10$
mppic	π	mp_real	no	π
idb	MPFUN debug level	int	yes	0
mcr	Crossover point for advanced routines	int	yes	7

Tabelle 10.2: Tunable parameters for the MP package.

ders elegant und ohne größeren Probleme können wir dieses übrigens in der Programmiersprache[27] C++ realisieren, wobei, was wir am Rande notieren wollen, eine objektorientierte Programmierung auch bei der numerischen Realisierung der Integrale (10.1) bis (10.3) respektive der Integrale zum Ausdruck (10.6) entsprechend, von Vorteil und Nutzen ist. Dementsprechend wurde in dieser Arbeit den von SIDDHARTHA CHATTERJEE geschriebene C++Aufsatz mpfun++ zur „Multipräzisionbibliothek“ MPFUN von DAVID H. BAILEY, der jene Bibliothek ursprünglich in Fortran-77 programmiert hat, verwendet[28].

Die wichtigsten einstellbaren Parameter jener Bibliothek sind, zur Information, in der Tabelle 10.2, die wir aus der Dokumentation [Cha94] des C++Aufsatzes (direkt) zitiert[29] haben, zusammengefaßt wiedergegeben. So wir nicht darauf explizit hinweisen, verwenden wir die Bibliothek mit deren ursprünglichen („default“) Parametereinstellungen verwenden, d.h. insbesondere, daß für dem bezüglich unserer Anwendung relevanteste Parameter mpipl , die (interne) Rechengenauigkeit, mpipl $= 100$ gelten wird[30].

10.3 Der numerische Einfluß des Datenfehlers

Im Abschnitt 9.3.2 haben wir den Einfluß des Datenfehlers $\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}$ bei Verwendung eines Gaußfilters theoretisch untersucht. Die zentralen Ausdrücke für den Datenfehler sind, zur Erinnerung, die Abschätzung (9.127) auf Seite 170 und deren Asympotik für $\gamma \to 0$, Gleichung (9.129) auf Seite 170 bzw. der hier für die phänomenologische Gleichung konkrete asymptotische Ausdruck (9.130),

$$\left\|\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}(x_0)\right\|^2 \lesssim (2\pi)^{-1/2}\,\frac{\varepsilon^2(x_0)}{\gamma}\,\exp\left(\frac{9\pi^2}{8\gamma^2}\right) \quad \text{für} \quad \gamma \to 0^+ \quad . \tag{10.10}$$

Untersuchen wir jetzt numerisch den Einfluß des Datenfehlers, indem wir quasi den Ausdruck (9.51) respektive (9.53) für $\Delta_\gamma^{\mathrm{v}}$ in die t-Domäne transferieren, oder mit anderen Worten gleich auf die Darstellungen (10.1) bis (10.3) bzw. auf die allgemeinen Darstellung (10.5) zurückgreifen und auf deren Basis den Daten-

[27] Die Programmiersprache C++ wird beispielsweise von deren Erfinder STROUSTRUP in [Str91] dargelegt.

[28] Bezüglich Details der konkret von uns verwendete BAILEYschen Programmbibliothek MPFUN sei auf [Bai90, Bai93] verwiesen. Die Bibliothek selber ist unter http://www.netlib.org öffentlich zugänglich.

[29] Wir haben uns deswegen eine Übersetzung der Tabelle verzichtet. Die Informationen in der Tabelle sind implizit ebenso in [Bai90, Bai93] enthalten.

[30] siehe a.a.O.

fehlereinfluß numerisch berechnen. Wir untersuchen also numerisch die Ausdrücke der allgemeinen Form

$$\Delta_\beta^\nu(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\Phi}_\beta^{1,2}(t_0 - t)\, \nu(t)\, dt \quad , \tag{10.11}$$

wobei hier ν wiederum der Datenfehler sein möge, d.h. die fehlerbehafteten Vorgegebenen wieder durch $\hat{E} = \hat{E}_T + \nu$ darstellbar[31] sein mögen. Entsprechend des im vorangegangenen Abschnitts Dargelegten, wurde der Ausdruck (10.11) numerisch unter Anwendung der BAILEYschen „Multipräzisionbibliothek“ `MPFUN` bei Verwendung einer Trapezroutine zur numerischen Integration realisiert. Der stochastische Fehler ν wurde auf der Basis des in [PTVF92] beschriebenen Zufallszahlengenerators[32], der gleichverteilte Zufallszahlen liefert, numerisch realisiert.

Die Abbildung 10.4 auf der nächsten Seite zeigt exemplarisch die auf der Basis der Gleichung (10.11) mit dem Kern $\hat{\Phi}_\beta^2$ des Imaginärteils erzielten numerischen Ergebnisse[33]. Wir haben dort nun exemplarisch die Ergebnisse für $\Delta_\beta^\nu(t_0)$ bei $t_0 = 0$ als Funktion des Parameters β aufgetragen und vergleichen jene mit den entsprechend zu (10.10) gegebenen asymptotischen Ausdruck.

Dabei ist zu bemerken, daß wir im gewissen Sinne so natürlich „Äpfel mit Birnen“ vergleichen, da wir den numerischen Datenfehler in der Supremumsnorm messen, wohingegen der Fehler in (10.10) in einer L^2-artigen[34] Norm gemessen wird. Tatsächlich haben wir auch für die Gegenüberstellung jene Norm (grob) durch die Supremumsnorm abgeschätzt und diese Abschätzung in den asymptotischen Ausdruck eingesetzt, wodurch sich so selbstverständlich zusätzliche konstante Faktoren[35] ergeben. Das Wesentliche bei dieser Untersuchung ist aber nicht die Frage nach einer tatsächlichen numerischen Übereinstimmung von Numerik mit der asymptotischen Abschätzung (10.10) respektive der Abschätzung (9.127), diese Frage haben wir so auch gar nicht betrachtet, sondern daß die numerischen Untersuchungen den grundsätzlich *kontrollierten exponentiell divergenten Einfluß des Datenfehlers in der Regularisierung bestätigen*! Dieses Resultat wird durch die Abbildung 10.4 offensichtlich mehr als drastisch demonstriert: bei einem Wert von $\beta = 1.5$ wird der Datenfehler beispielsweise bereits auf ca. seinen fünffachen Wert „verstärkt“, und bei $\beta = 2.0$ ($\gamma = 0.25$) ist der Datenfehlereinfluß bereits ca. 4222-mal so groß als der ursprüngliche Fehler[36].

Wie wollen nicht unerwähnt lassen, daß der Unterschied zwischen dem numerischen Ergebnis und der asymptotischer Abschätzung im unteren Teil der Abbildung 10.4 nicht verwunderlich ist, da hier die Asymptotik (10.10) noch nicht gelten sollte. Der obere Teil der Abbildung weist jedoch bereits auf die Übereinstimmung - innerhalb der numerischen Genauigkeit - von Numerik und Abschätzung für $\beta \to \infty$ hin.

Die numerischen Ergebnisse für Δ_β^ν bekräftigen also die theoretischen Untersuchungen zum Datenfehlereinfluß auf der Regularisierung und so wundert es uns auch nicht, entsprechend den zusammenfassenden Ausführungen im Abschnitt 9.3.3 zu Δ_β^ν, daß das „Trial and Error“-Verfahrens[37] zur Wahl des Parameters β bereits ausreichend sein wird um akzeptable und geeignete Regularisierte zu erhalten. Wie die Untersuchungen in den nachfolgenden Abschnitten bestätigen werden, können wir erwarten, die Dominanz von Δ_β^ν bereits an den Graphen der Regularisierten ablesen zu können und dementsprechend dann die Regularisierung zu beenden respektive den Parameter β zu bestimmen.

---

[31] siehe Abschnitt 5.3.2 und beispielsweise [AT77, Dav82, Iva76, LBP91]

[32] siehe auch [Sto99, SB00]

[33] Die Ergebnisse, die mit den Kern $\hat{\Phi}_\beta$ der komplexwertigen und mit den Kern $\hat{\Phi}_\beta^1$ der Realteilgleichung gewonnen werden, sind vollkommen äquivalent und sollen deswegen hier nicht explizit wiedergegeben werden. Die einzigen Unterschiede liegen hier, wie erwartet, nur in den genauen Absolutbeträge der einzelnen Datenpunkte, jedoch nicht in deren relativen Größenordnung; die Graphen sind übrigens visuell kaum voneinander zu unterscheiden und es hat nur historische Gründe, daß wir die auf den Imaginärteil basierenden Daten zeigen: jene sind die ersten, die berechnet worden sind.

[34] siehe die diesbezüglichen Hinweise im Abschnitt 9.3.2, Seite 168

[35] Wir wollen eingestehen, daß eine solche Abschätzung noch bezüglich der zusätzlichen Vorfaktoren eine gewisse Freiheit einräumt.

[36] Der Absolutwert der angegebenen Zahlen hat keinerlei Bedeutung, sondern nur deren Größenordnung.

[37] siehe Abschnitt 8.1

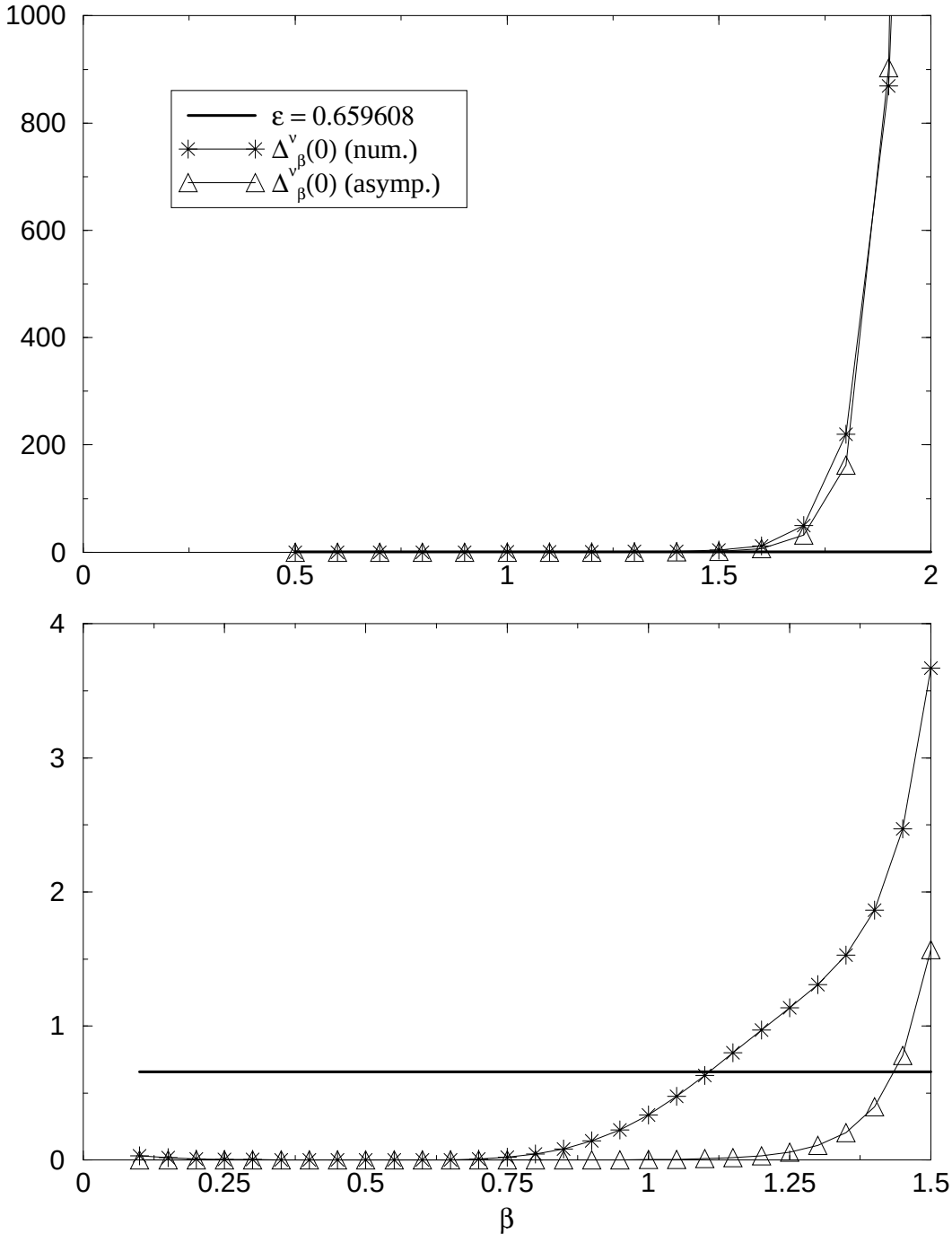

Abbildung 10.4: Numerik zum Datenfehlereinfluß Δ^{ν}_{γ}

Wir wollen an dieser Stelle jetzt daran erinnern[38], daß der Ursprung des Exponentialfaktors in der obigen asymptotischen Abschätzung (10.10), der Exponentialterm ist ebenso Bestandteil der Abschätzung (9.127), die Verbindung von Gaußfilter und exponentieller Divergenz der Funktion $\tilde{k}^{-1}$ ist. Die Ursprünge der Oszillationen in den regularisierenden Kernen und des kontrolliert exponentiell divergenten Datenfehlereinflusses sind also identisch; beide hängen, als Konsequenz dessen, also in diesem Sinne miteinander zusammen.

Abschließend sei noch das folgende bemerkt: Neben dem eigentlichen Datenfehler, ist eine weitere Fehlerquelle natürlich der Fehler des numerischen Integrationsverfahrens, der sich in den (numerischen) Ergebnissen der Abbildung 10.4 ebenso niederschlägt, und trotz Verwendung einer „Multipräzisionbibliothek“ sollten wir nicht vergessen, daß auch hier die numerische Integration über die bei wachsendem β immer stärker werdenden Oszillationen irgendwann zusammenbrechen wird. Dieses Zusammenbrechen können wir, was wir in den nachfolgenden Abschnitten demonstrieren werden, durch eine Vergrößerung der internen Rechengenauigkeit der Multipräzisionszahlen erreichen, jedoch hat dieses eine Verlangsamung[39] der Programme zur Konsequenz. Es soll auch nicht unerwähnt bleiben, daß wir dieses Zusammenbrechen der Numerik anhand der Ergebnisse für Δ_β^ν nur schwer bis gar nicht ablesen können; bei der numerischen Integration über Zufallszahlen ist es letztendlich kaum möglich dieses zu entscheiden. Die Frage des Zusammenbrechens läßt sich nur anhand von Modellrechnungen klären. Dieses soll nun im nachfolgenden Abschnitt einer der Schwerpunkte der Untersuchungen sein.

10.4 Die Regularisierung kontinuierlicher Daten

Untersuchen wir also als nächstes die Regularisierung kontinuierlicher Daten, d.h. die vorgegebene Funktion wird an beliebig vielen Stellen als bekannt vorausgesetzt, wobei jene fehlerbehaftet[40] oder fehlerlos sein kann. Die Kerne und die Daten selber werden, wie schon bei der Untersuchung des Datenfehlereinflusses, sofort als Multipräzisionszahlen bereitsgestellt. Wir wollen an dieser Stelle bemerken, daß die Trapezroutine zur Integration tatsächlich bereits ausreicht und wir auf die Anwendung des aufwendigeren Gaußalgorithmuses verzichten können. Letzterer bringt in den hier untersuchten Fällen bei der Verwendung der `mpfun++` Bibliothek insgesamt keine Verbesserung der numerischen Ergebnisse; genauer erziehen wir mit beiden Verfahren die gleichen Ergebnisse, der Unterschied liegt selbst bei der Verwendung der „Multipräzisionszahlen“ im Rahmen der (numerischen) Rechengenauigkeit.

10.4.1 Das Drudemodell

Als erstes Modell wollen wir uns dem *Drudemodell*[41] zuwenden, dessen Dichte durch den Ausdruck[42] (3.6),

$$p_D(\tau) = \frac{w_D(\tau)}{\tau} = \frac{1}{\tau}\,\delta\left(\ln\frac{\tau}{\tau_0}\right) \quad , \tag{10.12}$$

also im wesentlichen durch eine Delta-Distribution, gegeben ist, wobei τ_0 ein (Modell-)Parameter sei. Die entsprechend auf die Variable t substituierte Dichte W ist dann also durch

$$W_D(t) = \delta(t - t_0) \tag{10.13}$$

gegeben. Die Dichte (10.12), respektive (10.13), stellt somit einen numerisch pathologischen Fall dar; die Delta-Distribution ist, zur Erinnerung, keine reguläre Distribution und kann nicht durch „herkömmliche“

[38] siehe Abschnitt 9.3.2, Seite 171

[39] Die Geschwindigkeit bzw. die Effektivität der Programmme bezüglich Laufzeit wird kein Thema dieser Arbeit sein. Wir haben uns nur auf die grundsätzlichen numerischen Eigenschaften konzentriert.

[40] Tatsächlich wird jedoch in diesem Abschnitt der einzige Fehler die endliche numerische Darstellung der Vorgegebenen sein.

[41] siehe Abschnitt 3.1

[42] siehe auch Abschnitt 3.1, Seite 32

Funktionen dargestellt werden[43]. Dieses hat zur Konsequenz, daß es jetzt selbstverständlich nicht möglich ist, die regularisierte Lösung W_β numerisch direkt mir der Dichte (10.13) des Drudemodells zu vergleichen. Stattdessen ist es jetzt naheliegender, quasi als „einfachste“ und „bequemste“ Möglichkeit, die numerisch erhaltene mit der theoretischen, reinen regularisierten Lösung zu vergleichen. Die reine Regularisierte W_β^{th} des Drudemodells ist bei Verwendung der Mollifier-Funktion F_β des Gaußfilters[44] durch[45]

$$W_\beta^{th}(t_0) = \left(W_D * F_\beta\right)(t_0) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t_0^2\right) \tag{10.14}$$

gegeben, also per definitionem der δ-Distribution durch die Mollifier-Funktion selbst.

Bevor wir uns aber den mit den Multipräzisions-Algorithmen gewonnen Ergebnissen zuwenden, wollen wir zum einen demonstrieren, daß die Verwendung von Multipräzisionszahlen[46] in den Integrationsroutinen, wenn die Daten als `double`-Zahlen[47] bereitgestellt werden, tatsächlich bereits zu einer Stabilisierung führt. Dabei werden wir ebenso sehen, wann bei “doppelt genauen“ Daten die Numerik zusammenbricht. Wir wollen aber darauf hinweisen, daß dieses Zusammenbrechen weniger von der verwendeten Dichte als von der zu regularisierenden Ausgangsgleichung abhängig sein wird. In diesem Sinne sind die folgenden Ergebnisse auch als exemplarisch zu betrachten.

Beschäftigen wir uns zuerst mit der komplexwertigen Gleichung, also mit der explizit durch (10.6) gegebenen regularisierten Lösung. Der Integralkern $\hat{\Phi}_\gamma$ sei in der Numerik sofort durch `MP`-Zahlen dargestellt, ebenso möge der Integrationsalgorithmus auf `MP`-Zahlen basieren. Lediglich die vorgegebene Funktion $\hat{E}^+$ in (10.6) sei als “doppelt genau“, dafür aber an beliebig vielen Stellen bekannt, vorausgesetzt. Es sei noch erwähnt, daß die nicht Bereitstellung der vorgegebenen als `MP`-Zahl bei der Verwendung der `mpfun++` Bibliothek zu keinen (programmiertechnischen) Problemen führt, da jene Bibliothek Konversionsroutinen der “herkömmlichen“ Datentypen zum `MP`-Datentyp beinhaltet. Reale Meßwerte könnten somit ebenso ohne weiteren Programmier- oder algorithmischen Aufwand als Vorgegebene bzw. Eingabedaten verwendet werden.

In der Abbildung 10.5 auf der nächsten Seite sind nun die Ergebnisse der Numerik für die Regularisierte (10.6) wiedergegeben. Wir vergleichen dort, wie oben erwähnt, die durch (10.14) gegebene (reine) theoretische regularisierte W_β^{th} mit der numerischen W_β; genauer haben wir in der linken Spalte $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ und in der rechten Spalte der Abbildung $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ des Ergebnisses der numerischen Integration von (10.6) für W_β angegeben. Den Regularisierungsparameter haben wir insgesamt im Intervall $[3.5,\ 4.0]$ mit der Schrittweite $\Delta\beta = 0.1$ variiert, wobei wir aber nur die Ergebnisse bis $\beta = 0.7$ angegeben haben; jenseits dieses Parameterwertes besteht die numerische Lösung de facto nur noch aus „numerischem Rauschen“. Wir wollen an dieser Stelle bereits darauf hinweisen, daß aufgrund der prinzipiellen Fehlerlosigkeit von $\hat{E}^+$ die numerische mit der theoretischen Regularisierten übereinstimmen sollte.

Die theoretischen Untersuchungen im Abschnitt[48] 9.3 habe jetzt gezeigt, und wir wollen an dieser Stelle explizit darauf hinweisen, daß die regularisierte Lösung W_β der komplexwertigen Integralgleichung von der Seite des Verfahrens her nur aufgrund des Datenfehlers einen von Null verschiedenen Imaginärteil besitzen kann; der reine Fehler des Regularisierungsverfahrens, also der Filterfehler, kann keinen $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ erzeugen[49] - so wir die Gesuchte als rein reell voraussetzen. Eine weiter Quelle für einen nichtverschwindenen $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ wird ebenso der gesamte numerische Fehler sein. Der Imaginärteil der Regularisierten (10.6) ist somit ein weiteres Maß respektive Indiz für den gesamten Regularisierungsfehler, wobei jetzt der Fehler der Numerik mit enthalten ist.

---

[43] siehe Abschnitt B.3, Seite 355 und beispielsweise [BB93, Bre65, Wal94]

[44] siehe Gleichung (9.24), Seite 154

[45] siehe auch Abschnitt 9.5.2, Gleichung (9.222) auf Seite 191

[46] Wir werden im folgenden die „Multipräzisionszahlen“ als `MP`-Zahlen bezeichnen.

[47] Die Größe der `double`-Zahlen bei der von uns verwendeten Hardware (Prozessoren) betrug 64 Bit.

[48] siehe auch Abschnitt 5.3.3 und 6.2

[49] siehe auch beispielsweise Gleichung (5.55), Seite 78 und Gleichung (9.50) bzw. (9.52), Seite 158

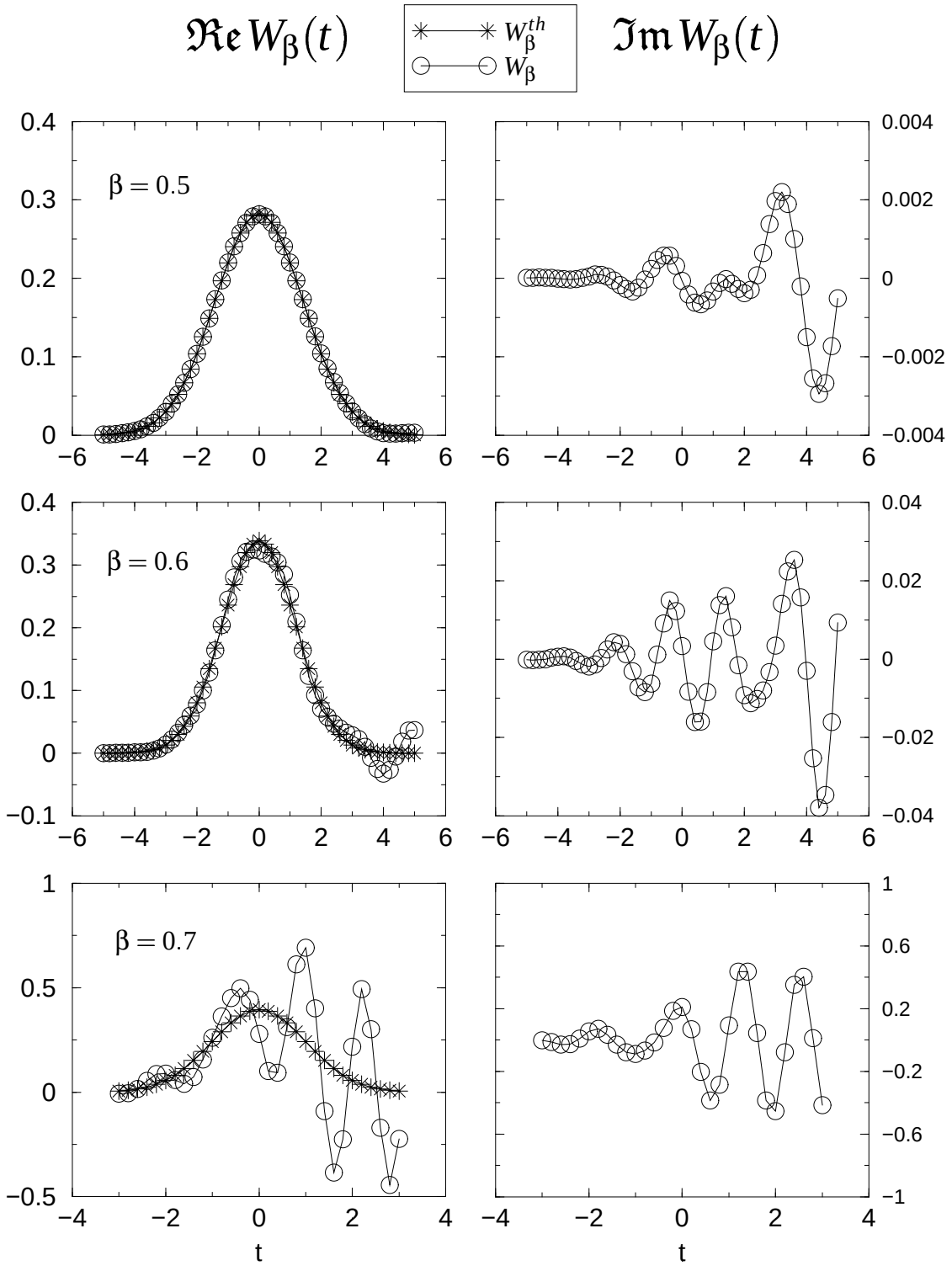

Abbildung 10.5: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $0.5 \leq \beta \leq 0.7$

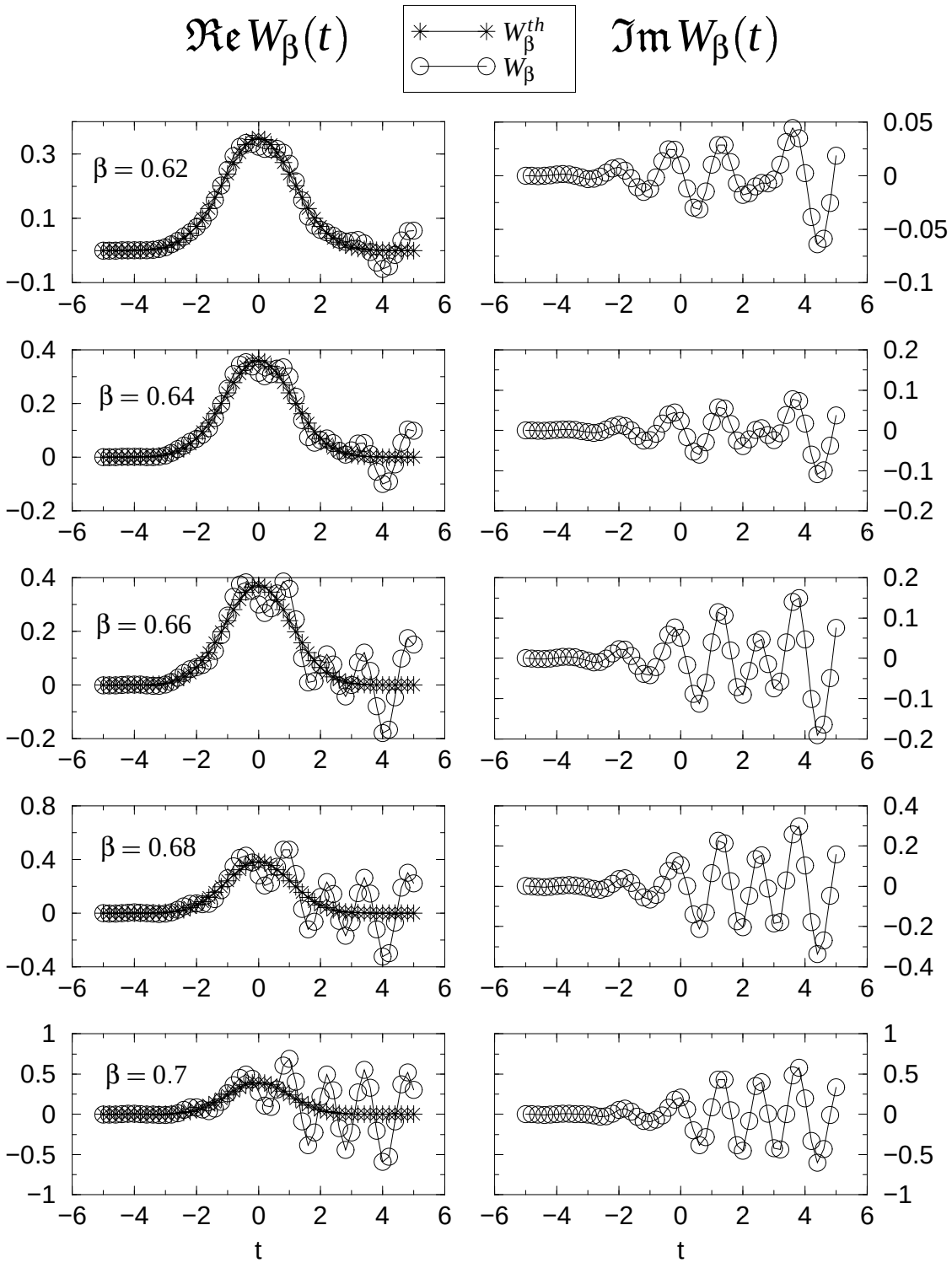

Abbildung 10.6: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $0.6 \leq \beta \leq 0.7$

Betrachten wir nun die Graphen der Abbildung 10.5, so stellen wir fest, daß in der Tat $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ mit wachsendem Fehler in der (eigentlich interessierenden) Regularisierten $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ zunimmt. Der oszillatorische Charakter von $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ läßt vermuten, daß die Fehlerquelle hauptsächlich ein numerisch systematischer Fehler sein wird. Obwohl die Daten prinzipiell als fehlerlos, bis auf die Tatsache, daß jene als „doppelt genaue" Zahlen vorliegen, betrachtet werden können, reicht deren numerische Genauigkeit offensichtlich nicht aus, um systematische Fehler bei der numerischen Integration über den oszillierenden Kern in (10.6) zu verhindern, und dieses gilt bereits bei einem Wert von $\beta = 0.5$. Daß der Fehler hauptsächlich ein numerischer sein dürfte, wird zusätzlich durch die Graphen von $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ gestützt: ab $\beta = 0.6$ nehmen die (systematischen) Oszillationen in der Regularisierten zu, und bei $\beta = 0.7$ besteht der Graph quasi nur noch aus Oszillationen. Desweiteren ändert sich die Gestalt der Graphen von $\beta = 0.6$ auf $\beta = 0.7$, aufgrund des Einflusses jenes Fehlers, beträchtlich und zwar analog zum Datenfehlereinfluß, ein Umstand, der aufgrund der Graphen des Kerns $\hat{\Phi}_\gamma$ in der Abbildung 10.1 auf Seite 225 schon zu vermuten war. Die Abbildung 10.6 auf der vorherigen Seite, in der wir die Graphen der Regularisierten für den Parameterbereich $[0.6,\ 0.7]$, quasi den „Weg in die Oszillationen", detailierter wiedergegeben haben, verdeutlichen diesen Sachverhalt eindrucksvoll: sobald der Einfluß des numerisch systematischen Fehlers an Bedeutung gewinnt, reicht hier bereits die minimale Variation von $\Delta\beta = 0.02$ aus, bis dieser Fehler die Graphen absolut dominiert.

In der Abbildung 10.7 auf der nächsten Seite sind jetzt die Ergebnisse der auf der Basis des Datentyps `double` gewonnen regularisierten Lösungen der Integralgleichung des Real- und des Imaginärteils, Gleichungen (10.2) und (10.3), auf die Variable t substituiert, zusammengefaßt dargestellt. Wir haben dort wiederum die Graphen der theoretischen regularisierten W_β^{th} mit den numerischen Ergebnissen W_β^1 der Real- und W_β^2 der Imaginärteilgleichung, bei der Variation des Parameters β im Intervall $[3.5,\ 4.0]$ mit der Schrittweite $\Delta\beta = 0.1$, verglichen.

Als erstes Fällt uns auf, so wir diese Ergebnisse mit jenen des komplexwertigen Ansatzes vergleichen, daß die Numerik erst sehr viel später bei einem Wert von $\beta = 4.0$, im Gegensatz zu $\beta = 0.64$, zusammenbricht respektive der Einfluß des numerischen Fehlers bei diesem Wert merklich an Dominanz gewinnt. Dieses Zusammenbrechen läuft jedoch analog wie im obigen Fall ab: sobald der Einfluß des Gesamtfehlers in den Graphen sichbar wird, genügt eine vergleichsweise kleine Variation des Parameters β, bis jener Fehler (absolut) dominiert, was wiederum ein Hinweis auf einen exponentiell ansteigende Einfluß für wachsendes β ist. Dieser Hinweis bzw. diese Vermutung wird durch die Abbildung 10.8 auf Seite 238 untermauert, in der wir die Graphen für die Parameterwerte $\beta = 3.9,\ 4.0$ und $\beta = 4.1$ wiedergegeben haben: wärend das Ergebnis für $\beta = 4.0$ fast noch als akzeptabel betrachtet werden könnte, bestehen die Graphen bei $\beta = 4.1$ nur noch aus Oszillationen, aus denen wir keinerlei Informationen über die gesuchte Dichte mehr ablesen können.

Weiter fällt auf, daß die Oszillationen weniger „systematisch" als in den obigen Fall des komplexwertigen Integrals (10.6) zu sein scheinen. Ein Grund dafür wird die (notwendige) Konversion der `double`-Zahlen zu `MP`-Zahlen in der Integrationsroutine sein, in der die „restlichen" Ziffern der `MP`-Zahlen u.U. „zufällig aufgefüllt" werden und der dadurch entstehende zusätzliche „stochastische" Fehler entsprechend erst bei höheren Parameterwerten merkbar wird, so daß jener Fehleranteil im obigen Fall der komplexwertigen Gleichung bei den Parameterwerten, für die die eigentliche Numerik, also die Integration über die Oszillationen, zusammenbricht, noch nicht sichbar ist.

Mit der Abbildung 10.9 auf Seite 240 sei nun die stabilisierende Eigenschaft der `MP`-Zahlen demonstriert, selbst wenn die Daten selber als `double`-Zahlen vorliegen. Wir vergleichen in der Abbildung 10.9 wiederum die theoretische Regularisierte W_β^{th} mit den numerischen Ergebnissen W_β, wobei die vorgegebene Funktion, wie bisher, an beliebig vielen Stellen in Form von `double`-Zahlen vorlagen. Die mit den Kreisen „$\bigcirc$" dargestellten Ergebnisse wurden mit einem „doppelt genau" bekannten Kern Φ_β (double) berechnet, die mit den Quadraten „$\square$" symbolisierten mit einem, wie bereits bei den bisherigen Ergebnissen, durch `MP`-Zahlen dargestellten Kern Φ_β (`MP`), wobei die numerischen Algorithmen dann wie oben dementsprechend ebenso auf `MP`-Zahlen basieren. Wir wollen nicht unerwähnt lassen, daß wir exemplarisch nur die Ergebnisse der Regularisierung (10.3) der Imaginärteilintegralgleichung wiedergegeben haben, da die Ergebnisse für die Realteil- und die phänomenologische Integralgleichung völlig analog zu den hier dargestellten sind, mit

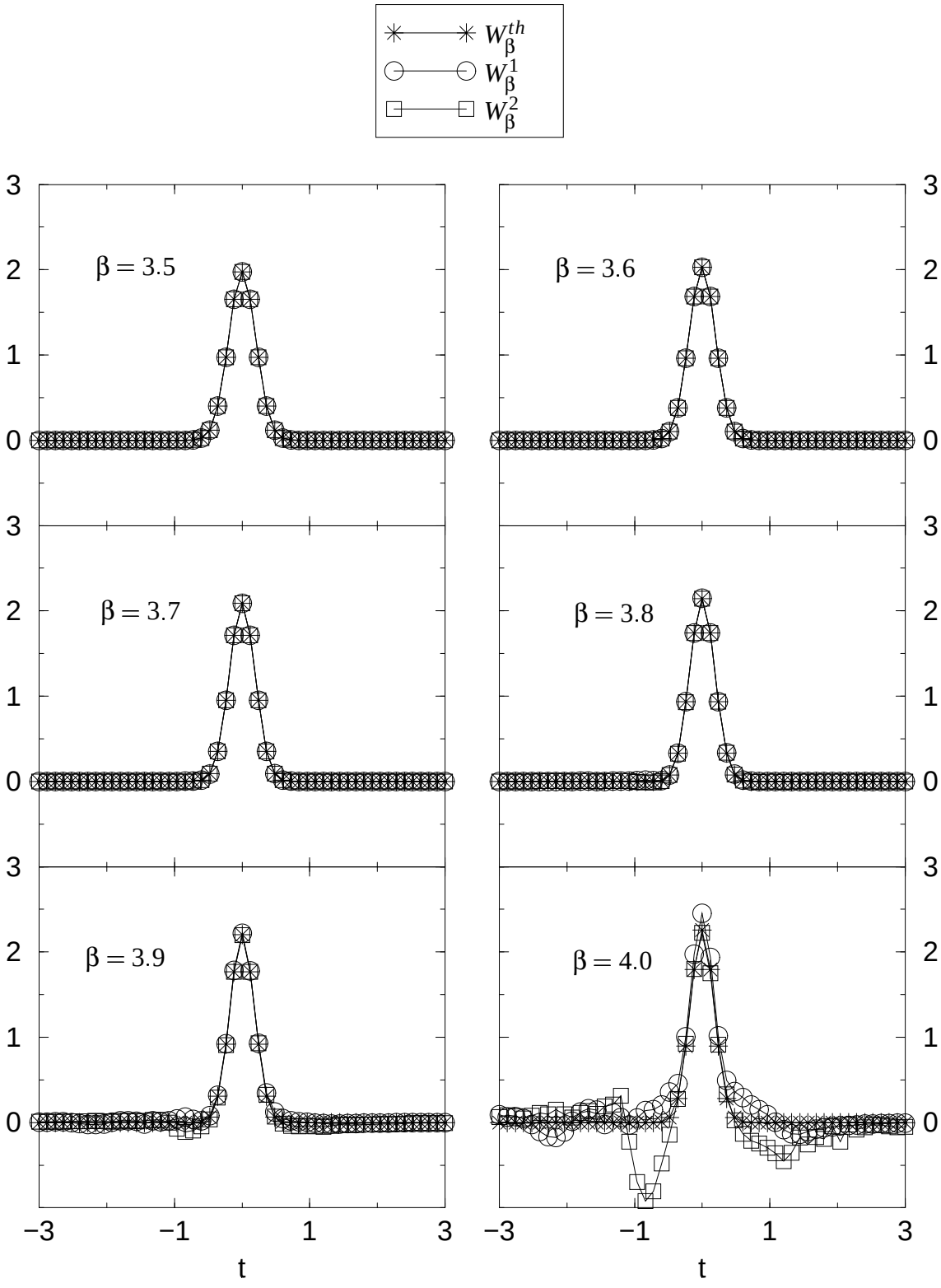

Abbildung 10.7: Zusammenbruch der Real- und Imaginärteilglechungen bei `double`-Zahlen; $3.5 \leq \beta \leq 4.0$

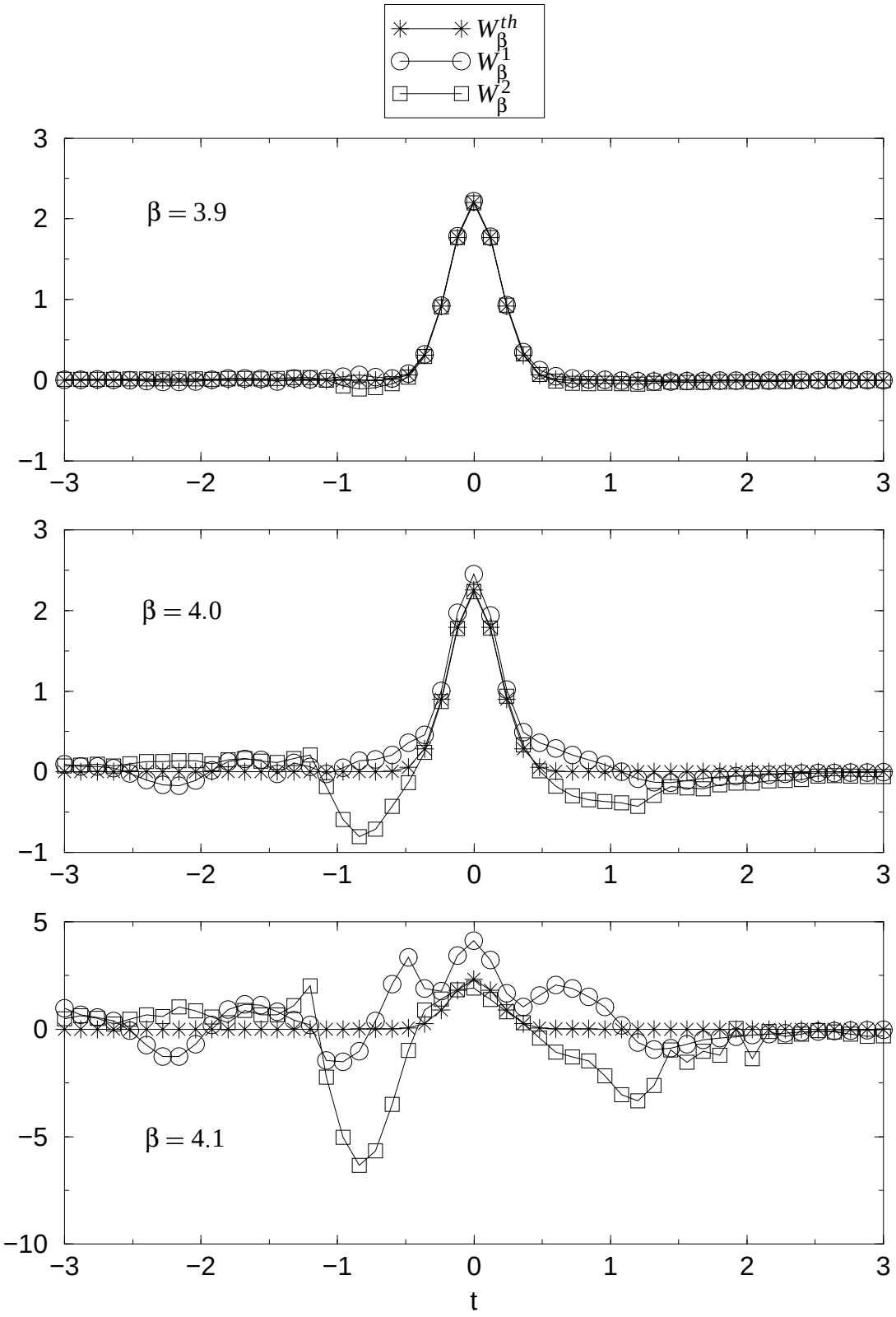

Abbildung 10.8: Zusammenbruch der Real- und Imaginärteilgleichungen bei `double`-Zahlen; $3.9 \leq \beta \leq 4.1$

Ausnahme des Parameterbereichs[50] bei der phänomenologischen.

Bei $\beta = 3.9$ sind die oszillatorischen Anteile mit den durch `double`-Zahlen dargestellten Kern bereits deutlich sichbar, wohingegen die dazu korrespondierenden Ergebnisse mit den „`MP`-Kern“ noch keine derartigen Anteile aufweisen. Besonders deutlich ist die Stabilisierung durch die `MP`-Zahlen jedoch bei $\beta = 4.0$: bei den rein auf `double`-Zahlen basierenden Ergebnis dominieren hier bereits die Oszillationen absolut, Informationen über die gesuchte Dichte können hier nicht mehr abgelesen werden, wohingegen jene Anteile bei den mit dem „`MP`-Kern“ erzielten Ergebnissen noch verhältnismäßig gering sind; hier können wir noch einige Informationen über die Dichte ableiten. Obwohl wir bereits an der vorangegangenen Abbildung 10.8 abgelesen haben, daß bei den „`MP`-Kernen“ die Numerik dann doch bereits bei $\beta = 4.1$ endgültig zusammenbricht, können wir als Fazit ziehen, daß die Verwendung der `MP`-Zahlen nichtsdestotrotz einen Vorteil, in Form einer mitunter auch nur kurz tragenden stabilisierenden Wirkung, gegenüber der Verwendung (reiner) `double`-Zahlen hat.

Nachdem wir uns nun mit dem Zusammenbruch der Numerik bei der Bereitstellung der Daten durch `double`-Zahlen und der, zumindest prinzipiellen, stabilisierenden Eigenschaft der `MP`-Algorithmen respektive -Zahlen beschäftigt haben, wollen wir uns jetzt sozusagen der grundsätzlichen numerischen Anwendbarkeit der durch die Gleichungen (10.1) bis (10.3), respektive jene auf t transformierten und somit in die allgemeine Form (10.5) gebrachten, gegebenen regularisierten Lösungen zuwenden. Wir stellen uns, mit anderen Worten, also die Frage, ob die Darstellung der Regularisierten durch stabilisierende Kerne, insbesondere mit den hier explizit angegebenen Kernen[51] (9.10), (9.15) und (9.16), für eine praktische Anwendung im den Sinne überhaupt geeignet sind, daß auch numerisch tatsächlich für $\gamma \to 0$ ($\beta \to \infty$) der Limes $W_\beta \to W$ gilt. Dabei müssen wir natürlich, entsprechen den Ausführungen am Anfang des Abschnitts 10.4, die prinzipielle Fehlerlosigkeit der Daten voraussetzen, ausgenommen der intrinsischen numerischen Fehler aufgrund der endlichen numerischen Darstellbarkeit und endlichen Rechenzeit. Konkret bedeutet dieses, daß wir jetzt nicht nur die Kerne $\hat{\Phi}_\beta^{1,2}$, sondern auch die vorgegebenen Daten $\hat{E}_{1,2}^+$ durch `MP`-Zahlen darstellen - die Algorithmen zur Integration sind selbstverständlich entsprechend auf `MP`-Routinen adaptiert[52] - und jene Daten wiederum als quasi kontinuierlich bekannt voraussetzen.

Die Abbildung 10.10 auf Seite 241 zeigt jetzt die Ergebnisse der so numerisch integrierten Regularisierten (10.6) des komplexwertigen phänomenologischen Ansatzes. Ebenso wie bereits in den Abbildungen 10.5 und 10.6 haben wir hier sowohl $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ als auch $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ wiedergegeben[53]. Die interne Präzision der `MP`-Zahlen betrug bei diesen Ergebnissen `mpipl` = 100, also den standardmäßigen Wert[54].

Bis $\beta = 3.1$ können wir keine merklichen Abweichungen zwischen W_β^{th} und W_β (visuell) erkennen; tatsächlich weichen beide Funktionen nur in den Bereichen, in denen diese gegen Null streben, bei diesen Parameterwert numerisch voneinander ab. Die Ergebnisse für $\beta = 3.2$ sind mehr der Vollständigkeit wegen angegeben: hier bricht selbst bei der Verwendung der `MP`-Zahlen die Numerik zusammen und die Funktion W_β besteht vollständig aus numerischen Rauschen. Im Gegensatz zu einem Wert von ca. $\beta = 0.62$, bei denen die auf „doppelt genaue“ Daten basierende Numerik zusammenbricht, sind wir mit $\beta = 3.1$ schon einen großen Bereich für β weitergekommen, was die Vermutung nahelegt, daß mit einer Erhöhung der Genauigkeit `mpipl` der `MP`-Zahlen der Wert für β, bei denen die Numerik dann zusammenbrechen wird, erhöht werden kann, wobei wir dabei jedoch mit einer längeren Rechenzeit rechnen müssen; dazu später mehr.

Wie schon im Fall „doppelt genauer“ Daten[55], ist hier der Imaginärteil der (numerischen) Regularisierten wiederum ein Maß für den numerischen Fehler: bei $\beta = 3.0$ ist $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ zwar nicht mehr für alle t-Werte tatsächlich Null, dieses gilt im Rahmen der Numerik für kleinere β-Werte, doch mit $\|\mathfrak{Im}\, W_{\beta=3.0}\|_\infty \leq 2\ 10^{-9}$, numerisch ermittelt, noch in einem geeigneten Akzeptansrahmen. Der entsprechende Wert bei

[50] siehe obige Ausführungen zur Abbildung 10.5f

[51] siehe Abschnitt 9.4, Seite 174ff

[52] Es sei an die Bemerkungen auf Seite 228 zur `mpfun++` Bibliothek erinnert.

[53] Es sei an die diesbezüglichen Bemerkungen auf Seite 233 verwiesen.

[54] siehe Tabelle 10.2 auf Seite 229

[55] siehe Abbildung 10.5 und 10.6

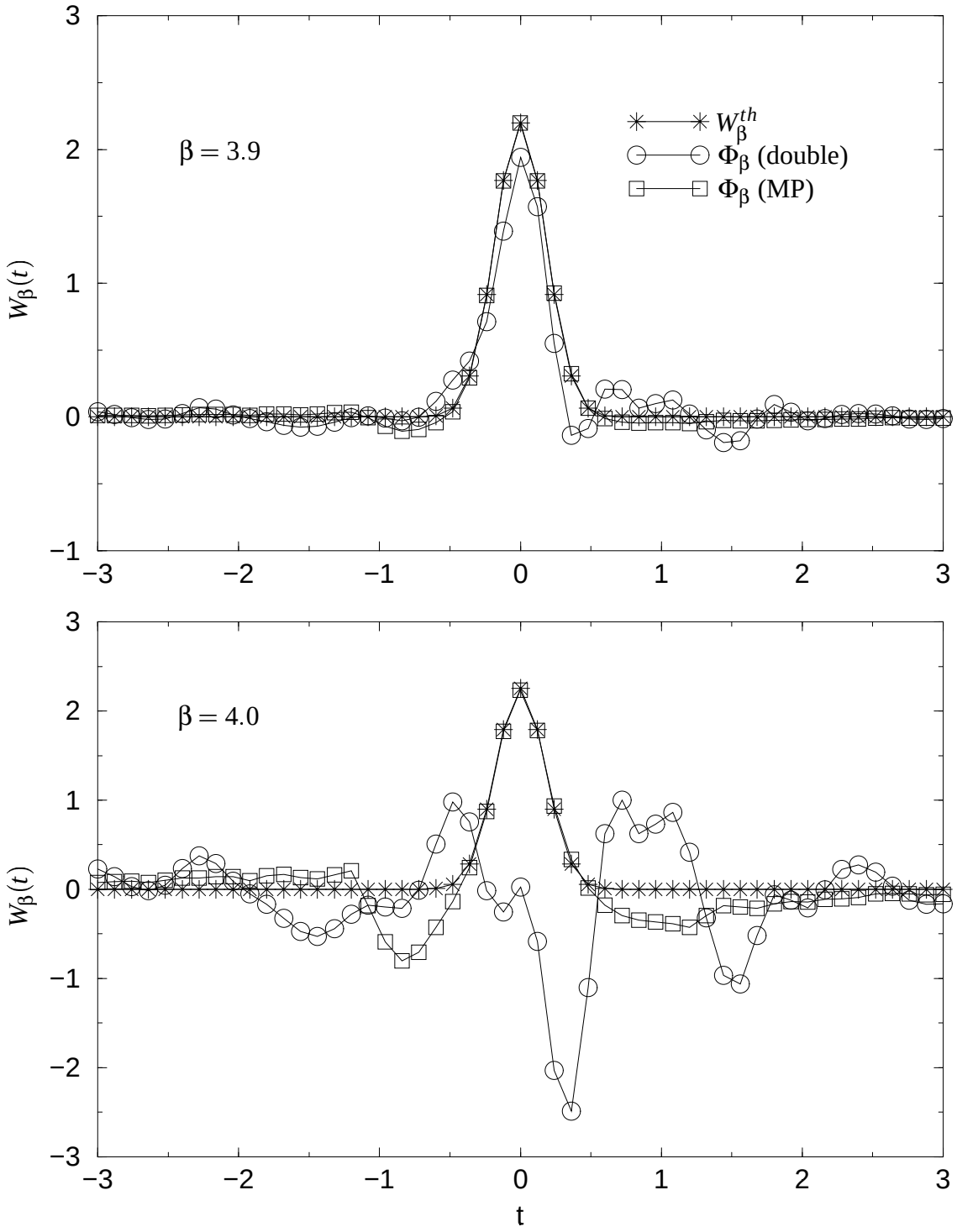

Abbildung 10.9: Stabilisierende Eigenschaft der „MP-Zahlen“

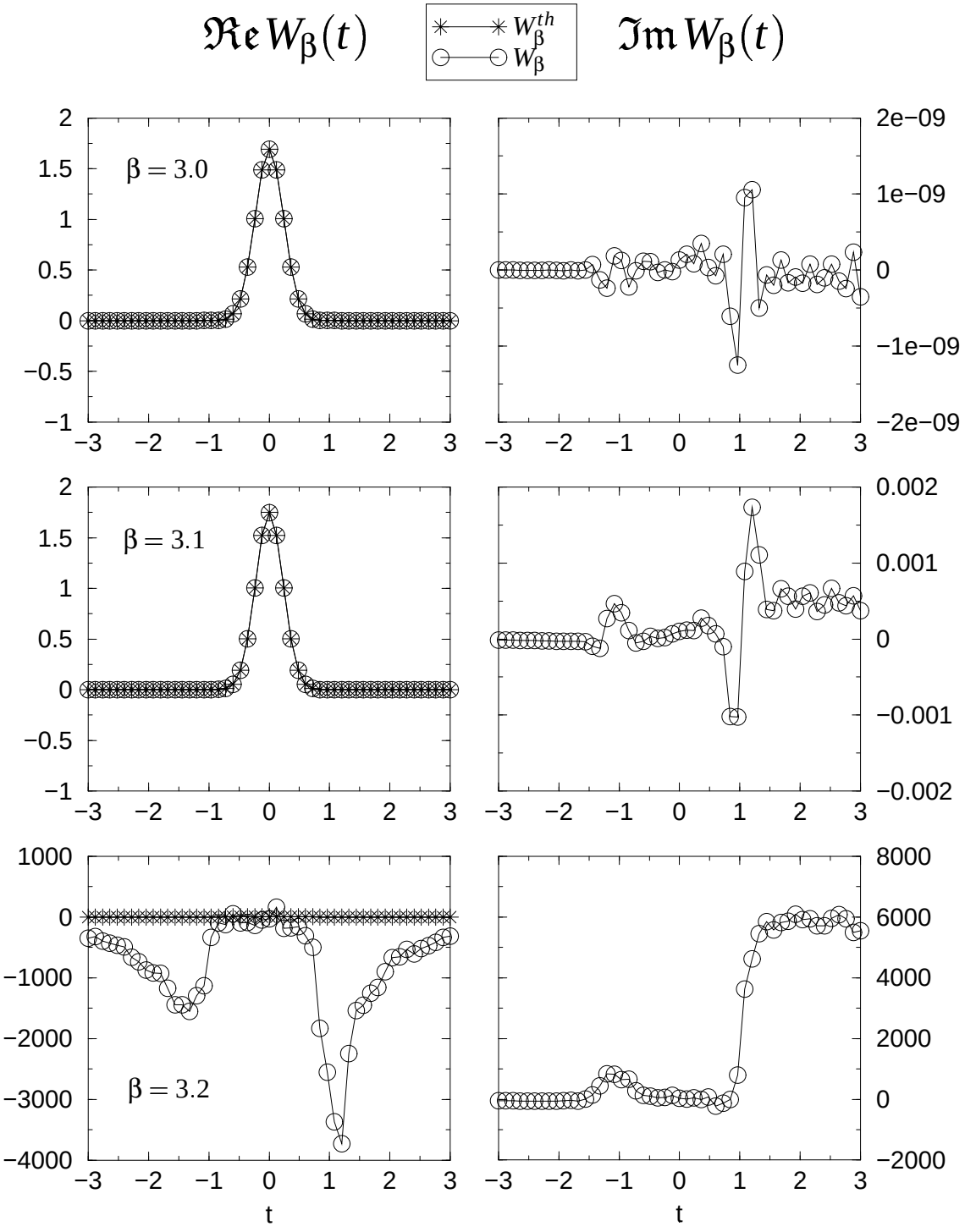

Abbildung 10.10: Phänomenologischer Ansatz: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; `mpipl` $= 100$, $3.0 \leq \beta \leq 3.2$

$\beta = 3.1$ ist übrigens $\|\mathfrak{Im}\, W_{\beta=3.1}\|_\infty \leq 0.0018$. Dieser Wert, und insbesondere der Graph $\mathfrak{Im}\, W_{\beta=3.1}$, weist bereits auf einen größer werdenden Einfluß des gesamten numerischen Fehlers hin. Desweiteren legen die Graphen von $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ insgesamt die Vermutung nahe, da jene im Gegensatz zu den auf „doppelt genaue" Daten basierende Ergebnissen keine reinen systematischen, oszillatorischen Strukturen aufweisen, daß hier der größte Einfluß im numerischen Fehler doch die endliche Zahlendarstellung sein dürfte, deren Fehler sich mit den systematischen Fehlern der numerischen Integration, die man insbesondere in den Graphen bei $\beta = 3.0$ und $\beta = 3.1$ erkennen kann, überlagert.

Um das Anwachsen des numerischen (Gesamt-)Fehlers auch quantitativ zu charakterisieren, und der Vollständigkeit halber, haben wir in der Tabelle 10.3 die in der L^2-Norm, entsprechend numerisch[56] approximiert, gemessene Differenz zwischen W_β^{th} und W_β für die in der Abbildung 10.10 wiedergegebenen Parameterwerte angegeben.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta\|_{L^2}^2$
3.0	$9.2 \cdot 10^{-19}$
3.1	$2.0 \cdot 10^{-06}$
3.2	$7.3 \cdot 10^{07}$

Tabelle 10.3: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β bei `mpipl` $= 100$

Wie anhand der eben besprochenen Abbildung auch nicht anders zu erwarten ist, liegt der Betrag der Differenz bei $\beta = 3.1$ in einem noch akzeptablen Rahmen, insbesondere wenn wir uns an den zu diesem Wert korrespondierenden Graphen von $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ erinnern, wohingegen der Wert für $\beta = 3.2$ entsprechend erwartungsgemäß weit jenseits aller akzeptablen Grenzen sich befindet.

In der Abbildung 10.11 auf der nächsten Seite sind jetzt die numerischen Ergebnisse der Auswertung[57] der Gleichungen (10.2) und (10.3), auf die Variable t substituiert, wiedergegeben, wobei wir, wie bei den vorangegangenen Abbildung, jene Ergebnisse mit der theoretischen Regularisierten (10.14) vergleichen. Wie die Legende der Abbildung 10.11 zeigt, haben wir nur die Ergebnisse der regularisierten Imaginärteilgleichung explizit angegeben. Diese sind wiederum als exemplarisch zu betrachten, und tatsächlich unterscheiden sich jetzt die Ergebnisse für die Real- von der Imaginärteilgleichung selbst im Rahmen der `MP`-Algorithmen nicht oder nur derart gering - für die maximale Abweichung der Regularisierten gilt $\|W_\beta^1 - W_\beta^2\|_\infty \leq 10^{-16}$ - daß diese im Rahmen einer Grafik visuell nicht darstellbar sind.

Konkret haben wir in der Abbildung 10.11 die Ergebnisse für die Werte des Regularisierungsparameters im Bereich $4.0 \leq \beta \leq 9.0$ angegeben, beginnen somit an der Stelle, bei der die auf „doppelt genaue" Daten basierende Regularisierung zusammenbricht[58]. Selbst bei $\beta = 9.0$ können wir noch keine merkliche Abweichung zwischen W_β^{th} und W_β ausmachen. Anhand der Abbildung 10.8 auf Seite 238, in der wir quasi den Weg des Zusammenbrechens der Numerik dokumentiert haben, erkennen wir, daß tatsächlich erst bei $\beta = 9.4$ sich numerische Fehler bemerkbar machen; bei $\beta = 9.3$ sind visuell noch keine Fehler in W_β auszumachen, sondern tatsächlich nur bei einem (numerischen) Vergleich mit W_β^{th}, wobei sich jene Fehler auf den Bereich der Dichten beschränken, in denen diese gegen Null gehen.

Wie in den vorangegangenen Abbildungen, so fällt auch hier auf, daß innerhalb einer kleinen Variation des

[56] Die L^2-Norm wurde gemäß der einfachen numerischen Quadraturformel durch

$$\left\| W_\beta^{th} - W_\beta \right\|_{L^2}^2 \approx \sum_i \Delta x_i \left| W_\beta^{th}(x_i) - W(x_i) \right|^2$$

approximiert, wobei (offensichtlich) x_i die Stellen sind, an denen W_β numerisch bestimmt worden ist und Δx_i die entsprechende Schrittweite ist; siehe [Sto99, PTVF92]. Ebenso wollen wir darauf hinweisen, daß wir in dieser, wie auch in den nachfolgenden Tabellen, tatsächlich den *quadratischen Fehler*, also $\|\cdot\|_{L^2}^2$, angegeben haben.

[57] Für die interne Genauigkeit der `MP`-Zahlen galt wiederum `mpipl` $= 100$.

[58] siehe die entsprechende Abbildung 10.7

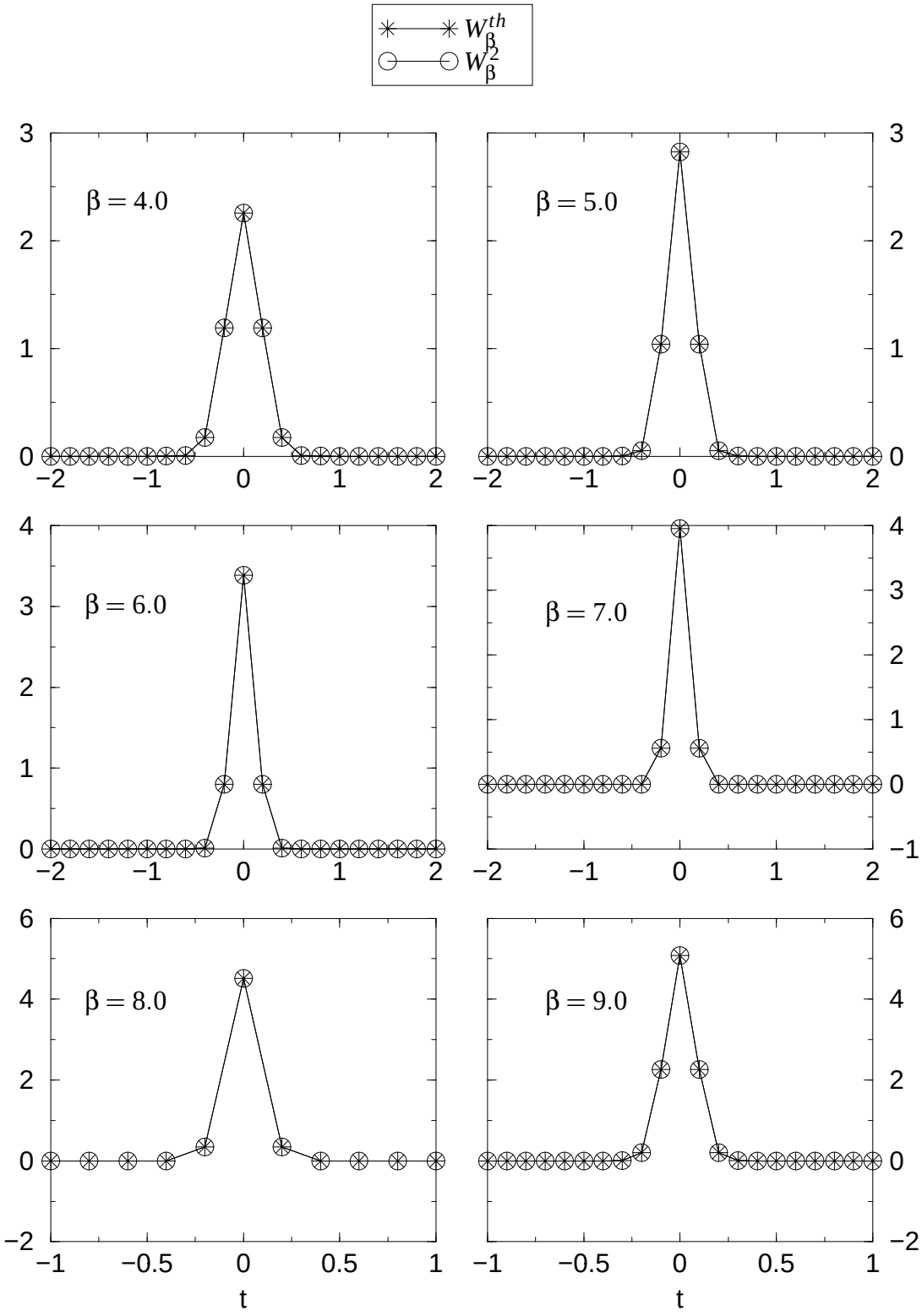

Abbildung 10.11: Real- und Imaginärteilgleichung: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; mpipl = 100, $4.0 \leq \beta \leq 9.0$

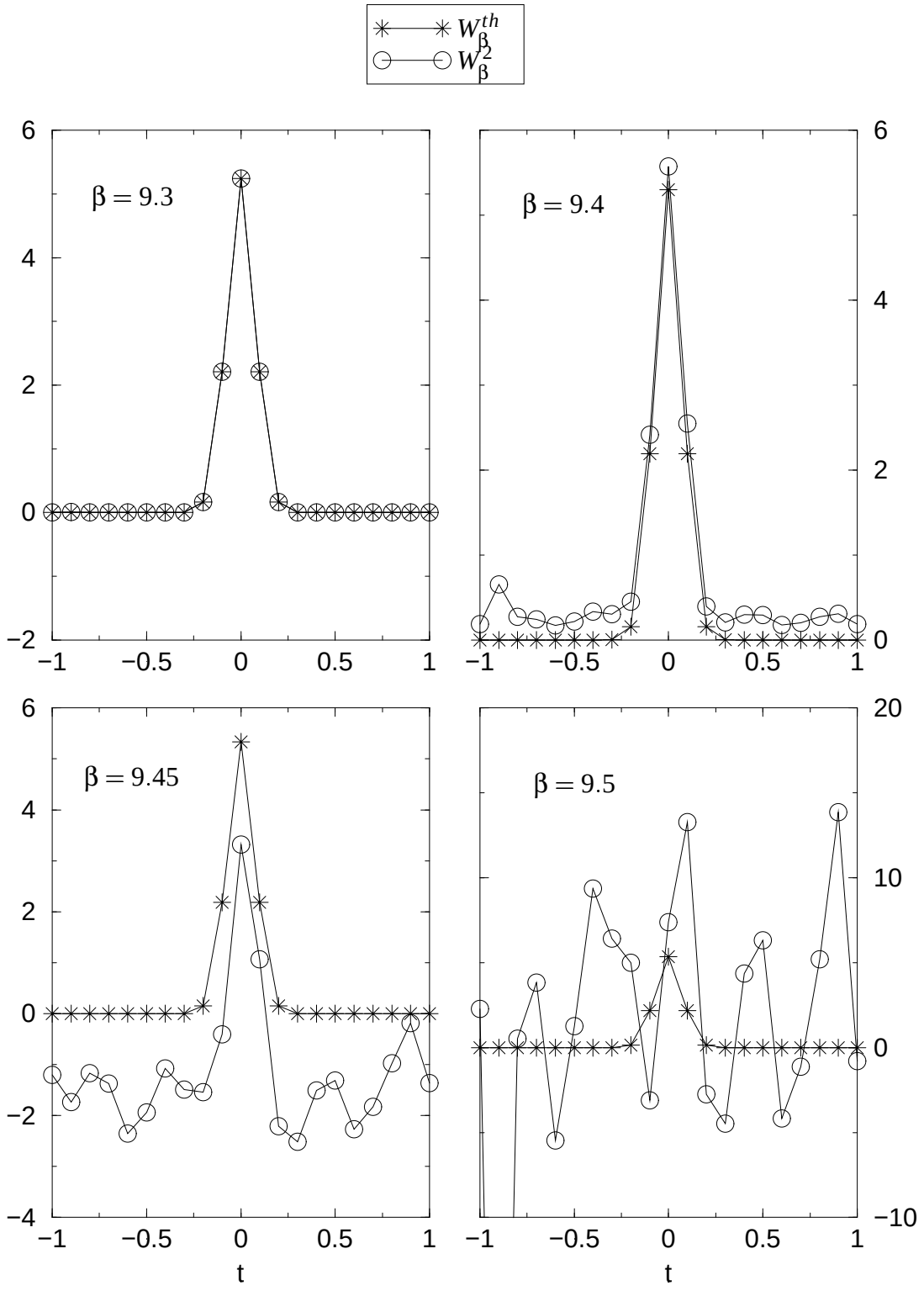

Abbildung 10.12: Real- und Imaginärteilgleichung: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; `mpipl` $= 100$, $9.3 \leq \beta \leq 9.5$

Parameters β die Fehler in der Numerik stark zunehmen: könnten wir das Ergebnis für $\beta = 9.4$ als noch gerade akzeptabel im Sinne der Möglichkeit, Informationen über die Gesuchte zu erhalten, betrachten, so ist das Ergebnis für $\beta = 9.45$, ebenso in diesem Sinne, größtenteils nicht mehr brauchbar, und das Ergebnis für $\beta = 9.5$ ist offensichtlich zu verwerfen. Die Graphen der Abbildungen 10.10 bis 10.12 sind somit, als ein (vorläufiges) Fazit, weitere Indizien für einen exponentiell divergenten Einfluß des numerischen Fehlers.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
9.3	$1.8 \cdot 10^{-05}$
9.35	0.0015
9.4	0.16
9.45	14.56
9.5	1665.55

Tabelle 10.4: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β^2 bei `mpipl` $= 100$

In der Tabelle 10.4 haben wir wiederum die in der L^2-Norm, entsprechend numerisch approximiert, gemessene Abweichung zwischen W_β^{th} und W_β^2 für den eben besprochenen Parameterbereich (Abb. 10.12) angegeben. Der Wert für $\beta = 9.3$ weißt bereits auf den beginnenden Einfluß des numerischen (Gesamt-)Fehlers hin. Insgesamt sind diese Werte, wie auch die der entsprechenden Tabelle 10.3 für die komplexwertigen Gleichung, ein weiterer, und gewissermaßen fundierterer, quantitativer Hinweis auf einen wiederum exponentiellen Einfluß des gesamtnumerischen Fehlers.

Wie wir bereits auf Seite 239 bei der Besprechung der Abbildung 10.10 bemerkt haben, werden wir durch eine Erhöhung der Genauigkeit `mpipl` der `MP`-Zahlen den Parameterbereich, in den die Numerik noch nicht zusammengebrochen ist, erhöhen können. Daß dieses tatsächlich der Fall ist, demonstrieren die Abbildungen 10.13 auf Seite 247 und 10.14 auf Seite 248, in denen Ergebnisse für die Genauigkeit `mpipl` $= 200$ dargestellt sind.

In der Abbildung 10.13 sind die Ergebnisse der Numerik der Regularisierten (10.6), also des komplexwertigen Ansatzes, für den Parameterbereich $4.3 \leq \beta \leq 4.5$ wiedergegeben, wobei hier, wie in den entsprechenden vorangegangenen Abbildungen, wiederum sowohl $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ als auch $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ des numerischen Ergebnisses aufgetragen sind. Durch die Verdopplung der Rechengenauigkeit[59] ist es uns also gelungen, die Regularisierung der `MP`-Daten jetzt bis zu $\beta \leq 4.5$ zu betreiben. Das Ergebnis bei $\beta = 4.6$ haben wir nicht mehr wiedergegeben, weil hier die Numerik bereits vollkommen zusammengebrochen ist; im betreffenden Graph dominieren die Fehleranteile.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta\|_{L^2}^2$
4.3	$1.3 \cdot 10^{-36}$
4.4	$2.0 \cdot 10^{-19}$
4.5	0.1
4.6	$7.2 \cdot 10^{16}$

Tabelle 10.5: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β bei `mpipl` $= 200$

Wie nicht anders zu erwarten, ist wiederum $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ ein Maß für den numerischen Fehler. Etwas überraschend, beim Vergleich mit den Ergebnissen in der Abbildung 10.10 bei `mpipl` $= 100$, ist jetzt aber, daß wir in jenen Graphen einen größeren Einfluß eines systematischen numerischen Fehlers gegenüber eines

[59] Tatsächlich haben wir die numerische Darstellung der Zahlen „verdoppelt“.

numerisch „stochastischen“ Fehlers, begründet durch selbstverständlich noch immer endlichen Zahlendarstellung, erkennen können. In der Abbildung 10.15 auf Seite 249 haben wir deswegen den Mittelteil des Graphen von $\mathfrak{Im}W_\beta$ bei $\beta = 4.5$ vergrößert wiedergegeben: wir können hier deutlich die Überlagerung eines systematischen und eines durch die Endlichkeit der Zahlendarstellung resultierenden „stochastischen“ numerischen Fehlers beobachten, d.h. beide Fehleranteile sind hier präsent.

In der Tabelle 10.5 ist nun (wiederum) die in der L^2-Norm, natürlich entsprechend numerisch approximiert, gemessene Abweichung der Funktionen W_β^{th} und W_β voneinander aufgelistet. Wir haben dort auch die Abweichung für $\beta = 4.6$ angegeben, die darauf hinweist, daß der entsprechende Graph tatsächlich durch den Fehlereinfluß dominiert sein wird. Die Werte bestätigen wiederum, ebenso wie vorangegangenen, den Hinweis des exponentiell anwachsenden Einflusses des numerischen Fehlers - bei einer vergleichsweisen minimalen Variation $\Delta\beta = 0.1$ des Regularisierungsparameters.

Diesen Teil des Abschnittes abschließend, wenden wir uns noch kurz der Diskussion der Abbildung 10.14 auf Seite 248 zu, in der die entsprechenden Ergebnisse der Regularisierung der Integralgleichung des Imaginärteils[60] für den Parameterbereich $13.0 \leq \beta \leq 13.6$ wiedergegeben sind.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
13.0	$9.7 \cdot 10^{-32}$
13.4	$1.2 \cdot 10^{-08}$
13.5	0.007
13.6	3506.05
13.7	$1.4 \cdot 10^{09}$

Tabelle 10.6: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β^2 bei `mpipl` $= 200$

Die Tabelle 10.6 listet wieder die in der L^2-Norm gemessene Abweichung von W_β zu W_β^{th} in jenem Parameterbereich auf, wobei wir, entgegen der Abbildung, noch zusätzlich den Wert bei $\beta = 13.7$ angegeben haben.

Sowohl aus der Abbildung wie auch aus der Tabelle können wir ablesen, daß wir bei einer Genauigkeit von `mpipl` $= 200$ den Regularisierungsparameter bis zum Zusammenbrechen der Numerik bis auf $\beta = 13.5$ erhöhen können, wobei wir dann einen quadratischen Fehler von 0.007 gegenüber der theoretischen Regularisierten erhalten. Die Abbildung 10.14 bestätigt die bisherigen Beobachtungen zum Verhalten der Graphen, insbesondere des stark anwachsenden Fehlereinflusses bei einer minimalen Variation $\Delta\beta = 0.1$ des Parameters. Es fällt jedoch zusätzlich auf, und dieses können wir ebenso (implizit) an der Abbildung 10.13 beobachten, daß das Zusammenbrechen der Numerik, also der Fehlereinfluß, bei Variation von β stärker ansteigt respektive zunimmt als bei den zu `mpipl` $= 100$ entsprechend korrespondierenden Ergebnissen[61], was letztendlich ein weiterer Grund für die Hypothese eines exponentiellen Einflusses des (gesamten) numerischen Fehlers darstellt. Es ist übrigens müßig zu erwähnen, daß die Werte des quadratischen Fehlers jene Hypothese zusätzlich untermauern.

[60] Es gelten hier die entsprechenden Bemerkungen auf Seite 242 über die Wiedergabe der Ergebnisse für die Gleichungen (10.2) und (10.3) wie zur Abb. 10.11.

[61] siehe Abb. 10.10f und 10.11f

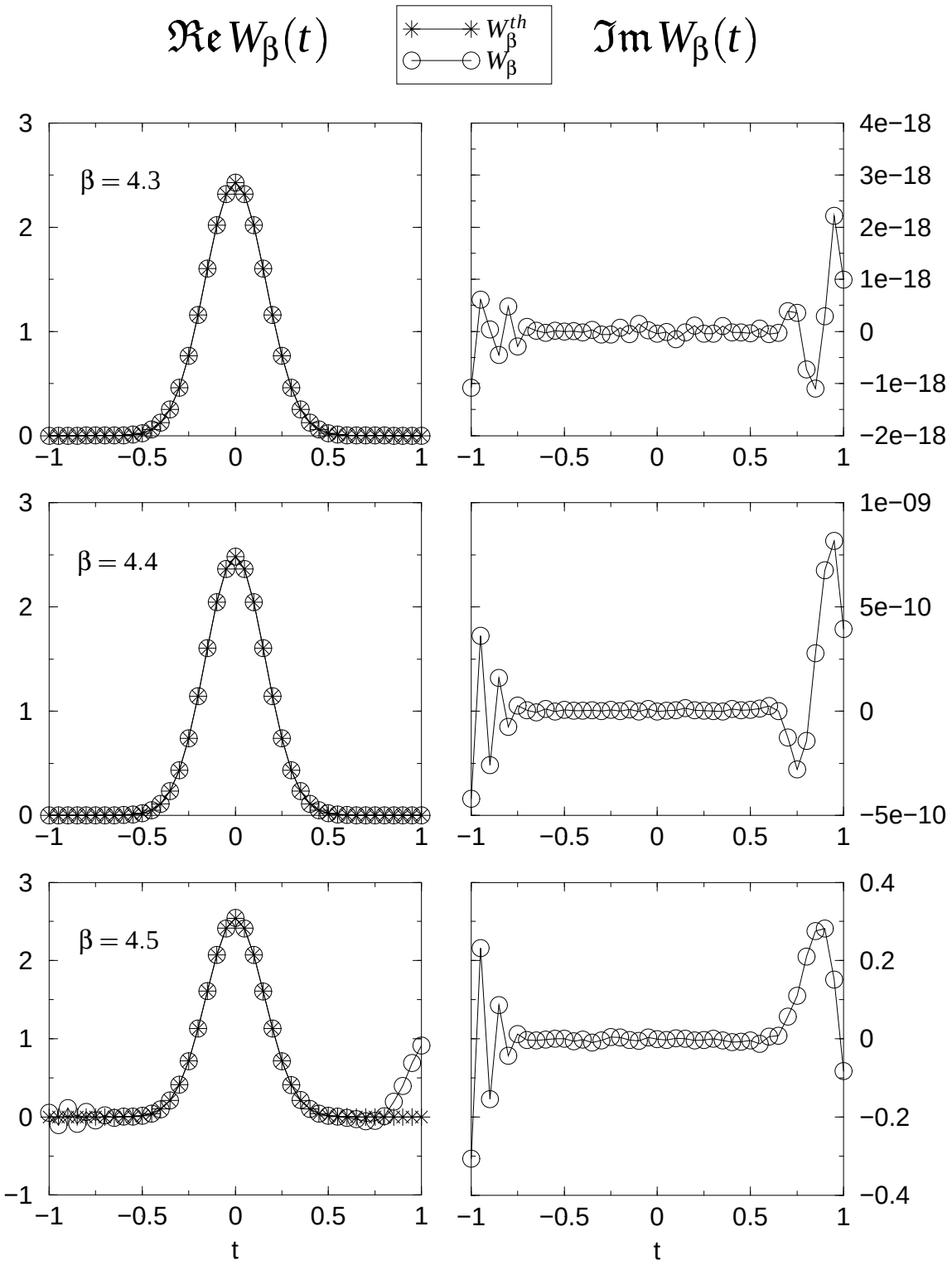

Abbildung 10.13: Phänomenologischer Ansatz: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; mpipl = 200, $4.3 \leq \beta \leq 4.5$

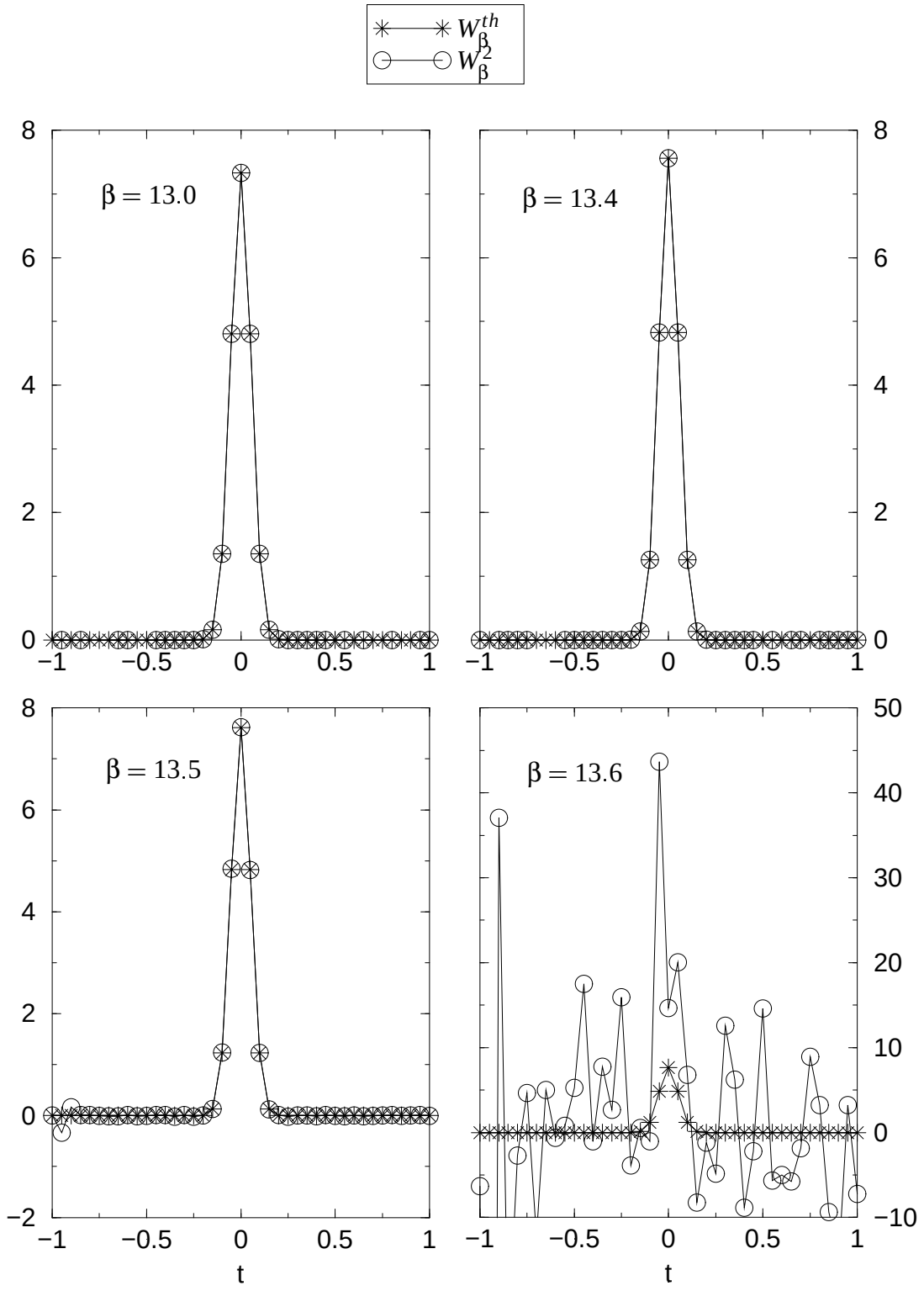

Abbildung 10.14: Real- und Imaginärteilgleichung: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; `mpipl` $= 200$, $13.0 \leq \beta \leq 13.6$

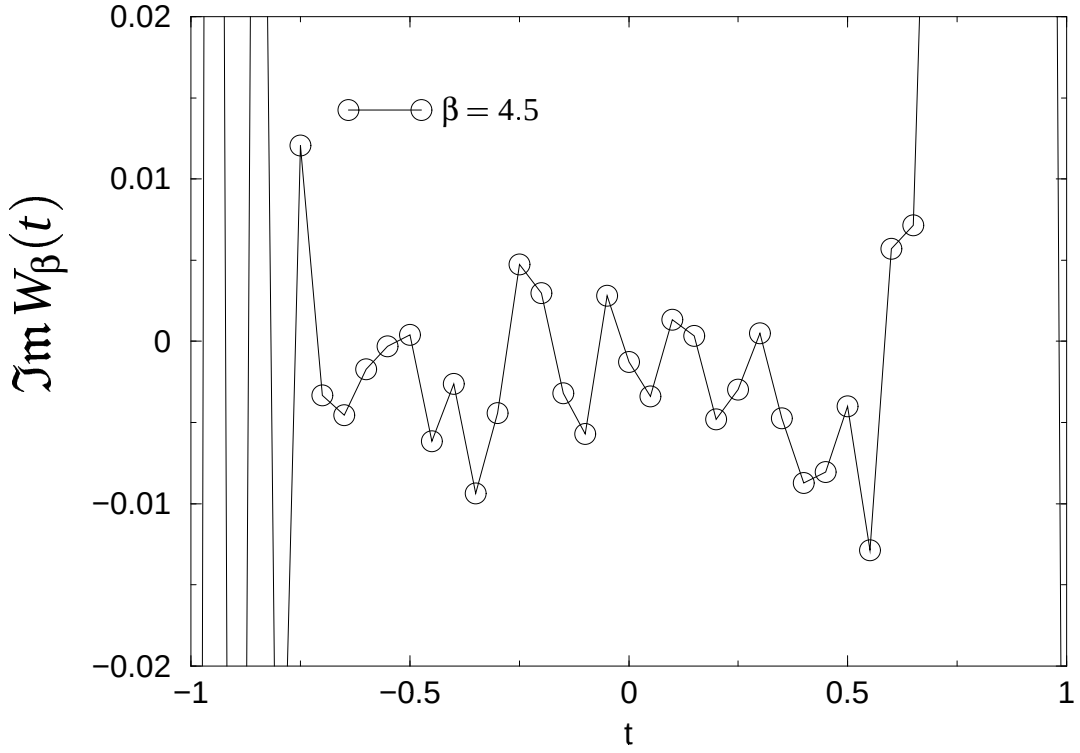

Abbildung 10.15: $\Im\mathrm{m}W_\beta$; `mpipl` $= 200$

10.4.2 Das Cole-Davidson Modell

Nach dem Drudemodell, wollen wir uns nun dem *Cole-Davidson Modell* zuwenden, dessen Dichte[62] w_{CD} durch

$$w_{CD}(\tau) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi} \left(\frac{\tau}{\tau_{CD}}\right)^{\alpha} \left(\frac{1}{\tau_{CD}-\tau}\right)^{\alpha} & \text{für} \quad 0 < \frac{\tau}{\tau_{CD}} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < \frac{\tau}{\tau_{CD}} < \infty \end{cases} , \tag{10.15}$$

mit $0 < \alpha \leq 1$, gegeben ist, und die dazu korrespondierende Dichte W_{CD} ist dann[63] durch

$$W_{CD}(t) = \begin{cases} \frac{\sin\{\pi\alpha\}}{\pi}\, e^{-\alpha(t-t_{CD})} \left(1 - e^{-(t-t_{CD})}\right)^{-\alpha} & \text{für} \quad 0 < e^{-(t-t_{CD})} < 1 \\ 0 & \text{für} \quad 1 < e^{-(t-t_{CD})} < \infty \end{cases} , \tag{10.16}$$

gegeben, wobei $\tau_{CD} = e^{-t_{CD}}$ gesetzt worden ist. Wir erkennen am Ausdruck (10.15), daß die Dichte w_{CD} gegenüber p_{CD} zwar nicht mehr die schwache Divergenz für $\tau \to 0$ aufweist, aber noch die ebenso schwache für $\tau \to \tau_{CD}$, welche sich (selbstverständlich) bis in die Dichte W_{CD} fortpflanzt, d.h. es gilt[64]

$$W_{CD}(t) = O\left(\left(1 - e^{-(t-t_{CD})}\right)^{-\alpha}\right) \quad \text{für } t \to t_{CD} \quad (t \geq t_{CD}) \quad . \tag{10.17}$$

Wie wir bereits im Abschnitt 9.5.2 auf der Seite 206 bemerkt haben, ist gerade dieses asymptotische Verhalten und der Umstand, daß die Cole-Davidson Dichte zur Interpretation von Meßdaten verwendet[65] wird,

[62] siehe Abschnitt 3.3 und [DC51]

[63] siehe auch Abschnitt 9.5.2, Gl. (9.244) auf Seite 212

[64] siehe auch Abschnitt 3.6, Gl. 3.73 auf Seite 45

[65] siehe wiederum z.B. [Bec88, DC51]

der Grund auch jene Dichte zum Testen der Numerik heranzuziehen.

Wie bei der Behandlung der Drudedichte im vorangegangenen Abschnitt 10.4.2, werden wir zuerst das Zusammenbrechen den Numerik bei der Bereitstellung der Daten durch den Datentyp „doppelt genau“ untersuchen, wobei, den obigen Untersuchungen entsprechend[66], der regularisierenden Kerne und die Integrationsroutine durch `MP`-Zahlen dargestellt worden ist.

Betrachten wir wieder zuerst die Regularisierung (10.6) der komplexwertigen Integralgleichung. Wir werden uns dabei auf $\alpha = 0.5$ als Wert des Modellparameter des Cole-Davidson Modells beschränken, als quasi exemplarisch für den gesamten Parameterbereich von α, denn tatsächlich weichen die Ergebnisse bezüglich der Werte des Regularisierungsparameters β, an denen die Numerik zusammenbricht, bei einer Variation des Modellparameters α nur derart voneinander ab, daß jene sich erst ab der zweiten Nachkommastelle bemerkbar machen und so praktisch marginal und irrelevant sein dürften.

Bevor wir uns die Graphen ansehen, sei auf die Tabelle 10.7 verwiesen, in der wir diesmal die Abweichung der Regularisierten $W\beta$ von der Cole-Davidson Dichte (10.16) aufgelistet ist, wobei jene wieder in der, numerisch approximierten[67], L^2-Norm gemessen worden ist.

β	$\|W_{CD} - W_\beta\|^2_{L^2}$
1.0	0.078
1.1	0.090
1.2	0.092
1.3	0.093
1.35	0.548
1.4	170.77

Tabelle 10.7: Differenz zwischen W_{CD} und W_β bei „`double`-Daten“; $\alpha = 0.5$

Wie schon bei den Untersuchungen zur Drudedichte, so fällt der sprunghafte Anstieg des quadratischen Fehlers bei einer kleinen Variation des Parameters β auf, insbesondere bei dem Übergang von $\beta = 1.35$ zu $\beta = 1.4$, bei der der quadratische Fehler von 0.548 auf 170.77 ansteigt, wodurch wieder ein exponentiell steigender Fehlereinfluß nahegelegt wird.

Dementsprechend sehen die Graphen der regularisierten W_β aus, die wir in der Abbildung 10.16 auf der nächsten Seite, in der wir den Parameterbereich $1.0 \leq \beta \leq 1.2$ wiedergegeben haben, und der Abbildung 10.17 auf Seite 252, in der der Bereich $1.3 \leq \beta \leq 1.4$ wiedergegeben ist, abgebildet haben. Ebenso wie in den entsprechenden Abbildungen des vorangegangenen Abschnitts, haben wir in der linken Spalte der Abbildungen $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ und in der rechten $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ wiedergegeben. Der Imaginärteil der regularisierten W_β ist offensichtlich wieder ein Maß für den gesamten numerischen Fehler. Erwartungsgemäß wächst der (absolut) Betrag von $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ mit steigendem β, und wir können neben oszillatorischen Anteile, die auf einen systematischen numerischen Fehler hindeuten, ebenso eine Überlagerung mit stochastischartigen Fehleranteilen erkennen. Die letzteren können wir wieder dadurch erklären, daß bei der Konversion der `double`-Zahlen zu `MP`-Zahlen die letzten Ziffern quasi zufällig aufgefüllt werden.

Der Einfluß eines systematischen numerischen Fehlers können wir insbesondere noch bei $\beta = 1.3$ in der Abbildung 10.17 erkennen: in den Graphen der Regularisierten sind deutlich oszillatorische Schwebungen in den Bereich, in den W_{CD} identisch Null ist, zu erkennen. Diese Schwebungen und der „stochastische“ numerische Fehler nehmen bereits bei einer Variation von $\Delta\beta = 0.05$ deutlich zu. Aus der regularisierte Lösung bei $\beta = 1.35$ kann man aufgrund des stark angewachsenem Fehlereinflusses nur noch mit gutem Willen auf die zugrundeliegende Dichte W_{CD} schließen, ganz im Gegensatz bei dem Wert $\beta = 1.3$, wo wir trotzt des Beginnens des Anwachsen des Fehlers noch die reine, mit einem Gaußfilter gewonnene theoreti-

[66] siehe auch die Bemerkungen auf Seite 233

[67] siehe Fußnote 56 auf Seite 242

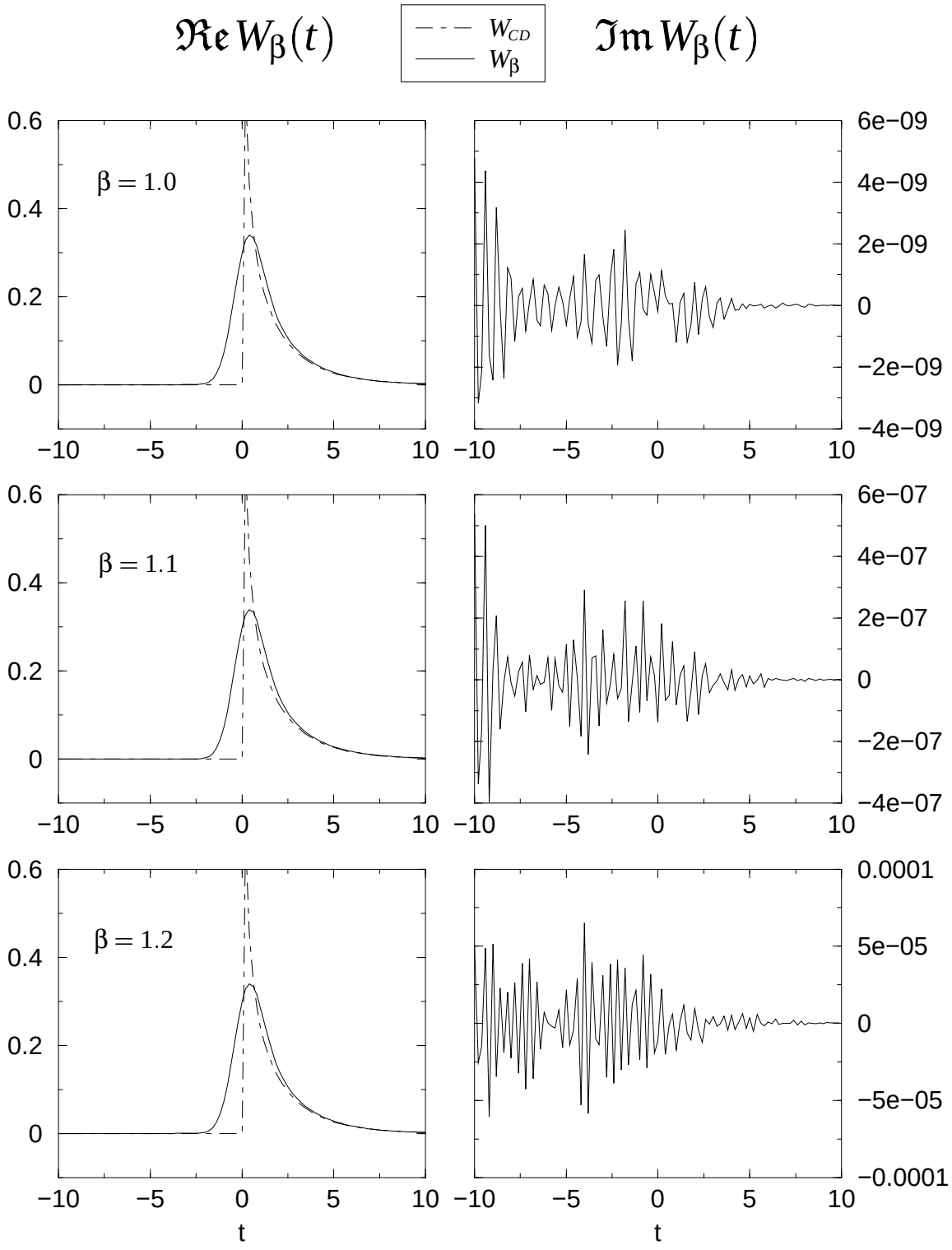

Abbildung 10.16: W_{CD}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $1.0 \leq \beta \leq 1.2$

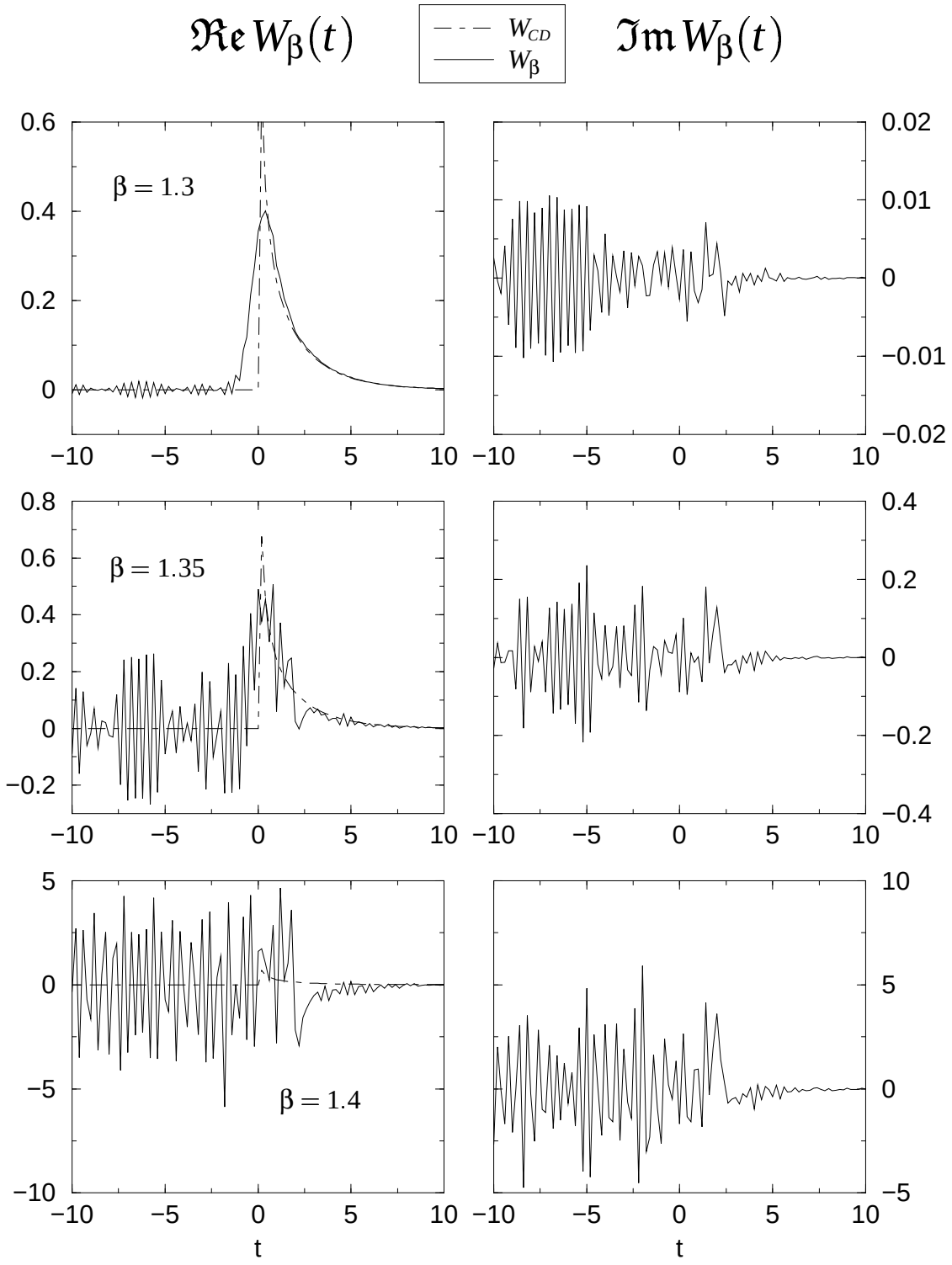

Abbildung 10.17: W_{CD}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $1.3 \leq \beta \leq 1.4$

sche Regularisierte[68] erkennen können.

Wenden wir uns jetzt der auf „double-Daten“ basierenden, wiederum in der Form (10.5) dargestellten, Regularisierung der Realteil- und Imaginärteilintegralgleichung zu. Generell sei jetzt - wie in den vorangegangenen Abschnitt - mit W_β^1 die regularisierte der Realteil- und mit W_β^2 die der Imaginärteilgleichung bezeichnet.

β	$\|W_{CD} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{CD} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
3.0	0.070	0.070
3.5	0.072	0.072
3.8	0.073	0.073
3.9	0.118	0.076
4.0	2.481	0.222
4.1	138.0	7.934

Tabelle 10.8: Differenz zwischen W_{CD} und jeweils W_β^1 und W_β^2 bei „double-Daten“; $\alpha = 0.5$

In der Tabelle 10.8 haben wir wieder die in der numerisch approximierten L^2-Norm gemessenen Abweichung der regularisierten von der exakten Lösung aufgelistet. Die Fehler verhalten sich jetzt genau so, wie wir es aufgrund der vorangegangenen Untersuchungen erwarten: über einen weiten Bereich steigt dieser bei einer kleinen Variation des Regularisierungsparameters geringfügig an bis zu dem Wert, ab dem der Einfluß des gesamten numerischen Fehlers dominant wird; anschließend steigt der Fehler bei einer kleinen Variation, hier konkret von $\Delta\beta = 0.1$, drastisch an - was wieder die Vermutung des exponentiellen Einflusses des numerischen Fehlers bestärkt.

Wenden wir uns jetzt einem anderen Punkt zu, denn wie bereits bei der entsprechenden Untersuchung des Zusammenbrechens der Regularisierung im Modellfall der Deltadichte[69], so können wir schon anhand der Tabelle 10.8 ein leicht graduell unterschiedliches Verhalten bei der Regularisierung der Realteil- und der Imaginärteilintegralgleichung beobachten: die Regularisierung des Imaginärteils bricht graduell später zusammen als die des Realteils, genauer nimmt der Fehlereinfluß entsprechend graduell später in der beobachteten drastischen Form zu. Visuell bestätigt wird diese Beobachtung in der Abbildung 10.18 auf der nächsten Seite, in der wir den Bereich $3.0 \leq \beta 3.8$, und in der Abbildung 10.19 auf Seite 255, in der wir den Parameterbereich $3.9 \leq \beta \leq 4.1$ wiedergegeben haben. In der linken Spalte jener beiden Abbildungen haben wir W_β^1 und in der rechten W_β^2, jeweils verglichen mit der exakten Dichte W_{CD} für $\alpha = 0.5$, abgebildet. Wir erkennen in der Abbildung 10.18 in der regularisierten W_β^1 bei $\beta = 3.8$ bereits die ersten oszillatorischen Überlagerungen, die wir in W_β^2 zwar bei diesem Parameterwert bereits erahnen können, doch der in dieser Deutlichkeit erst bei $\beta = 3.9$, in der Abbildung 10.19, zu beobachten ist, bei dem in den Graphen von W_β^1 die Oszillationen bereits deutlich an Dominanz gegenüber den Filterfehler gewonnen haben. Bei $\beta = 4.0$ wird der Graph von W_β^1 praktisch vollkommen von den numerischen Fehler dominiert, wobei wir im Gegensatz dazu am entsprechenden Graphen von W_β^2 die zugrundeliegende Dichte W_{CD}, genauer deren theoretische reine Regularisierte, noch erahnen können. Ab $\beta = 4.1$ sind die Graphen beider Regularisierten vollkommen von den numerischen Fehler dominiert.

Desweiteren können wir, was nicht unerwähnt bleiben soll, in den Graphen der Abbildungen 10.18 und 10.19, wie bei der komplexwertigen Integralgleichung, die Überlagerung eines systematischen numerischen Fehlers, der sich durch oszillatorische Schwebungen bemerkbar macht, und eines numerischen „stochastischen“ Fehlers, der wieder durch die Konversion der double- zu MP-Zahlen erklärbar ist, erkennen.

Das Fazit der bisherigen Untersuchungen dieses Abschnittes ist also:

[68] siehe auch Abschnitt 9.5.2, Seite 9.244

[69] siehe Abb. 10.7f

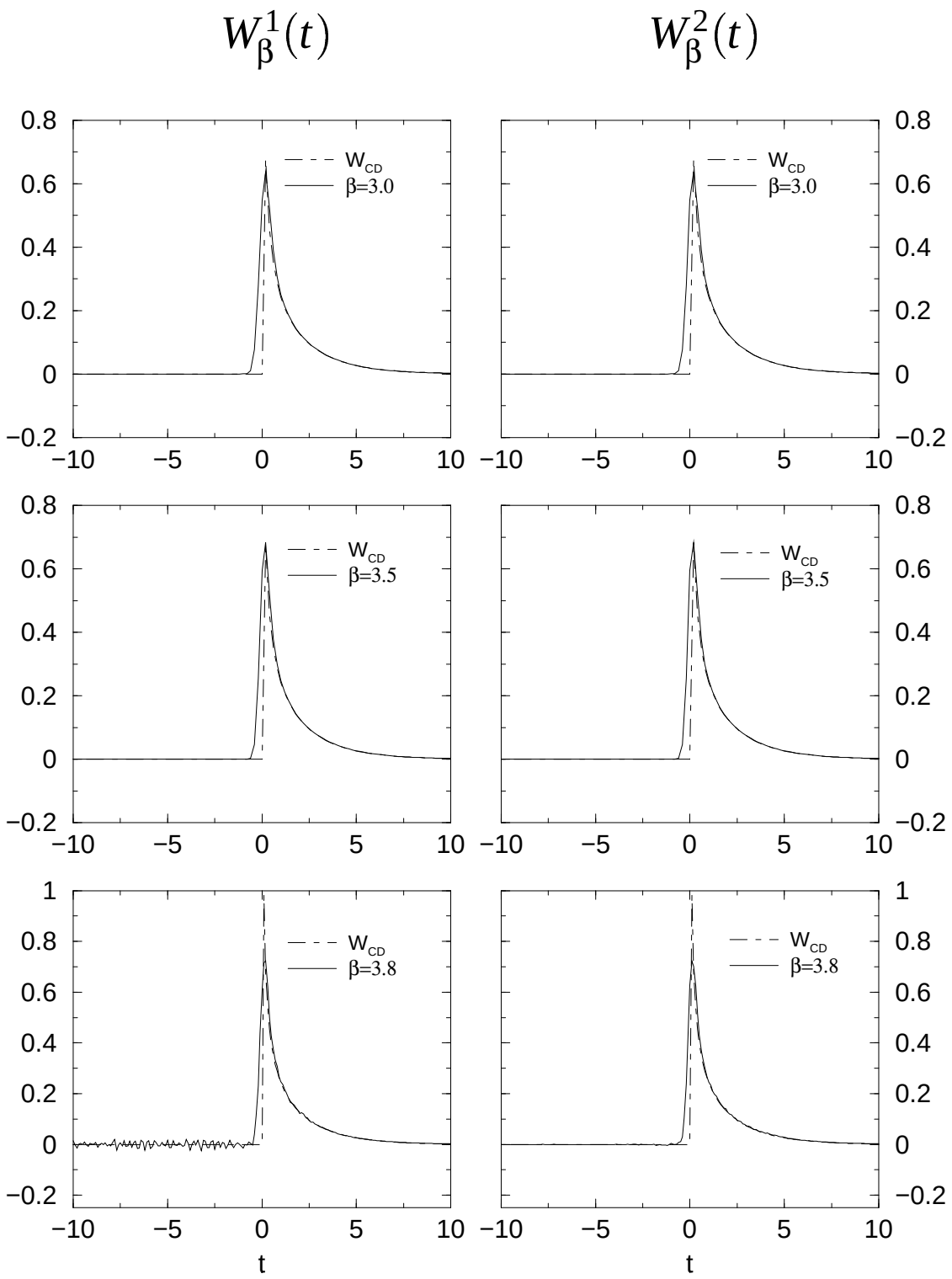

Abbildung 10.18: W_{CD}: Zusammenbruch der der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $3.0 \leq \beta \leq 3.8$

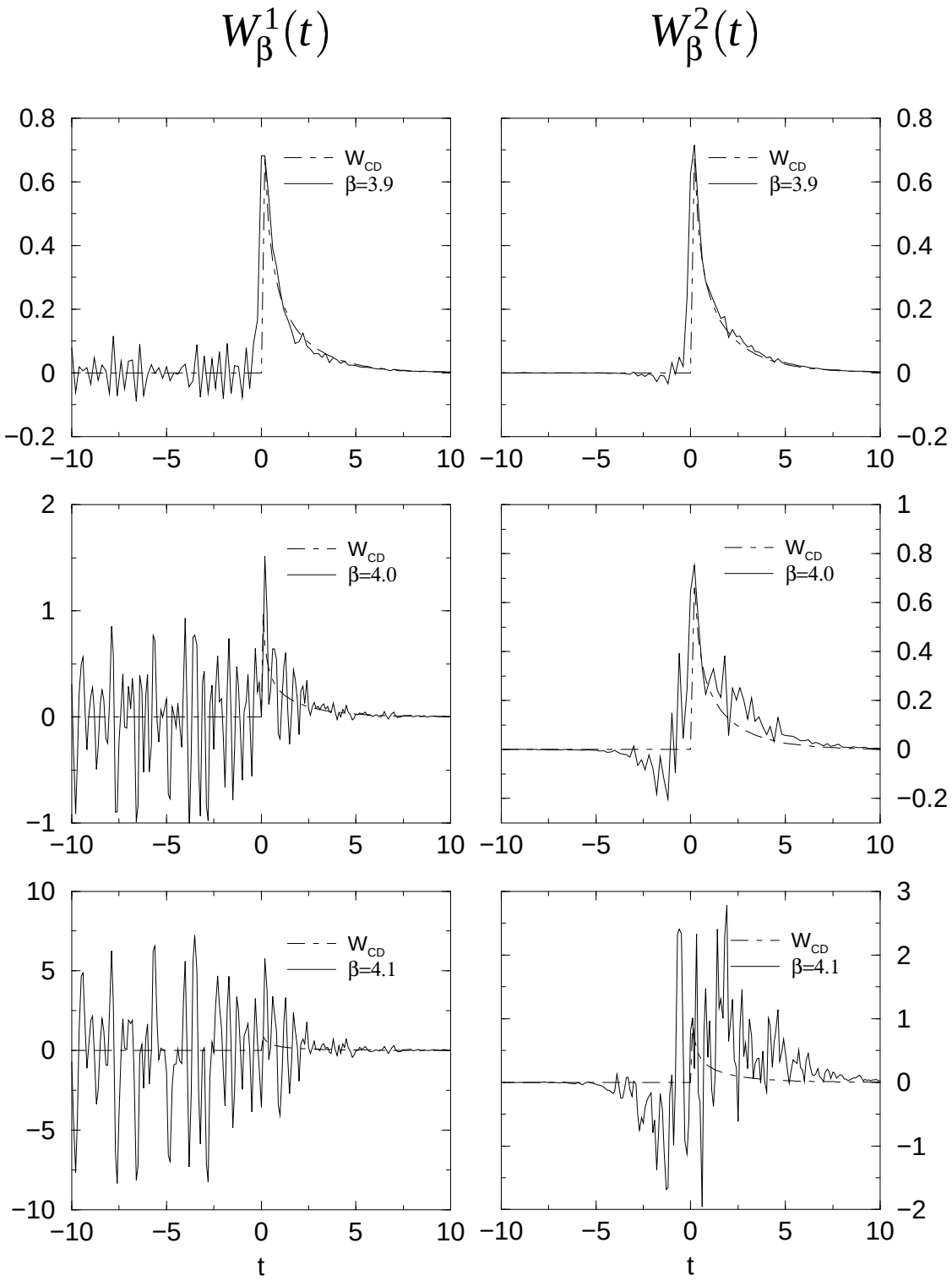

Abbildung 10.19: W_{CD}: Zusammenbruch der der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $3.9 \leq \beta \leq 4.1$

Regularisieren wir auf der Basis „doppelt genauer“ Daten, so bricht im Fall des Cole-Davidson Modells[70] die Numerik für den komplexwertigen, phänomenologischen Ansatz nach[71] $\beta = 1.3$, die Numerik für die Realteilintegralgleichung nach $\beta = 3.8$ und die der Imaginärteilgleichung nach $\beta = 3.9$ zusammen.

Nachdem wir die Grenzen der Numerik bei der auf „doppelt genaue“ Daten basierende Regularisierung ausgelotet haben, wollen wir uns nun, wie im vorangegangenen Abschnitt, der Regularisierung reiner „MP-Daten“ zuwenden, d.h. sowohl der regularisierende Kern $\Phi_\beta^{1,2}$ als auch die Vorgegebene $E_{1,2}^+$ sind durch MP-Zahlen numerisch dargestell und dementsprechend ist die numerische Integrationsroutine auf MP-Zahlen respektive -Algorithmen umgeschrieben[72]. Für die Genauigkeit der MP-Zahlen gelte zuerst wieder `mpipl` $=$ 100. Wenden wir uns zuerst wieder der Regularisierung des komplexwertigen Ansatzes zu.

β	$\|W_{CD} - W_\beta\|_{L^2}^2$
2.0	0.070
2.5	0.091
3.0	0.098
3.1	0.099
3.15	50.70
3.2	$3.1 \cdot 10^8$

Tabelle 10.9: Differenz zwischen W_{CD} und W_β bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 100$

In der Tabelle 10.9 ist nun wiederum die in der, numerisch approximierten, L^2-Norm gemessene Abweichung der regularisierten W_β von der exakten W_{CD} aufgelistet, wobei wir uns nicht nur auf den in der Abbildung 10.20 auf der nächsten Seite wiedergegeben Parameterbereich beschränkt haben. Die Werte in jener Tabelle bestätigen die bisherigen Untersuchungen, insbesondere das rapide Anwachsen des (quadratischen) gesamten Fehlers, sobald der (gesamte) numerische Fehler an Dominanz gewinnt.

Betrachten wir jetzt die Graphen der Abbildung 10.20, in der wir konkret die wesentlichen Entwicklungen im Parameterbereich $3.0 \leq \beta \leq 3.15$ aufgetragen haben, so bestätigen jene Graphen die aufgrund der Tabelle 10.9 gewonnen Vermutung, daß bei $\beta = 3.1$ die regularisierte W_β, genauer deren Realteil, als approximative Lösung noch völlig geeignet ist, wohingegen bei $\beta = 3.15$ die Regularisierte von den numerischen Fehler völlig dominiert wird und letztendlich zu verwerfen ist.

Desweiteren erkenne wir in der Abbildung wiederum, daß $\mathfrak{Im} W_\beta$ als Maß für den (numerischen) Fehler betrachtet werden kann. Etwas überraschend ist jetzt allerdings die Festellung, selbst bei kleineren[73] β-Werten weniger reine systematische Oszillationen oder Schwebungen im Imaginärteil ausmachen zu können, sondern daß quasi sofort eine Überlagerung von systematischen und „stochastischen“ numerischen Fehlerquellen zu beobachten ist; systematische Einflüsse lassen sich insbesonders bei $\beta = 3.0$ beobachten.

Als nächstes wollen wir uns der Regularisierung der Real- und der Imaginärteilintegralgleichungen zuwenden, wobei wir nur exemplarisch die Ergebnisse für W_β^2, also der Regularisierten des Imaginärteils[74], angeben wollen.

[70] Es sei daran erinnert, daß wir die Ergebnisse für den Modellparameterwert $\alpha = 0.5$ des Cole-Davidson Modells als exemplarisch für den Gesamtparameterbereich des Modells angegeben haben.

[71] Wir wollen darauf hinweisen, daß die nachfolgenden Werte für β als Richtwerte zu verstehen sind. So könnte der Wert $\beta = 3.9$ bei *Wrb* noch als gerade akzeptabel betrachtet werden.

[72] Es sei diesbezüglich wiederum auf die Bemerkung zur Multipräzisionsbibliothek `mpfun++` und deren Verwendung, insbesondere im Rahmen der Programmiersprache C^{++} auf der Seite 228 hingewiesen.

[73] Dieses gilt auch für die kleineren β-Werte, die wir nicht grafisch wiedergegeben haben, wie bsplw. $\beta = 1.0$ und $\beta = 2.0$.

[74] Es sei auf die Bemerkung auf Seite 242 bezüglich der exemplarischen Wiedergabe von W_β^2 hingewiesen. Im weiteren dieser Arbeit werden wir nur dann explizit die Funktionen W_β^1 und W_β^2. also die Regularisierten der Real- und der Imaginärteilgleichung, wiedergeben, so diese sich signifikant und nicht nur marginal voneinander unterscheiden.

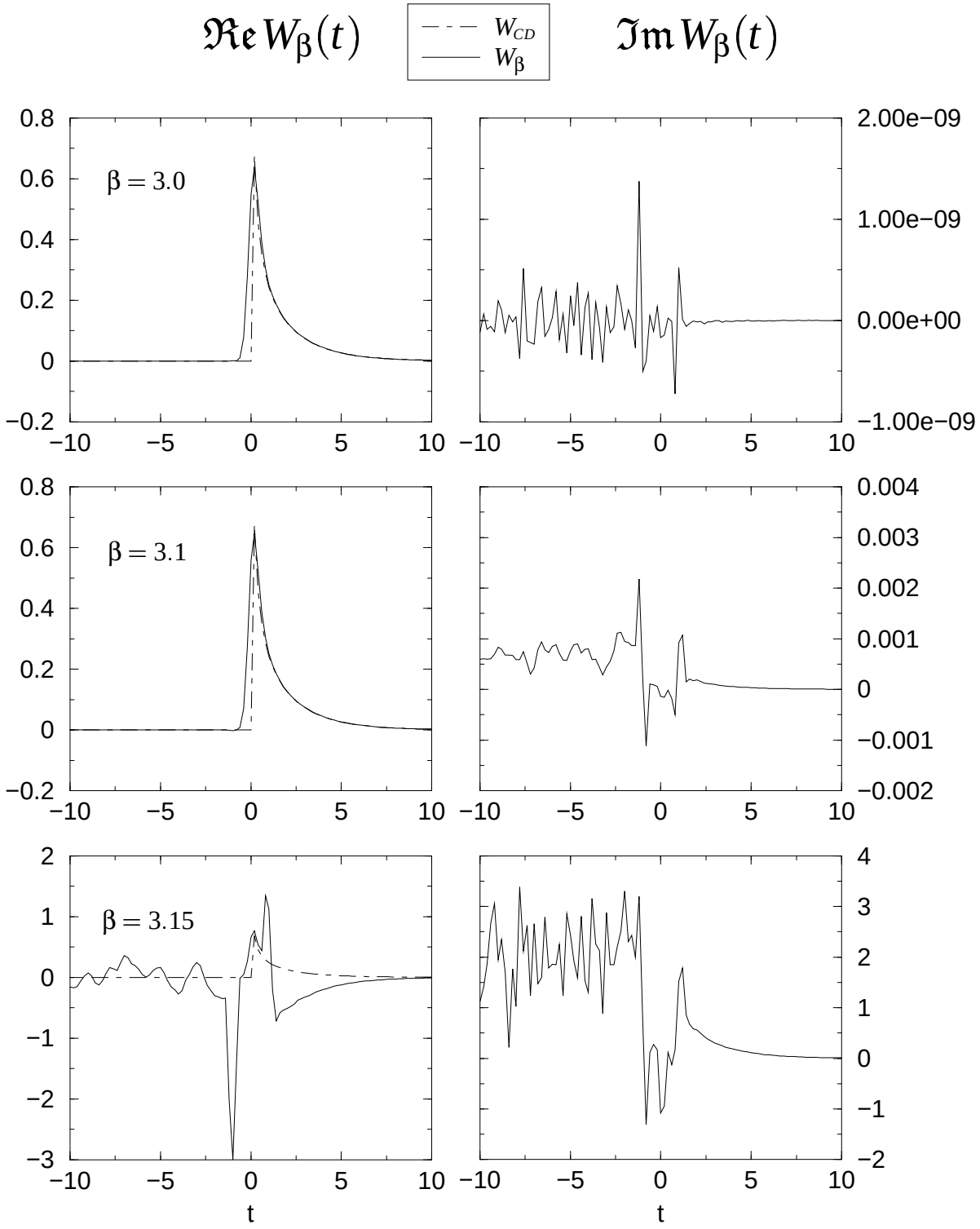

Abbildung 10.20: W_{CD}: Phänomenologischer Ansatz: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 100$, $3.0 \leq \beta \leq 3.15$

β	$\|W_{CD} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
8.0	0.095
9.0	0.103
9.1	0.114
9.2	0.116
9.3	0.119
9.4	29.45
9.5	115601
10.0	$5.9 \cdot 10^{24}$

Tabelle 10.10: Differenz zwischen W_{CD} und W_β^2 bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 100$

Wie bisher üblich, wurde in der Tabelle 10.10 die in der (numerisch approximierten) L^2-Norm gemessene Abweichung von W_β^2 zu W_{CD} aufgelistet und wir können aus der Tabelle sofort wiederum die bisherigen Beobachtungen ablesen, so daß wir auf eine (weiteren) Wiedergabe jener verzichten wollen. Nur kurz sei erwähnt, daß wir, wie in der vorangegangenen Tabelle zur Regularisierung der Phänomenologischen, hier nicht nur den in der Abbildung 10.21 auf der nächsten Seite grafisch wiedergegebenen Parameterbereich angegeben haben.

Auch die in jener Abbildung wiedergegebenen Graphen der regularisierten W_β^2 bestätigen die bisherigen Untersuchungen: sobald der Einfluß des (gesamten) numerischen Fehlers im Graphen der Regularisierten bemerkbar ist, reicht eine kleine Variation des Regularisierungsparameters, hier $\Delta\beta = 0.1$, bis dieser Fehler den Graphen vollständig dominiert und so die Numerik zusammenbricht. Und tatsächlich ist die Regularisierte für $\beta = 9.3$ trotz beginnenden Einflusses des Numerikfehlers noch vollständig akzeptabel, wir können hier sogar noch die theoretische regularisierte der Dichte W_{CD} erkennen, doch bereits bei $\beta = 9.4$ ist die Numerik zusammengebrochen, der Graph von W_β^2 wird vom „Rauschen“ des Numerikfehlers vollständig bestimmt. Ein Rückschluß auf die zugrundeliegende exakte Dichte ist hier, eigentlich überflüssig[75] zu erwähnen, nicht mehr möglich.

Diese Untersuchungen zur Cole-Davidson Dichte 10.16 abschließend, wollen wir kurz die Ergebnisse der Regularisierung angeben, wenn wir für die Genauigkeit der `MP`-Zahlen `mpipl` $= 200$ ansetzen.

β	$\|W_{CD} - W_\beta\|_{L^2}^2$
4.4	0.081
4.5	5.38
4.6	$2.7 \cdot 10^{19}$

Tabelle 10.11: Differenz zwischen W_{CD} und W_β bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 200$

Und so ist in der Tabelle 10.11 die Abweichung der Regularisierten W_β von der exakten W_{CD} wieder angegeben, wobei wir uns hier auf das Ende des Parameterbereichs beschränkt haben, d.h. den Übergang zum Zusammenbrechen der Numerik angegeben haben. Wie bisher, wurde in der Abbildung 10.22 auf Seite 261 $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ und $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ grafisch dargestellt, jetzt für die Parameterwerte $\beta = 4.4$ und $\beta = 4.5$: ersterer kennzeichnet den letzten Wert für β, bei dem die Numerik stabil, also noch nicht vom (gesamten) numerischen Fehler dominiert wird, ist, letzterer kennzeichnet das endgültige Zusammenbrechen der Numerik. Erwähnenswert wären nur noch zum einen, daß der Einfluß des numerischen Fehlers gemäß der Tabelle 10.11 mit wachsendem β jetzt stärker zunimmt als im vergleichbaren Fall mit `mpipl` $= 100$; dieses haben wir bereits bei der

[75] Es gibt aber tatsächlich noch „Wissenschaftler“, die aus derartigen Regularisierten auf die exakte Lösung schließen wollen. Aus Pietätsgründen wollen wir diese aber nicht namentlich erwähnen.

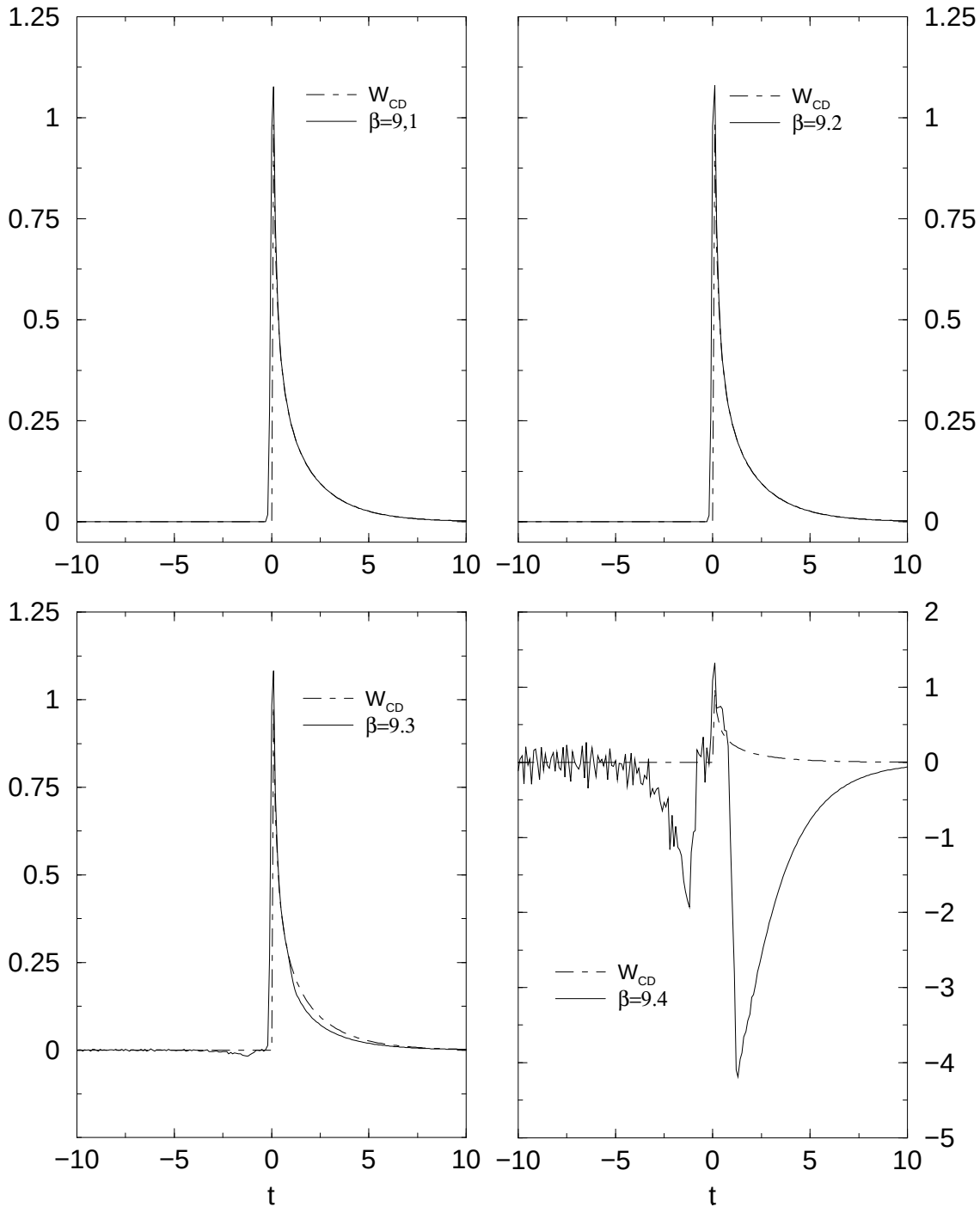

Abbildung 10.21: W_{CD}: Regularisierte W_β^2: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 100$, $9.1 \leq \beta \leq 9.4$

Drudedichte beobachten[76] können. Jenes Verhalten bestärkt nochmals die Hypothese eines analogen zur Abschätzung[77] (9.127) exponentiell steigendem Einflusses des numerischen Fehlers, der ein derartiges Verhalten erklären würde und wir hier bei höheren Werte für β sind als im Fall `mpipl` $= 100$. Zum anderen ist kurz erwähnenswert, daß wir jetzt deutlicher als in der vergleichbaren Abbildung 10.20 eine systematische Signatur in $\mathfrak{Im}\, W_\beta$, also einen systematischen numerischen Fehler, erkennen können.

Wenden wir uns jetzt, wie üblich an dieser Stelle, den exemplarischen Ergebnissen der Regularisierung der Imaginärteilintegralgleichung, bei dem Parameter `mpipl` $= 200$, zu.

β	$\|W_{CD} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
13	0.272
13.1	0.329
13.2	0.342
13.3	0.347
13.4	0.350
13.45	1.010
13.5	92.835
13.6	$8.199 \cdot 10^{06}$
13.7	$7.398 \cdot 10^{11}$

Tabelle 10.12: Differenz zwischen W_{CD} und W_β^2 bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, `mpipl` $= 200$

Die Tabelle 10.12 listet die Entwicklung der, wiederum in der numerisch approximierten L^2-Norm gemessenen, Abweichung der regularisierten W_β^2 von der exakten W_{CD} auf. Wie bisher, so können wir auch hier ein dramatisches Anwachsen des Fehlers beobachten, sobald der (gesamte) Numerikfehler an Einfluß, und demzufolge letztendlich an Dominanz, gewinnt.

In der Abbildung 10.23 auf Seite 262 sind jetzt die wesentlichsten Ergebnisse des in der Tabelle wiedergegebenen Parameterbereichs grafisch wiedergegeben: wie die Werte jener Tabelle bereits vermuten lassen, ist $\beta = 13.4$ der letzte, bei dem wir noch keinen merklichen Einfluß des Numerikfehlers in den Graphen der Regularisierten erkennen können, und entsprechend jener Werte ist bei $\beta = 13.5$ die Numerik tatsächlich bereits völlig zusammengebrochen. Wir erkennen an den Graphen der Abbildung 10.23 jedoch auch etwas überraschend einen anderen Verlauf und Signatur des Zusammenbrechens der Numerik: wie sich bereits im Graphen bei $\beta = 13.45$ andeutet, wird die Signatur des Zusammenbrechens hier nicht durch Oszillationen und „quasi stochastische“ Fluktuationen bestimmt, sondern durch phantom- und karrikaturhafte Reproduktion der für die theoretische Regularisierten W_β^{CD}, die wir nachfolgend noch kurz kritisch untersuchen werden, typischen Signatur an der Stelle, bei der W_{CD} ihre schwache Divergenz aufweist. Dieses Verhalten ist auch der Grund dafür, daß wir den Graphen bei $\beta = 13.5$ in der Abbildung 10.25 auf Seite 263 nochmals detailierter, genauer in einem Ausschnitt, wiedergegeben haben: wir erkennen hier sogar, daß, wie bei $\beta = 13.45$, jene typische Signatur von W_β^{CD} bei der schwachen Divergenz in einem kleinen Intervall sogar noch erkennbar nachgebildet wird. Dieses kann jetzt, ehrlicherweise, eher Zufall sein, doch erkennen wir an den Graphen bei $\beta = 13.45$ und $\beta = 13.5$ deutlich die Dominanz eines systematischen numerischen Fehlers, gegenüber eines sich mehr „stochastisch“ auswirkenden, der sich durch die Erzeugung von „Phantomen“ der erwähnten typischen Signatur auszeichnet. Wir wollen erwähnen, daß diese „Phantome“, sobald sie beobachtet werden, auch bei einer Erhöhung der Stützstellen bei gleichzeitiger Verringerung der Schrittweite in der numerischen Integration nicht prinzipiell verschwinden, sondern nur Form und Lage verändern. Dieses haben wir, letztendlich wieder exemplarisch, in der Abbildung 10.24 auf Seite 263 dokumentiert, in der wir die Regularisierte bei $\beta = 13.45$ für zwei verschiedene Werte der Stützstellen N der numerischen Integration wiedergegeben haben. Das Integrationsintervall I war bei beiden $[-20.0;\ 20.0]$. Bemerkenswert

[76] siehe die Ausführungen 246

[77] siehe Abschnitt 9.3.2, Seite 170

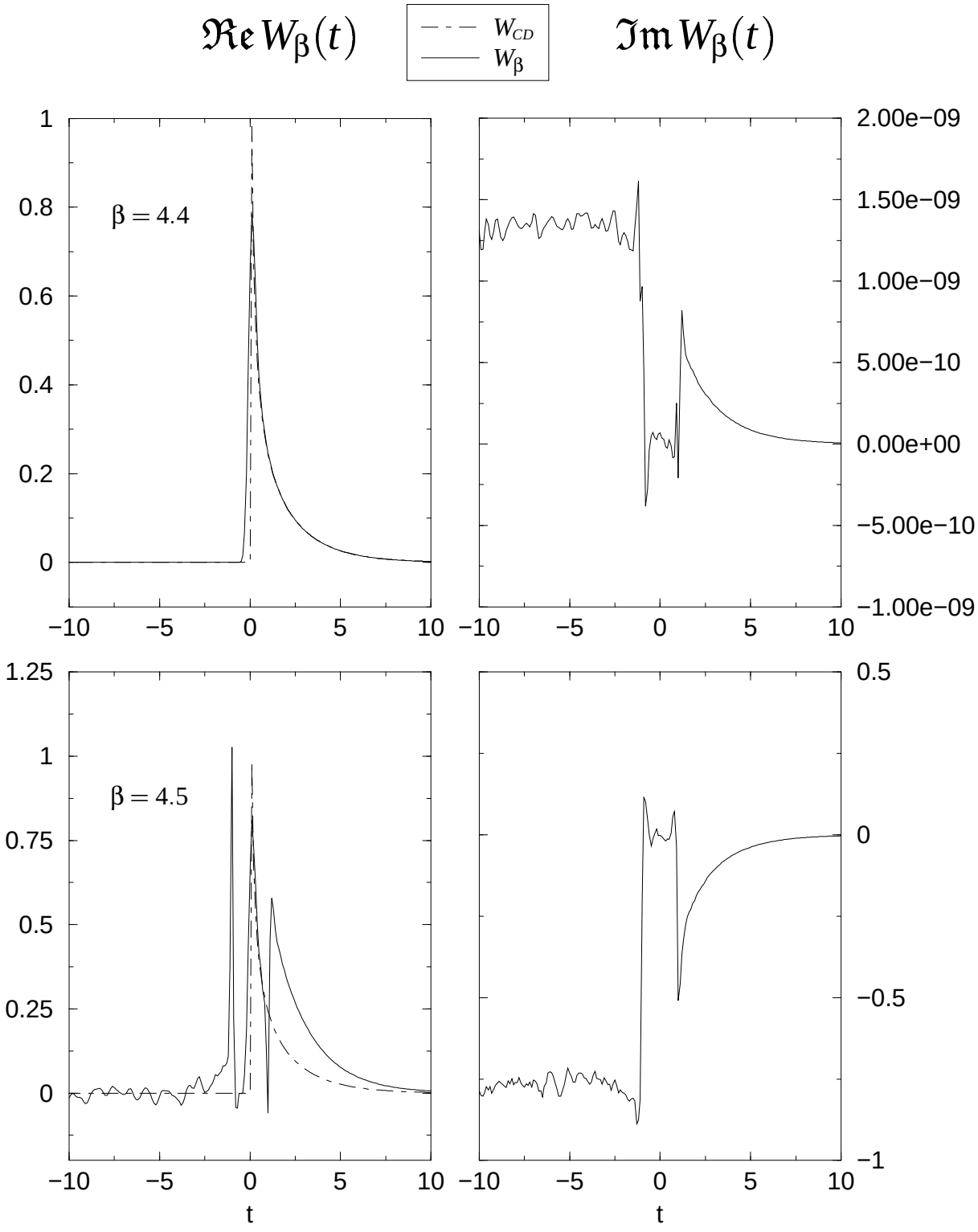

Abbildung 10.22: W_{CD}: Phänomenologischer Ansatz: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, mpipl $= 200$, $4.4 \leq \beta \leq 4.5$

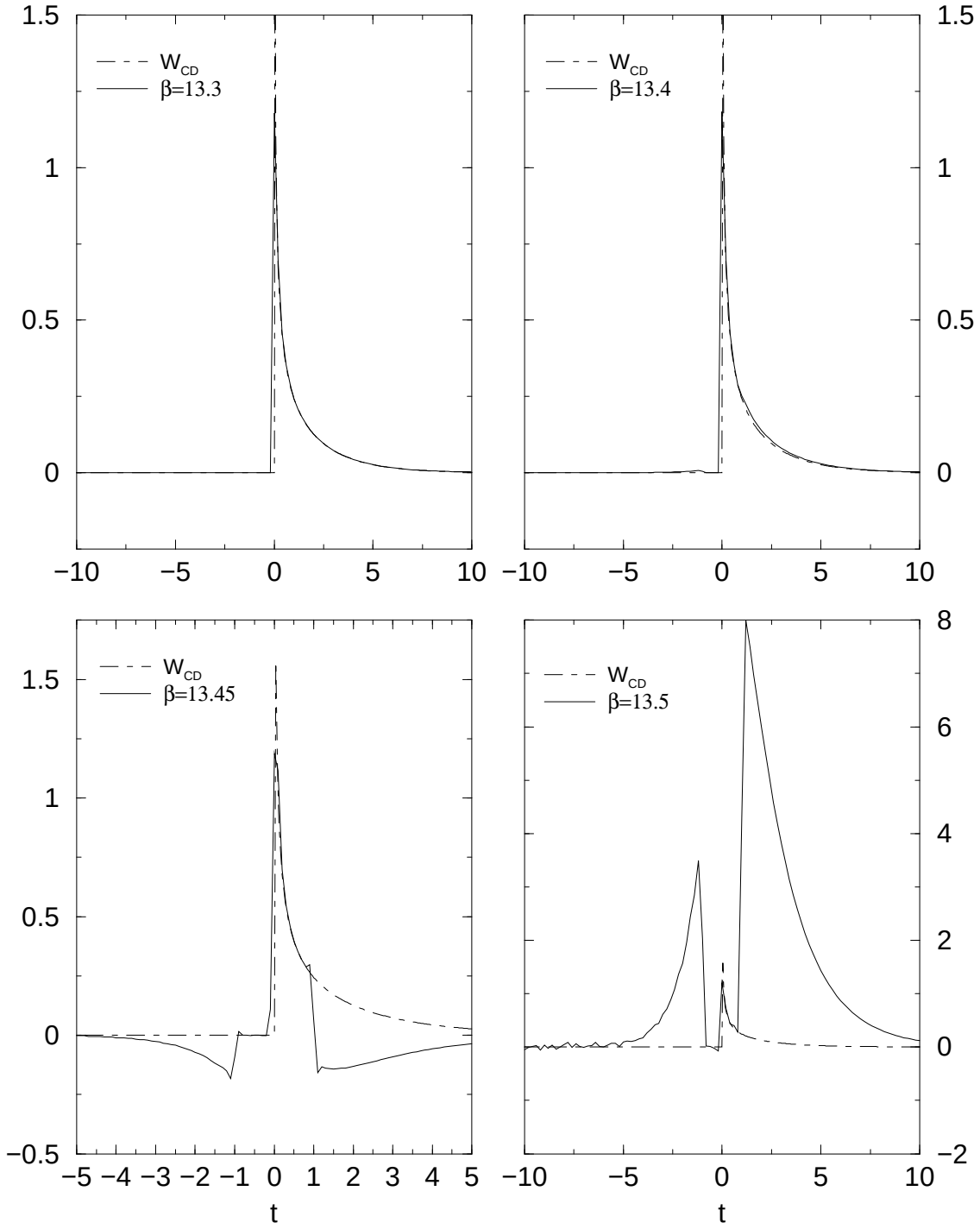

Abbildung 10.23: W_{CD}: Regularisierte W_β^2: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; $\alpha = 0.5$, mpipl $= 200$, $13.3 \leq \beta \leq 13.5$

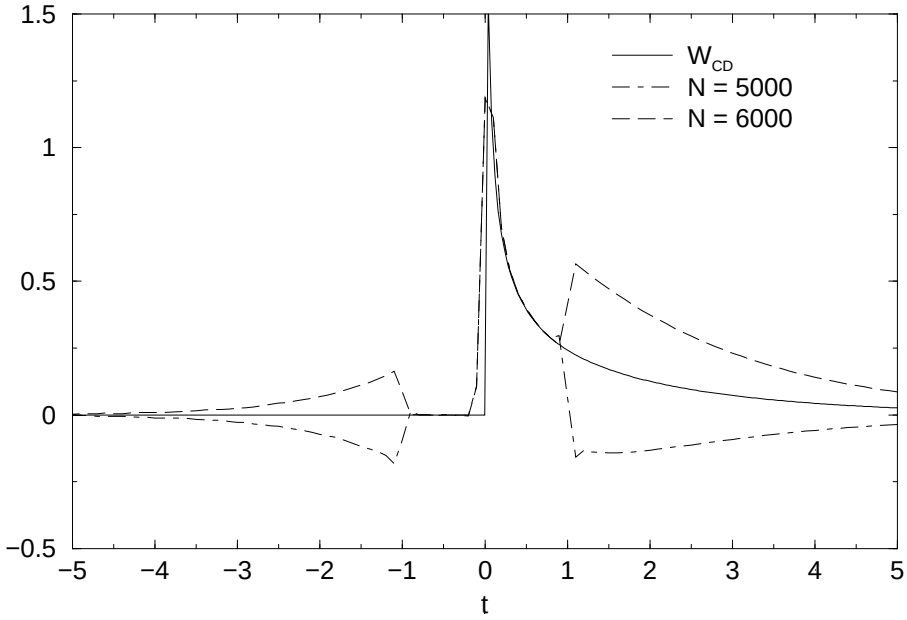

Abbildung 10.24: W_{CD}: Regularisierte W_β^2 bei $\beta = 13.45$ für verschiedene Stützstellen N

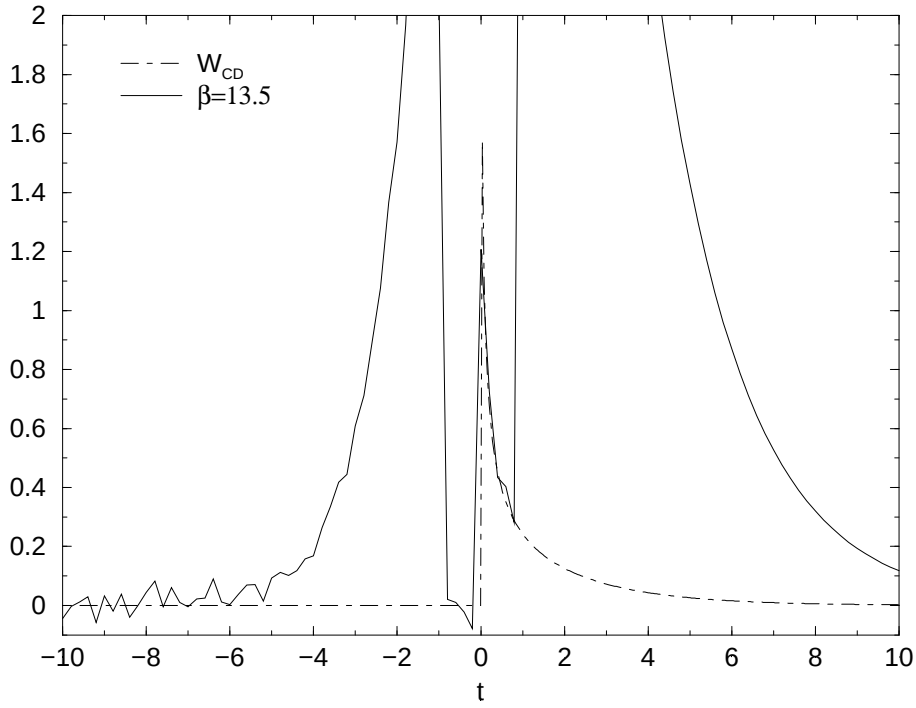

Abbildung 10.25: W_{CD}: Regularisierte W_β^2: Details bei $\beta = 3.5$

an dieser Abbildung ist übrigens, daß hier die Phantombilder, bei den hier wiedergegebenen Werten für N, gespiegelt und vergrößert werden.

Bevor wir mit den Untersuchungen an einem weiteren Modell fortfahren, soll, wie oben bereits angekündigt, die Regularisierung der Cole-Davidson Dichte kritisch betrachtet werden. Konkret ist die reine, theoretische Regularisierte W_β^{CD}, die gemäß der allgemeinen Gleichung[78] (5.61) durch

$$W_\beta^{CD}(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} W_{CD}(t)\, F_\beta(t_0 - t)\, dt \quad ,$$

wobei F_β wieder konkret die gemäß (9.23) bzw. (9.218) gegebene Gaußsche Mollifier-Funktion[79],

$$F_\beta(t) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\beta^2 t^2\right) \quad ,$$

sei, gegeben. An dem obigen Ausdruck für F_β und den Ausdruck (10.16) für W_{CD} können wir ohne Schwierigkeiten die Existenz von W_β^{CD} für alle t ablesen respektive die Existenz und Konvergenz des obigen Faltungsintegrales. Ebenso sehen wir an jenen Ausdrücken, daß die reine regularisierte W_β^{CD} eine stetige Funktion sein muß und insbesondere keine schwachen Divergenzen aufweisen wird. Dieses wird auch durch die Graphen der Abbildung 10.27 auf Seite 266 bestätigt, in der wir einen Überblick über die Funktion W_β^{CD} im Parameterbereich $3 \leq \beta \leq 100$ geben. Bis zu $\beta = 10$ sind wir, grob gesprochen, schon bei unserem bisherigen Untersuchungen vorgedrungen. Wir habe W_β^{CD} für jenen Wert nochmals detailierter in der Abbildung 10.28 auf Seite 267 wiedergegeben. Wir können hier noch immer eine deutliche Diskrepanz zwischen der theoretisch exakten W_{CD} und der theoretisch regularisierten W_β^{CD} erkennen. Erinnern wir uns jetzt noch an die Graphen des Havriliak-Negami Modells, Abbildung 3.2 auf Seite 41, so erkennen wir sofort, daß wir, nicht nur in dem Parameterbereich $\beta \leq 50$, auf der Basis der theoretischen regularisierten das Cole-Davidson- nicht von einem Havriliak-Negami Modell, mit den geeigneten Parametern, unterscheiden können. Weitere Zweifel an der grundsätzlichen Möglichkeit dieser Unterscheidung auf der Basis regularisierte Lösungen liefert noch der detailierter Graph für $\beta = 100$, in der Abbildung 10.28 wiedergegeben: wir erkennen an dem betreffenden Teil dieser Abbildung, daß die Singularität von W_{CD} selbst bei jenem Parameterwert relativ schwach wiedergegen wird. Selbstverständlich ist uns klar, daß wir bei jedem endlichen β-Wert numerisch keine Singularität werden beobachten können, doch liegt der Wert $\beta = 100$, wie wir jetzt aufgrund der bisherigen Untersuchungen sagen können, bereits weit jenseits der in einer praktischen Regularisierung möglichen Werte.

Und so wird jetzt noch jene Skepsis bezüglich der Unterscheidung zusätzlich durch die Abbildung 10.26 auf der nächsten Seite bekräftigt, in der wir die Dichte W_{HN} des Havriliak-Negami Modells, für die Parameter $\alpha = 0.5$ und jeweils $\gamma = 0.99$ und $\gamma = 0.999$, mit den Regularisierten W_β^{CD} für $\beta = 10,\ 50,\ 100$ verglichen haben. Gerade hier wird die Schwierigkeit der Unterscheidung beider Modelle auf der Basis regularisierter Lösungen besonders deutlich[80] und es bedarf wohl keiner weiteren Diskussion über die dort abgebildeten Graphen. Betrachten wir jetzt noch zusätzlich die Regularisierten für $\beta = 4.0$, die wir in der Abbildung 10.28 auf Seite 267 aufgrund ihrer Relevanz bezüglich der praktischen Regularisierung[81] ebenso nochmal wiedergegeben haben, so kommen wir, die Abbildung 3.2 der Dichte des Havriliak-Negami Modells mit einbeziehend, zu den pessimistischen Urteil der *Unmöglichkeit der auf Regularisierte basierenden Unterscheidung der Cole-Davidson- von der Havriliak-Negami Dichte*.

---

[78] siehe Abschnitt 5.3.3 und Kapitel 6f

[79] siehe Abschnitt 9.2.1 und 9.5.2

[80] Jene Schwierigkeit bleibt somit sogar in einem Parameterbereich bestehen, der in der Praxis kaum erreichbar sein dürfte, wie die Regularisierung „doppelt genauer“ Daten gezeigt hat.

[81] Jenen Wert können wir Grob als Grenze der numerischen Regularisierung bei „doppelt genauen“ Daten und also auch für gestörte, „reale“ Daten betrachten.

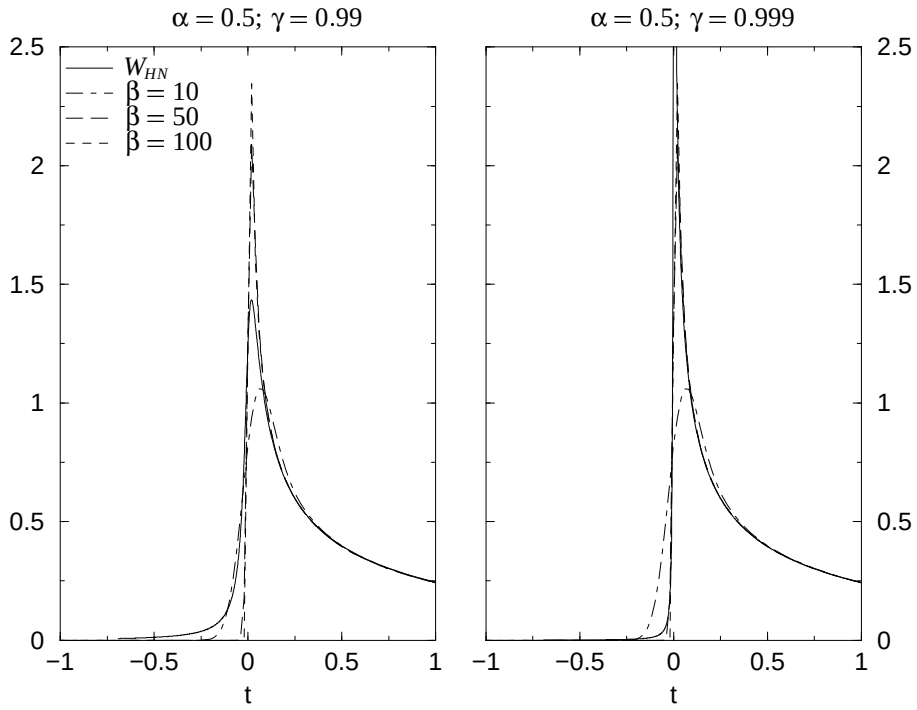

Abbildung 10.26: Vergleich von W_β^{CD} (gestrichelte Linien) mit W_{HN} (durchgezogene Linie) für einige β-Werte

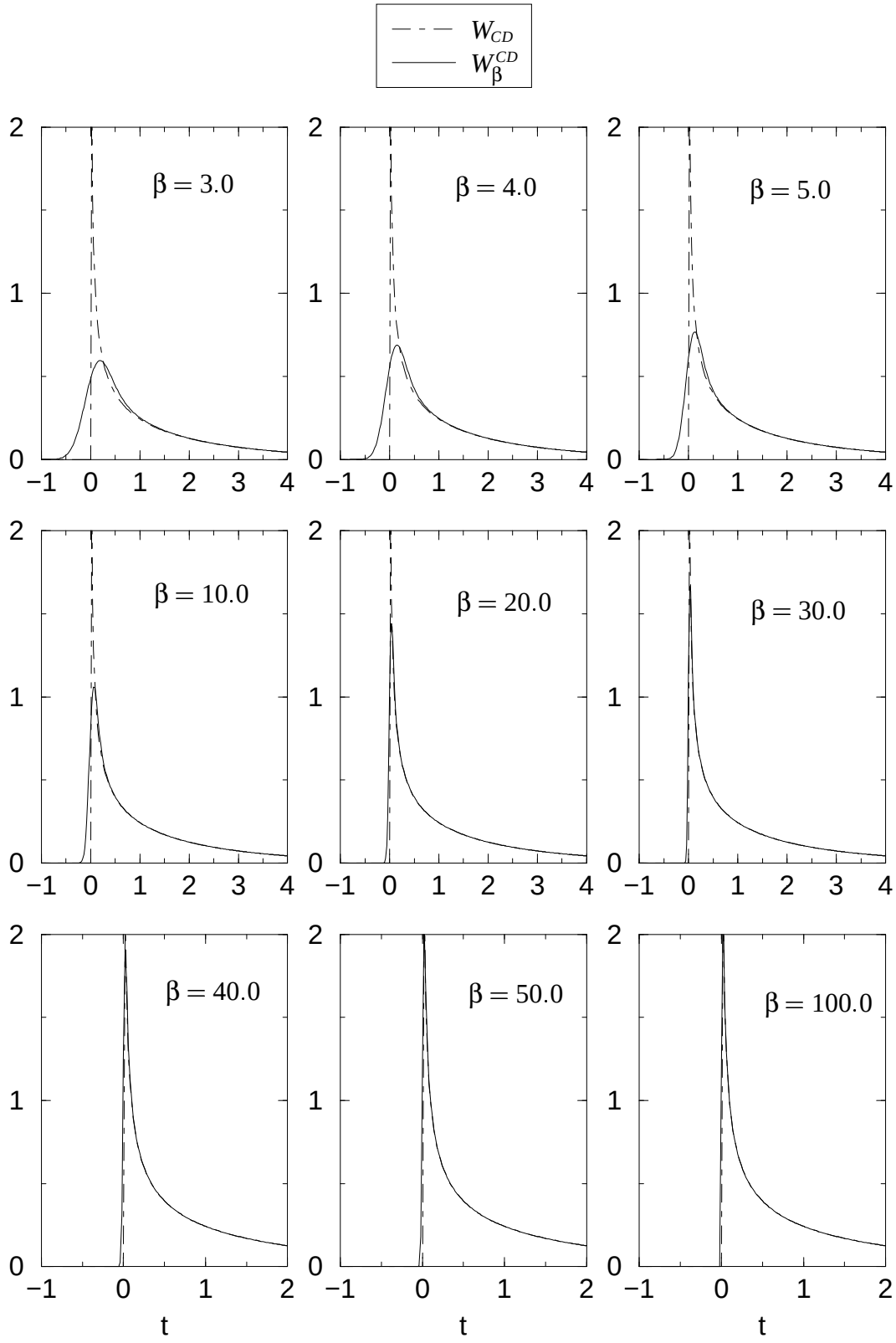

Abbildung 10.27: Theoretische regularisierte W_β^{CD}

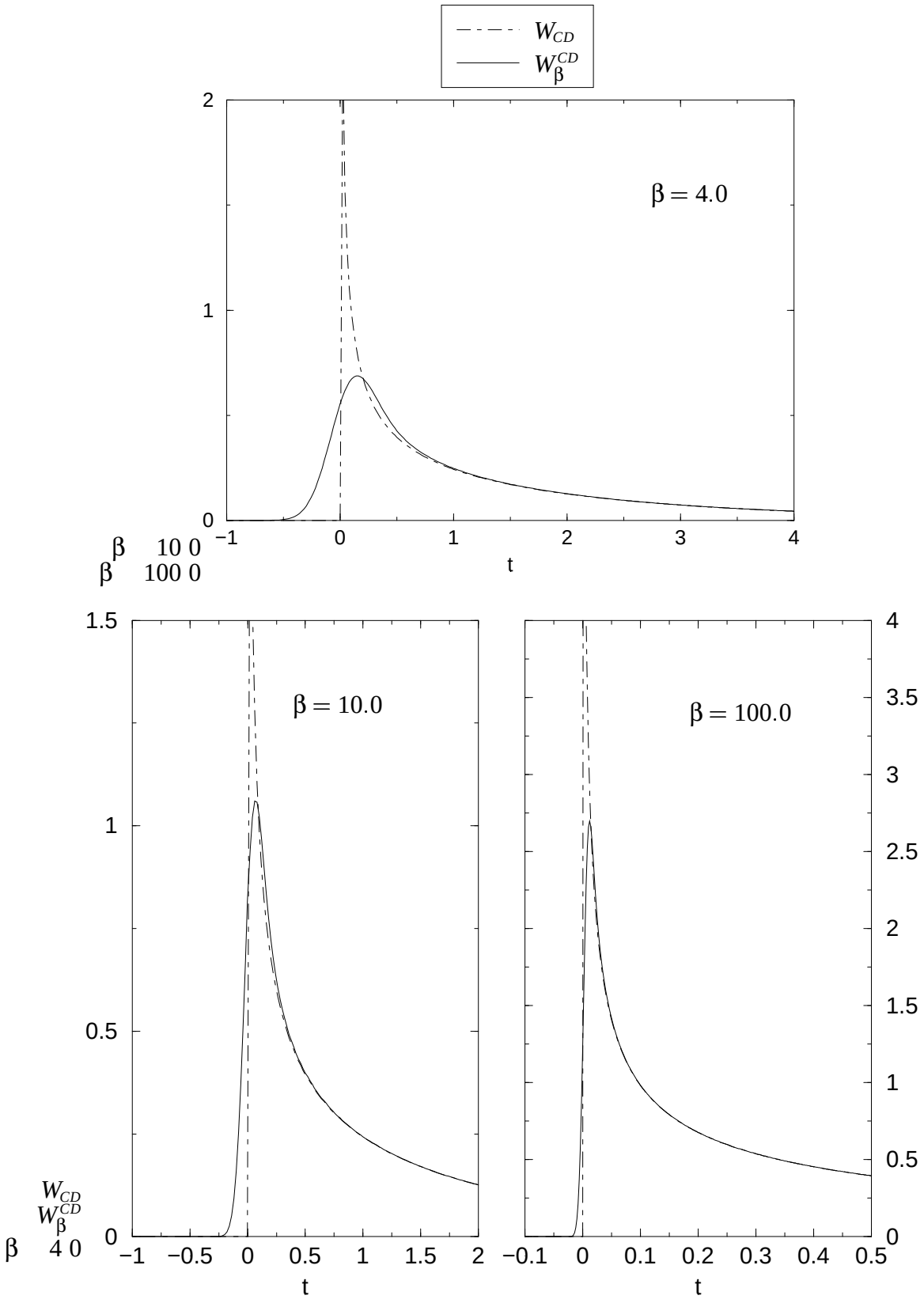

Abbildung 10.28: Details der theoeretische regularisierte W_β^{CD} bei $\beta = 4$, $\beta = 10$ und $\beta = 100$

10.4.3 Das Cole-Cole Modell

Die letzte Dichte, die wir im Rahmen der Untersuchung der Regularisierung kontinuierlicher Daten betrachten wollen, ist die des *Cole-Cole Modells*[82], das neben dem Cole-Davidson- und dem Havriliak-Negami Modell[83], wobei letzters die beiden ersten als Spezialfälle[84] beinhaltet, als phänomenologisches Modell für E^+ zur Beschreibung von Messungen herangezogen wird. Dieser Umstand und der Tatsache, daß wir, im Gegensatz zu der auch von uns als „Testdichte“ gerne verwendeten Gaußdichte, die „Daten“ E^+ bereits durch einen analytischen Ausdruck[85] vorliegen haben, bewogen uns, jene Dichte hier zu untersuchen. Anders als in den beiden vorangegangenen Abschnitten 10.4.1f, wollen wir die Ergebnisse, um (weitere) Redundanz zu vermeiden, nur kurz präsentieren und nur die neu gefundenen detaillierter diskutieren.

Wie die Dichte W_{CD} des Cole-Davidson Modells, ist die Dichte W_{CC} des Cole-Cole Modells schon länger bekannt und durch den Ausdruck[86]

$$W_{CC}(t) = \frac{\sin(\alpha\pi)}{2\pi\,[\cosh(\alpha t) + \cos(\alpha\pi)]} \quad \text{mit } 0 < \alpha < 1 \tag{10.18}$$

gegeben.

Vergleichen wir also die regularisierte W_β mit dem obigen Ausdruck (10.18) für W_{CC}. In der Tabelle 10.13 habe wir die in der, natürlich numerisch approximierten, L^2-Norm gemessenen Abweichung der Regularisierten von der Exakten angegeben, wobei wir für den Modellparameter $\alpha = 0.5$ gewählt haben.

β	$\|W_{CC} - W_\beta\|^2_{L^2}$
1.25	$8.77 \cdot 10^{-5}$
1.3	0.002
1.31	0.005
1.32	0.016
1.33	0.052
1.34	0.1699

Tabelle 10.13: Differenz zwischen W_{CC} und W_β bei „`double`-Daten“; $\alpha = 0.5$

Diese Abweichung verhält sich hier grundsätzlich genau so, wie bereits bei den vorher behandelten Modellen beobachtet. Aufgrund der Werte für den quadratische Fehler können wir vermuten, daß die Regularisierte bei $\beta = 1.3$ die ersten Einflüsse des numerischen Fehlers aufweisen dürfte und spätestens bei $\beta = 1.33$ dieser Fehler dominiert. Tatsächlich zeigen die Graphen von W_β in der Abbildung 10.29 auf der nächsten Seite, daß der numerische Fehler bereits bei $\beta = 1.31$ recht dominant ist; diese Regularisierte möge hier als gerade noch akzeptabel gelten. In der Abbildung 10.30 auf Seite 270 habe wir, mehr der Vollständigkeit halber, die weitere Entwicklung von W_β bis $\beta = 1.34$ wiedergegeben. Sicherlich sollten die Regularisierten ab $\beta = 1.32$, so es sich jetzt um eine praktische handeln würde, verworfen werden. Wir wollen jedoch in diesem Zusammenhang noch erwähnen, daß wir bei $\beta = 1.25$ für diesen Modellparameter bereits eine recht brauchbare Approximation der exakten W_{CC} erhalten.

Neben den obigen Modellparameter, haben wir das Cole-Cole Modell beim Modellparameter $\alpha = 0.9$ untersucht. In der Tabelle 10.14 sind wieder die Abweichungen der Regularisierten von der Exakten aufgelistet, und in der Abbildung 10.31 auf Seite 271 haben wir die Graphen einschließlich der letzten noch gerade akzeptablen Regularisierten bei $\beta = 1.35$ wiedergegeben.

[82] siehe [CC41]

[83] siehe [HN66]

[84] siehe Abschnitt 3.4, im welchem wir dieses ausführlicher dargelegt haben

[85] siehe [CC41] und hier Abschnitt 3.4, Gleichung (3.35) auf Seite 36

[86] a.a.0. und siehe [Bec88]

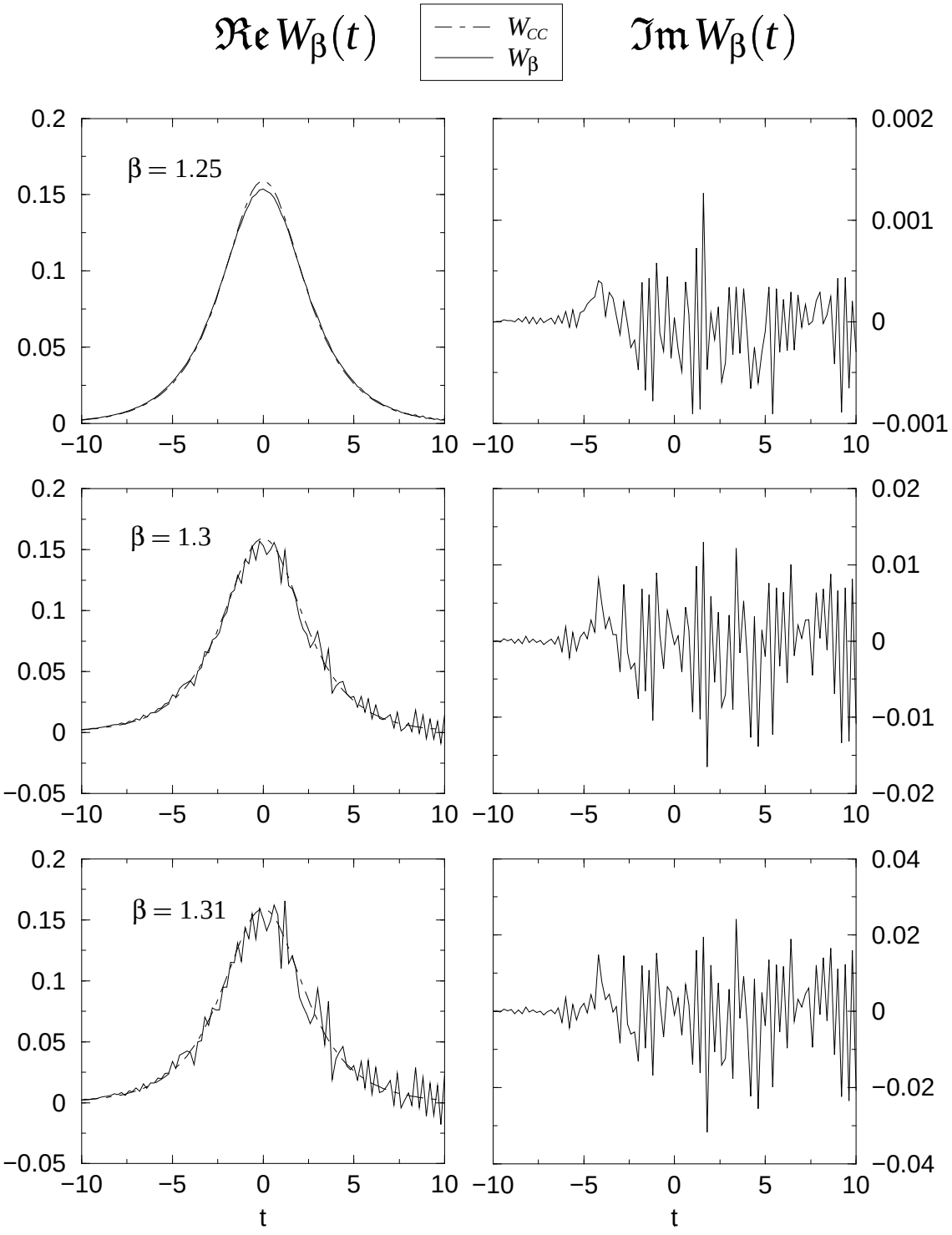

Abbildung 10.29: W_{CC}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $1.25 \leq \beta \leq 1.31$

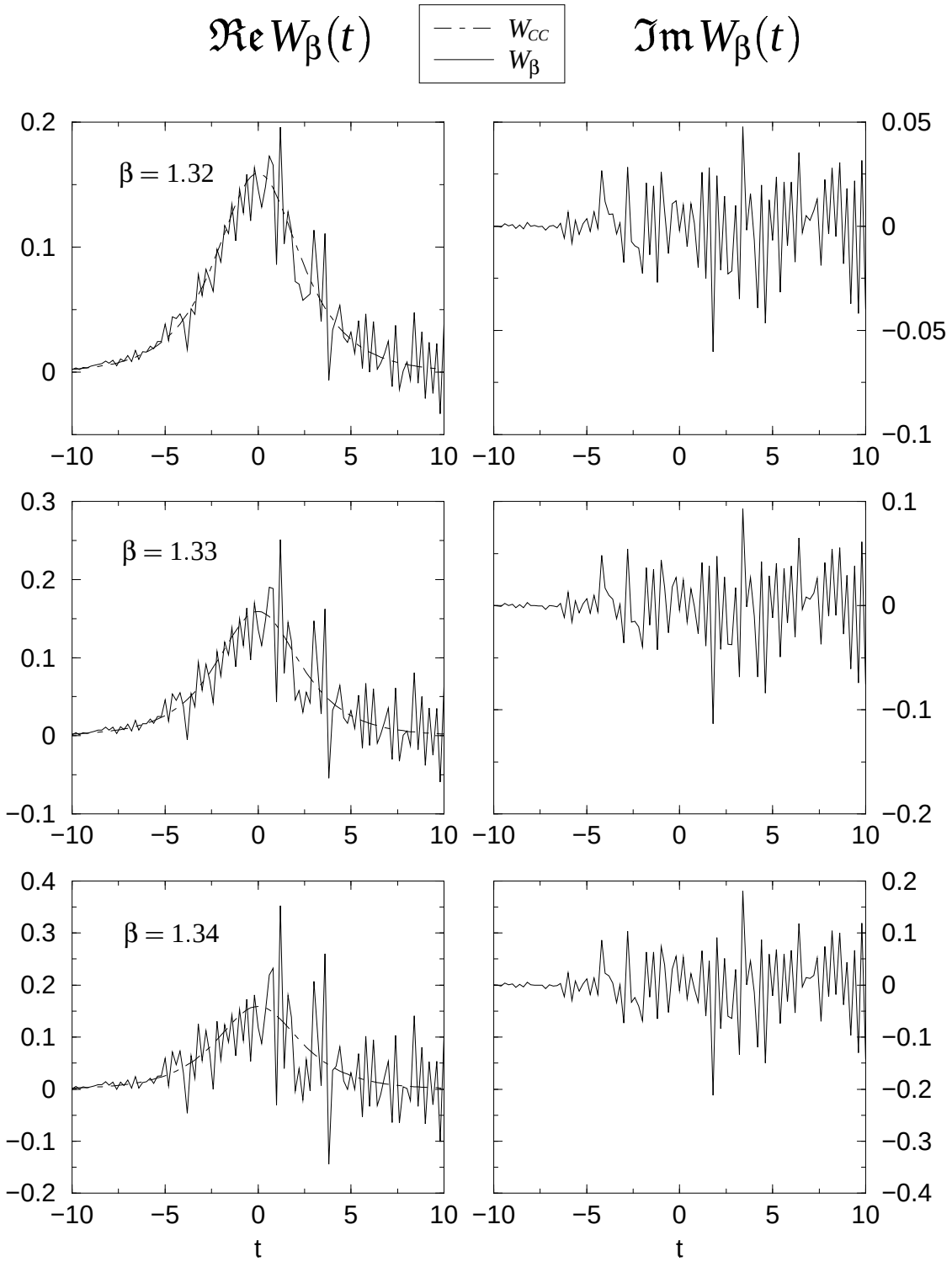

Abbildung 10.30: W_{CC}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $1.32 \leq \beta \leq 1.34$

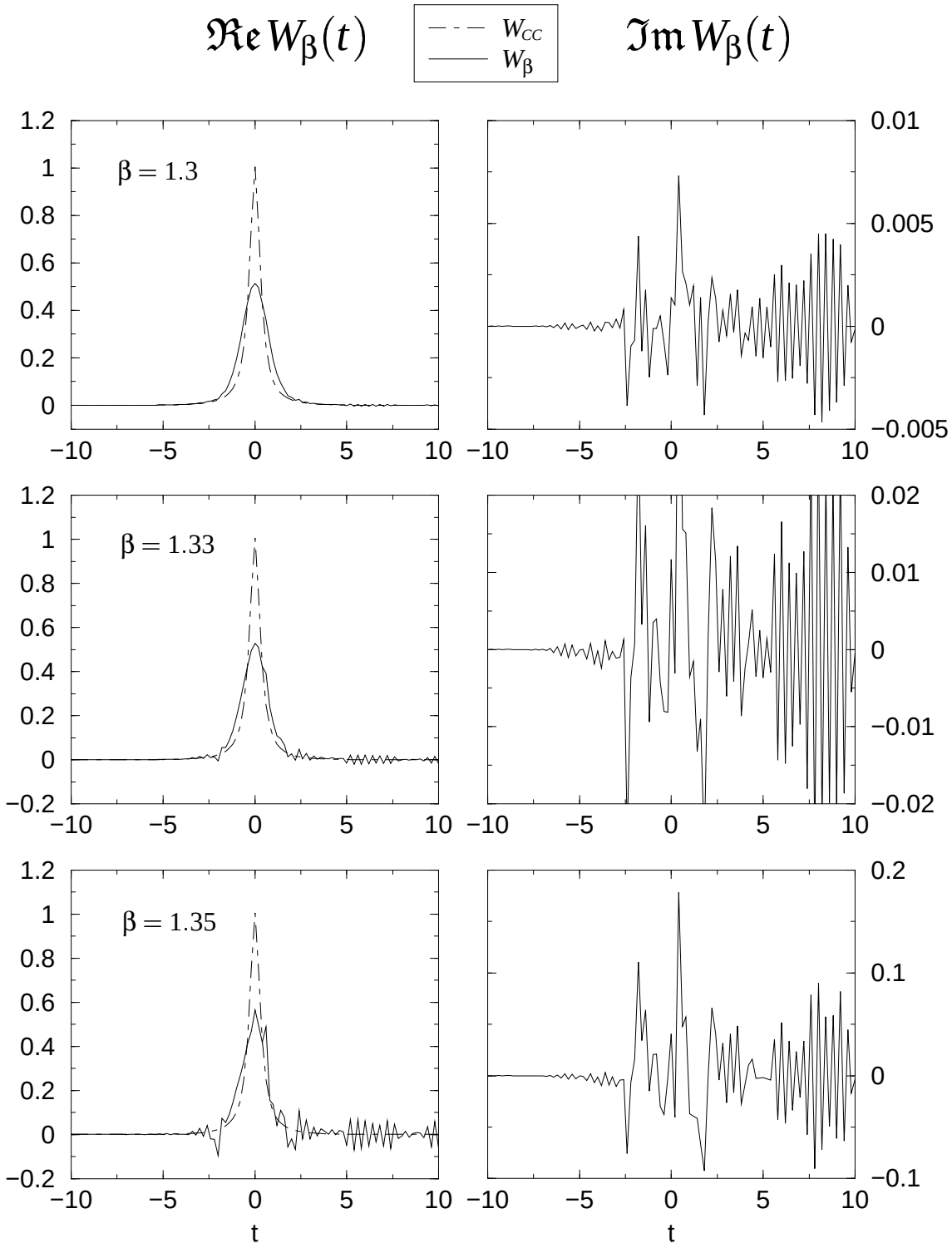

Abbildung 10.31: W_{CC}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei `double`-Zahlen; $\alpha = 0.9$, $1.3 \leq \beta \leq 1.35$

β	$\|W_{CC} - W_\beta\|^2_{L^2}$
1.25	0.123
1.3	0.115
1.33	0.124
1.35	0.169

Tabelle 10.14: Differenz zwischen W_{CC} und W_β bei „`double`-Daten“; $\alpha = 0.9$

Die Graphen der Regularisierten für $\beta > 1.35$ ersparen wir uns wiederzugeben, da diese der Qualität der Graphen in der Abbildung 10.30 entsprechen und in diesem Sinne keine weiteren Informationen oder Erkenntnisse liefern.

Es fällt hier auf, daß sich der Wert des Parameters bis zum Zusammenbrechen der Numerik geringfügig erhöht hat: bei dem Modellparameter $\alpha = 0.5$ war bei $\beta = 1.32$ Schluß, jetzt hat sich der Parameter auf $\beta = 1.35$ „erhöht“; die Größenordnung des Parameters verändert sich bei einer Variation des Modellparameters also nicht, der absolute Wert nur geringfügig - und für die Praxis sicherlich vernachlässigbar[87]. Was sich jetzt erwartungsgemäß geändert hat, ist die Qualität der approximativen Lösung. Betrachten wir die Regularisierten in der Abbildung 10.31 insgesamt, so geben diese ein „verwaschenes“ Bild der zugrundeliegenden Exakten wieder, im Gegensatz zum Fall $\alpha = 0.5$. Wir können hier bereits tendenziell beobachten, daß das Regularisierungsverfahren „breite“ Dichten wie bei $\alpha = 0.5$ eher reproduzieren wird können als „schmale“ Dichten wie bei $\alpha = 0.9$. Dieses werden, vorweggenommen, die Untersuchungen in den nachfolgenden Abschnitten bestätigen.

Wie in den bisherigen Abschnitten üblich, folgen jetzt die Ergebnisse der Regularisierung der Real- und Imaginärteilintegralgleichung, natürlich auf „doppelt genauen“ Daten basierend.

β	$\|W_{CC} - W^1_\beta\|^2_{L^2}$	$\|W_{CC} - W^2_\beta\|^2_{L^2}$
3.0	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$2.2 \cdot 10^{-6}$
3.5	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$2.2 \cdot 10^{-6}$
3.8	0.0002	$5.9 \cdot 10^{-5}$
3.9	0.0098	0.0031
4.0	0.5138	0.1517
4.1	28.9294	6.96418

Tabelle 10.15: Differenz zwischen W_{CC} und jeweils W^1_β und W^2_β bei „`double`-Daten“; $\alpha = 0.5$

Betrachten wir zuerst wieder den Fall des Modellparameters $\alpha = 0.5$. In der Tabelle 10.15 ist wieder die jeweilige Abweichung der regularisierten W^1_β und W^2_β von der exakten Wcc, in der numerisch approximierten L^2-Norm gemessen, aufgelistet. Ergänzend zu den in den Abbildungen 10.32 auf der nächsten Seite und 10.33 auf Seite 274 aufgetragenen Graphen im Parameterbereich $3.5 \leq \beta \leq 4.0$, haben wir in der Tabelle noch zusätzlich die Werte für $\beta = 3.0$ und $\beta = 4.0$ angegeben: Bei den Übergang von $\beta = 3.0$ zu $\beta = 3.5$ nimmt der (quadratische) Fehler ab, da hier der Filterfehler, also der reine Fehler des Regularisierungsverfahrens, gegenüber dem numerischen Fehler noch dominiert. Aus der Tabelle können wir ablesen, daß ab ca. $\beta = 3.8$ der Einfluß des (gesamten) numerischen Fehlers an Dominanz gewinnt.

Wie bereits bei der entsprechenden Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes, erhalten wir für die beiden Integralgleichungen sehr gute Approximationen der exakten Dichte, hier bei $\beta = 3.5$. Ab (ca.) $\beta = 3.8$ nimmt, wie aus der Tabelle abgelesen, der Einfluß des numerischen Fehlers in den Graphen deutlich

[87] Dieses Verhalten können wir bei jeden der hier behandelten Modellen beobachten; siehe auch die nachfolgenden Untersuchungen.

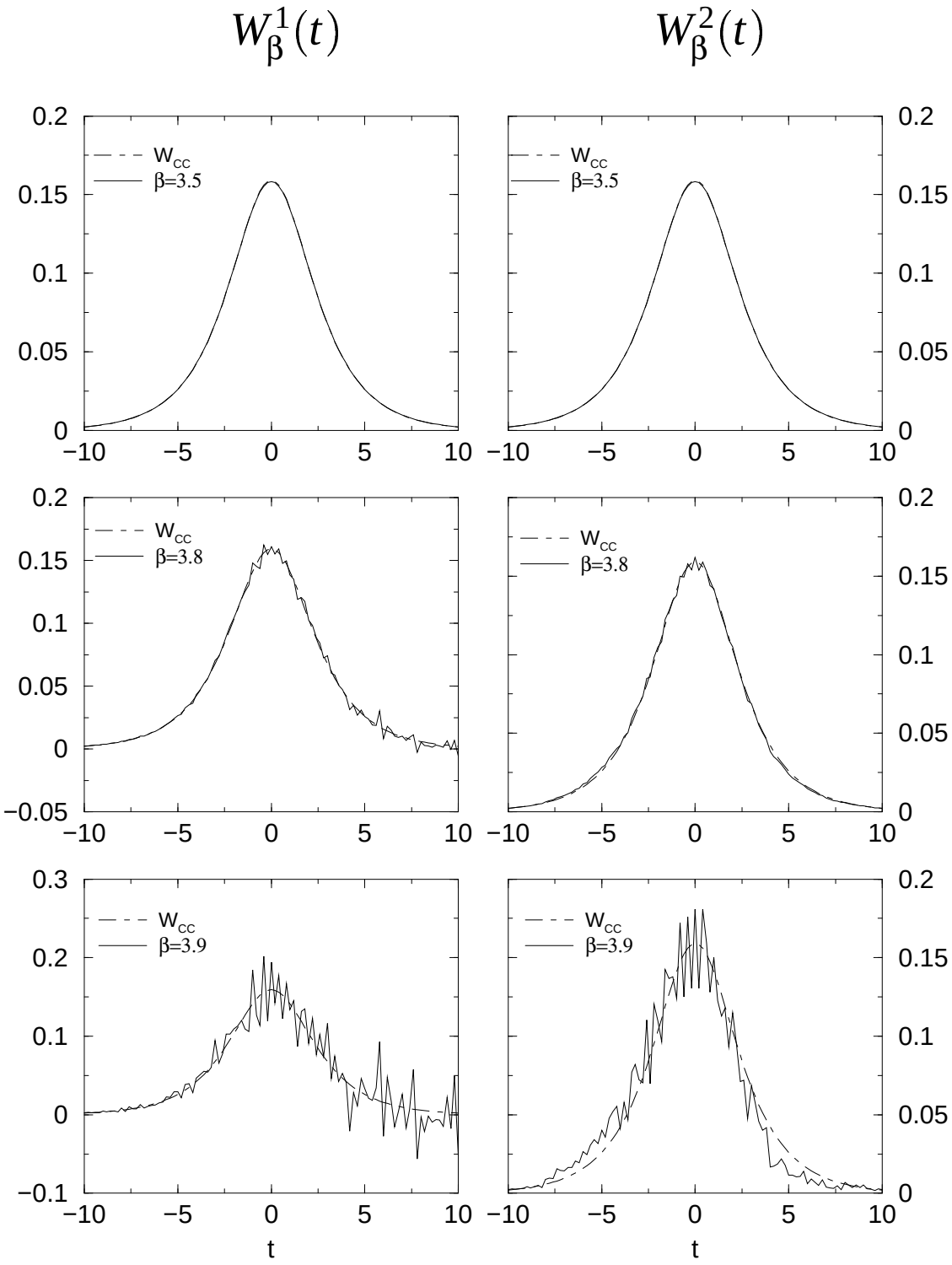

Abbildung 10.32: W_{CC}: Zusammenbruch der der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $3.5 \leq \beta \leq 3.9$

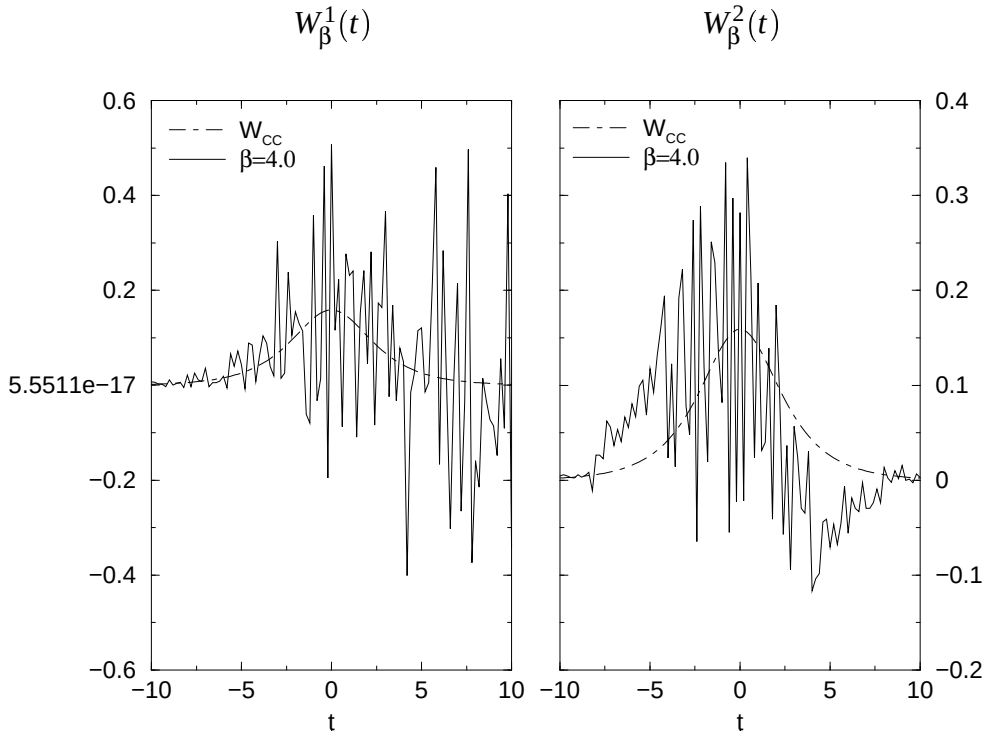

Abbildung 10.33: W_{CC}: Zusammenbruch der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.5$, $\beta = 4.0$

zu. Wenn wir die Graphen der regularisierten W_β^1 und W_β^2 bei $\beta = 3.8$ als noch akzeptabel betrachten können, so sind jene Graphen bei $\beta = 3.9$, streng genommen, schon zu verwerfen: bei diesen können wir nur noch recht vage auf die zugrundeliegenden Exakten schließen. Die Graphen der Abbildung 10.33 bei $\beta = 4.0$ sollen wieder das dramatische Anwachsen des Fehlereinflusses demonstrieren.

Wie in den entsprechenden Abbildungen 10.18 und 10.19 im Fall des Cole-Davidson Modells, können wir hier ein leicht unterschiedliches Verhalten der regularisierten W_β^1 und W_β^2 bezüglich des Fehlereinflusses beobachten: in der regularisierten W_β^2 gewinnt der numerische Fehler erst später an Einfluß[88], einen Umstand, den die Werte der Tabelle 10.15 ebenso deutlich wiedergeben: wir sehen, daß der Fehler für W_β^2 marginal später zunimmt als der Fehler für W_β^1.

β	$\|W_{CC} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{CC} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
3.0	0.0161	0.0161
3.5	0.0106	0.0106
3.7	0.0090	0.0091
3.8	0.0083	0.0086
3.9	0.0114	0.0122
4.0	0.2561	0.2233
4.1	16.972	9.22801

Tabelle 10.16: Differenz zwischen W_{CC} und jeweils W_β^1 und W_β^2 bei „`double`-Daten“; $\alpha = 0.5$

[88] Der Leser beachte die leicht unterschiedliche Skalierung der Graphen bei $\beta = 3.9$.

Wenden wir uns jetzt der Funktion W_{CC} bei $\alpha = 0.9$ zu. In der Tabelle 10.16 haben wir wieder den Verlauf den in der numerisch approximierten, L^2-Norm angegebenen, jeweiligen Abweichung der regularisierten W_β^1 und W_β^2 von W_{CC} aufgelistet. Das Minimum des (quadratischen) Fehlers liegt hier bei $\beta = 3.8$. Das Fallen des Fehlers bei der Variation von β im Bereich $3.0 \leq \beta \leq 3.8$ können wir, analog wie oben, durch die Dominanz des Filterfehlers in diesem Parameterbereich gegenüber des gesamten numerischen Fehlers erklären. In der Abbildung 10.34 auf dieser Seite habe wir die Graphen bei $\beta = 3.7$ aufgetragen; jener Wert markiert das Ende, bei dem wir in den Graphen (visuell) keinen Einfluß des numerischen Fehlers entdecken können. Wenden wir uns nun der Abbildung 10.35 auf der nächsten Seite zu. Obwohl $\beta = 3.8$ das Minimum in der L^2-Norm ist, erkennen wir in dem Graph von W_β^1 die ersten, noch schwachen Oszillationen: ab hier beginnt somit der Einfluß des Numerikfehlers zuzunehmen. So können wir die Regularisierten bei $\beta = 3.9$ als noch akzeptabel betrachten, wohingegen jene bei $\beta = 4.0$ aufgrund der des nun dominierenden Numerikfehlers bereits wieder zu verwerfen sind.

Wir wollen noch erwähnen, daß wir zwar an den Graphen der Abbildung 10.35 wiederum erkennen können, daß in W_β^2 der Numerikfehler marginal später Einfluß gewinnt, jenes Verhalten diesmal jedoch alleine anhand der in der Tabelle 10.16 aufgelisteten Fehler nicht sofort erkennbar ist; ab $\beta = 4.0$ wird jenes deutlicher durch den Fehler wiedergegeben. Da jedoch die beiden Fehler bis dahin von der gleichen Größenordnung sind und sich nur geringfügig unterscheiden, können wir diese Abweichung auf die numerische Genauigkeit der approximierten L^2-Norm zurückführen.

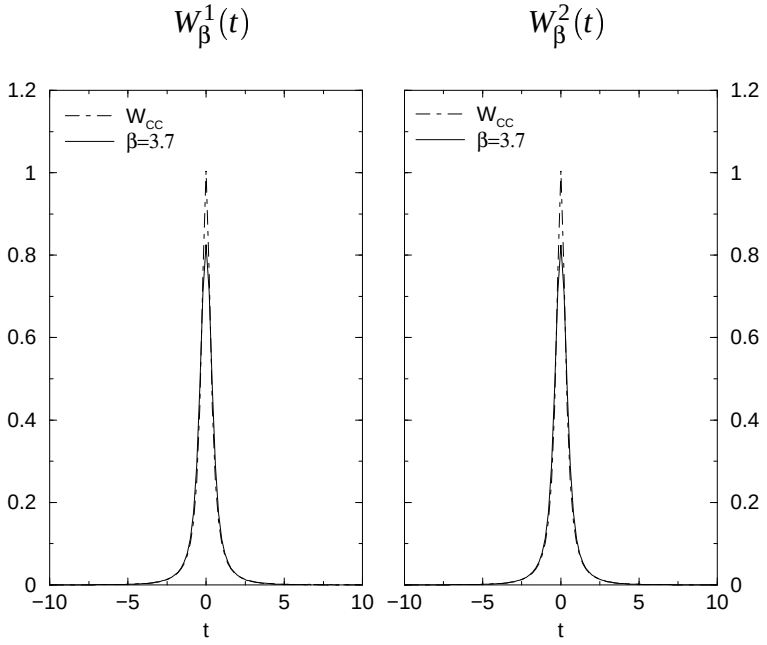

Abbildung 10.34: W_{CC}: Zusammenbruch der der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.9$, $\beta = 3.6$

Nach der Untersuchung der auf „doppelt genauen“ Daten basierenden Regularisierung, werden wir uns jetzt wieder der auf `MP`-Zahlen basierenden zuwenden. Dabei wollen wir uns auf den Modellparameter $\alpha = 0.9$ in (10.18) beschränken, denn wie eben gesehen, können wir bereits mit „doppelt genauen“ Daten die exakte W_{CC}, bei dem Modellparameter $\alpha = 0.5$, sehr gut approximieren; bereits in den Graphen der regularisierten W_β^1 und W_β^2 können wir, bei einem quadratischen Fehler von $\left\|\Delta W_\beta\right\|_{L^2}^2 = 1.2 \cdot 10^{-6}$ bei $\beta = 3.5$, keinen Unterschied zu W_{CC} mehr ausmachen. Desweiteren werden wir uns auch auf `mpipl` $= 100$ als Präzision der `MP`-Zahlen beschränken, da eine Erhöhung der Größe der `MP`-Zahlen keine neuen Ergebnisse liefert, wobei wir insbesondere nur eine Erhöhung des Parameters β, ab dem die Numerik zusammenbricht, beobachten.

Die Tabelle 10.17 listet wieder den, numerisch approximierten, in der L^2-Norm gemessenen Fehler der Re-

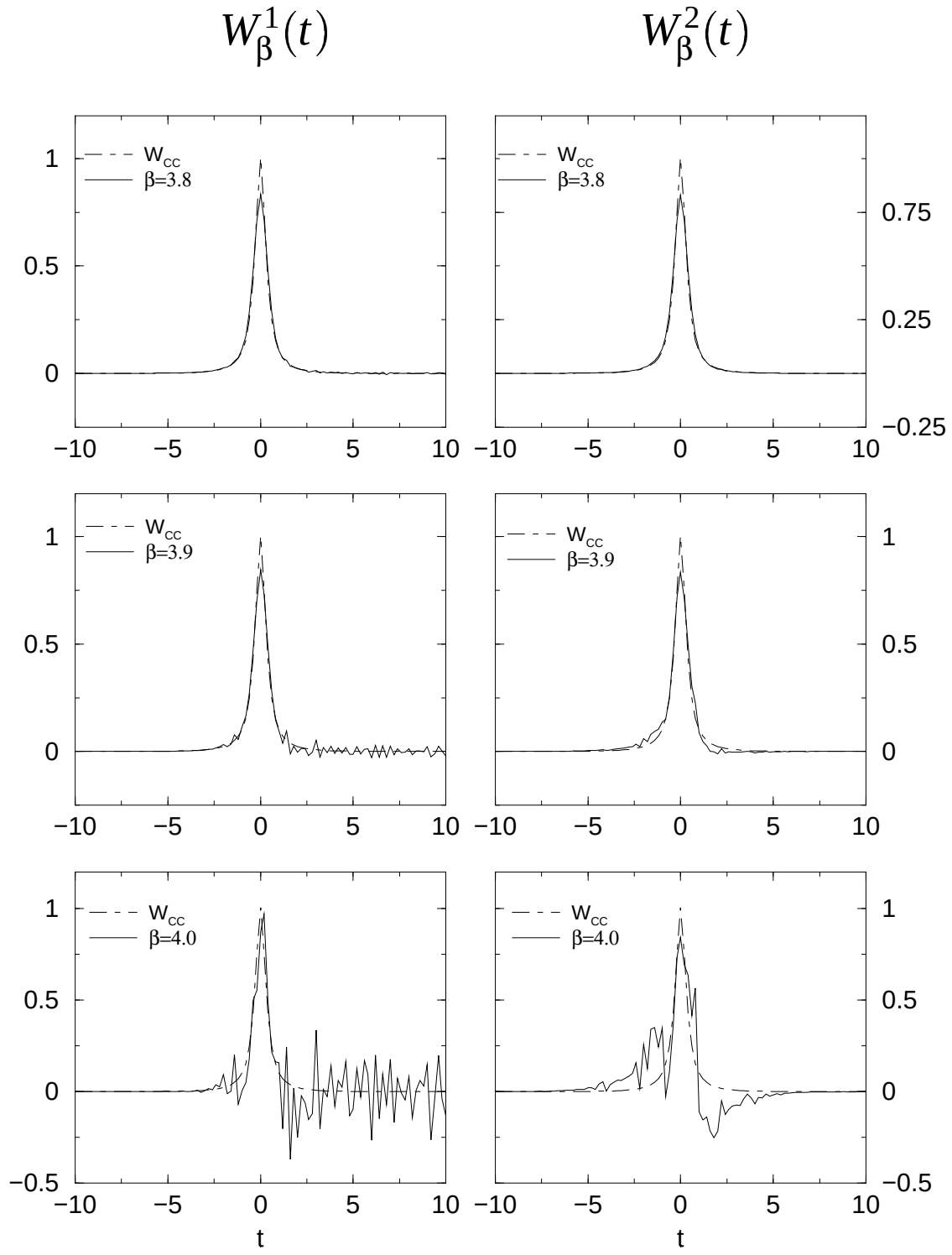

Abbildung 10.35: W_{CC}: Zusammenbruch der der Real- und Imaginärteilgleichungen `double`-Zahlen; $\alpha = 0.9$, $3.8 \leq \beta \leq 4.0$

β	$\|W_{CC} - W_\beta\|^2_{L^2}$	β	$\|W_{CC} - W_\beta\|^2_{L^2}$
3	0.0191265	3.11	0.0215382
3.01	0.0192116	3.12	0.0970841
3.02	0.0196898	3.13	2.0575
3.0	0.0196481	3.14	49.07
3.04	0.0195039	3.15	1265.69
3.05	0.0193405	3.16	30316.7
3.06	0.0191747	3.17	742711
3.07	0.0190091	3.18	$1.67458 \cdot 10^7$
3.08	0.018844	3.19	$3.98795 \cdot 10^8$
3.09	0.0186709	3.2	$8.84619 \cdot 10^9$
3.1	0.0185581		

Tabelle 10.17: Differenz zwischen W_{CC} und W_β bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.9$, `mpipl` $= 100$

gularisierten bezüglich der Exakten auf. Dabei wurden, um die Entwicklung des Fehlers diesmal detailierter zu dokumentieren, dieser für den Bereich $3.0 \leq \beta \leq 3.2$ aufgelistet, wobei wir uns in der zur Tabelle 10.17 korrespondierenden Abbildung 10.36 auf der nächsten Seite verständlicher weise nur auf die für diesem Parameterbereich wesentlichen Graphen beschränkt haben. Das Minimum in der Tabelle bei $\beta = 3.1$ ist, wie wir aus der Abbildung 10.36 ablesen können, tatsächlich der letzte β-Wert, bei dem wir in den Graphen der Regularisierten noch keinen Einfluß des Numerikfehlers erkennen können. Bei $\beta = 3.12$, bei dem der Fehler bereits um (fast) einer Größenordnung angestiegen ist, können wir deutlich die beginnende Dominanz des Numerikfehlers erkennen, die bei dem, nachfolgenden Wert bereits recht deutlich ausgeprägt ist. Zu erwähnen sei noch, daß sich $\mathfrak{Im} W_\beta$ genauso wie bei den bisher betrachteten Modellen verhält, insbesondere daß wir eine Überlagerung eines systematischen mit einem, hier weniger stark ausgeprägten, „stochastischen“ numerischen Fehlers erkennen können.

β	$\|W_{CC} - W^2_\beta\|^2_{L^2}$	β	$\|W_{CC} - W^2_\beta\|^2_{L^2}$
8	0.000742171	9.5	92580.8
9	0.000486601	9.6	$7.64351 \cdot 10^7$
9.1	0.000564842	9.7	$2.73913 \cdot 10^{13}$
9.2	0.000562573	9.8	$6.68297 \cdot 10^{17}$
9.3	0.00228653	9.9	$4.95671 \cdot 10^{21}$
9.35	0.00855614	10	$6.83562 \cdot 10^{24}$
9.4	23.2174		

Tabelle 10.18: Differenz zwischen W_{CC} und W^2_β bei „MP-Daten“; $\alpha = 0.9$, `mpipl` 100

Die Tabelle 10.18 listet nun endlich, zum Abschluß dieser Untersuchungen, den Fehler der regularisierten W^2_β zu der exakten W_{CC} für den Parameterbereich $8.0 \leq \beta \leq 10.0$ auf, und war somit, wie im obigen Fall der Phänomenologischen, die Entwicklung des Fehlers detailierter als sonst dokumentieren wollen. In der Abbildung 10.37 auf Seite 279 sind jetzt die wesentlichen Graphen dieses Parameterbereichs $9.0 \leq \beta \leq 9.4$ wiedergegeben. Hier macht sich der Numerikfehler zuerst sehr schwach bei $\beta = 9.3$, dem Minimum des Fehlers gemäß der Tabelle, bemerkbar[89] und dominiert bereits wieder nicht unerwartet vollständig bei $\beta = 9.4$.

[89] Würden wir tatsächlich nicht die exakte Lösung W_{CC} kennen, so könnten wir bei $\beta = 9.3$ eigentlich noch gar nicht auf eine beginnenden Einflußnahme des numerischen Fehlers schließen.

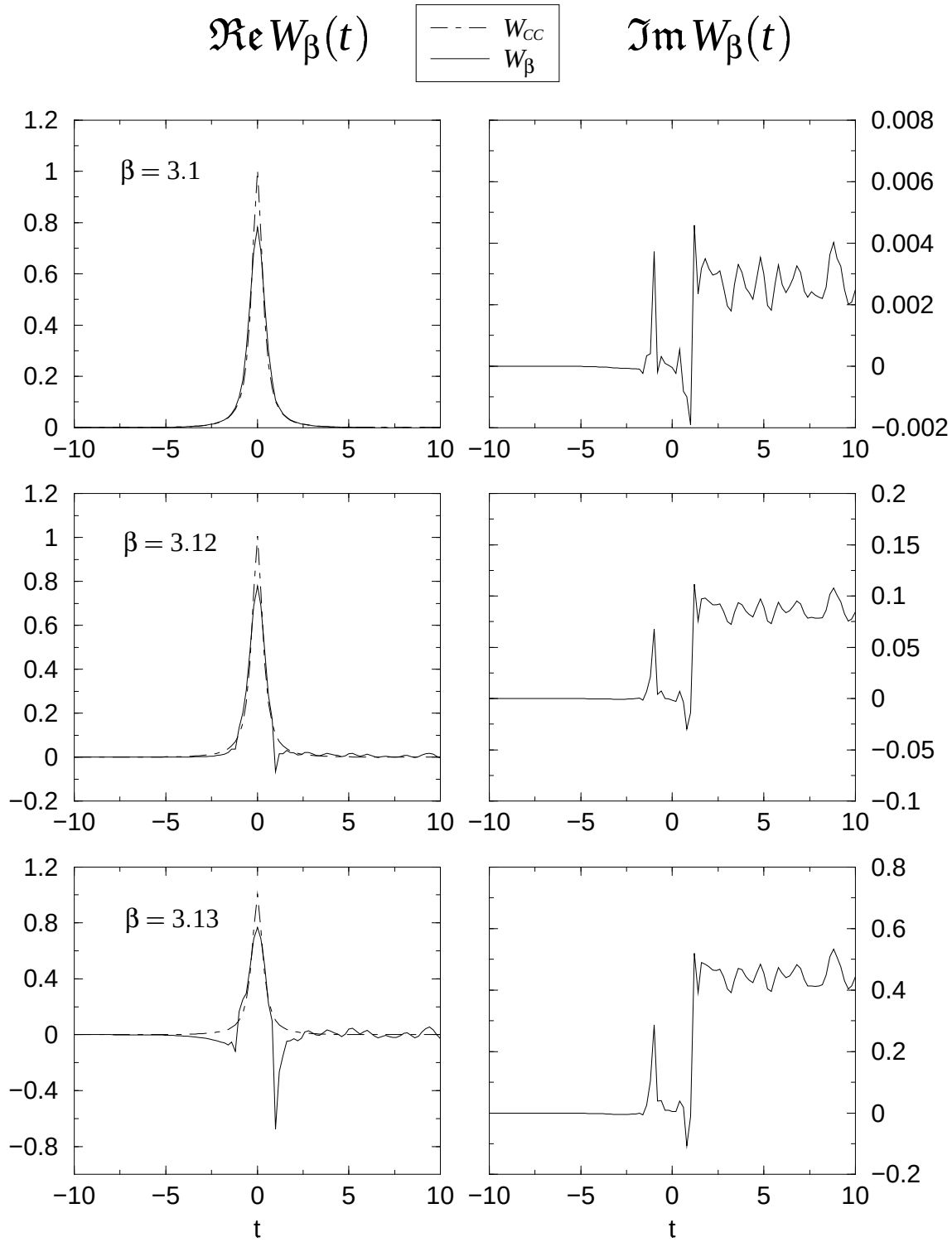

Abbildung 10.36: W_{CC}: Zusammenbruch des phänomenologischen Ansatzes bei MP-Zahlen; $\alpha = 0.9$, $3.1 \leq \beta \leq 3.13$

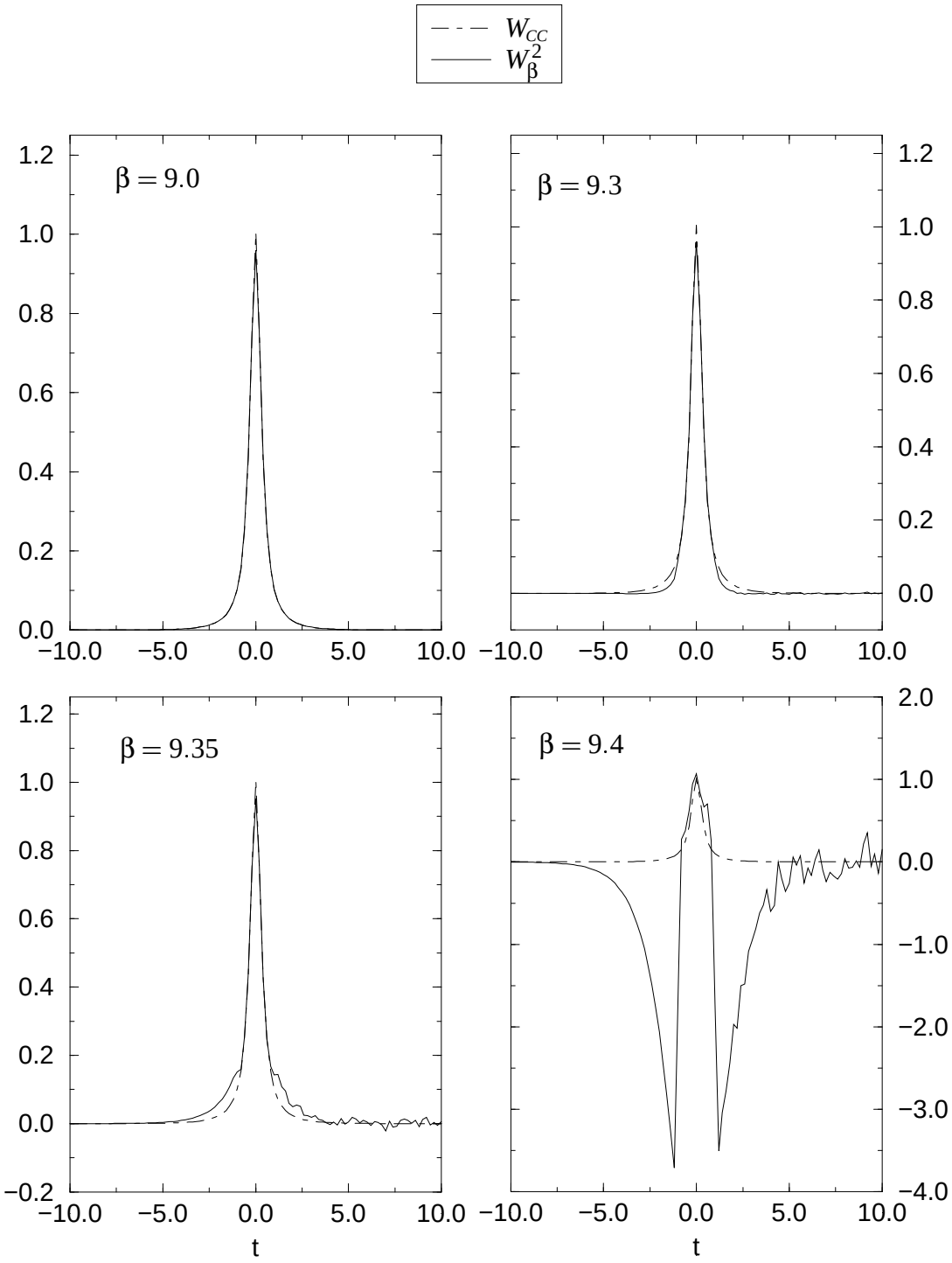

Abbildung 10.37: W_{CC}: Regularisierte W_β^2: Regularisierung mit reinen „MP-Daten“; $\alpha = 0.9$, .mpipl $= 100$, $9.0 \leq \beta \leq 9.4$

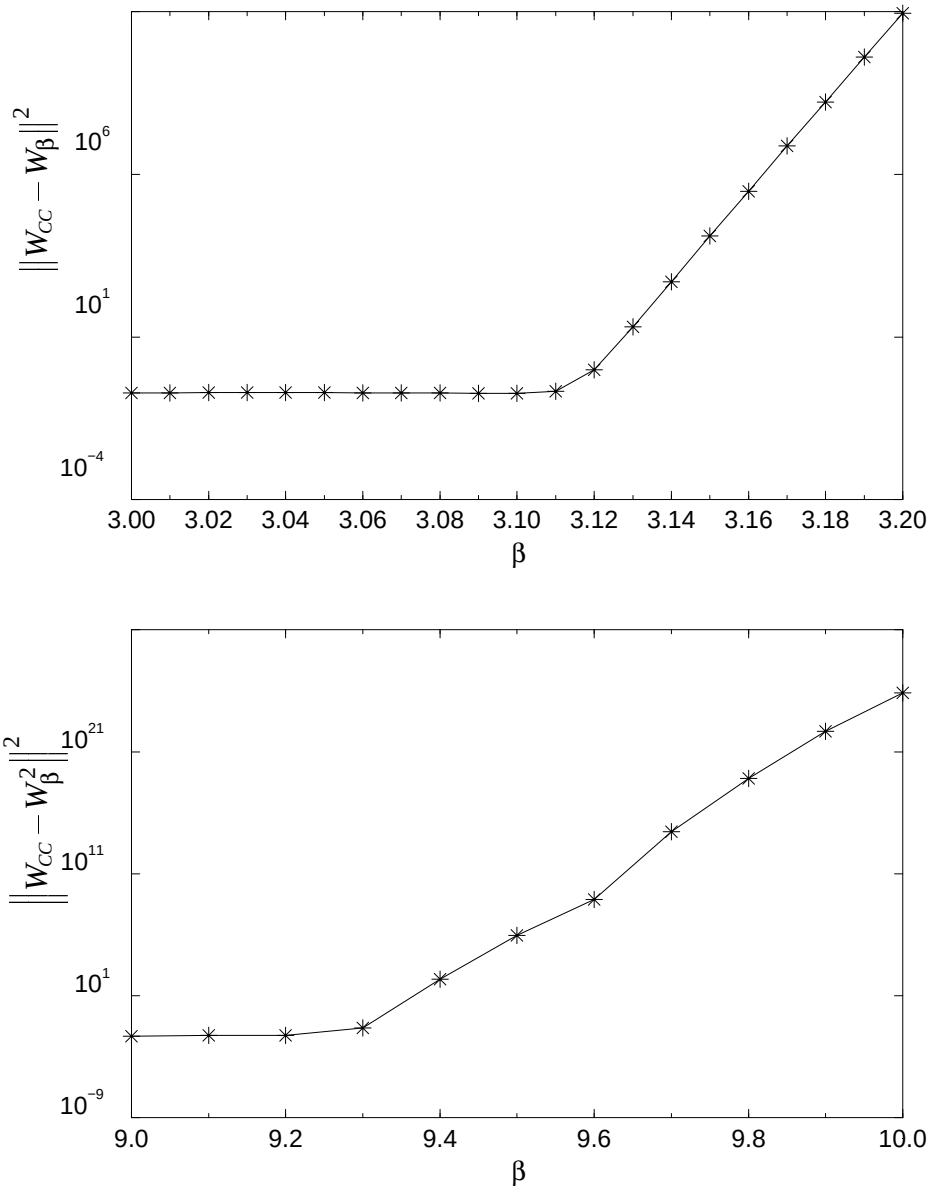

Abbildung 10.38: Quadratischer Fehler von W_β (oben) und W_β^2 (unten); $\alpha = 0.9$, `mpipl` $= 100$

In der Abbildung 10.38 auf der vorherigen Seite haben wir nun die Tabellen 10.17 und 10.18 grafisch wiedergegeben, um der Hypothese des (vermutlich analog zu der Abschätzung[90] (9.127)) Einflusses des (stochastischen) Datenfehlers, exponentiell anwachsenden Numerikfehlers eine weitere Grundlage zu geben; und mehr als einen weiteren Hinweis bzw. weitere Grundlage für ein solches Verhalten des Numerikfehlers kann die Abbildung aufgrund der kleinen Parameterbereiche[91], die dort jeweils wiedergegeben werden, auch nicht sein. Konkret haben wir in der Abbildung 10.38 jeweils den Regularisierungsparameter β gegen den, auf einer logarithmischen Skaler abgebildeten, (quadratischen) Fehler aufgetragen, wobei in der obigen Abbildung die Fehler der Regularisierten der phänomenologischen und in der unteren die der Imaginärteilgleichung dargestellt sind. Wir lesen aus der Abbildung 10.38 ab, daß, sobald der Einfluß des Numerikfehlers an Dominanz gewinnt, der quadratische Fehler in den abgebildeten Parameterbereichen tatsächlich exponentiell anwächst, welches insbesondere in dem oberen Graphen der Abbildung deutlich zu erkennen ist, und somit die Hypothese durch die bisherigen Ergebnisse unterstützt wird. Kritischer betrachtet zumindest keine deutlichen Zweifel an jener Hypothese aufgeworfen. Einen Beweis in strengen Sinne können die bisherigen Untersuchungen selbstverständlich nicht geben.

10.4.4 Fazit der Numerik kontinuierlicher Daten

An dieser Stelle wollen wir ein erstes, auf den bisherigen gesamten Untersuchungen basierendes, Fazit bezüglich der numerischen Regularisierung ziehen. Vorab wollen wir folgendes bemerken:
Sicherlich ist die Drudedichte (10.13) ein numerisch recht pathologisches Problem, welches eventuell besondere Eigenschaften in der numerischen Behandlung aufweisen wird. Jedoch sollte jene Dichte trotzdem in den numerischen Untersuchungen betrachtet werden, insbesondere aufgrund des Umstandes, daß wir sofort auf Deltadichten geführt werden, falls *diskrete* Dichten[92] betrachtet respektive eingeführt werden. Desweiteren erhält die Deltadichte ihre Relevanz und Bedeutung als Lösung des Drudemodells, das auf reinen exponentiellen Zerfälle beruht[93].

Die Begründung für die Betrachtung des schwache Divergenzen aufweisendes Cole-Davidson Modell wurde ja bereits mehrfache[94] gegeben. Desweiteren sei zu bedenken, daß das von uns vorgestellte, durch die Foxsche H-Funktion dargestellte, verallgemeinerte Modell[95] (3.63) bei einem geeigneten Parametersatz ebenso schwache Divergenzen aufweisen wird, und da dieses Modell als eine „allgemeine (Modell-)Lösung“ interpretiert werden kann, die als Grenzfall sogar die Deltafunktion beinhaltet, ist die Untersuchung einer schwachen Divergenzen aufweisenden Modelldichte naheliegend - und ratsam.

Das besonders Interessante des Cole-Cole Modells ist, wie ebenso bereits erwähnt, daß wir nicht nur die Dichte, sondern auch die Vorgegebenen als analytische Ausdrücke vorliegen haben, wodurch die numerische Untersuchung bequemer wird als im Fall einer Gaußdichte; beide Dichten weisen bekanntlich keine irgendwie gearteten Pathologien auf.

Nachdem wir uns die Gründe für die Wahl der Dichten, die wir in den hinter uns liegenden Abschnitten 10.4.1 bis 10.4.3 untersucht haben, nochmal kurz bewußt gemacht haben, wollen wir auf die interessantesten und relevanteste Ergebnisse dieser Abschnitte zu sprechen kommen. Als erstes, und wohl wichtigstes Ergebnis, fällt auf, daß wir zwar prinzipiell numerisch die exakte Lösung bei numerisch exakten Daten reproduzieren können, doch müssen wir dafür letztendlich die numerische Darstellung der Zahlen bis zur

[90] siehe Abschnitt 9.3.2, Seite 170

[91] Der Grund, daß wir hier keine größeren Parameterbereiche wiedergegeben haben, liegt an dem numerischen Aufwand, genauer der Rechenzeit, die die auf Multipräzisionsalgorithmen basierenden Programme benötigen. Es sei aber auch bedacht, daß aufgrund des starken Anwachsens des Fehlers jene kleinen Parameterbereiche in der Praxis relevanter sein werden, als die Variation des Regularisierungsparameters über größere Bereiche.

[92] siehe beispielsweise [Bec88]; es sei bemerkt, daß manchmal kontinuierliche Dichten durch diskrete Dichten in Form einer unendlichen Reihe von Deltafunktionen approximiert werden. Aus der Distributionentheorie folgt aber, daß diese Reihen immer divergent sind [BB93, Wal94],

[93] siehe Abschnitt 3.1 und beispielsweise [AM76, Jac75, Roo69]

[94] siehe Seite 206 und die Bemerkungen am Anfang des Abschnitts 10.4.2

[95] siehe Abschnitt 3.5, Seite 43; siehe in jenem Abschnitt auch die Gleichungen (3.61) und (3.62)

einer beliebig hohen Ordnung durchführen. Mit anderen Worten bedeutet dieses, in einem „Korollar“ verbal ausgedrückt:

Korollar 10.1
Exakte Daten sind im Fall eines exponentiell schlecht gestellten (Entfaltungs-)Problems, dessen einfachste stabilisierende Funktion eine Gaußfunktion ist, ein Synonym für einen analytischen Ausdruck.

Insbesondere bedeutet das „Korollar“ 10.1, daß es nicht ausreicht, die Funktion E^+ zwar an beliebig vielen Stellen und numerisch exakt, d.h. im Rahmen einer immer endlichen numerischen Genauigkeit, zu kennen, sondern tatsächlich auch an jedem Punkt numerisch beliebig, also „unendlich“ genau, um von ungestörten, exakten Daten sprechen zu können. Es sollte klar sein, daß dieses numerisch tatsächlich niemals erfüllbar ist, doch zeigt das Beispiel der Cole-Cole Dichte, bei dem Modellparameter $\alpha = 0.5$, daß wir diese Exaktheit bereits mit „doppelt genauen“ Daten recht gut approximieren können, da jetzt die Exakte durch die Regularisierte mit einem quadratischen Fehler von $\left\|\Delta W_\beta\right\|_{L^2}^2 = 8.77 \cdot 10^{-5}$ im Fall des komplexwertigen phänomenologischen Ansatzes approximiert wird, wobei nur ein kleiner Unterschied in den Graphen der Funktionen zu erkennen ist, und $\left\|\Delta W_\beta\right\|_{L^2}^2 = 2.2 \cdot 10^{-6}$ im Fall der real- und imaginärteiligen Integralgleichungen, wobei wir hier insbesondere visuell keine Unterschiede in den betreffenden Graphen erkennen können.

Vergleichen wir diese Resultate mit den entsprechenden im Fall des Modellparameter $\alpha = 0.9$, der eine schmale Dichte beschreibt, so erkennen wir desweiteren, da jetzt die Graphen der Regularisierten immer deutliche Unterschiede zu den Graphen der Exakten aufweisen, daß hier zum einen sicherlich „doppelt genaue“ Daten noch keine hinreichend gute Approximation zu exakten sind, und zum anderen, das wohl wichtigere Ergebnis, daß breite Dichten, die sich auf der τ-Skalar über mehrere Dekaden[96] erstrecken, einfacher zu approximieren sind respektive durch die Regularisierten reproduziert werden, als schmale Dichten. Dieses belegen auch die rein auf MP-Zahlen basierenden Ergebnisse, denn erst hier können wir die Cole-Cole Dichte, bei dem Parameter $\alpha = 0.9$, bis auf einem quadratischen Fehler von hier minimal $\left\|\Delta W_\beta\right\|_{L^2}^2 = 0.00049$, bei der Regularisierung des Imaginärteils, approximieren. Es sind dabei nur geringe Unterschiede zur Exakten zu erkennen.

Das nächste wichtige Ergebnis ist der Umstand, daß wir auf der Basis der Regularisierten aufgrund der Manigfaltigkeit der Havriliak-Negami Dichte, und insbesondere des verallgemeinerten Modells, die Cole-Davidson Dichte nur schwer separieren können, d.h. zu entscheiden, ob die zugrundeliegende Exakte eine schwache Divergenz besitzt oder nur eine besonders scharfe Struktur. Um die schwache Divergenz des Cole-Davidson Modells in der Regularisierten tatsächlich zweifelsfrei identifizieren zu können, müssen wir mit dem Regularisierungparameter in die Größenordnung $\beta = 100$ oder höher gelangen. Bedenken wir jetzt jedoch die Grenzen des Parameters β, bis zu denen die Numerik stabil ist, bei der auf „doppelt genaue“ Daten basierende Regularisierung, so erkennen wir sofort die Unmöglichkeit der zweifelsfreien[97] Unterscheidung jener Modelle.

Jene Grenzwerte haben wir jetzt in der Tabelle 10.19, einzeln für jedes der betrachteten Modelle, der Übersicht halber zusammengefaßt. Hierbei sollen die Punkte bei einigen Werten andeuten, daß die Regularisierten des zuletzt angegebenen Wertes, trotz merklichen Einflusses des Numerikfehlers, noch als akzeptabel betrachtet werden könnten. Betrachten wir nun die Werte in der Tabelle, so können wir als generelle pessimistische[98] Grenzen für β bei der Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung $\beta \leq 1.3$, wobei die Deltadichte hier eine Außnahme bildet, und bei der Regularisierung der real- und imaginärteiligen Integralgleichung $\beta \leq 4.0$ angeben[99]. Wir wollen der Ehrlichkeit wegen erwähnen, daß wir bisher keine plausible Erklärung[100] für den geringeren maximalen Wert des Regularisierungparameters bei der Deltadichte in

[96] Das wesentliche hier ist die Erstreckung über Dekaden.

[97] Von einer eindeutigen Unterscheidung wagen wir aufgrund der bisher dargelegten Ergebnisse bereits nicht mehr zu sprechen.

[98] Pessimismus ist hier in der (eigentlichen) Bedeutung des maximal Möglichen zu verstehen.

[99] Diese Grenzen können u.U. tatsächlich bei diskreten Daten erreicht werden jedoch mit einem entsprechend größeren Fehler als im Fall reiner MP-Daten.

[100] Eine Vermutung ist das für die Numerik unglückliche Zusammenspiel von regularisiereden Kern und der Vorgegebenen, wobei

der Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung haben.

Delta Dichte	
Komplexwertige	Real-/Imaginärteil
0.6	3.9
Cole-Davidson Dichte	
Komplexwertige	Real-/Imaginärteil
1.2, ..., 1.3	3.5, ..., 3.8
Cole-Cole Dichte	
Komplexwertige	Real-/Imaginärteil
1.25	3.5, ..., 3.8 ($\alpha = 0.5$)
1.3	3.8 ($\alpha = 0.5$)

Tabelle 10.19: Grenzen des Regularisierungsparameters β bei „doppelt genauen“ Daten

Die verschiedenen Grenzen der Regularisierung der komplexwertigen einerseits und der real- und imaginärteiligen Intergralgleichung andererseits spiegeln jetzt quantitativ wider, was wir bereits deutlich qualititiv an den betreffenden Graphen beobachtet haben: die Regularisierung des ursprünglichen komplexwertigen, phänomenologischen Ansatzes ist numerisch schwieriger, d.h. bricht schneller zusammen, als die jeweilige einzelne Regularisierungen des Real- und des Imaginärteils des Ansatzes. Obwohl die Behandlung des gesamten komplexwertigen Ansatzes, um analytische Aussagen zu gewinnen, von Vorteil war, denn so stand uns dafür beispielsweise auf natürlicher Weise die Funktionentheorie zur Verfügung, unter deren Berücksichtigung dann ebenso die Mellin-Transformationen eleganter gelöst[101] werden können, ist es bei der numerischen Behandlung offensichtlich jedoch günstiger und sinnvoll, die Real- und Imaginärteilintegralgleichungen als eigenständige Gleichungen zusätzlich zu der komplexwertigen zu betrachten; denn schließlich können wir kaum damit rechnen, daß wir dieses unterschiedlich Verhalten, bis die Numerik zusammenbricht, nicht bei der numerischen Regularisierung diskreter Daten beobachten werden. Ein Grund für dieses wird gerade der Umstand sein, daß wir aus komplexen Funktionen eine Dichte, also per definitionem eine reelle Funktion, berechnen, der Imaginärteil des Integrals (10.6), der entsprechend oszillatorische Anteile aufweisen wird, also Null sein muß. Es ist somit nicht wirklich verwunderlich, daß wir ein derartiges unterschiedliches Konvergenzverhalten der Numerik beobachten.

Abschließend wollen wir noch hauf das folgende hinweisen:
Aus den schon genannten Gründen, ist es natürlich nicht möglich, eine Deltadichte numerisch darzustellen, sondern bestenfalls numerisch durch eine herkömmliche Funktion zu approximieren. Erinnern wir uns jetzt daran, daß die theoretischen Regularisierten sowohl der Delta- als auch der Gaußdichte, bei der Verwendung eines Gaußfilters und somit einer Gaußschen Mollifier-Funktion, selbst wieder Gaußfunktionen sind. Im ersten Fall wird die Mollifier-Funktion selbst reproduziert[102], im zweiten Fall erhalten wir die Gaußsche Mollifier-Funktion mit einem „renormierten“ Regularisierungsparameter, wie bereits im Abschnitt 9.5.2 dargelegt haben[103]. Betrachten wir, dieses mit bedenkend, nocheinmal die Grenzwerte des Parameters β in der Tabelle 10.19 für das Drudemodell, so erkennen wir die weitere, neben der bezüglich des Cole-Davidson Modells, Unmöglichkeit der Unterscheidung einer approximierten Deltadichte von einer, vom Wesen her ebenso approximierten, schmalen Gaußdichte. Es ist, aufgrund des „niedrigen“ Maximalwertes des Parameters bei der Regulasrisierung der Real- und Imaginärteilintegralgleichungen, pessimistisch zu bemerken, daß wir Probleme haben dürften, eine zugrundeliegende Delta- von einer nur relativ schmalen

erstere von der letzteren abhängt; siehe insbesondere die Darstellung in den Kapiteln 6ff

[101] Wir wollen diesbezüglich insbesondere auf das dreibändige Werk von DOETSCH [Doe71, Doe72, Doe73] verweisen.

[102] siehe Gleichung (10.14) im diesem Kapitel

[103] siehe Gleichungen (9.232) und (9.233), Seite 195

Gaußdichte, auf der Basis der Regularisierten, unterscheiden[104] zu können.

10.5 Die Regularisierung diskreter Daten oder Simulierte Meßwerte

Nach all den hinter uns liegenden unerläßlichen Untersuchungen, wenden wir uns nun den mehr der Praxis bezogenen zu: der Untersuchung der (numerischen) Regularisierung diskreter Daten. In diesem Abschnitt werden wir ebenso Meßwerte simulieren, indem wir den diskreten Daten zusätzlich einen stochastischen Fehler, generiert durch gleichverteilte Zufallszahlen, aufprägen werden, und die Regularisierung dieser Daten untersuchen. Neben den im vorangegangenen Abschnitt 10.4 untersuchten Dichten, werden wir zusätzlich noch die Gaußdichte und den Friedrichschen Glättungoperator als Modelldichten betrachten.

Zuerst aber ein paar Bemerkungen respektive Erläuterungen zur numerischen Realisierung: Wie in den vorangegangenen Abschnitt, wird auch hier prinzipiell die Numerik auf der Basis der Multipräzisionsbibliothek `mpfun++` durchgeführt. Dieses bedeutet konkret, daß die regularisierenden Kerne[105] $\Phi_\beta^{1,2}$ wieder durch `MP`-Zahlen, aufgrund der numerisch stabilisierenden Eigenschaften[106] der Multipräzisionsalgorhitmen bei der Integration über die stark oszillierenden Kerne, dargestellt werden. Die diskreten Daten werden zur numerischen Integration linear interpoliert, und anschließend werden die interpolierten zu `MP`-Zahlen konvertiert. Bezüglich des Integrationsverfahrens ist zu erwähnen, daß wiederum die Trapezroutine und die Gaußintegration die selben Ergebnisse liefern. Tatsächlich ist numerisch zwischen diesen beiden Integrationsverfahren kein Unterschied zu erkennen; genauer liegt die relative Abweichung $\sigma_{\text{rel}}^{\text{num}}$, unabhängig von der betrachteten Modelldichte, bei $\sigma_{\text{rel}}^{\text{num}} \leq 10^{-14}\%$. Wir wollen noch darauf hinweisen, daß durch die Konversion der Daten zu `MP`-Zahlen keine weitere Fehlerquelle hinzukommt. Vergleichen wir den Datenfehler der auf den „doppelt genauen“ Datentyp basierenden Daten, den Fehler also bezüglich der „doppelt genauen“ ungestörten Funktion, mit den Fehler, bezogen auf die ungestörte `MP`-Version der Vorgegebenen, der konvertierten Daten, so sind diese Fehler numerisch exakt gleich[107]. Untersuchen wir jetzt wieder einige Modelldichten.

Noch eine Bemerkung zu der weiteren Vorgehensweise in den nun folgenden Untersuchungen: Wie wir zur Tabelle 10.19 bemerkt haben[108], ist es bei der Numerik sinnvoll, die real- und imaginärteiligen Gleichungen als eigenständige zusätzlich zu - oder an Stelle von - der komplexen zu betrachten. Anders ausgedrückt ist der bei kontinuierlichen „doppelt genauen“ Daten erreichbare Maximalwert des Parameters $\beta_{\max}$ von 1.3 gerade im Hinblick einer praktischen Anwendung recht gering, und so wird die Regularisierte jener Integralgleichung generell ein nur sehr verschwommenes Bild der zugrundeliegenden exakten Lösung sein. Dieses hat zur Konsequenz der schwerpunktmäßigen Untersuchung der Integralgleichungen des Real- und des Imaginärteils gegenüber des (gesammten) komplexwertigen Ansatzes. Dieses bedeutet u.a., daß wir uns auf die wesentlichen numerischen Ergebnisse[109] bei der Regularisierung der komplexwertigen beschränken werden.

---

[104] Eine philosophische Bemerkung dazu: Es ist natürlich fraglich, ob es sich bei dieser Unmöglichkeit der Unterscheidung tatsächlich um ein wesentliches Problem handelt, da hier die Frage nach der Existens von Deltadichten in der Natur berührt wird. Wir wissen aber seit KANT (siehe [Kan95]), daß Existenz kein reales Prädikat ist, und zum anderen sollten wir uns, spätestens seit der Problematik der Interpretation der Quantenmechanik, hüten aufgrund der Lösung des mathematischen phänomenologischen Ansatzes eine ontologische Aussage bezüglich der Lösung zu treffen. Es sollte somit klar sein, da es sich bei der Deltadichte in Rahmen einer mathematischen, physikalischen Beschreibung ebenso um ein Idealisierung handelt, daß wir tatsächlich niemals experimentell reine Deltadichten werden beobachten können. Für weiteres sei, neben KANT, auf beispielsweise auf die entsprechenden Darlegungen zur Wissenschafts- und Erkenntnistheorie von HAAG in [Haa83] hingewiesen.

[105] siehe auch die Gleichungen (9.162), (9.15) und (9.16)

[106] siehe die Ausführungen zur Abbildung 10.9 auf Seite 240

[107] Natürlich unterscheiden sich die Fehler nach dem durch den „doppelt genauen“ Datentyp nicht mehr dargestellten Nachkommestellen. Ansonsten ist aber tatsächlich keine Abweichung dieser Datenfehler voneinander von uns beobachtet worden.

[108] siehe am Ende des vorangegangenen Kapitels, Seite 283

[109] Aufgrund der Ergebnisse des Abschnitts 10.4 gilt jene Beschränkung so in gewisser Weise generell, also auch für die Integralgleichungen für E_1 und E_2.

10.5.1 Das Drudemodell

Als erstes wollen wir uns wieder dem Drudemodell, also den Deltadichten, zuwenden. Die **Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung**, gemäß Gleichung (10.6), wollen wir, entsprechend dem eben erwähnten, also nur kurz abhandeln. Hier gilt jenes sogar noch in verschärfter Form, da der maximal mögliche Regularisierungparameter [110] $\beta_{max} = 0.6$ beträgt; das Bild der Regularisierten W_β wird so grundsätzlich nur eine „stark verwaschene“ Approximation der theoretischen W_D sein. Die komplexwertige Integralgleichung ist also für die Regularisierung von Deltadichten generell besonders schlecht geeignet.

Wenden wir uns also nun kurz der Regularisierten (10.6) zu. Untersuchen wir zuerst die Regularisierung reiner diskreter Datensätze, d.h. neben der numerischen Diskretheit und der Endlichkeit der Zahlendarstellung, konkret durch den Datentyp „doppelt genau“, möge die Funktion E^+ keine weiteren Fehler besitzen.

Die Abbildung 10.39 auf der nächsten Seite zeigt jetzt die Ergebnisse der Regularisierung eines Datensatzes, dessen Anzahl der Datenpunkte *MD*, in den Intervall $[-10;\ 10]$, 1024 betrug. Wir haben uns in jener Abbildung auf die Wiedergabe der Ergebnisse für die maximal möglichen Parameter beschränkt. Die Graphen, in denen der Fehlereinfluß dominiert, entsprechen dem Fall kontinuierlicher „doppelt genauer“ E^+, wie in den Abbildungen 10.5 auf Seite 234 und 10.6 auf Seite 235 dargestellt. Wie erwartet ist $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ wieder ein Maß für den Fehler der Regularisierten, und wir erkennen deutlich die Dominanz eines systematischen numerischen Gesamtfehlers, der jedoch eine andere Struktur besitzt als im Fall kontinuierlicher Daten.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta\|_{L^2}^2$	ε^2
0.5	$7.40372 \cdot 10^{-09}$	$1.06754 \cdot 10^{-10}$
0.6	$1.47847 \cdot 10^{-07}$	

Tabelle 10.20: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β und Datenfehler: $MD = 1024$

In der Tabelle 10.20 sind wieder die in der, numerisch approximierten, L^2-Norm gemessenen Abweichungen wiedergegeben. Wie wollen darauf hinweisen, daß wir jetzt wieder den Fehler der numerischen regularisierten W_β gegenüber der theoretischen regularisierten W_β^{th} angegeben haben[111]. Desweiteren habe wir jetzt auch den (quadratischen) Datenfehler ε^2, gegeben durch $\varepsilon^2 = \|E_T^+ - E^+\|_{L^2}^2$, angegeben; genauer handelt es sich hier um den Fehler der linear interpolierten Daten[112]. Es ist bemerkenswert, daß wir wiederum als maximal möglichen Parameter $\beta_{max} = 0.6$ erhalten und Datensätze mit einem größeren Datenintervall und einer größeren Datenzahl natürlich keine Verbesserung bringen. Entgegengesetzt würde sich die Qualität der Regularisierten bei einer Verringerung der Anzahl der Datenpunkte verschlechtern.

Betrachten wir nun die Regularisierung fehlerbehafteter Daten, d.h. wir haben dem Datensatz, auf dem die Ergebnisse der gerade diskutierten Abbildung 10.39 basieren, noch ein numerisches, stochastisches Rauschen aufgeprägt. Konkret wurde dieses Rauschen durch die Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen, wie es in [PTVF92, Sto99] beschrieben und erklärt wird, realisiert. Wir wollen an dieser Stelle darauf hinweisen, daß die so erzeugten Zufallszahlen eine Funktion der Variablen t sind, d.h. daß wir tatsächlich eine stochastische Funktion $\nu(t)$ numerisch realisiert haben. Dieses ist deswegen von Vorteil, da wir so verschiedene Datensätze, die sich zwar bezüglich der Länge deren Datenintervalls und der Anzahl *MD* der Daten unterscheiden mögen, ansonsten jedoch das gleiche Fehlerniveau besitzen mögen, also durch die gleiche stochastische Funktion ν gestört sein mögen, ohne Probleme vergleichen können.

In der Abbildung 10.39 auf der nächsten Seite zeigen wir nun die Ergebnisse für einen Datensatz mit $MD = 1024$, $[-10;10]$ und einen *relativen mittleren Fehler* $\sigma_{rel} = (0.04 \pm 0.02)\%$. Zu diesen Datensatz

[110] siehe Tabelle 10.19 auf Seite 283

[111] siehe die diesbezüglichen Bemerkungen am Anfang des Abschnitts 10.4.1

[112] Offensichtlich ist der Fehler der interpolierten von der gleichen Größenordnung wie der Fehler der „reinen“ diskreten Daten.

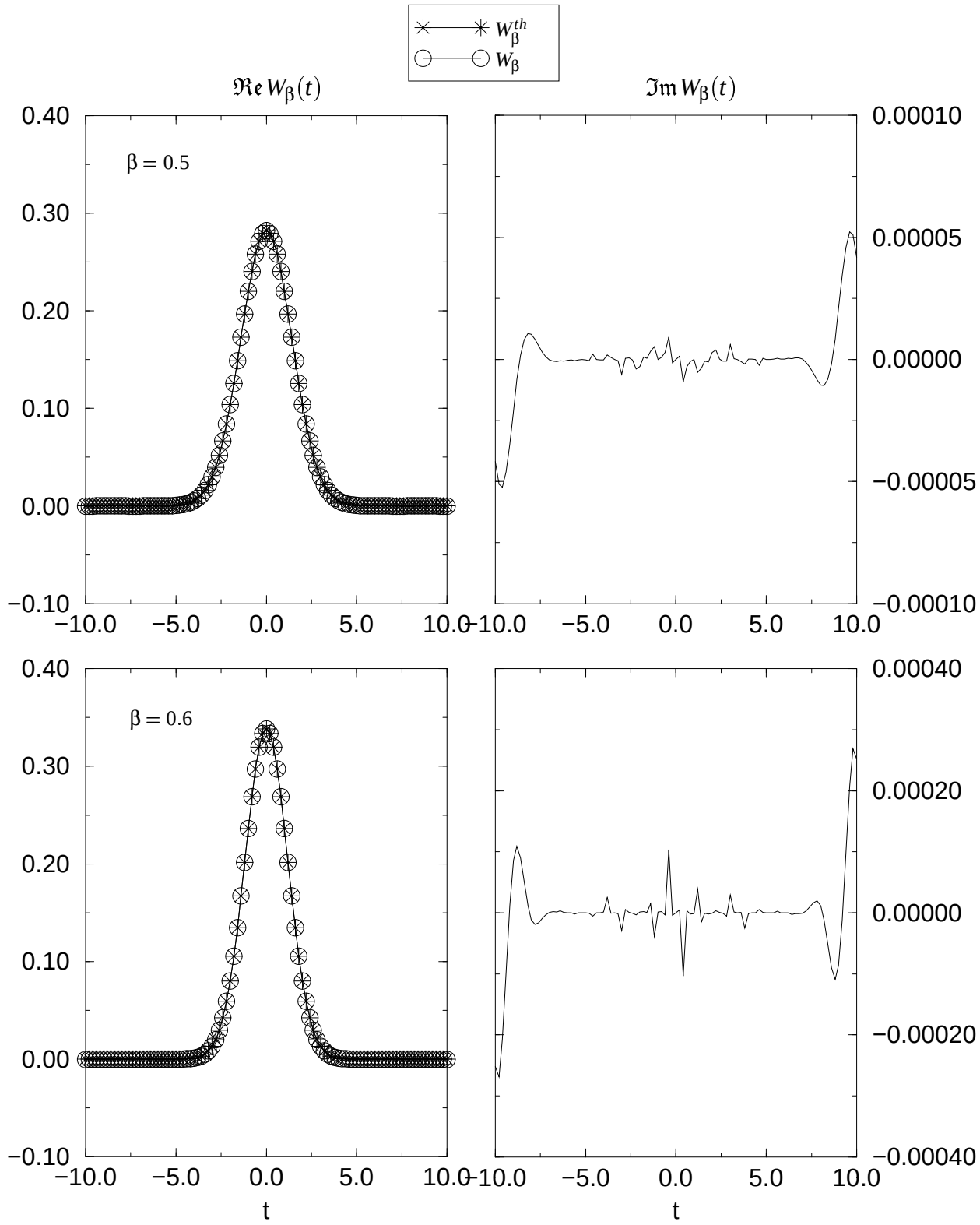

Abbildung 10.39: Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes bei diskreten Daten; $0.5 \leq \beta \leq 0.6$, $MD = 1024$

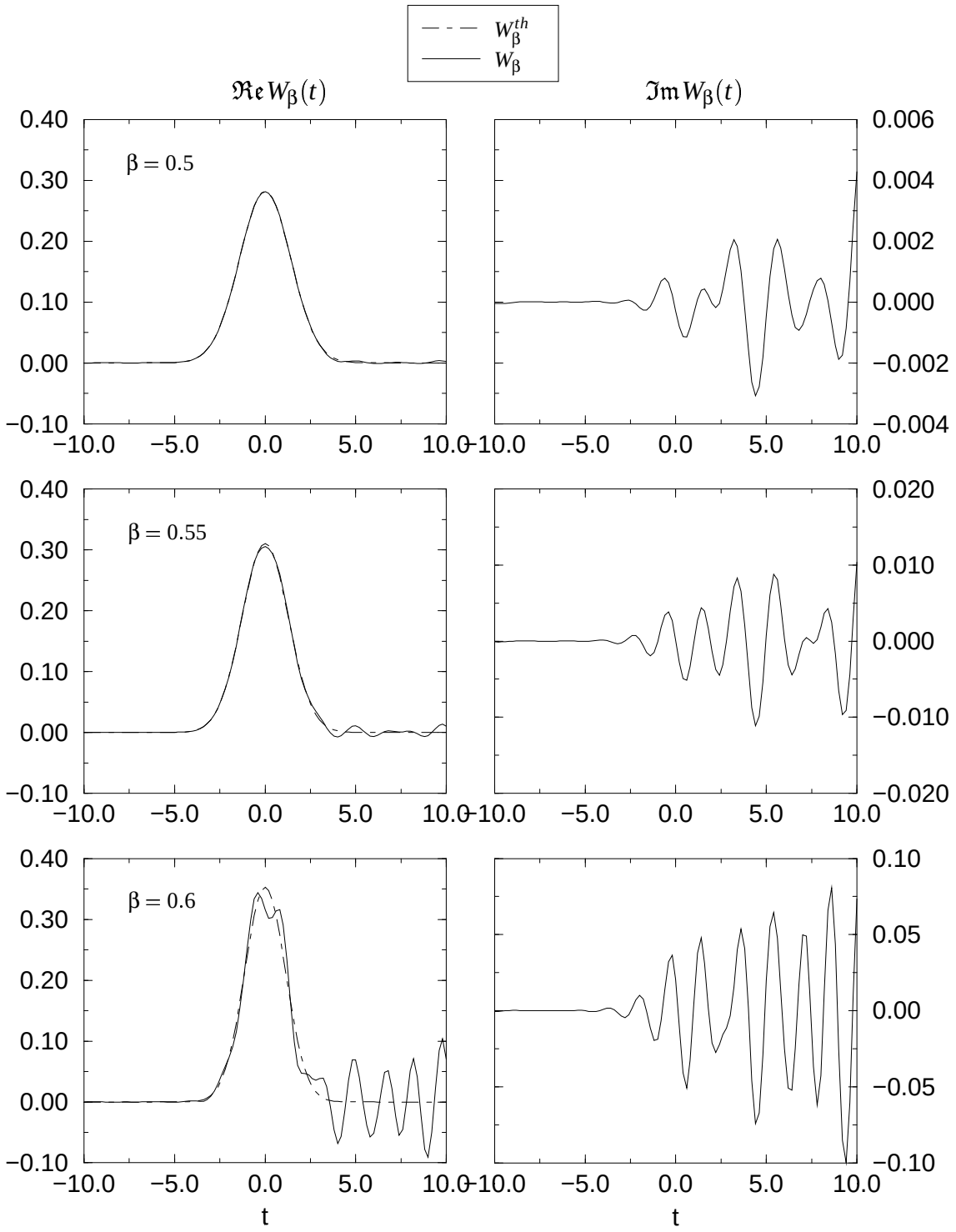

Abbildung 10.40: Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes bei diskreten Daten: $0.5 \leq \beta \leq 0.6$, $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

ist zu bemerken, daß dieser bereits eine optimistischen Simulation eines experimentell aufgenommenen Datensatzes verkörpert: wenn auch die Zahl der Datenpunkte experimentell noch realisierbar ist, obwohl jene bereits eine „obere Schranke“ darzustellen scheint, ist der relative Datenfehler im Promillebereich praktisch sicherlich kaum realisierbar[113]. Wie bisher üblich, haben wir die relevanten Fehler in der Tabelle

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta\|_{L^2}^2$	ε^2
0.5	$4.20977 \cdot 10^{-05}$	
0.55	0.00059	$1.95 \cdot 10^{-06}$
0.6	0.00501	

Tabelle 10.21: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β und Datenfehler: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

10.21, wobei wir ebenso den in der L^2-Norm gemessenen quadratischen Datenfehler ε^2, neben dem eben bereits angegebenen relativen Fehler σ_{rel}, aufgelistet haben.

Sowohl die Werte der Tabelle 10.21 als auch die in 10.40 abgebildeten Graphen bestätigen das schon erwartete Ergebnis: der maximal erreichbare Wert $\beta_{\max}$ ist jetzt nicht mehr der, den wir bei den prinzipiell als fehlerlos betrachteten Daten erhalten, sondern verringert sich. Wir können an dem Graphen der Regularisierten bei $\beta = 0.5$ bereits die ersten oszillatorischen Störungen, der hinweist auf den Beginn der Dominanz des Numerik- und Datenfehlers, beobachten, die bei $\beta = 0.55$, also nach der minimalen Variation von $\Delta\beta = 0.05$, bereits deutlicher ausgebildet sind und letztendlich, nach der erneuten minimalen Variation um $\Delta\beta = 0.05$, bei $\beta = 0.6$ die Regularisierte bereits in einer verfälschenden Art und Weise beeinflußt, denn während die Oszillationen bei positiven t's noch als solche zu erkennen sind, ist die „doppelt Peak“ Struktur also ein numerisches Artefakt, welches ohne die Kenntnis der theoretischen Regularisierten nicht unbedingt als solche zu erkennen ist.

Als letztes wollen wir uns nun einen mehr realistischen Datensatz, d.h. einen, der auf einem Experiment beruhen könnte, zuwenden. Dabei haben wir den bisher verwendeten diskreten Daten, also die mit den „Datensatzparametern “ $MD = 1024$ und $[-10;\ 10]$, die gleichverteilten Zufallszahlen, die den stochastischen Fehler numerisch modellieren sollen, derart aufgeprägt, daß wir jetzt einen mittleren relativen Fehler im Prozentbereich erhalten; konkret betrug der relative Fehler hier $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$. In der Tabelle 10.22

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta\|_{L^2}^2$	ε^2
0.1	0.0220	
0.2	0.0123	
0.3	0.0118	
0.4	0.0224	0.0191
0.45	0.1951	
0.5	0.4518	

Tabelle 10.22: Differenz zwischen W_β^{th} und W_β und Datenfehler: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

sind wieder die Fehler der Regularisierung, in der (numerisch approximierten) L^2-Norm ausgedrückt, aufgelistet. Wir können aus jener Tabelle ablesen, daß bereits bei diesem relativ geringen Datenfehler (wir haben hier $\varepsilon^2 = 0.0191$, die Abweichung der numerischen regularisierten W_β von der theoretischen Regularisierten W_β^{th}) selbst bei diesen recht niedrigen Werten des Parameters β, im Vergleich zu den bisherigen Ergebnissen, schon recht groß sind. Dieses ist auf den bereits bei diesen kleinen aufgelisteten β-Werten be-

[113] Wir haben nicht den Anspruch, einen vollständigen Überblick über die experimentell realisierbaren Datensätze zu besitzen, doch beziehen wir uns hier auf die Aussagen in [Bec88, LBP91] und die veröffentlichten Daten wie beispielsweise in [CC41, DC51, UT95]

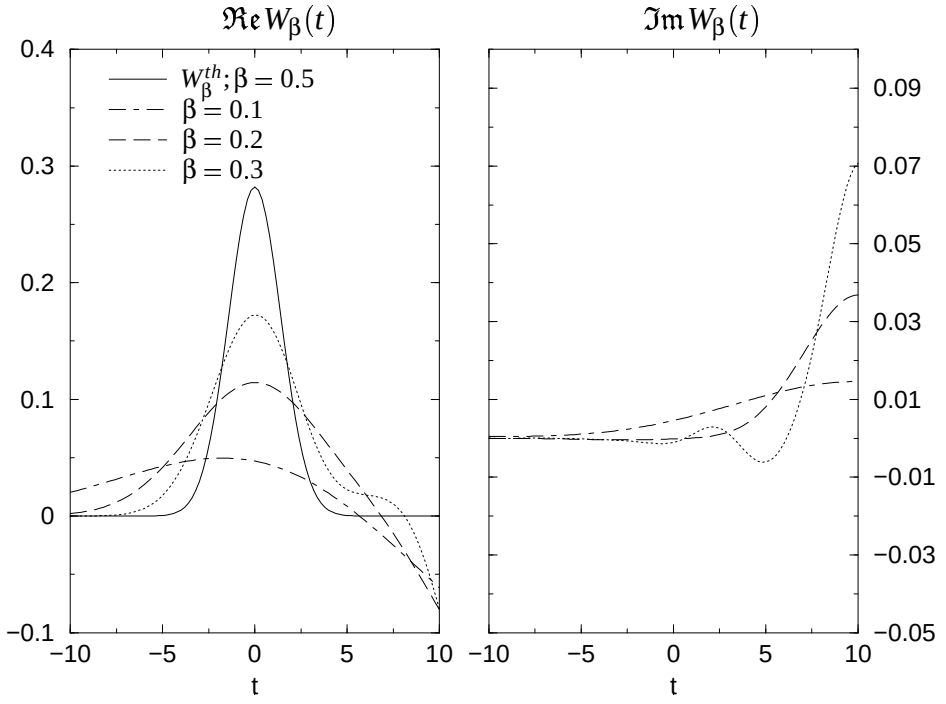

Abbildung 10.41: Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes bei diskreten Daten: $0.1 \leq \beta \leq 0.3$, $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

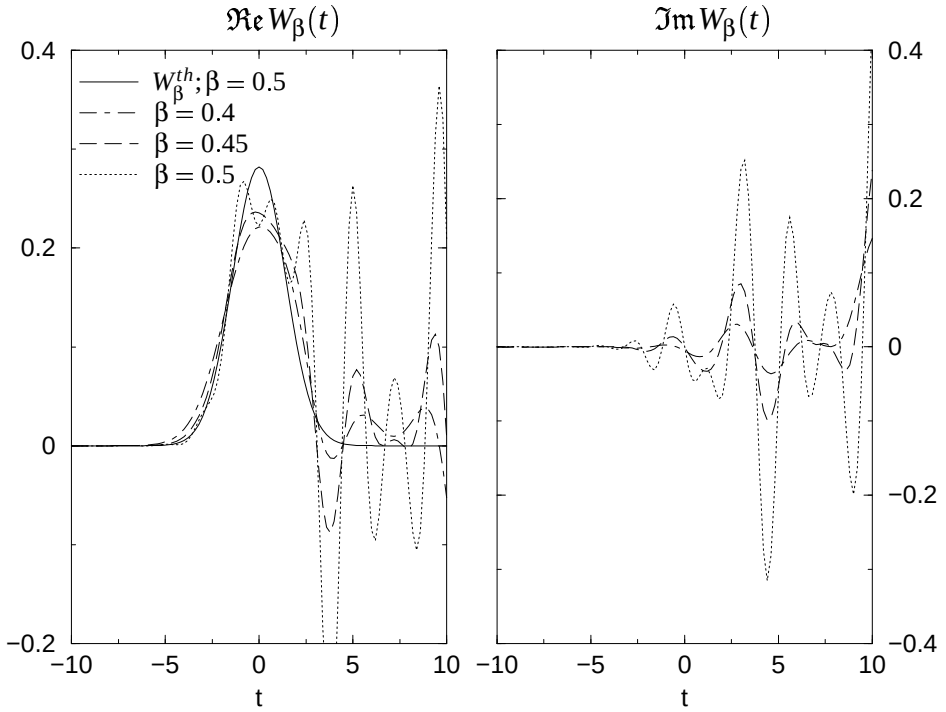

Abbildung 10.42: Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes bei diskreten Daten: $0.4 \leq \beta \leq 0.5$, $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

ginnenden gesammten Datenfehlereinfluß[114] zurückzuführen. Das Minimum des auf die theoretische W_β^{th} bezogenen Fehlers liegt in bei den in der Tabelle angegebenen Werten bei $\beta = 0.3$.

In der Abbildung 10.41 auf der vorherigen Seite haben wir die numerischen Ergebnisse für den Parameterbereich $0.1 \leq \beta \leq 0.3$ grafisch angegeben. Es fällt sofort ins Auge, und dieses läßt bereits die Tabelle vermuten, daß sich schon bei $\beta = 0.1$ ein Datenfehlereinfluß bemerkbar macht; der numerische $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ weist hier einen Nulldurchgang auf, der sich im Laufe steigender β zu Oszillationen ausbildet, deren weitere Entwicklung - und deren weiteren Verlauf - wir in der Abbildung 10.42 auf der vorherigen Seite beobachten können. Der Graph des minimalen Fehlers bei $\beta = 0.3$ weist zwar die charakteristische Gaußstruktur von W_β^{th} auf, doch wird diese durch die Oszillationen überlagert, wobei an dieser Stellen noch keine eindeutige Zuordnung, was eine tatsächliche Struktur der Zugrundeliegenden abbildet und was numerische, oszillatorische Artefakte sind, möglich ist.

In der Abbildung 10.42 auf der vorherigen Seite sind jetzt noch die numerischen Ergebnisse für den Parameterbereich $0.4 \leq \beta \leq 0.5$ grafisch wiedergegeben. Hier fällt desweiteren sofort auf, was letztendlich die Zahlenwerte der Tabelle 10.22 einen schon ohne der Kenntnis der Abbildung 10.41 auf der vorherigen Seite vermuten lassen können, daß wir bereits im Graphen bei $\beta = 0.4$ deutlich oszillatorische Störungen beobachten können, die mit wachsendem Parameter β quasi „exponentiell“ in ihren Amplituden zunehmen. Den Einfluß generell und das, wie bisher, „explosionsartige“ Anwachsen des Datenfehlers können wir ebenso wieder sehr klar an den Graphen von $\mathfrak{Im}\, W_\beta$ ablesen: jener bei $\beta = 0,4$ ist bereits deutlich von Null verschieden, das gilt offensichtlich ebenso bereits für den in 10.41 abgebildeten $\mathfrak{Im}\, W_\beta$, und weist eine oszillatorische Struktur auf. Wir vermuten deswegen, daß der Datenfehler den Gesamtfehler derart beeinflußt, daß ein „effektiver“ systematische Numerikfehler letztendlich dominiert. Erwähnenswert wäre noch, daß die Absolutwerte von $\mathfrak{Re}\, W_\beta$ und $Im W_\beta$ bei $\beta = 0.5$ bereits in der gleichen Größenordnung sind.

Die eben vorgestellten Ergebnisse bestätigen also unsere pessimistischen und kritischen Betrachtungen am Ende des vorangegangenen Abschnitts 10.4 und am Anfang dieses Abschnitts 10.5: speziell auf der Basis der Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung wird es nicht möglich sein, eine zugrundeliegende Delta- von einer Gaußdichte zu unterscheiden, geschweige denn, überhaupt eine Deltadichte zu identifizieren. Dieses gilt insbesondere bei der Regularisierung „realer“ Meßwerte.

Als nächstes wollen wir uns der **Regularisierung der Real- und der Imaginärteilintegralgleichung** zuwenden. Im Gegensatz zu der auf diskrete Datensätze basierenden Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung, bei der wir, wie eben gezeigt, bereits mit den Datensatz $MD = 1024$ und $[-10;\ 10]$ das Ergebnis der Regularisierung kontinuierlicher Daten reproduzieren konnten, ergibt sich bei ersteren Gleichungen diesbezüglich überaschenderweise ein anderes Bild. Wie wir gleich demonstrieren werden, genügt die Anzahl der Datenpunkte von $MD = 1024$ sogar bei weitem noch nicht, um überhaupt mit den Regularisierungsparameter β in die Gegend des kontinuierlichen Maximalwertes $\beta_{\max}$ zu gelangen, bis die Numerik zusammenbricht respektive der gesammte Datenfehlereinfluß den Graphen der Regularisierten in der bekannten destruktiven Weise dominiert.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
2.6	$2.33 \cdot 10^{-05}$	$3.15 \cdot 10^{-05}$		
2.7	0.0053	0.0063	$3.25 \cdot 10^{-10}$	$2.84 \cdot 10^{-10}$
2.8	0.9459	1.0495		

Tabelle 10.23: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 1024$

Als erstes haben wir in der Tabelle 10.23 die Fehler der Regularisierung des bisher bei der komplexwertigen Gleichung verwendeten reinen[115] Datensatzes, mit $MD = 1024$ und $[-10;\ 10]$, und den jeweiligen (qua-

[114] Wir werden im folgedem „Datenfehler“ und „gesammter Datenfehler“ als Synonyme für die Summe des reinen Datenfehlers und des Numerikfehlers verwenden, es sei denn, daß wir auf die Unterscheidung jener beiden Fehlerquellen explizit hinweisen werden.

[115] Es sei daran erinnert, daß außer der (numerischen) Diskretheit und der Endlichkeit der numerischen Zahlendarstellung jene Daten

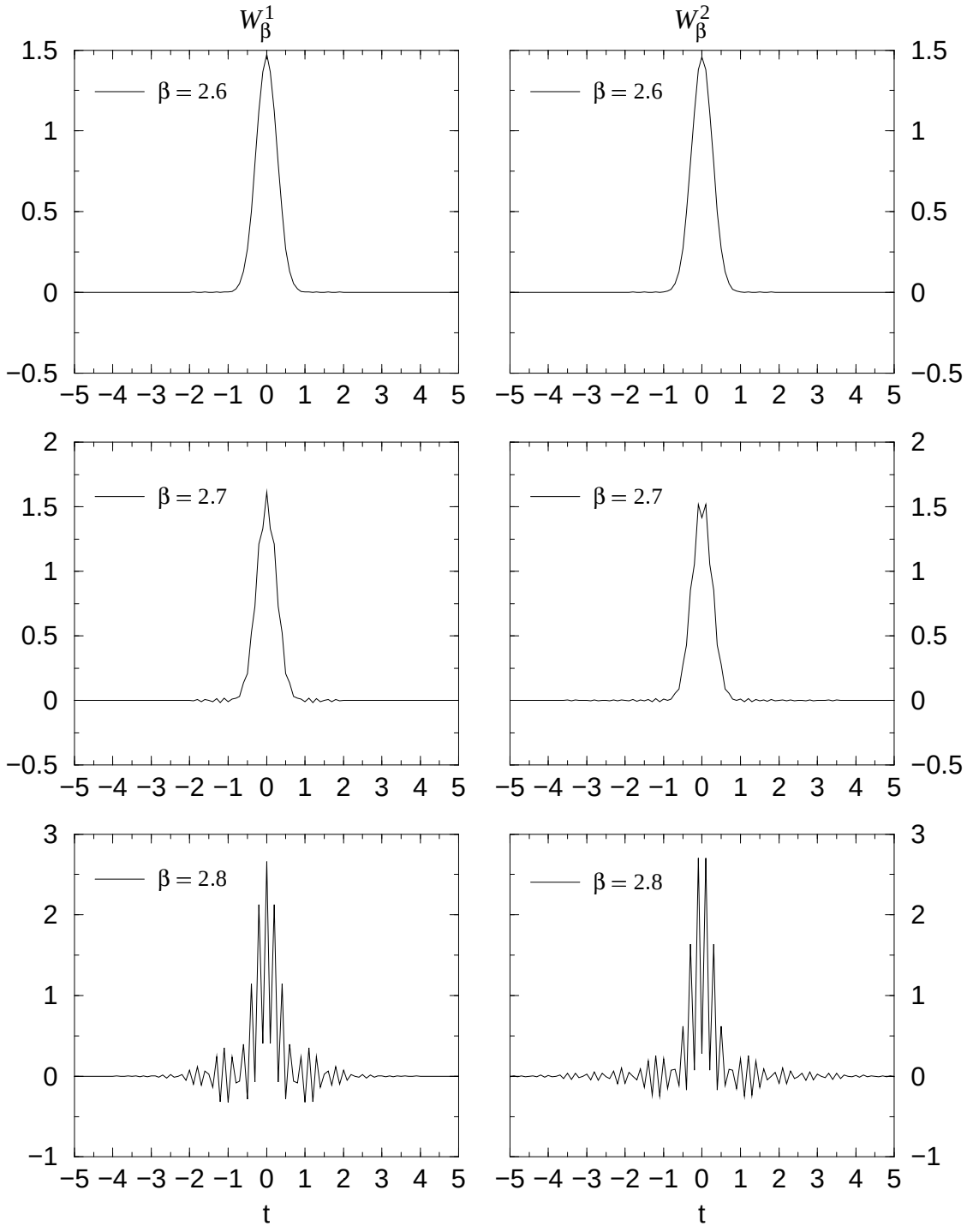

Abbildung 10.43: Regularisierte W_β^1 und W_β^2: $2.6 \leq \beta \leq 2.8$, $MD = 1024$

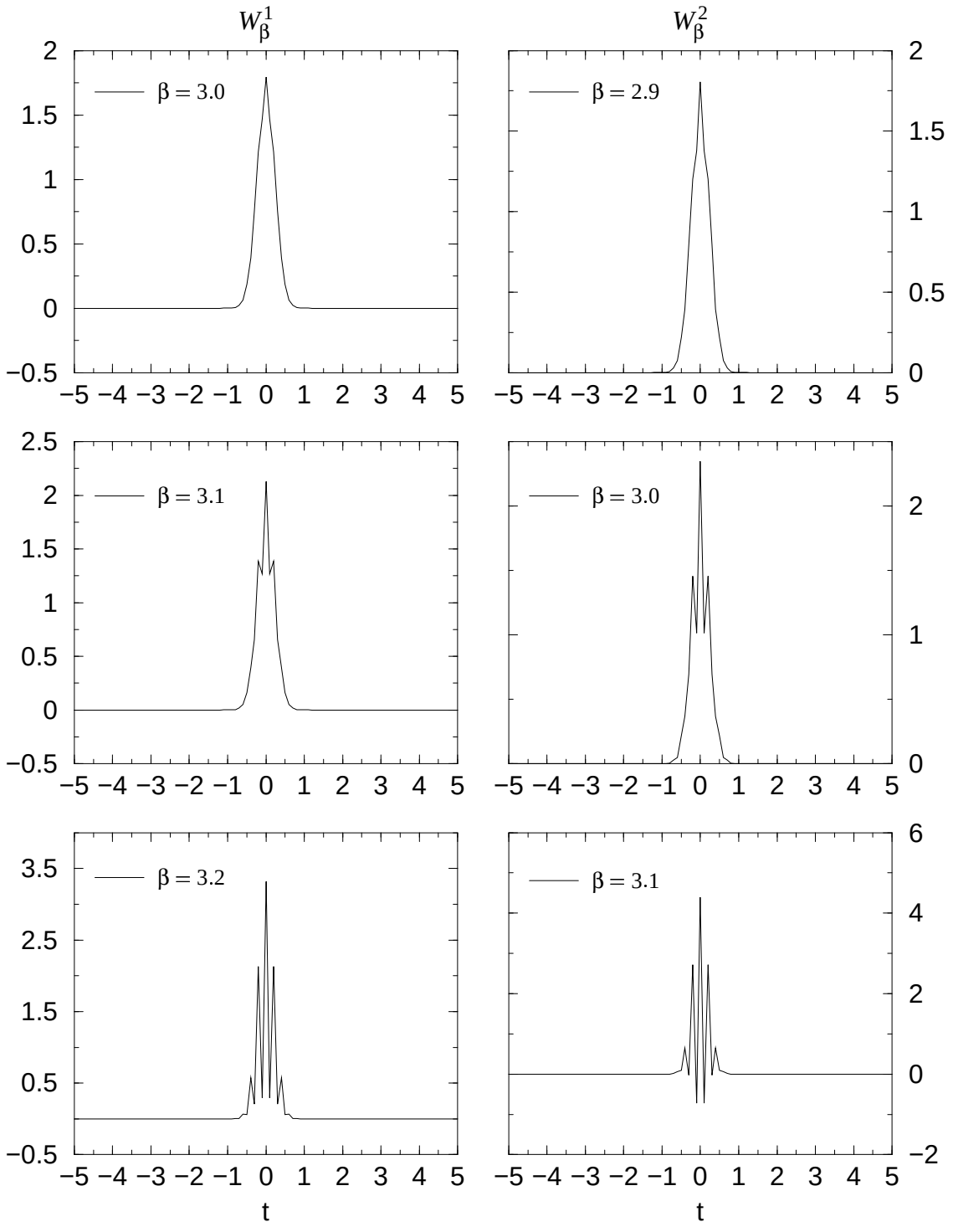

Abbildung 10.44: Regularisierte W_β^1 und W_β^2: $2.9 \leq \beta \leq 3.2$, $MD = 10000$

dratischen) Datenfehler ε_1^2 und ε_2^2 der Funktionen E^1 und E^2 aufgelistet. Trotz der geringen Datenfehler bricht also die Regularisierung weitaus eher zusammen als im Fall kontinuierlicher fehlerfreier Daten: aus der Tabelle lesen wir jetzt für den Maximalwert des Regularisierungparameters optimistisch $\beta_{max} = 2.7$ ab, wohingegen wir im letzteren Fall, zur Erinnerung, $\beta_{max} = 4.0$ erhalten haben.

Betrachten wir jetzt die in der Abbildung 10.43 auf Seite 291 grafisch wiedergegebenen, zu der Tabelle 10.23 korrespondierenden, numerischen Ergebnisse, so erkennen wir: bei $\beta = 2.7$, dem optimistischen Wert für β_{max}, sind in den Graphen bereits deutlich der Einfluß der Datenfehler, in Form von Oszillationen, zu erkennen. Bei $\beta = 2.8$, also nach der minimalen Variation von $\Delta\beta = 0.1$, sind die Graphen bereits wieder vollständig durch den Datenfehlereinfluß dominiert.

Tatsächlich müssen wir die Anzahl *MD* der Datenpunkte erheblich erhöhen, und auch das Intervall der Daten vergrößern, um den Wert des maximal möglichen Parameter zu erhöhen und so dem Wert β_{max} für kontinuierliche Daten näher zu kommen. In der Tabelle 10.24 sind die Ergebnisse, also die Fehler, des Datensatzes mit $MD = 1000$ und $[-20, 20]$ wiedergegeben; wir haben also grob die Datenzahl verzehnfacht und das Intervall verdoppelt.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
2.9	0.0002	0.0067	$5.35 \cdot 10^{-13}$	$4.68 \cdot 10^{-13}$
3.0	0.0025	0.1162		
3.1	0.0440	2.3685		
3.2	0.8248	48.50		

Tabelle 10.24: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 10000$

Wiederum sehen wir, daß wir, trotz der so bewirkten Verkleinerung des Datenfehlers, immer noch nicht an den Wert für kontinuierliche Daten herankommen, sondern der Datenfehler die Numerik vorher dominiert. Aus der Tabelle lesen wir, genauer vermuten wir, wobei die Vermutung durch die zur jener korrespondierenden Abbildung sogleich bestätigt wird, als Maximalwerte für W_β^1 $\beta_{max} = 3.0$ und für W_β^2 $\beta_{max} = 2.9$ ab. Auffällig ist noch an den Werten der Tabelle, daß diesmal die Regularisierung der Realteilgleichung marginal stabiler ist als die der Imaginärteilgleichung, wohingegen wir bisher gerade das umgekehrte Verhalten beobachtet[116] haben.

So haben wir nun in der Abbildung 10.44 die zur Tabelle 10.24 gehörenden numerischen Ergebnisse grafisch wiedergegeben. Grundsätzlich beobachten wir nichts neues in jener Abbildung, denn wir sind bereits mit den Umstand vertraut, daß bei einer kleinen Variation des Parameters β der Datenfehlereinfluß, eventuell bereits vorher schwach erkennbar, drastisch an Dominanz gewinnt, entsprechend der qualitativen Vorhersage der Abschätzung[117] (9.127). Und tatsächlich müssen wir, unter Beibehaltung der Intervallänge, für die Anzahl der Datenpunkte $MD = 40000$ wählen, um die Ergebnisse der Regularisierung der kontinuierlichen zu reproduzieren, sowohl bezüglich des maximalen Regularisierungsparameters β_{max} als auch bezüglich der Qualität, wobei im Rahmen des Numerikfehlers bei „doppelt genauen“ Daten, die quantitativen Werte der Regularisierten dann ebenfalls reproduziert werdenden. Obwohl wir also bei der Regularisierung der Real- und Imaginärteiligen prinzipiell, bezüglich des Regularisierungsparameters, weiter kommen als bei der Regularisierung der Komplexwertigen, benötigen wir bei der letzteren weniger Daten, um die Regularisierung der Kontinuierlichen zu reproduzieren. Dieses Ergebnis legt den pessimistischen Schluß nahe, daß wir auf der Basis realistischer Datensätze auch bei der Regularisierung des Real- und des Imaginärteils eine zugrundeliegende Deltadichte nicht identifizieren werden können.

Als nächstes sollen deswegen fehlerbehaftete, d.h. stochastisch gestörte, Datensätze betrachtet werden, wobei wir zuerst den zuletzt verwendeten Daten diesen Fehler derart aufprägen wollen, daß wir einen mittleren

keine weiteren Fehler besitzen mögen, d.h. die Daten ansonsten ungestört sein mögen.

[116] siehe die Ergebnisse des Abschnitt 10.4

[117] siehe Abschnitt 9.3.2, Seite 170

relativen Fehler im Promillebereich[118] erhalten.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
1.5	0.00036	$1.46 \cdot 10^{-05}$		
1.6	0.00293	$9.15 \cdot 10^{-05}$		
1.7	0.02728	0.00109	$1.85 \cdot 10^{-06}$	$1.41 \cdot 10^{-07}$
1.8	0.22961	0.01760		
1.9	1.75564	0.25606		

Tabelle 10.25: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 10000$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

Die Tabelle 10.25 listet wieder, wie mittlerweile üblich, die relevanten Fehler der Regularisierung dieses Datensatzes auf. Es fällt auf, daß sich die quadratische Datenfehler ε_1 und ε_2 in einer Größenordnung voneinander unterscheiden, obwohl bei beiden der mittlere relative Datenfehler tatsächlich $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$ beträgt. Dieses ist aber ein nur scheinbarer Wiederspruch, da die Standardabweichung des mittleren Fehlers selber bei 50% liegt. Wir haben aber, was wir an dieser Stelle erst bemerken wollen, absichtlich eine so breite Streuung um den mittleren relativen Fehler zugelassen, um damit einen der denkbaren ungünstigen Fällen fehlerbehafteter Daten zu simulieren. Ohne das wir in dieser Arbeit explizit darauf eingehen wollen, sind die Ergebnisse fehlerbehafteter Daten, die eine weitaus geringere Streuung um deren mittleren relativen Fehler aufweisen, vollkommen analog zu den hier vorgestellten; ausschlaggebend scheint das mittlere Fehlerniveau zu sein.

Betrachten wir nun die Tabelle 10.25: wir sehen deutlich, daß die Regularisierung der Imaginärteil- gegenüber der der Realteilintegralgleichung sich bezüglich des angegebenen Fehlers günstiger verhält. Wir wollen darauf hinweisen, daß wir ein ähnliches Verhalten bereits im Abschnitt 10.4 beobachtet haben, so daß wir die „günstigere“ regularisierte W_β^2 gegenüber W_β^1 nicht allein durch den geringeren Fehler ε_2 erklären können. Betrachten wir jetzt die Abbildung 10.45 auf der nächsten Seite (zur Tabelle korrespondierende), so relativiert sich das bessere Fehlerverhalten, und die so geweckte Hoffnung auf ein grafisch qualitativ besseres Ergebnis wird sofort zunichte. Wie bereits aus der Tabelle 10.25 ablesbar, kommen wir bei W_β^2 mit dem Regularisierungsparameter zwar (marginal) höher als bei W_β^1, und dementsprechend dominiert der Datenfehler später, doch sind die Graphen der Regularisierten qualitativ[119] gleich. Aufallend an den Graphen von W_β^1 und W_β^2 ist das jetzt unterschiedliche Verhalten bei dem Weg zur Dominanz des Datenfehlers: wärend bei W_β^1 in der Flanke bei negativen t-Werten die Oszillationen beginnen und sich dann zum Maximum der regularisierten fortpflanzen, beginnen diese Oszillationen bei W_β^2 bereits um das Maximum. Das wesentliche Ergebnis hier ist jedoch, ebenso wie bei den entsprechenden Datensatz der regularisierten W_β der komplexwertigen Gleichung, daß sich bereits ein Fehler im Promillebereich drastisch, im Vergleich mit reinen kontinuierlichen „doppelt genauen“ Daten, auf die regularisierte Lösung auswirkt, so daß eine Annäherung, geschweige denn eine Reproduktion, der regularisierten kontinuierlichen Daten bereits nicht mehr - oder nur sehr schwer - möglich ist. Dieses sei eindrucksvoll mit der Abbildung 10.46 demonstriert, in der wir die kontinuierlichen, anfänglich „doppelt genauen“ Daten auf die selben Art und Weise[120] einen stochastischen numerischen Fehler aufgeprägt haben, so daß wir wieder einen mittleren relativen Fehler von $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$ erhalten haben. Die Datenfehler betrugen übrigens $\varepsilon_1^2 = 1.89 \cdot 10^{-06}$ und $\varepsilon_2^2 = 1.46 \cdot 10^{-07}$, d.h. diese entsprachen sogar fast den Datenfehler des diskreten Satzes. Vergleichen wir die Graphen der beiden Abbildungen 10.45 und 10.46, so können wir in jenen keine qualitative Unterschiede feststellen; somit bestätigt sich hier das pessimistische Urteil.

[118] Es ist uns bewußt, daß ein derartige Datensatz experimentell sowohl bezüglich der Datenanzahl, aber insbesondere bezüglich des Fehlerniveaus, nur schwer realisiert werden dürfte.

[119] Dieses legt, bei einer kritischen Betrachtung, bereits die Werte der Tabelle nahe.

[120] Tatsächlich handelte es sich dabei um die gleiche, von t-abhängige, gleichverteilte Zufallszahlenfunktion, die wie auch bisher verwendet haben; für Details dieser numerischen stochastischen sei auf [PTVF92, Sto99] verwiesen.

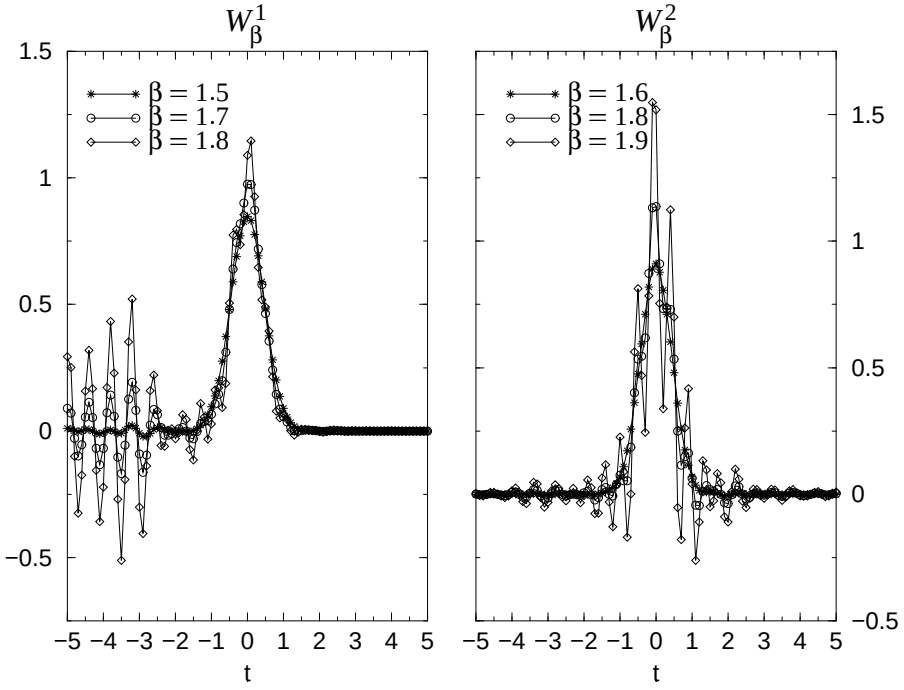

Abbildung 10.45: Regularisierte W_β^1 und W_β^2: $1.5 \leq \beta \leq 1.9$, $MD = 10000$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

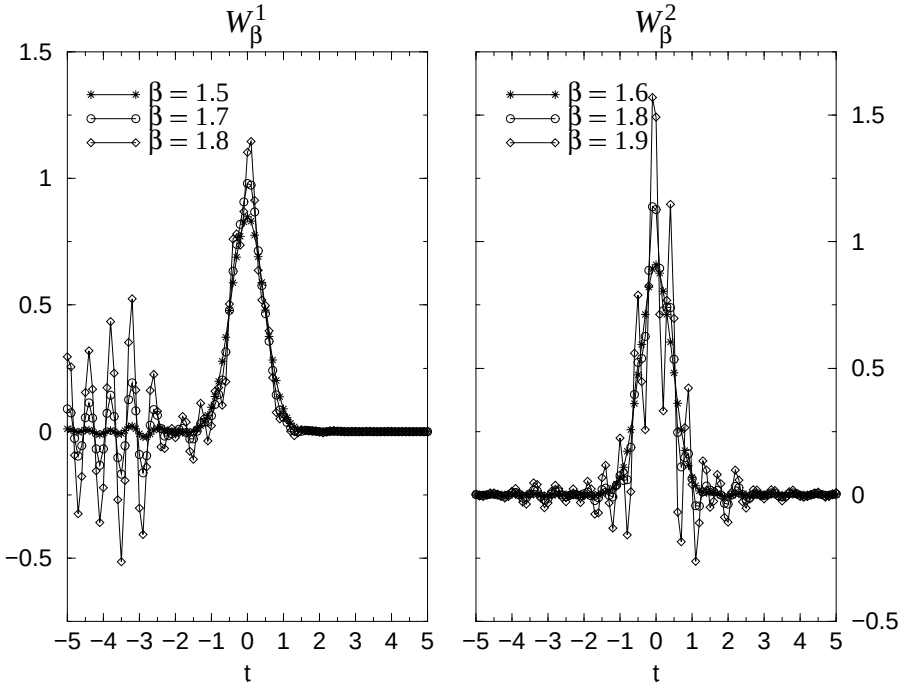

Abbildung 10.46: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 des kontinuierlichen Datensatzes: $1.5 \leq \beta \leq 1.9$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

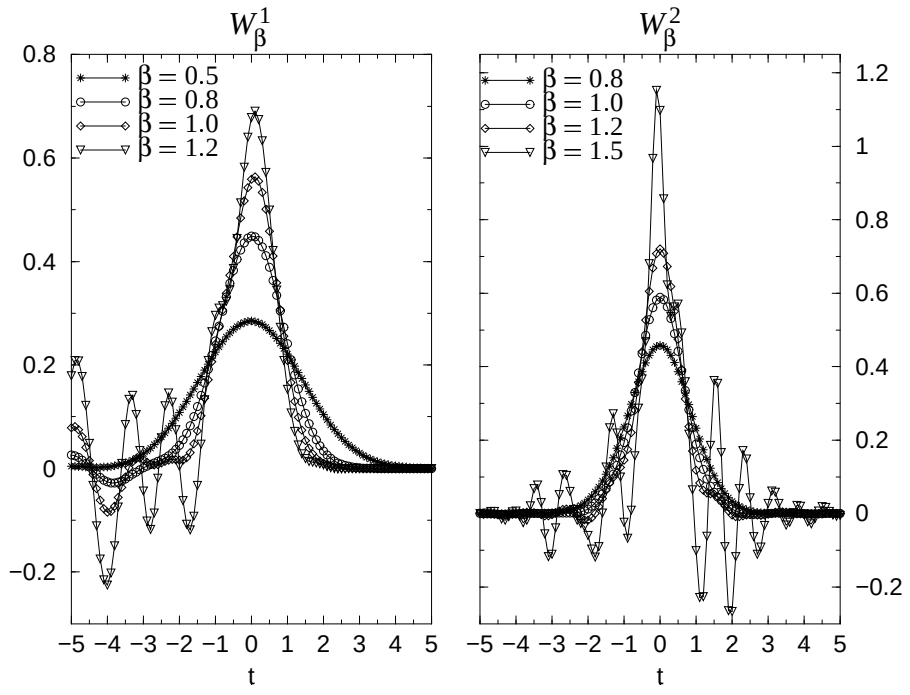

Abbildung 10.47: Regularisierte W_β^1 und W_β^2: $1.5 \leq \beta \leq 1.9$, $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

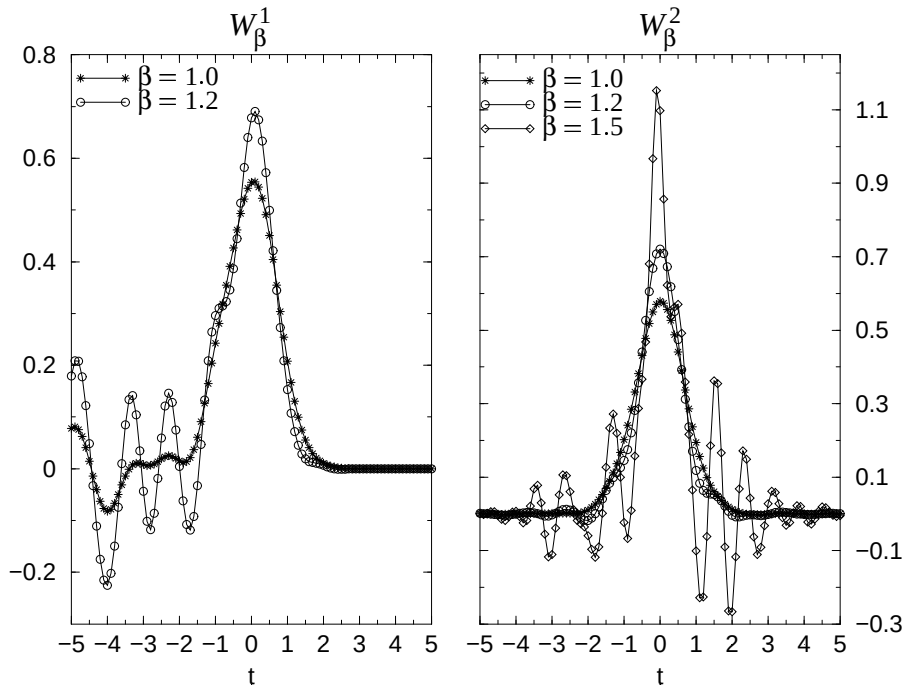

Abbildung 10.48: Regularisierte W_β^1 und W_β^2: $1.5 \leq \beta \leq 1.9$, $MD = 1000$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

Betrachten wir nun die Regularisierung eines realistischen Datensatzes, mit den konkret Satzparametern $MD = 1024$ im Intervall $[-10;\ 10]$ und einem mittleren relativen Fehler $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$, also dem gleichen Datensatz, den wir bei der entsprechenden Regularisierung der Komplexwertigen benutzt haben und deren Ergebnisse, zur Erinnerung, in den Abbildungen 10.41 auf Seite 289 und 10.42 grafisch dargestellt sind. Wir haben uns entschieden, diesen Datensatz nun zu betrachten, da die Ergebnisse der Datensätze, deren Anzahl an Datenpunkte *MD* höher sind und deren Fehlerniveau geringer sind, zwischen den eben und den jetzt betrachteten Sätzen liegen werden. In diesem Sinne stellt der jetzt betrachtete Datensatz den „unteren Bereich“ der möglichen Ergebnis dar.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
0.5	$5.95 \cdot 10^{-05}$	$5.89 \cdot 10^{-06}$		
0.8	0.00098	$5.62 \cdot 10^{-05}$		
1.0	0.00673	0.00037	0.0168	0.0013
1.2	0.06142	0.00498		
1.5	3.43252	0.17752		

Tabelle 10.26: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (4.0 \pm 2.0)\%$

In der Tabelle 10.26 haben wir wieder die relevanten Fehler dieser Regularisierung aufgelistet. Wie bereits bei der eben betrachteten Regularisierung, weist E^2 einen niedrigeren (quadratischen) Fehler ε_2^2 auf als E^1. Entsprechend ist die hier gemessenen Abweichung der numerischen Regularisierten W_β^2 gegenüber der theoretischen W_β^{th} betragsmäßig kleiner als der entsprechenden Fehler der regularisierten W_β^1. Demzufolge können wir aus der Tabelle ablesen, daß wir bei W_β^2 bis zu einem höheren Wert des Parameters β gelangen als bei W_β^1. Kritisch betrachtet, ist der Unterschied zwischen diesen beiden Parameterwerten jedoch recht gering, so daß wir bezüglich der Qualität der Regularisierten keine wesentlichen Unterschied erwarten dürfen.

Und so zeigen die Graphen der Funktionen W_β^1 und W_β^2, die wir in der Abbildung 10.47 auf der vorherigen Seite wiedergegeben haben, tatsächlich keinen beobachtbaren wesentlichen qualitativen Unterschied. Es fällt wieder auf, daß der Datenfehlereinfluß in W_β^1 sich zuerst bei negativen t-Werten bemerktbar macht und mit wachsender Dominanz sich zum Maximum der Funktion fortpflanzt, wohingegen dieser Einfluß in W_β^2 sich bereits anfänglich oszillatorisch um das Maximum bemerkbar macht und sich dementsprechend bei wachsender Dominanz fortpflanzt. Letztlich ist jedoch festzustellen, daß beide Regularisierte ein nur sehr stark verschwommenes Bild der zugrundeliegenden Deltadichte wiedergeben. Es ist sogar aufgrund dieser Graphen unmöglich zu entscheiden, ob es sich jetzt bei der theoretischen, zugrundeliegenden Dichte um eine Gauß- oder eine Deltadichte handelt. Zusätzlich sei erwähnt, daß, aufgrund der niedrigen Werte des Regularisierungsparameters, wir jetzt selbstverständlich eventuelle Feinstrukturen der zugrundeliegenden Dichte noch gar nicht feststellen würden.

Bedauerlicherweise ändert sich die Qualität der Regularisierten bei einer Erhöhung der Datendichte nicht, was wir mit der der Abbildung 10.48 auf der vorherigen Seite dokumentieren wollen. Dort haben wir die Ergebnisse des Datensatzes mit $MD = 10000$, unter Beibehaltung der Intervallänge[121] und des Fehlerniveaus, abgebildet. Trotz der fast zehnfachen Datenmenge, können wir offensichtlich keinen qualitativen Unterschied zu den Ergebnissen der Regularisierung des Datensatzes mit $MD = 1024$ erkennen. Wir erinnern uns, daß wir dieses Verhalten bereits bei einem Fehlerniveau im Promillebereich beobachtetet haben, so daß uns dieses jetzt auch nicht mehr verwundert.

Letztendlich lassen die Ergebnisse also das pessimistische Urteil der Unmöglichkeit der, auf den regularisierten W_β^1 und W_β^2 basierenden, Identifizierung einer Deltadichte zu. Fassen wir dieses mit dem Ergebnis

[121] Wir wollen erwähnen, daß eine Vergrößerung der Intervallänge weder die Qualität der Regularisierten noch den Wert des maximalen Regularisierungsparameters merklich beeinflussen.

der Untersuchungen der regularisierten W_β der Komplexwertigen zusammen, so heißt das pessimistische Urteil[122]:

Ergebnis 2
Die zweifelsfreie, auf den regularisierten W_β, W_β^1 und W_β^2 basierende, Identifizierung einer zugrundeliegenden Deltadichte respektive die Unterscheidung von einer Gaußdichte ist nicht möglich.

Die ernüchternden Konsequenzen des zusammenfassenden Ergebnisses 2 sind, daß wir generell nur mit groben Nachbildungen der zugrundeliegenden Dichte, die man auch als „unscharf“ oder „verwaschen“ bezeichnen können, rechnen dürfen und daß so detailierte, scharfe Strukturen nicht respektive dementsprechend schlecht oder kaum aufgelöst reproduziert werden können. Dieses wird sich in den weiteren Untersuchungen noch bestätigen, wobei dieses pessimistische Urteil sich nicht auf das bisher betrachtete Regularisierungsverfahren beschränken wird, sondern auch über die zum Vergleich herangezogenen erweitert werden kann.

10.5.2 Das Cole-Davidson Modell

Das nächste Modell, das wir separat und etwas detailierter betrachten wollen, ist das Cole-Davidson Modell. Wie wir bereits im Abschnitt 10.4.4 bemerkt haben, lesen wir aus den in der Tabelle 10.19 aufgelisteten Grenzen des Regularisierungsparameters bei kontinuierlichen Daten die Unmöglichkeit der zweifelsfreien Identifizierung des Cole-Davidson Modells ab. Dieses gilt für die regularisierten W_β^1 und W_β^2 und insbesondere für die regularisierte W_β der Komplexwertigen. Dementsprechend werden wir die **Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung** nur kurz behandeln.

Und so haben wir in der Abbildung 10.49 auf der nächsten Seite die Ergebnisse der Regularisierung des diskreten Datensatzes mit $MD = 10000$ und dem Intervall $[-20;20]$, bei ansonsten als fehlerfrei betrachteten Daten, wiedergegeben. Für den Modellparameter der Cole-Davidson Dichte wählten wir exemplarisch $\alpha = 0.5$; die Ergebnisse bei anderen Werten dieses Parameters sind vollkommen äquivalent. Dieser Datensatz ist übrigens der „Minimale“, mit dem wir die Ergebnisse der Regularisierung kontinuierlicher Daten quasi reproduzieren können, d.h bis zum maximalen Wert $\beta_{max} = 1.3$ tatsächlich die Regularisierung betreiben können. Anders als bei den bisherigen Abbildungen, haben wir uns jetzt entschlossen, nur die regularisierte $W_\beta = \mathfrak{Re}\, W_\beta$ anzugeben, da der Imaginärteil, $\mathfrak{Im}\, W_\beta$, keine neuen Informationen enthält. Wir bisher, können wir aus diesem aufgrund einer charakteristischen oszillatorischen Struktur, wie wir diese bereits in anderen Fällen beobachtet haben, die Dominanz eines systematischen numerischen Fehlers ablesen. Anstelle der Funktion $\mathfrak{Im}\, W_\beta$, haben wir uns entschlossen, die „ursprüngliche“ Dichte p_{CD} anzugeben, die wir aus W_{CD} abgeleitet haben[123].

Das pessimistische Urteil zur Möglichkeit eine Identifizierung der Cole-Davidson Dichte wird offensichtlich durch die diskreten Daten bestätigt. Weniger die Notwendigkeit eines relativ großen Datensatzes mit $MD = 10000$, sondern die Qualität der erhaltenen Regularisierten sind der Grund für die Bestätigung: die schwache Divergenz der Dichte p_{CD} wird durch die regularisierte p_β nicht mal ansatzweise beschrieben, d.h. aus der alleinigen Kenntnis der regularisierten würden wir nicht mal dieses pathologische Verhalten der zugrundeliegenden vermuten. Desweiteren überlagern die oszillatorischen Einflüsse des Datenfehlers die Regularisierte derart, daß die schwache Divergenz für $\tau \to 0$, die offensichtlich durch die theoretische regularisierte exakt nachgebildet[124] wird, sie ist zwar zu identifizieren, doch der Exponent jener Divergenz kann kaum ermittelt werden .

[122] Es sei jedoch an die philosophische, erkenntnistheoretische Bemerkung auf Seite 283 erinnert.

[123] Zur Erinnerung: per definitionem ist die regularisierte durch

$$p_\beta(\tau) = w_\beta(\tau)/\tau$$

gegeben.

[124] siehe auch die Ausführungen im Abschnitt 9.5.2, Seite 213 und insbesondere Abbildung 9.27

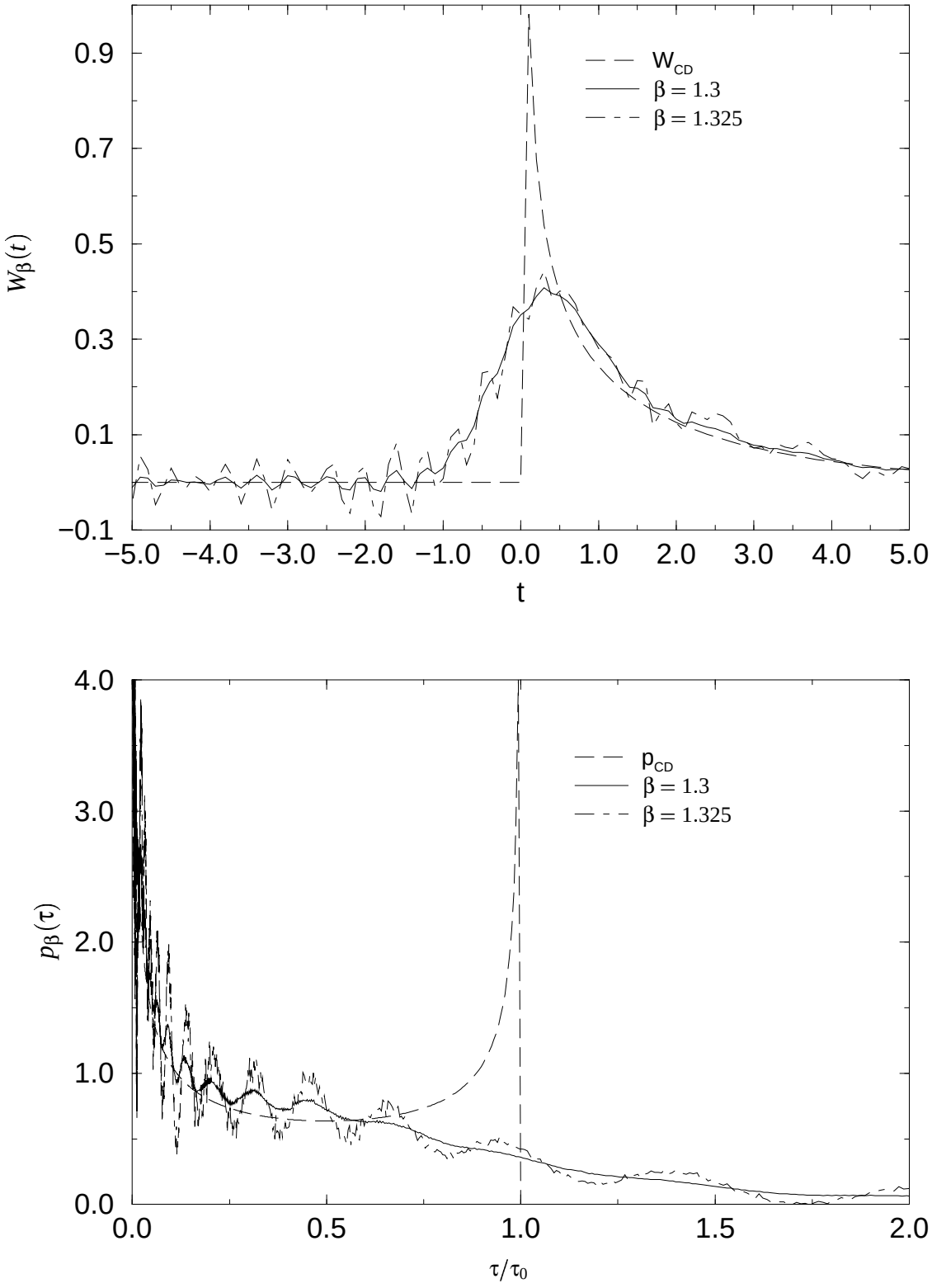

Abbildung 10.49: W_{CD}: Regularisierung des phänomenologischen Ansatzes diskreten Daten: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $1.3 \leq \beta \leq 1.325$, $MD = 10000$

Nach den der bisherigen Ergebnissen dieser Arbeit, ist es klar, daß wir qualitativ bessere regularisierte W_β, auf der Basis fehlerbehafteter Daten, nicht werden erhalten können. Die Abbildung 10.49 charakterisiert im diesen Sinne die bestmöglichen Approximationen der Cole-Davidson Dichte, die wir mit den komplexwertigen phänomenologischen Ansatz auf der Basis diskreter Datensätze überhaupt erhalten können. Wir wollen deswegen diesen jetzt nicht weiter untersuchen, sondern uns gleich der **Regularisierung der Real- und der Imaginärteilintegralgleichung** zuwenden.

So haben wir jetzt die Ergebnisse der regularisierten W_β^1 und W_β^2, auf der Basis des exakt gleichen, obigen Datensatzes, in der Abbildung 10.50 auf der nächsten Seite wiedergegeben. Wir wollen erwähnen, daß wir auch hier mindestens einen Datensatz mit $MD = 10000$ benötigen, um überhaupt in der Gegend des maximalen $\beta_{\max}$ der kontinuierlichen, „doppelt genauen“ Daten zu gelangen. Wie wir an der Abbildung 10.50 erkennen, gelangen wir mit diesem Datensatz bis zu dem Parameter, den wir bei der Regularisierung kontinuierlicher Daten erhalten haben. Vergleichen wir die Abbildung mit der entsprechenden der kontinuierlichen Daten, Abbildung 10.32 auf Seite 273, so stellen wir erstaunlicher Weise dieselbe Qualität der Regularisierten fest. Dieses scheint ein erfreuliches Ergebnis darzustellen, doch sollten wir nicht vergessen, daß die Größe des Datensatzes $MD = 10000$ eine experimentelle Ausnahme bilden dürfte[125].

Nachdem wir nun demonstriert haben, daß wir mit diskreten, ansonsten als fehlerlos zu betrachtenden, Datensätzen prinzipiell den Maximalwert $\beta_{\max}$ erreichen können, wollen wir uns jetzt wieder den Auswirkungen des Datenfehlers zuwenden. Entsprechend der bisherigen Untersuchungen, prägen wir dem eben benutzten Datensatz nun einen numerisch stochastischen Fehler derart auf, daß der mittlere relative Fehler der Daten im Promillebereich liegen möge.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
1.2	0.0989	0.0991		
1.4	0.0923	0.0927		
1.6	0.0888	0.0889	$3.48 \cdot 10^{-06}$	$8.66 \cdot 10^{-08}$
1.7	0.1080	0.0915		
1.8	0.3153	0.1141		

Tabelle 10.27: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 10000$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

In der Tabelle 10.27 haben wir jetzt die, in der numerisch approximierten L^2-Norm gemessenen, Daten- und Regularisierungfehler aufgelistet; genauer haben wir den Ausschnitt um das Minimum des gesamten Regularisierungfehlers, bei der Variation des Parameters im Intervall $[1.0; 2.0]$, wiedergegeben. Auffallend ist, daß die Datenfehler ε_1^2 und ε_2^2 beinahe um eine Größenordnung auseinander liegen; der mittlere relative Fehler beträgt bei beiden jedoch den angegebenen Wert.

Aus der Tabelle lesen wir als Wert für β, bei dem der Regularisierungsfehler sein Minimum annimmt. $\beta = 1.6$ ab. Wir haben jetzt in der Abbildung 10.51 auf Seite 302 sowohl die Graphen der regularisierten W_β^1 und W_β^2 bei diesem Wert als auch die Graphen desjenigen Minimalwertes, bei dem in jenen noch kein Datenfehlereinfluß zu erkennen ist, abgebildet.

Es fällt wieder das leicht unterschiedliche Verhalten bei der Regularisierung der Real- und der Imaginärteilgleichung auf: es scheint so zu sein, daß die Regularisierung der Imaginärteilgleichung numerisch stabiler als die der Realteilgleichung ist. Da wir dieses Verhalten auch bei der Regularisierung der kontinuierlichen Daten beobachtet haben, können wir dieses nicht einfach auf den Unterschied der Datenfehler ε_1^2 und ε_2^2 zurückführen.

Das wesentliche Ergebnis der Abbildung 10.51 ist jedoch die Bestätigung der Beobachtung, daß selbst ein Fehler im Promillebereich sich drastisch auf das Endergebnis der Regularisierung auswirkt. Der maximal

[125] siehe diesbezüglich [Bec88, CC41, DC51, WW99]

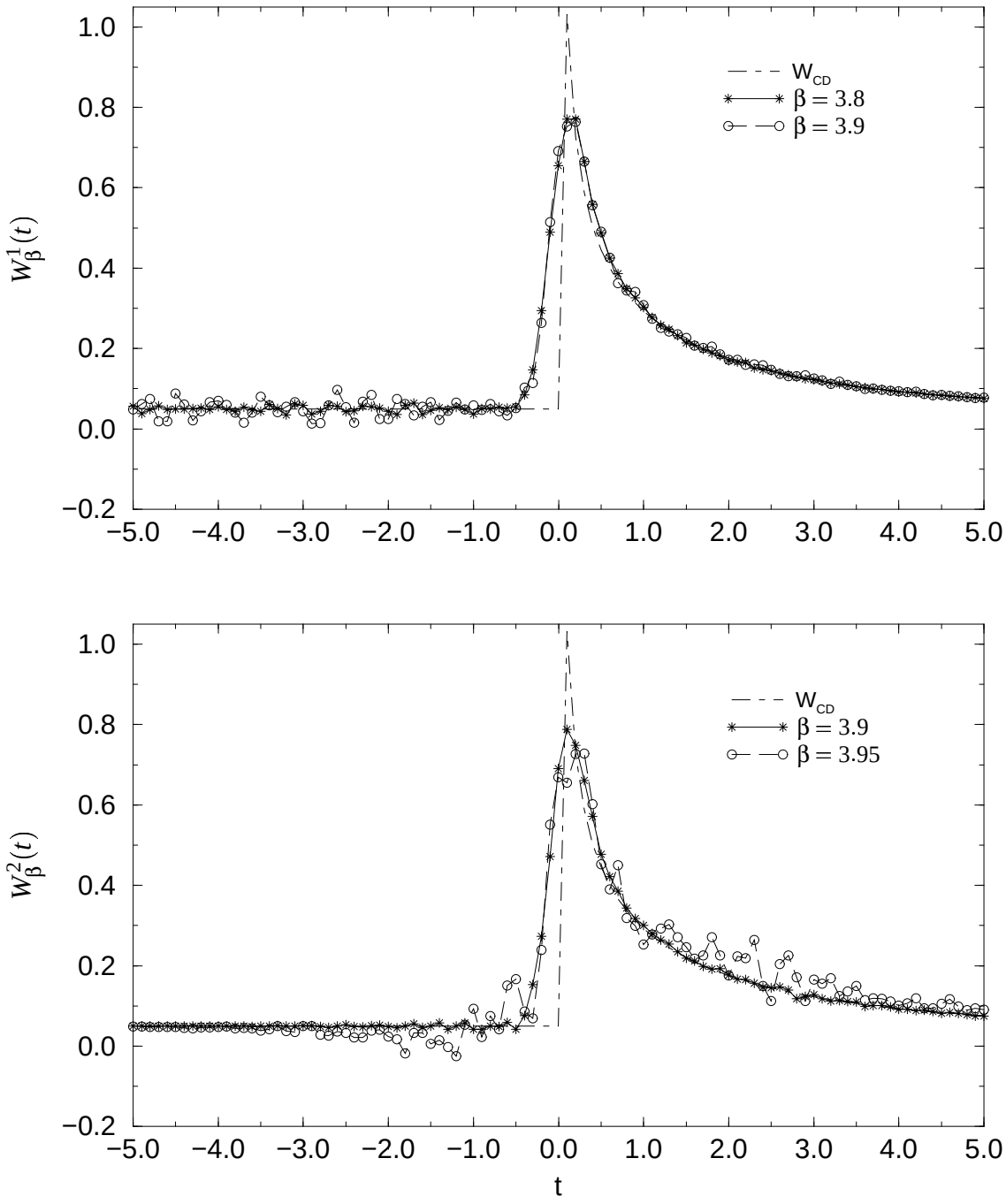

Abbildung 10.50: W_{CD}: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 bei diskreten Daten: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $MD = 10000$, $3.8 \leq \beta \leq 3.95$

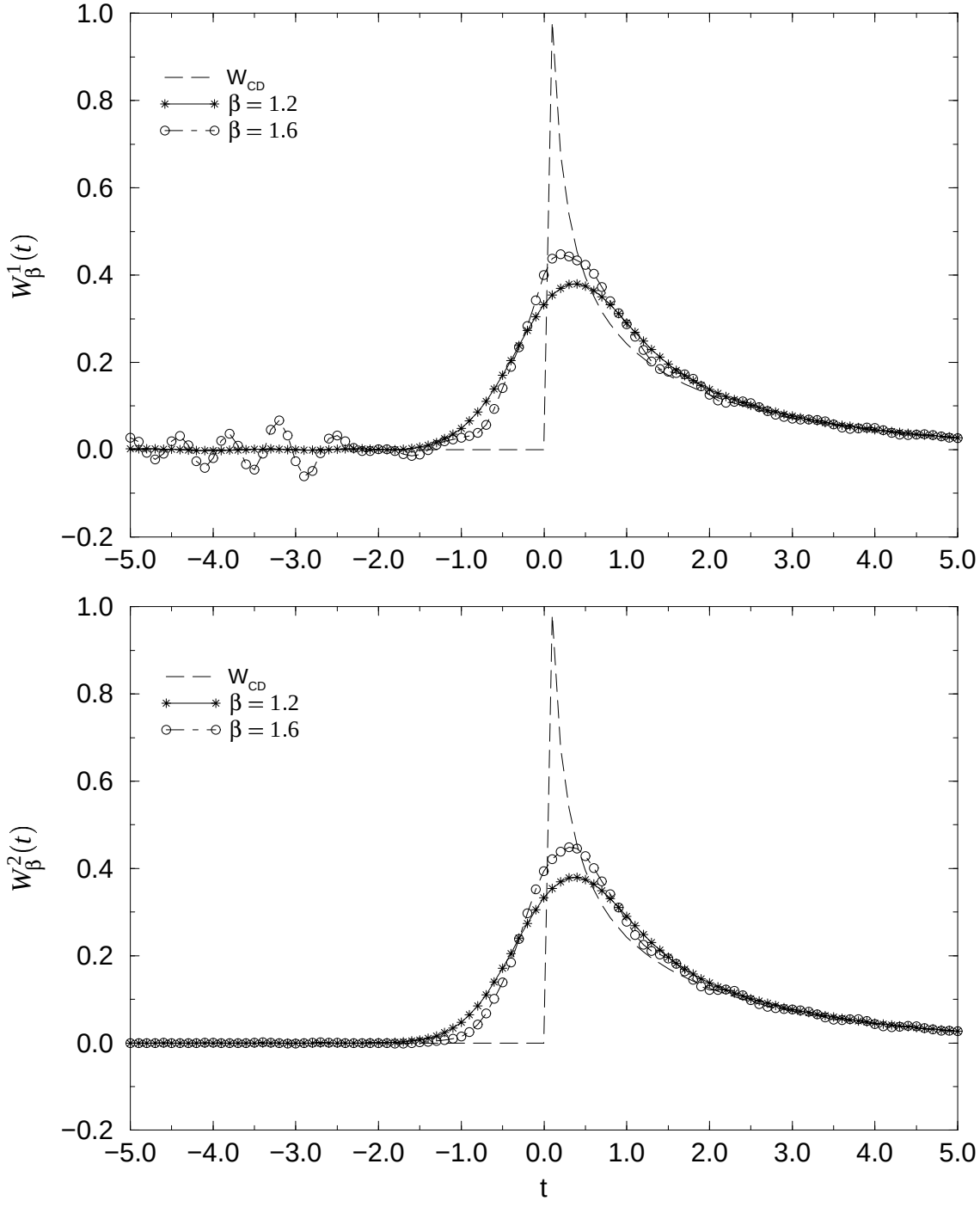

Abbildung 10.51: W_{CD}: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 bei diskreten Daten: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $MD = 10000$, $1.2 \leq \beta \leq 1.6$; $\sigma_{\text{rel}} = (0.04 \pm 0.02)\%$

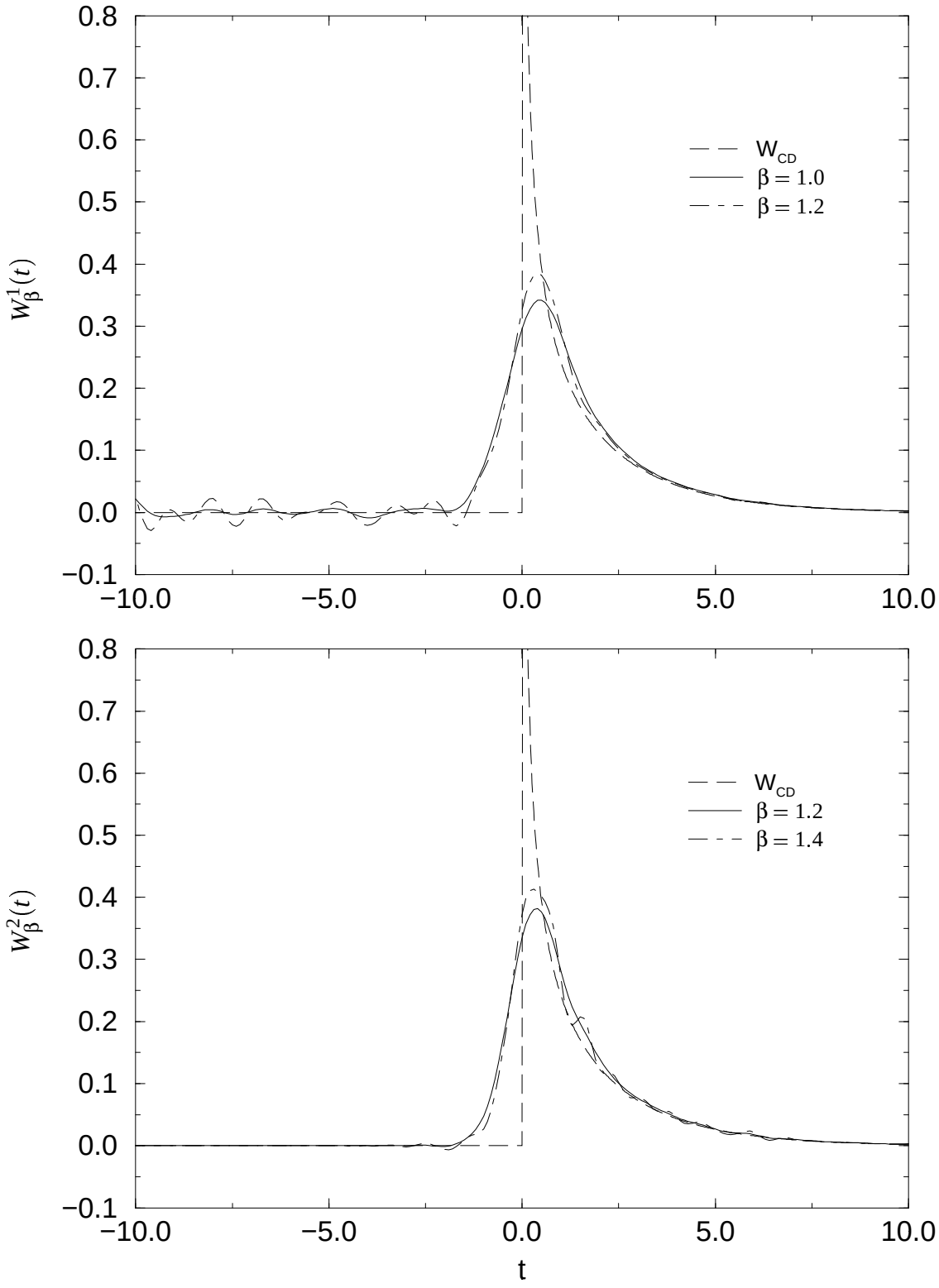

Abbildung 10.52: W_{CD}: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 bei diskreten Daten: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $1.0 \leq \beta \leq 1.4$; $MD = 101$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.5 \pm 0.2)\%$

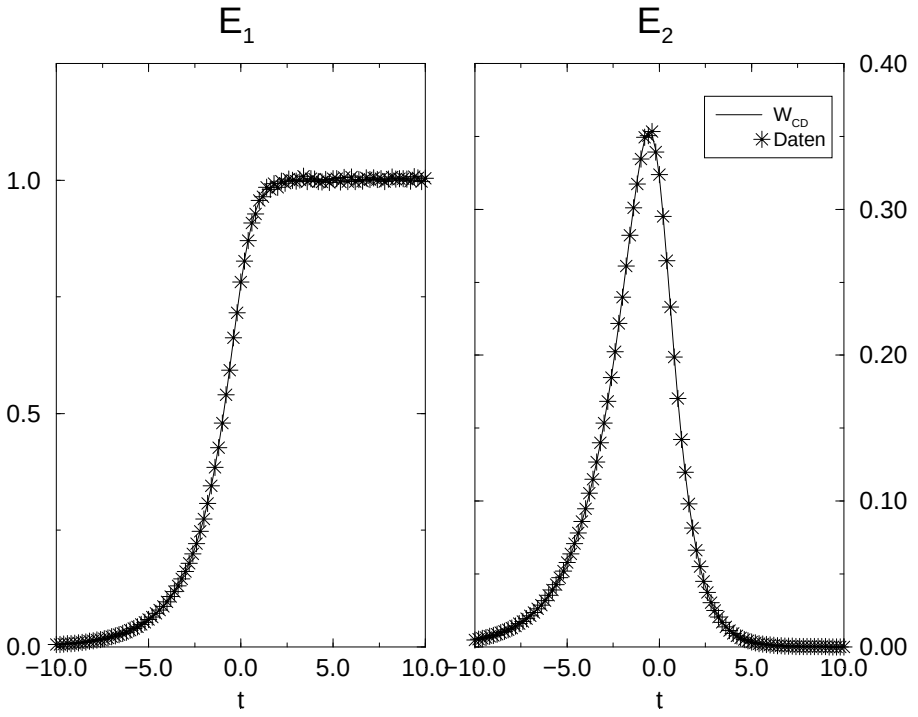

Abbildung 10.53: W_{CD}: Simulierter Datensatz: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $MD = 101$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.5 \pm 0.2)\%$

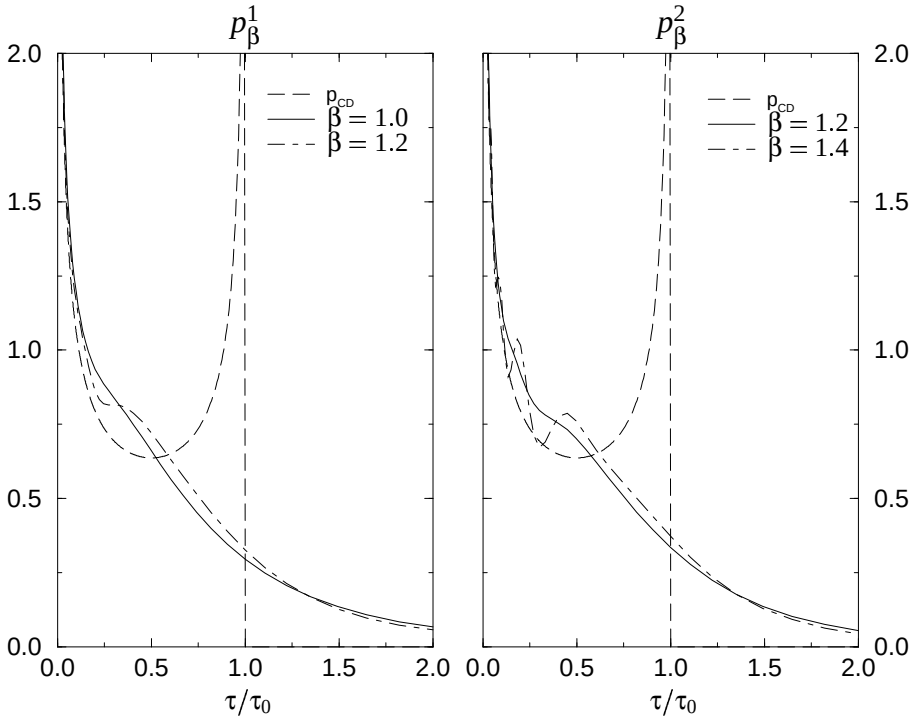

Abbildung 10.54: W_{CD}: Regularisierte p^1_β und p^1_β: $\alpha = 0.5,\ \tau_0 = 1.0$; $1.0 \leq \beta \leq 1.4$; $MD = 101$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.5 \pm 0.2)\%$

mögliche Parameter, bis zu dem wir eine noch brauchbare Regularisierte erhalten, ist drastisch von $\beta_{max} = 3.8$ auf $\beta_{max} = 1.6$ gesunken. Desweiteren sehen wir anhand der regularisierten W_β^1 bei $\beta = 1.6$, also bei den Wert des Regularisierungsparameters, bei dem der quadratische Fehler der Regularisierten minimal wird, daß diese nicht die glatteste zu sein braucht respektive dort bereits der Einfluß des Datenfehlers deutlich erkennbar sein kann. Dieses verwundert uns aufgrund der Natur der Norm, in der wir den Fehler angegeben haben, auch nicht.

Wenden wir uns jetzt, diese Untersuchungen nun abschließend, wieder der Regularisierung eines simulierten Datensatzes zu, wie jener in der Praxis realisiert werden könnte. Konkret betrachten wir den Datensatz mit $MD = 101$ im Intervall $[-10;0]$ und einem mittleren relativen Fehler $\sigma_{rel} = (0.5 \pm 0.2)\%$. Die Modellparameter[126] der Dichte W_{CD} sind wieder $\alpha = 0.5$ und $\tau_0 = 1.0$ gewesen. Wir haben diesen Datensatz in der Abbildung 10.53 auf der vorherigen Seite grafisch dargestellt. Hierbei sind, wie die Legende es uns verrät, die durchgezogene Linie die theoretischen, fehlerfreien Funktionen E^1 und E^2 und die Sterne sind die simulierten Meßwerte. Trotz des geringen relativen Fehlers, können wir bereits visuell eine geringe Abweichung der Datenpunkte von der Exakten erkennen, insbesondere in den Bereich, indem die theoretische E^1 ihren „Plateauwert“ Eins bei $t \to \infty$ annimmt.

β	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_\beta^{th} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
1.0	0.1070	0.1072	$1.04 \cdot 10^{-05}$	$5.22 \cdot 10^{-06}$
1.2	0.0981	0.0982		
1.4	0.1087	0.0926		
1.6	0.5615	0.1110		

Tabelle 10.28: Differenz zwischen W_β^{th} und jeweils W_β^1 und W_β^2 und jeweiligem Datenfehler: $MD = 101$, $\sigma_{rel} = (0.4 \pm 0.2)\%$

Die Tabelle listet die uns interessierenden Fehler, in der numerisch approximierten L^2-Norm gemessenen, der Regularisierung sowie die Datenfehler auf. Konkret ist die Tabelle wieder ein Ausschnitt der Ergebnisse, die bei der Variation des Parameters β im Intervall $[1.0;2.0]$ erhalten worden sind. Wir lesen als den Wert, bei dem der Regularisierungsfehler jeweils sein Minimum annimmt, für beide Regularisierte $\beta = 1.2$ ab. Wir wollen noch kurz darauf hinweisen, daß der beginnende, drastisch Datenfehlereinfluß bei W_β^1 sich bei den Wert $\beta = 1.6$ bereits andeutet.

Die zur Tabelle 10.28 gehörenden Abbildungen sind jetzt 10.52 auf Seite 303 und 10.54 auf der vorherigen Seite. In der ersteren sind, wie bisher üblich, die Ergebnisse für W_β^1 und W_β^2, verglichen mit der zugrundeliegenden exakten W_{CD}, grafisch dargestellt. Wir haben hier sowohl das Ergebnis für den Wert $\beta = 1.2$, bei dem also der Regularisierungsfehler minimal wird, und jeweils das Ergebnis für den Wert angegeben, bei dem wir noch keinen bzw. einen sich gerade zu beginnen abzeichnenden Datenfehlereinfluß erkennen können; anders ausgedrückt zeigen wir das Ergebnis für den Wert des Regularisierungsparameters, den wir nach dem „trial and error“ Verfahren[127] erhalten haben; hier liegen die beiden Werte des Regularisierungsparameters also dicht beieinander, ein Umstand, der uns aufgrund des exponentiellen Einflusses des Datenfehlers nicht verwundert.

Bereits an den in der Tabelle 10.28 wiedergegebenden Bereichs des Regularisierungsparameters fällt uns auf, daß sich jener Parameterbereich, in den wir akzeptable regularisierte Lösungen erhalten, die durch den Datenfehlereinfluß nicht völlig korrumpiert sind, sich nur geringfügig von den entsprechenden Bereich des oben diskutierten Datensatzes mit $MD = 10000$ und, wichiger, mit einem relativen Fehler im Promillebereich unterscheiden. Tatsächlich ähnelt sich die Qualität der Regularisierten auffällig.

In der Abbildung 10.54 auf der vorherigen Seite haben wir die aus den regularisierten W_β^1 und W_β^2 abgeleitete regularisierten der „ursprüngliche“ Dichte p_{CD} abgebildet. Sind die Regularisierten der Abbildung 10.52

[126] Wir wiederhohlen, daß die Ergebnisse für andere Werte der Modellparameter vollkommen äquivalent sind.

[127] siehe Abschnitt 8.1

bereits von einer ernüchternden Qualität, so lassen diejenigen der regularisierten der Dichte p_{CD} quasi die Hoffnung auf die Möglichkeit der Identifizierung jener Dichte fahren: es ist offensichtlich, daß wir allein aus den Regularisierten die Cole-Davidson Dichte nicht identifizieren können, ja es ist gerade so, daß wir, wenn wir die zugrundeliegende nicht kennen würden, überhaupt nicht auf die Idee kommen würden, daß es sich hier um das Cole-Davidson Modell handelt, da diese approximierten kein Anzeichnen einer schwachen Divergenz aufweisen; betrachten wir die Dichten des Havriliak-Negami Modells[128], so würden wir aus den regularisierten Lösungen eher auf dieses Modell schließen.

10.5.3 Fazit der Numerik diskreter Daten

Es wäre nun müßig, die Regularisierten weiterer Datensätze zu präsentieren: erhöhen wir den Datenfehler, so können die Lösungen offensichtlich qualitativ nicht besser werden. Eine nochmalige Verringerung des Datenfehlers ist insbesondere aufgrund der experimentellen Möglichkeiten keine sinnvolle Alternative, und andererseits haben wir in den hinter uns liegenden Untersuchungen den bereits drastischen Einfluß eines relativen Datenfehlers im Promillebereich demonstriert. Einzig die Variation der Datendichte scheint noch sinnvoll zu sein, doch demonstriert der eben diskutierte Datensatz, daß die dominante Fehlerquelle in der Regularisierung der Fehler der Numerik und insbesondere der stochastische Datenfehler zu sein scheint. Im Laufe der noch verbleibenden Untersuchungen werden wir noch kurz die Ergebnisse für einige andere Datensätze, die eine geringere Datenzahl aufweisen, präsentieren. Nichtsdestotrotz wollen wir darauf hinweisen, ohne das wir dieses anhand von numerischen Ergebnissen detailiert[129] belegen wollen, daß ein Datensatz mit $MD < 100$ nicht zu empfehlen ist; die Numerik könnte, bezogen auf einen äquivalenten Datensatz mit $MD \geq 100$, sonst zu schnell instabile werden, wobei diese Gefahr inbesondere bei einem mittleren relativen Fehler im Prozentbereich besteht.

Bei der Regularisierung diskreter Datensätze können wir zuersteinmal die prinzipielle Möglichkeit der Reproduktion[130] der Ergebnisse der Regularisierung kontinuierlicher Datensätze feststellen, wobei bei der phänomenologischen Integralgleichung sogar bereits ein Datensatz mit $MD = 1024$ und $[-10;\ 10]$ ausreicht - im Fall der Deltadichte. Dieses gilt, ohne daß wir es beweisen wollen, ebenso für alle weiteren Dichten, die keine numerischen Pathologien aufweisen, insbesondere als für die Cole-Cole- und die Gaußdichte. Beim Cole-Davidson Modell benötigen wir, um mit den Regularisierungsparameter in den Bereich der Kontinuierlichen zu gelangen, im Gegensatz dazu einen Datensatz mit $MD = 10000$, unter Beibehaltung der Intervallänge, den wir ebenso generell bei den Integralgleichungen des Real- und des Imaginärteils benötigen.

Auch wenn ein Datensatz mit der Größenordnung von jeweils 10000 Datenpunkten experimentell nicht unbedingt realistisch zu sein scheint, relativiert sich dieses Ergebnis sobald wir Datensätze mit einem mittleren relativen Fehler im *Promillebereich* betrachten: unabhängig von der zugrundeliegenden (Modell-)Dichte wirkt sich dieser Fehler bereits derart *drastisch und destruktiv* in der Regularisierung aus, so daß wir mit den Regularisierungsparameter nur noch in den Bereich $b \leq 2.0$ gelangen. Man möge jetzt einwenden, daß unsere Datensätze, da jene eine sehr breiten Streuung des relativen Fehlers aufweisen, zu sehr verrauscht waren und die experimentellen Begebenheiten eventuell nur ungenügend modellieren würden. Dazu ist zu sagen: Untersuchen wir den Einfluß des Datenfehlers mit Datensätzen, die eine geringere Streuung um deren mittleren relativen Fehler aufweisen, so sind diese Ergebnisse mit den hier vorgestellten vollkommen qualitativ und, im Rahmen der möglichen numerischen Genauigkeit, bezogen auf den Daten- und den numerischen Integrationsfehler bei der Integration über stark oszillierende Funktionen, sogar quantitativ äquivalent. Ausschlaggebend scheint somit nur das *mittlere Fehlerniveau* zu sein. Desweiteren wollen wir auf die Irrelevanz dieses Argumentes bei Fehlern im Promillebereich hinweisen: selbst bei einer Streuung um 100% wäre der Datenfehler immer noch nicht mehr als „ein numerisches Rauschen“.

[128] siehe Abschnitt 3.4, Abbildung 3.2 auf Seite 41

[129] Dieses soll schon allein um die Arbeit in einen noch erträglichen Umfang zu halten nicht detailiert ausgeführt werden.

[130] Diese ist natürlich mit den einer entsprechend hohen Anzahl und einer entsprechend niedrigen Datendichte immer gegeben, doch soll es hier um derartige „pseudokontinuierliche“ nicht gehen.

Der Grund, daß wir die auf Datensätzen, die eine breite Variation des relativen Fehlers aufweisen, basierende Ergebnisse hier präsentiert haben, und noch präsentieren werden, ist, daß jene Datensätze experimentell vielleicht gar nicht so unrealistisch sind. Betrachtet man jene genauer so stellt man fest, daß diese Variation durch die Datenpunkte erzeugt wird, bei denen die Vorgegebenen sehr kleine Funktionswerte oder, wie im Fall von E_1, einen (asymptotische) Konstante annehmen. Und im Gegensatz zu einer experimentellen Situation, so sollten wir nicht vergessen, sind wir hier in der Lage, den mathematischen exakten Fehler angeben zu können. Desweiteren können wir, falls die Argumente nicht überzeugen, die Datensätze bezüglich der Variation als die „schlimmsten möglichen Fälle“ betrachten.

Neben dem Ergebnis[131] der Unmöglichkeit der Identifizierung einer zugrundeliegenden Deltadichte, ist ein weiteres wesentliches Fazit dieser Untersuchungen jedoch, daß das pessimistische Urteil über die Identifizierung der Cole-Davidson Dichte bestätigt wird. Wir können also formulieren:

Ergebnis 3
Die auf den regularisierten W_β, W_β^1 und W_β^2 basierende Identifizierung eines zugrundeliegenden Cole-Davidson Modells ist nicht möglich.

Wenn uns auch das pessimistische Urteil bezüglich der Deltadichte von erkenntnistheoretischer[132] Seite nicht zu stören braucht, so ist dieses Urteil von größerer Brisanz, insbesondere aufgrund, der bereits oftmals erwähnten, Bedeutung der Cole-Davidson Dichte bei der Interpretation von Meßwerten: mit der Unmöglichkeit der Identifizierung verliert das Modell letztendlich seine Bedeutung, seinen interpretatorischen und erkenntnistheoretischen[133] Wert. Letztendlich wird das Cole-Davidson Modell, insbesondere in der numerischen Auswertung, wie wir jetzt deutlich gezeigt haben sollten, durch das Havriliak-Negami Modell aufgehoben; letzteres ist bekanntlich ebenso ein phänomenologisches.

Wir wollen nun die Untersuchungen zum Cole-Davidson Modell abschließen, wobei wir noch erwähnen wollen, daß es tatsächlich Autoren[134] gibt, die die in ihrer Gesamtheit wiedergegebenen regularisierten der Cole-Davidson Dichte als „gute Reproduktionen“ bezeichnen würden. Wie man auf ein derartiges defizitäres Urteil kommen kann, möge ein Geheimnis dieser Autoren sein.

10.6 Der Vergleich verschiedener Regularisierungsverfahren

In diesem Abschnitt sollen also verschiedene Regularisierungsverfahren miteinander verglichen werden. Konkret wollen wir das regularisierende Kerne verwendende Verfahren, also das von uns behandelte, mit dem „Standardverfahren“ in der Regularisierung, der Tikhonov-Phillips Regularisierung[135] und der Landweber-Iteration[136], wobei letzteres ein Beispiel eines, zumindest in der physikalischen Literatur, weniger beachtetes ist. Die letzten beiden Verfahren wenden wir in deren Formulierung als inverse Fourier-Transformationen an, was zur Konsequenz hat, daß wir in Wirklichkeit nur die Integralgleichung des Imaginärteils[137] behandelt haben. Die Verfahren so anzuwenden bringt jedoch große Vorteile bei der numerischen Realisierung, da wir jetzt nicht aufwendigere numerische Extremalisierungen respektive numerisch Operatorgleichungen iterativ lösen müssen, sondern die numerisch ausgereifte und besser kontrollierbare[138] *schnelle Fourier-*

[131] siehe Seite 2

[132] siehe die Bemerkungen auf Seite 283

[133] Die phänomenologische Natur des Cole-Davidson Modells verbietet von vornherein eine ontologische Interpretation; siehe dazu [Kan95, Haa83].

[134] Ein ähnlicher Hinweis auf Autoren ist in [LBP91] zu finden.

[135] siehe Abschnitt 5.2

[136] siehe Abschnitt 5.4 und [Lan51, Lou89]

[137] Zur Lösbarkeit der Imaginärteilintegralgleichung siehe wieder Abschnitt 2.4.3

[138] Auch wenn wir in dieser Arbeit den Rechenzeitaufwand nicht betrachtet haben, so ist diesbezüglich die Anwendung der schnellen Fourier-Transformation ein weiteres Argument.

Transformation[139], die wir der Konvention entsprechend mit „FFT“ abkürzen werden, anwenden können. Zusätzlich haben wir die *direkte* Anwendung der stabilisierenden $\tilde{F}_\gamma$ im Fourier-Raum, verglichen mit den dazu korrespondierenden Kern Φ^2_γ, untersucht. Wir wollen noch darauf hinweisen, daß wir in den folgenden Abbildungen und Tabellen die Tikhonov-Phillips Regularisierung durch „TP“ und die Landweber-Iteration durch „LW“ abkürzen werden.

Noch eine Bemerkung zu den folgenden Präsentationen: Den Leser wird auffallen, daß wir nicht mehr zu jeder Abbildung die dazu gehörenden Tabelle mit den relevanten Fehlern angegeben haben. Wir haben uns darauf beschränkt, nur noch exemplarisch die Tabellen anzugeben und insbesondere auf diejenigen verzichtet, deren Aussagen bereits in den anderen Tabellen enthalten sind. Ein weiterer Grund ist, wie wir bereits an den vorangegangenen Untersuchungen ablesen können, daß die quantitativen Werte der L^2-Fehler nur bedingt geeignet sind Schlüsse über die Qualität der Regularisierten zu ziehen. Dieses liegt, wie schon einmal erwähnt, in der Natur der L^2-Norm.

Vergleichen wir zuerst die mit den verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen Regularisierten eines einfachen Gaußmodells, das wir in völliger Analogie zu der Gaußschen Mollifier-Funktion als

$$W_{\text{Gauß}}(t) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\alpha^2 t^2\right) \tag{10.19}$$

formuliert haben. Ebenso haben wir uns der Einfachheit wegen auf die Zentrierung um den Nullpunkt beschränkt. Es ist klar, daß die Ergebnisse nicht von der Lage des Maximums der Gaußdichte abhängen werden.

Als erstes wollen wir das obige Gaußmodell (10.19) mit $\alpha = 2.0$ untersuchen. In der Abbildung 10.55 auf der nächsten Seite sind nun die, auf „doppelt genauen“ kontinuierliche Daten basierenden, mit den unterschiedlichen Verfahren bestimmte regularisierten Lösungen abgebildet. Konkret haben wir die Ergebnisse der direkten Anwendung des Filters im Fourier-Raum, gekennzeichnet mit „Gaußfilter-FFT“, der Tikhonov-Phillips Regularisierung, mit „TP-FFT“ gekennzeichnet und des regularisierenden Kerns abgebildet. Auf die Widergabe des Ergebnisses der Landweber-Iteration haben wir, da dieses mit dem der Tikhonov-Phillips Regularisierung identisch ist, der Übersicht in der Abbildung halber verzichtet. Ebenso verzichtet haben wir auf die Angabe der Werte des jeweiligen Regularisierungsparameters, und ein direkter Vergleich dieser numerischen Werte ist offensichtlich sinnlos.

Wie wir auch nicht anders erwartet haben, unterscheiden sich die Ergebnisse der beiden unterschiedlichen Realisierungen des Gaußfilters qualitativ nur marginal, wir erhalten als maximal möglichen Wert des Regularisierungsparameters bei der direkten Anwendung also keinen anderen als den der regularisierenden Kerne, und tatsächlich weisen, vorweggenommen, die Untersuchungen jener beiden Ansätze generell kaum Unterschiede auf. Insbesondere in Hinblick auf die Praxis, sind somit jene beiden äquivalent, was durch das nachfolgende noch bestätigt wird. Es verwundert auch nicht wirklich, daß jene beiden Realisierungen äquivalente Ergebnisse liefern, da das Problem, über stark oszillierende Funktionen zu integrieren, in der Formulierung als inverse Fourier-Transformation zwar implizit, aber nachwievor enthalten[140] ist.

Nach den umfangreichen, detailierten und mitunter auch mühevollen Untersuchungen, ist es ernüchternd, die Reproduktion der Modelldichte durch das Tikhonov-Phillips Verfahren festzustellen: in der Abbildung 10.55 können wir keinen Unterschied zwischen den Graphen der Modelldichte und der regularisierten Lösung mehr erkennen. Der in der L^2-Norm ausgedrückte Regularisierungsfehler ist hier sogar nur von der Größenordnung 10^{-10}. Der Einfluß des Datenfehlers ist, und das haben wir bereits dargelegt[141] in der Tikhonov-Phillips Regularisierung ein anderer und offensichtlich derart, daß dieser sich erst bei größeren Fehlern bemerkbar macht und auf dem Niveau „doppelt genauer“ Daten noch keine Rolle spielt. Desweiteren könnte auch noch die Möglichkeit eines subexponentiellen Fehlereinflusses bestehen.

---

[139] siehe beispielsweise [PTVF92, Sto99, SB00]

[140] Die Problematik der numerischen Integration über stark oszillierende Funktionen wird durch den Algorithmus der FFT quasi verschleiert; siehe dazu auch [Sto99, KF87]

[141] siehe Abschnitt 9.3.2; wir wollen daran erinnern, daß die dort angegebenen Fehlerabschätzung das globale Fehlerverhalten, bezüglich einer Hilbertraumnorm, beschreibt und nur indirekt Rückschlüsse auf das in der Numerik beobachtbare lokale Verhalten zuläßt.

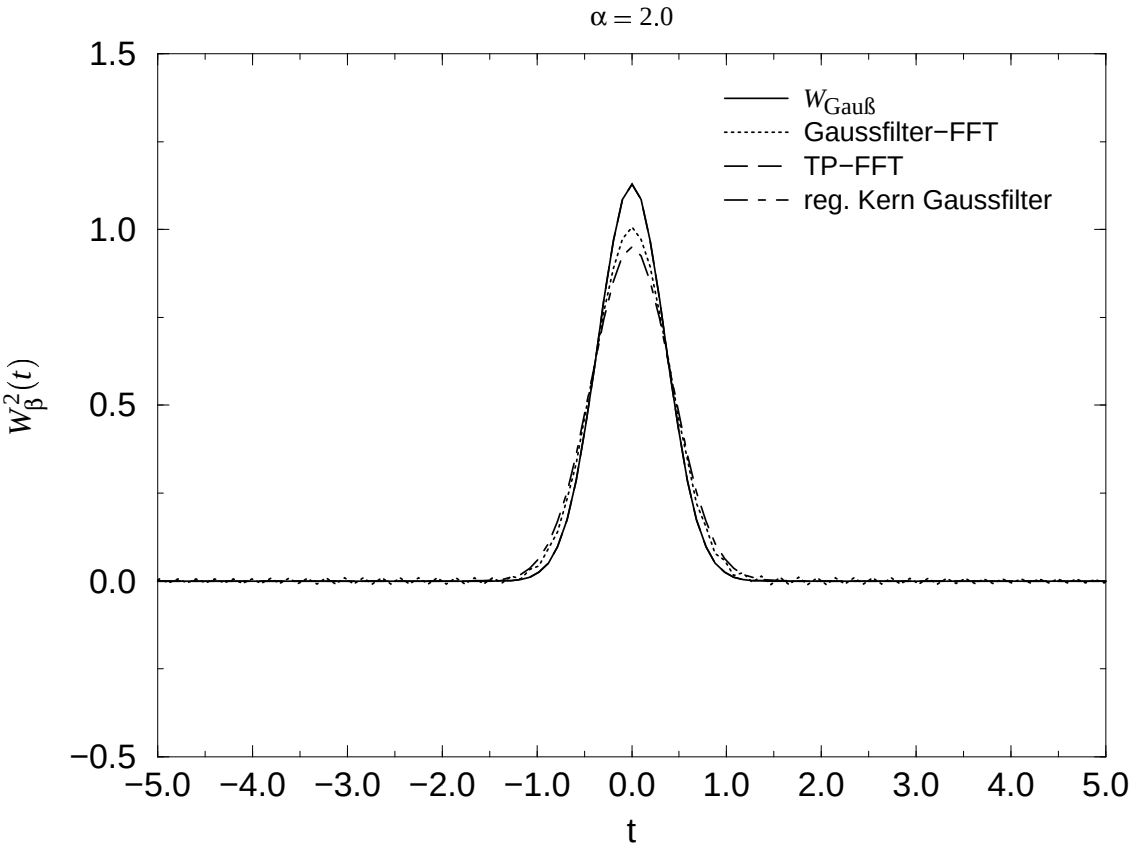

Abbildung 10.55: Gaußdichte: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2; $\alpha = 2.0$

Zur Beantwortung dieser Frage tragen nun die Abbildungen 10.56 auf der nächsten Seite und 10.57 auf Seite 312 bei: in der ersteren haben wir die Regularisierten eines fehlerbehafteten Datensatzes mit den Spezifikationen $MD = 1024$ im Intervall $[-20;\ 20]$ und einem mittleren relativen Fehler von $\sigma_{\text{rel}} = (0.4 \pm 0.2)\%$ wiedergegeben, in der letzteren die Regularisierten des selben Datensatzes, jetzt mit einem relativen mittleren Fehler von $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$. Auch wenn die um Größenordnungen qualitativ besseren Ergebnisse der Tikhonov-Phillips Regularisierung bei ungestörten Daten die Hoffnung auf eine generell besseren Reproduktion der zugrundeliegenden wecken, zeigen die auf fehlerbehafteten Daten basierenden Regularisierten ein anderes Bild: wir erkennen an den Abbildungen 10.56 auf der nächsten Seite und 10.57 auf Seite 312, daß die Tikhonov-Phillips Regularisierte, wir haben übrigens generell einen Stabilisator[142] mit konstanten Koeffizienten der Ordnung $p = 1$ benutzt, zwar die Gaußspitze „schärfer“ wiedergibt als die beiden anderen Regularisierten, die ein recht unscharfes Bild der Gaußdichte wiedergeben, doch ist die Tikhonov-Phillips Regularisierte von Oszillationen[143] überlagert. Ebenso können wir in den beiden Abbildungen einen leichten Unterschied des Zentrums der regularisierten Gaußdichte bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung erkennen. Wir werden dieses „wandern“ eines Zentrums später deutlicher beobachten können, wenn wir Doppelgauß Modelldichten (kurz) betrachten werden.

Bezüglich der beiden verschiedenen Realisierungen des Gaußfilters können wir dasselbe festhalten, was wir bereits bei der Regularisierung der ungestörten Daten beobachtet haben: grundsätzlich sind jene beiden Regularisierten von der gleichen Qualität, und die Werte des Parameters β sind von der gleichen[144] Größenordnung, d.h. jene Werte weichen nur geringfügig voneinander ab. Und offensichtlich gilt für den Wert des „trial and error“-Verfahrens immer $\beta \leq \beta_{L^2}$, wobei β_{L^2} den Wert, bei dem der (gesamte) Regularisierungfehler, ausgedrückt durch die L^2-Norm, sein Minimum annimmt, bezeichnen soll.

[142] siehe Abschnitt 5.2

[143] Derartige Oszillationen in der Tikhonov-Phillips Regularisierung wurden bereits bei ähnlichen, stark schlecht gestellten Problemen beobachtet; siehe dazu auch [AT77, Gro84, Lou89, TGSY95]

[144] Würden wir sämtlich untersuchten Modelle und deren verschiedenen Parameter vorstellen, so würde die Arbeit jedes erträgliche Maß sprengen. So können wir nur auf das Vertrauen des Lesers hoffen, wenn wir derartige Ergebnisse ohne weiteren Nachweis, außer den numerischen in ihrer Gesamtheit, angeben.

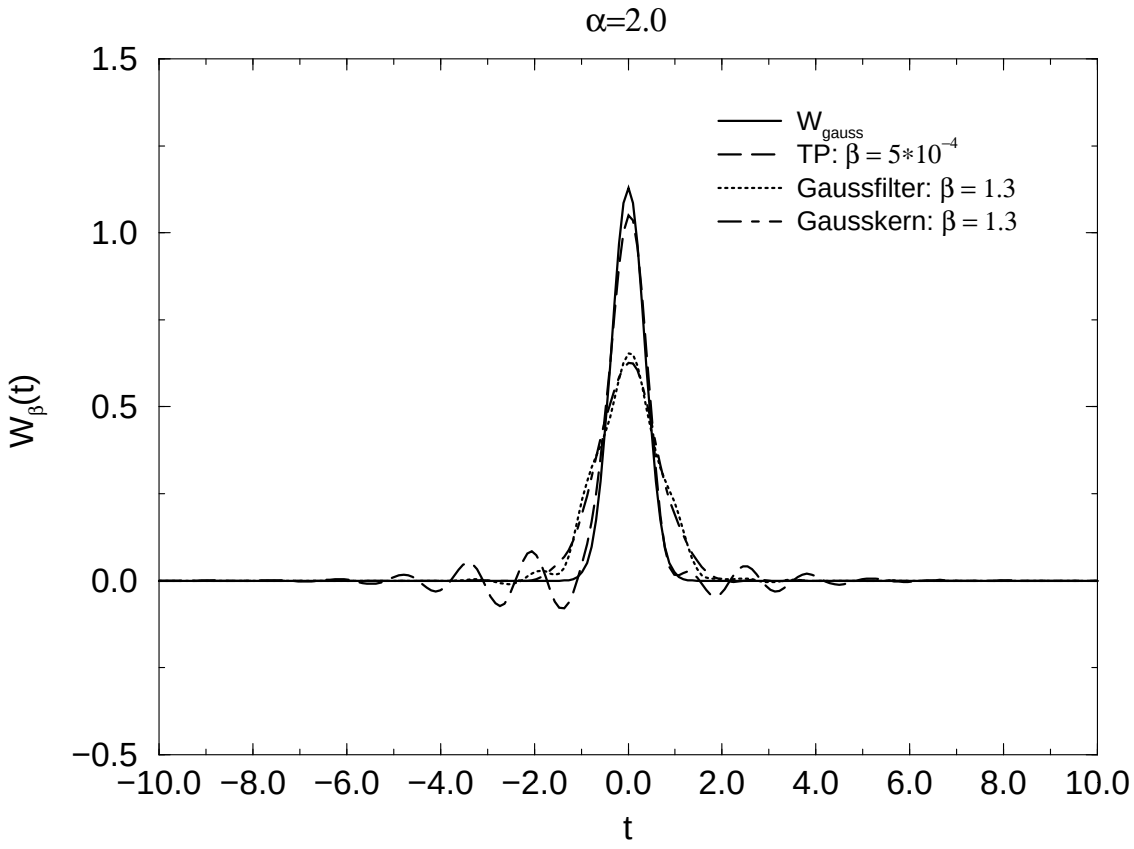

Abbildung 10.56: Gaußdichte: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2 bei gestörten Daten: $\alpha = 2.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.4 \pm 0.2)\%$

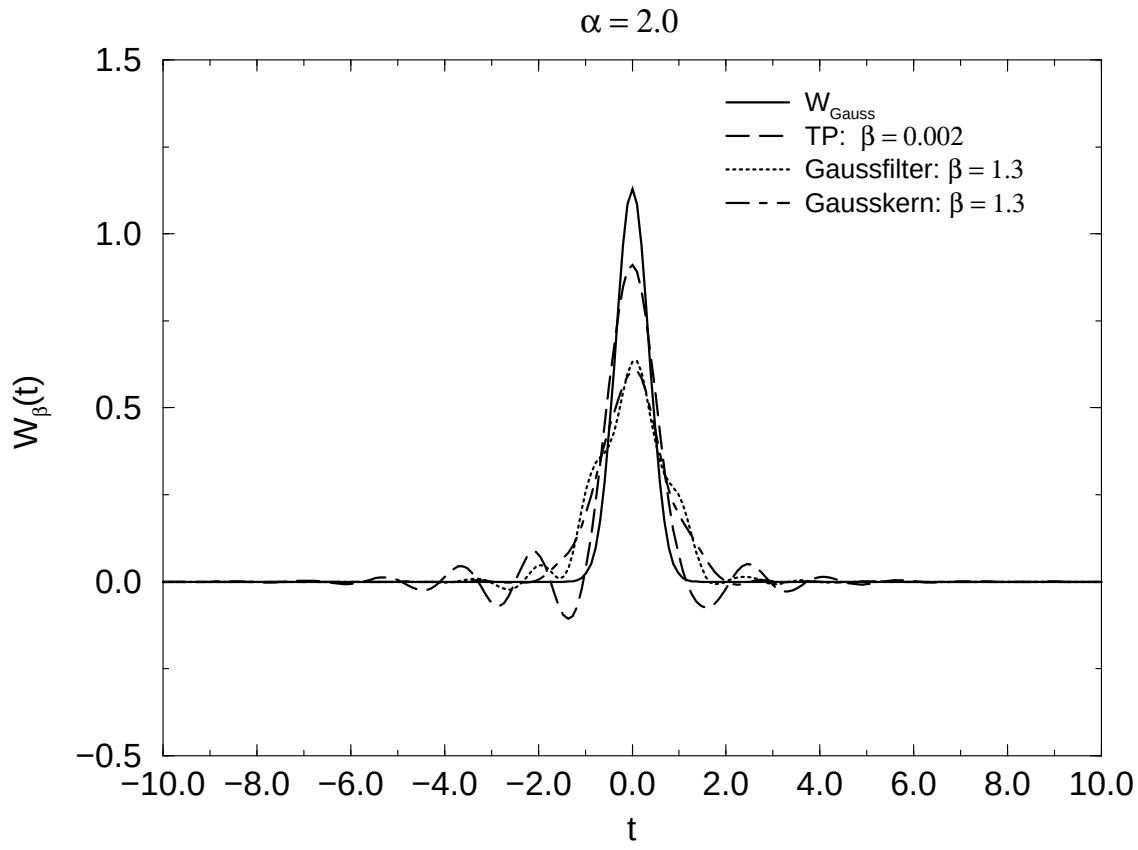

Abbildung 10.57: Gaußdichte: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2 bei gestörten Daten: $\alpha = 2.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Ein weiteres Problem bei der Tikhonov-Phillips Regularisierten ist noch zu erkennen, nämlich welche der Oszillationen tatsächlich numerische Artefakte sind und welche eventuell Strukturen der zugrundeliegenden Dichte zu reproduzieren versuchen, da diese Oszillationen, im Gegensatz zur Regularisierung mit den Gaußfilter, immer zu beobachten sind, also auch bei einem höheren Wert[145] des Parameters β.

Die Regularisierungsparameter wurden übrigens sowohl nach dem „trial and error"-Verfahren als auch über das numerisch bestimmte Minimum des (gesamtem) L^2-Regularisierungsfehlers bestimmt. Beide Werte sind hier tatsächlich identisch. Die asymptotischen Entwicklungen (9.205) auf Seite 184 und (9.206) auf Seite 184 zur „quasi optimalen" Wahl des Parameters β gemäß des ersten modifizierten Diskrepanzprinzips[146] ergeben übrigens ein zu großen Wert, bei dem der Datenfehlereinfluß bereits zu stark dominiert.

In der Abbildung 10.58 auf der nächsten Seite haben wir jetzt die, auf einem Datensatz mit den gleichen Spezifikationen wie oben und wiederum mit einem mittleren relativen Fehler von $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$ basierenden Regularisierten einer Gaußdichte, wobei der Modellparameter jetzt $\alpha = 3.0$ betrug, wiedergegeben. Diesmal haben wir wieder die relevanten Fehler dieser Regularisierung in der Tabelle 10.29 aufgelistet. Wir lesen aus der Tabelle den minimalen Fehler bei der Tikhonov-Phillips Regularisierten ab. Zu den zwei verschiedenen Werten des Parameters β bei den beiden verschiedenen Realisierung des Gaußfilters ist zu erwähnen, daß wir den Wert bei dem regularisierenden Kern gemäß des „trial and error"-Verfahrens gewählt haben, wohingegen wir der Wert bei dem direkt angewandten Gaußfilter nach dem, numerisch bestimmten, Minimum des L^2-Regularisierungsfehlers gewählt haben.

[145] Es sei daran erinnert, daß im Tikhonov-Phillips Filter $\beta \to 0$ bei $g^\varepsilon \to g$ gilt.

[146] siehe Abschnitt 8.2.2 und 9.5.1

Verfahren	β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
TP-Filter	0.004	0.249
Gauß-Filter	1.3	0.411
Gaußkern	1.1	0.507

Tabelle 10.29: Vergleich der Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ und W_β^2 bei verschiedenen Regularisierungsverfahren: $\alpha = 3.0$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Wiederum zeigt es sich, daß die Regularisierte mit den minimalen L^2-Fehler nur bedingt auch die „bessere“ qualitative Approximation darstellt: Zwar zeichnet die Tikhonov-Phillips Regularisierte einen deutlichen Gaußpeak nach, doch mit einem falschen Zentrum, das Maximums der Regularisierten liegt nicht beim Maximum der Zugrundeliegenden, und ist wiederum mit Oszillationen überlagert. Einen deutlichen Einfluß des Datenfehlers, manifestiert ebenso durch Oszillationen, weist die Regularisierte des Gaußfilters auf. Ziehen wir in der Betrachtung jener noch das Ergebnis des regularisierenden Kerns zusätzlich heran, so erkennen wir die numerisch artefaktische Natur der zusätzlichen oszillatorischen Spitzen in den Graphen. Übrigens reproduzieren beide Gaußfilterregularisierte die Stelle des Maximums der Zugrundeliegenden korrekt.

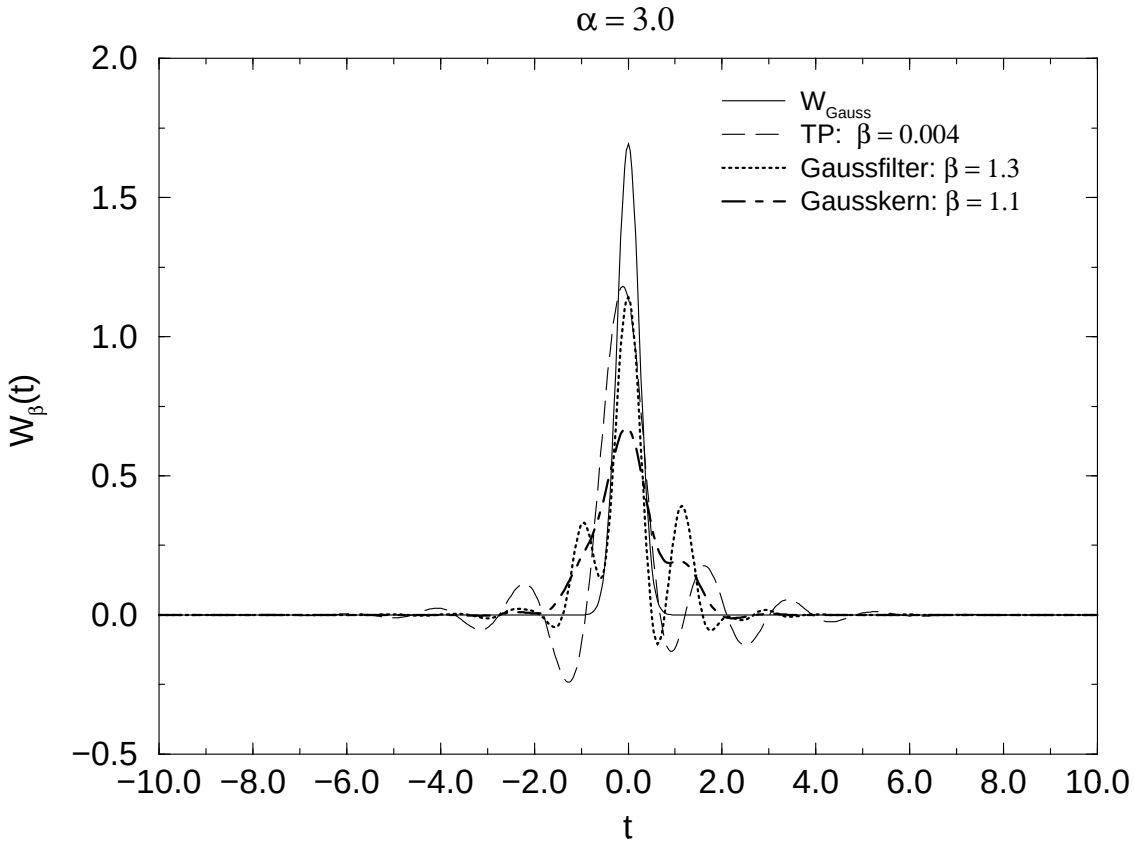

Abbildung 10.58: Gaußdichte: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2 bei gestörten Daten: $\alpha = 3.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Nach dem einfachen Gaußmodell wollen wir ein ebenso einfaches Doppelgauß Modell der Form

$$W_{\text{Gauß}}(t) = a\frac{\alpha_1}{\sqrt{\pi}}\,\exp\left(-\alpha_1^2(t-t_1)^2\right) + (1-a)\frac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}}\,\exp\left(-\alpha_2^2(t-t_1)^2\right) \tag{10.20}$$

mit $0 \leq a \leq 1$ betrachten. Als erstes konkretisieren wir die Parameter in (10.20) zu $\alpha_1 = \alpha_2 = 2.0$, $t_1 = -1.0$, $t_2 = 1.0$ und $a = 0.5$, also zwei Gaußpeaks mit jeweils der gleichen Breite.

Die Tabelle 10.30 listet die obligatorischen Fehler der auf regularisierenden Kernen basierenden Ergebnisse der Behandlung der Real- und Imaginärteilintegralgleichungen, wobei wir zuerst einen reinen Datensatz mit $MD = 1024$ und Datenintervall $[-20;20]$ betrachtet haben.

β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
3.0	0.0096	0.0096	3.6	0.0053	0.0052		
3.1	0.0086	0.008	3.7	0.0069	0.0065		
3.2	0.0078	0.0078	3.8	0.0860	0.084	0	0
3.3	0.0070	0.0079	3.9	3.3244	3.3244		
3.4	0.0063	0.0063	4.0	151.41	151.41		
3.5	0.0057	0.0057					

Tabelle 10.30: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und jeweils W_β^1 und W_β^2 und Datenfehler: $MD = 1024$

Die Abbildung 10.59 auf der nächsten Seite zeigt jetzt die grafische Aufarbeitung der zur Tabelle 10.30 gehörenden Ergebnisse. Wir haben uns hier auf die Wiedergabe der Regularisierten bei $\beta = 3.6$, jenem Wert, bei denen der quadratische Fehler minimal wird, beschränkt und wie nicht anders erwartet, können wir die zugrundeliegende Dichte mit diesem Verfahren nicht vollständig reproduzieren. Die Lösung der direkten Anwendung des Gaußfilters im Fourier-Raum ist vollkommen äquivalent mit der hier für W_β^2 angegebenen, so daß wir auf deren Wiedergabe verzichten können.

β_{TP}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	β_{TP}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_2^2
$5\cdot10^{-09}$	$9.03985\cdot10^{-08}$	$1\cdot10^{-08}$	$3.36783\cdot10^{-08}$	
$6\cdot10^{-09}$	$6.78715\cdot10^{-08}$	$2\cdot10^{-08}$	$3.41492\cdot10^{-08}$	
$7\cdot10^{-09}$	$5.37796\cdot10^{-08}$	$3\cdot10^{-08}$	$7.23693\cdot10^{-08}$	0
$8\cdot10^{-09}$	$4.44569\cdot10^{-08}$	$4\cdot10^{-08}$	$1.35804\cdot10^{-07}$	
$9\cdot10^{-09}$	$3.80851\cdot10^{-08}$	$5\cdot10^{-08}$	$2.19812\cdot10^{-07}$	

Tabelle 10.31: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und der Tikhonov-Phillips regularisierten W_β^2 und Datenfehler: $p = 1$; $MD = 1024$

Nehmen wir nun den obigen Datensatz und wenden die Tikhonov-Phillips Regularisierung an. Die Tabelle 10.31 listet die Regularisierungsfehler bei Variation des Parameter β_{TP} auf. Bereits aufgrund der Werte in jener Tabelle können wir die Reproduktion der Zugrundeliegenden vermuten, was mit der Abbildung 10.60 auf Seite 316 bestätigt wird. Wie bereits im Fall der einzelnen Gaußdichte, ist die Tikhonov-Phillips Regularisierung tatsächlich in der Lage, dieses auf der Basis diskreter „doppelt genauer“ Daten zu vollbringen.

Abschließend wollen wir die Regularisierung des ansonsten fehlerfreien Datensatzes mit der Anwendung der Landweber-Iteration betrachten, deren Ergebnisse tabellarisch in 10.32 und grafisch in der Abbildung 10.61 auf Seite 317 wiedergegeben sind. Und so stellen wir ernüchternd[147] fest, daß die Landweber-Iteration

[147] Die Ernüchterung ist auf den Schwerpunkt unserer Arbeit bezogen.

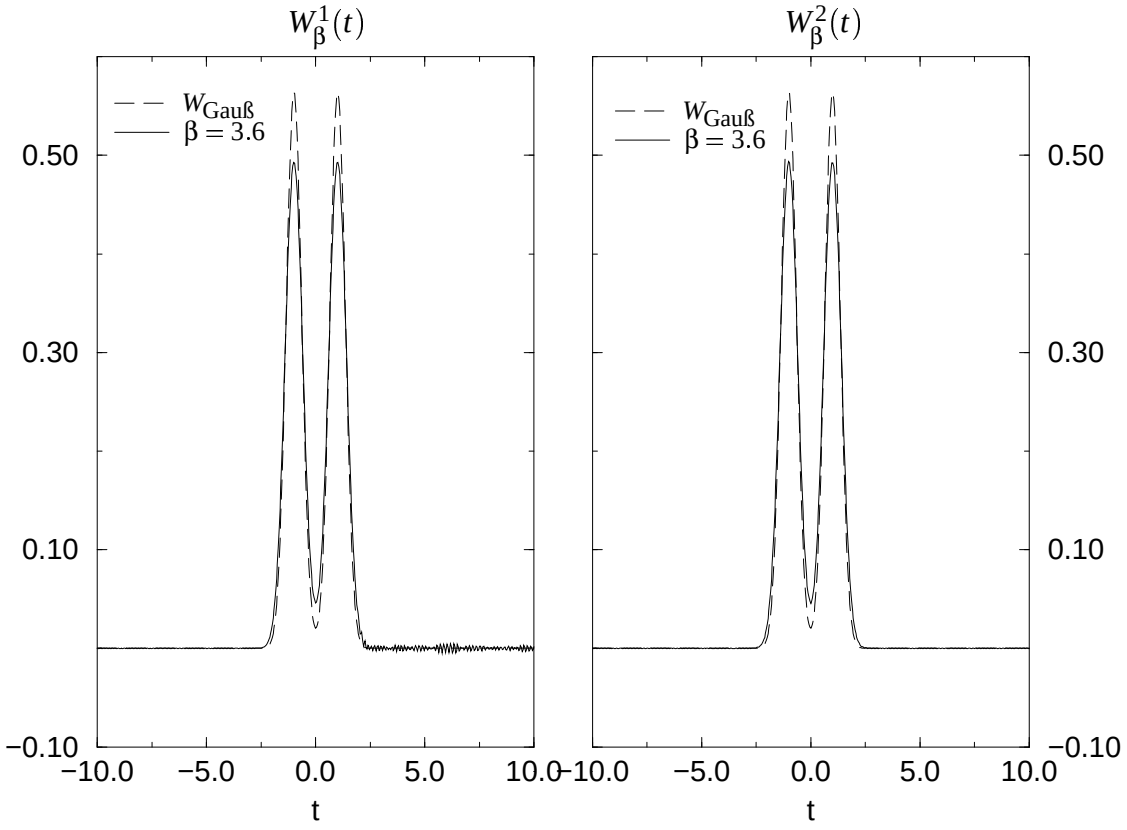

Abbildung 10.59: Doppelgaußdichte: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 bei diskreten Daten: $MD = 1024$

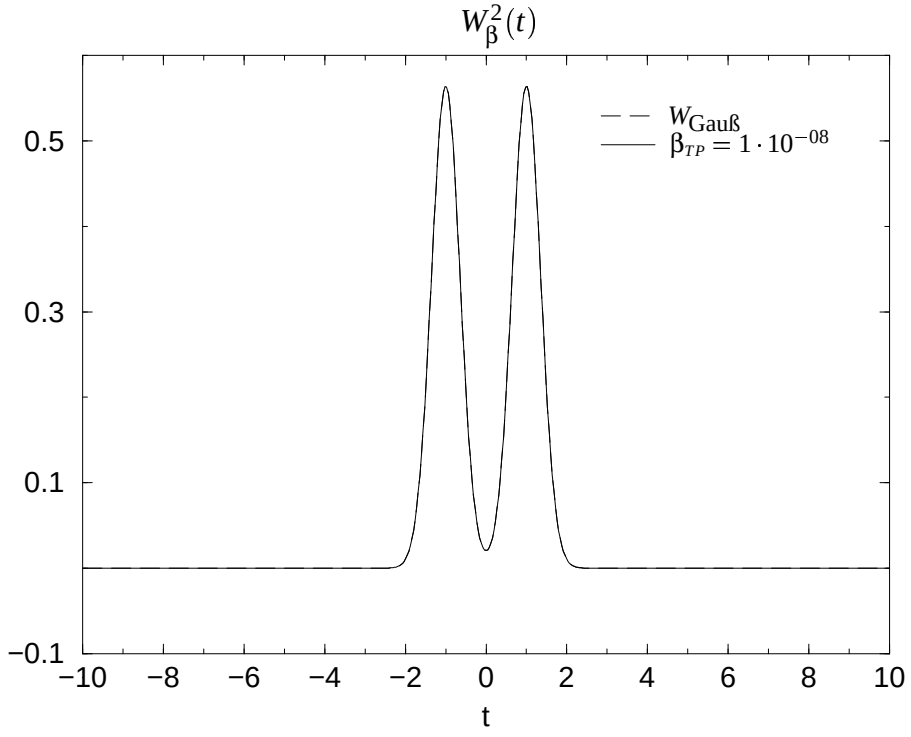

Abbildung 10.60: Doppelgaußdichte: Tikhonov-Phillips regularisierte W_β^2 bei diskreten Daten: $p = 1.0$; $MD = 1024$

ein derartigen Datenfehlereinfluß besitzt, in den der reine Fehler „doppelt genaue“ diskrete Daten sich noch nicht in der Regularisierung auswirkt.

β_{LW}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	β_{LW}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_2^2
$1 \cdot 10^{16}$	$2.667 \cdot 10^{-10}$	$6 \cdot 10^{16}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	
$2 \cdot 10^{16}$	$2.094 \cdot 10^{-10}$	$7 \cdot 10^{16}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	
$3 \cdot 10^{16}$	$2.047 \cdot 10^{-10}$	$8 \cdot 10^{16}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	0
$4 \cdot 10^{16}$	$2.031 \cdot 10^{-10}$	$9 \cdot 10^{16}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	
$5 \cdot 10^{16}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{17}$	$2.030 \cdot 10^{-10}$	

Tabelle 10.32: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und der Landweber-Regularisierten W_β^2 und Datenfehler: $p = 0.8$; $MD = 1024$

Bevor wir jedoch aufgrund der positiven Ergebnisse der Landweber-Iteration bei der Regularisierung diskreter, fehlerloser Datensätze zu früh euphorisch werden, untersuchen wir jetzt fehlerbehaftete Datensätze.

Dazu gehen wir wie bisher übliche vor, d.h. wir übernehmen[148] den eben verwendeten Datensatz und prägen diesen einen numerischen, stochastischen Fehler auf. Halten wir uns jetzt nicht mit den experimentell eher unrealistischen Fehlern im Promillebereich auf, sondern betrachten jetzt sofort einen relativen mittleren Datenfehler von $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$.

[148] Wir sollten bemerken, daß wir in den Untersuchungen dieses Abschnitts genauer die Spezifikation des Datensatzes übernommen haben. Numerisch ist dieses jedoch vollkommen äquivalent.

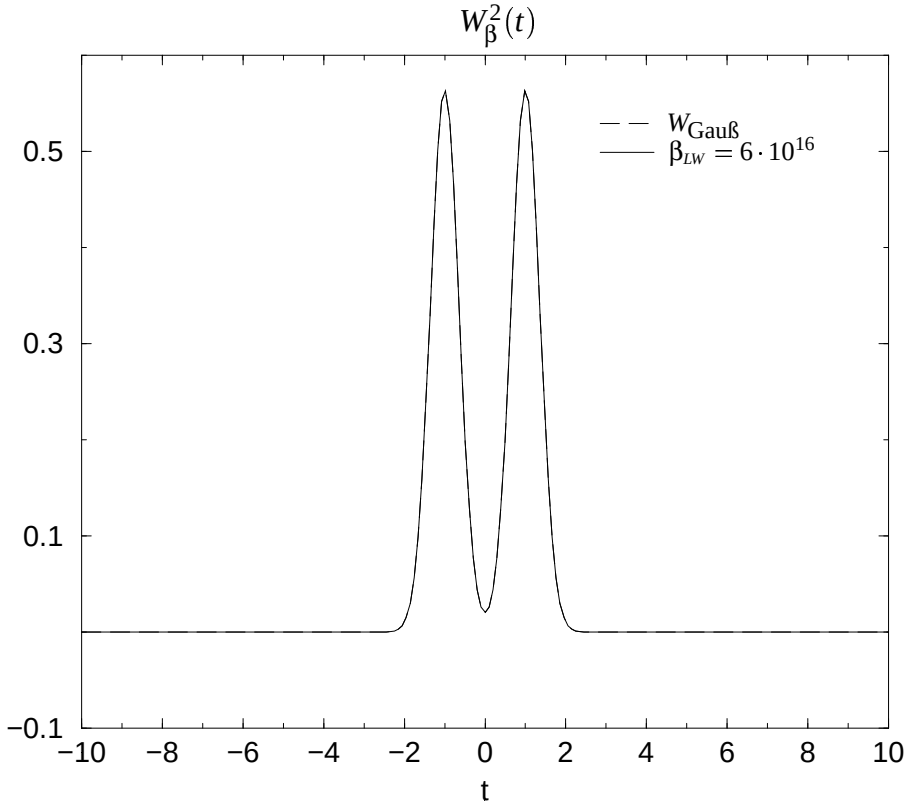

Abbildung 10.61: Doppelgaußdichte: Landweber-Regularisierte W_β^2 bei diskreten Daten: $p = 0.8$; $MD = 1024$

β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^1\|_{L^2}^2$	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_1^2	ε_2^2
0.5	0.1812	0.1810	1.1	0.1751	0.1216		
0.6	0.1693	0.1695	1.2	0.4002	0.1187		
0.7	0.1587	0.1593	1.3	1.4214	0.1263	0.0323	0.0010
0.8	0.1475	0.1489	1.4	5.7378	0.1661		
0.9	0.1374	0.1385	1.5	26.080	0.3340		
1.0	0.1361	0.1290	1.6	147.151	1.2792		

Tabelle 10.33: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und jeweils W_β^1 und W_β^2 und Datenfehler: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}}(1.3 \pm 0.9)\%$

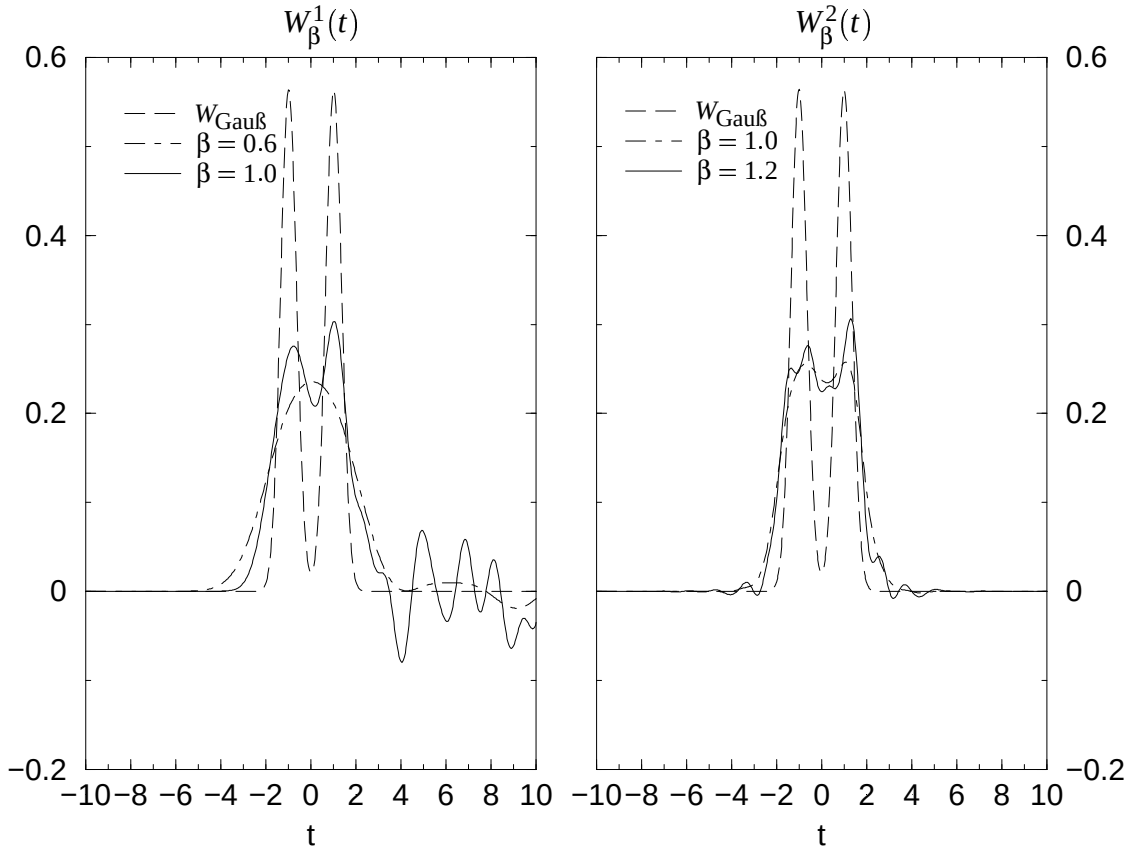

Abbildung 10.62: Doppelgaußdichte: Regularisierte W_β^1 und W_β^2 bei diskreten Daten: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Betrachten wir zuerst die Anwendung der jeweiligen regularisierenden Kerne auf die Real- und Imaginärteilgleichung. In der Tabelle 10.33 haben wir wieder detailiert den Fehlerverlauf des Regularisierungsfehlers, angegeben in der numerisch approximierten L^2-Norm, bei Variation des Regularisierungsparameters angegeben. Ebenso haben wir dort, wie bisher üblich, den jeweiligen Datenfehler ε_1^2 und ε_2^2 aufgelistet. Die Werte der Tabelle spiegeln das uns nun hinlänglich bekannte Bild wider: sobald der Datenfehlereinfluß spürbar wird, wächst dieser Einfluß bei einer relativ minimalen Variation von β drastisch an. Die Werte des Regularisierungsparameters, bei dem der (gesamte) Regularisierungsfehler minimal wird, sind, gemäß der Tabelle, für W_β^1 $\beta = 1.0$ und für W_β^2 $\beta = 1.2$. Die Graphen dieser Regularisierten haben wir in der Abbildung 10.62 auf der vorherigen Seite dargestellt. Neben jenen Graphen haben wir auch die Regularisierten, die wir gemäß des „trial and error“ Verfahrens erhalten haben, abgebildet. In den Graphen des minimalen Regularisierungsfehlers können wir bereits deutlich den Datenfehlereinfluß erkennen, der sich wiederum in Form von Oszillationen manifestiert hat. Zwar weisen die Graphen der „trial and error“-Methode diese Oszillationen nicht respektive noch nicht in einem dominierenden und destruktiven Maße auf, doch weist jener Graph für W_β^1 noch keine Doppelgaußstruktur auf, genauer läßt sich aufgrund dieses Graphen kein Hinweis auf die zugrundeliegenden Doppelstruktur finden. Ein solcher Hinweis gibt aber im Gegensatz dazu bereits der entsprechende Graph von W_β^2. Letztendlich können wir, auf der Basis dieser Regularisierten, zwar eine Art Doppelpeak-Struktur erkennen, insgesamt sind diese aber nur verschwommene und vage Bilder der zugrundeliegenden Dichte.

β_{TP}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	β_{TP}	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$	ε_2^2
0.001	1.3662	0.02	0.0954	
0.002	0.4886	0.03	0.1079	
0.003	0.2880	0.04	0.1183	
0.004	0.2033	0.05	0.1262	
0.005	0.1588	0.06	0.1321	0.0010
0.006	0.1328	0.07	0.1367	
0.007	0.1166	0.08	0.1403	
0.008	0.1063	0.09	0.1432	
0.009	0.0997	0.1	0.1456	
0.01	0.0954			

Tabelle 10.34: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und der Tikhonov-Phillips regularisierten W_β^2 und Datenfehler: $p = 1$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Wenden wir uns nun der Regularisierung des gleichen, identischen Datensatzes[149] mit dem Tikhonov-Phillips Verfahren zu. Die Regularisierungfehler bei der Variation des Parameters β_{TP} sind detailiert in der Tabelle 10.34 aufgelistet, um so den Datenfehlereinfluß exemplarisch zu dokumentieren. Wir erkennen ein prinzipiell ähnliches Verhalten der Fehlerentwicklung wie im Fall des Gaußfilters, nur daß wir jetzt den Regularisierungsparameter dekadenweise variieren müssen. Nachdem der Fehler bei $\beta_{TP} = 0.02$ sein, numerisch bestimmtes, Minimum erreicht hat, können wir einen entsprechend deutlichen Anstieg dieses Fehlers bei einer weiteren Verringerung des Parameters erkennen, wobei wir nochmals betonen wollen, daß wir hier tatsächlich den Regularisierungsparameter dekadenweise variieren müssen, insbesondere um die so erhaltenen Parameterwert *qualitativ* mit den Regularisierungparameter im Gaußfilter vergleichen zu können. Dieses folgt[150] übrigens bereits aus der Form der Abhängigkeit von dem Parameter β_{TP} des Filters der Tikhonov-Phillips Regularisierung .

In der Abbildung 10.63 auf der nächsten Seite sind nun die numerischen Ergebnisse dargestellt, wobei wir wiederum zusätzlich neben den Graphen des minimalen Fehlers den Graphen, den wir nach dem „trial and

[149] Tatsächlich haben wir nur die vorgegebene E_2 verwendet; siehe die Bemerkungen am Anfang dieses Abschnitts, Seite 10.6

[150] siehe wieder [AT77, Lou89, Gro84]

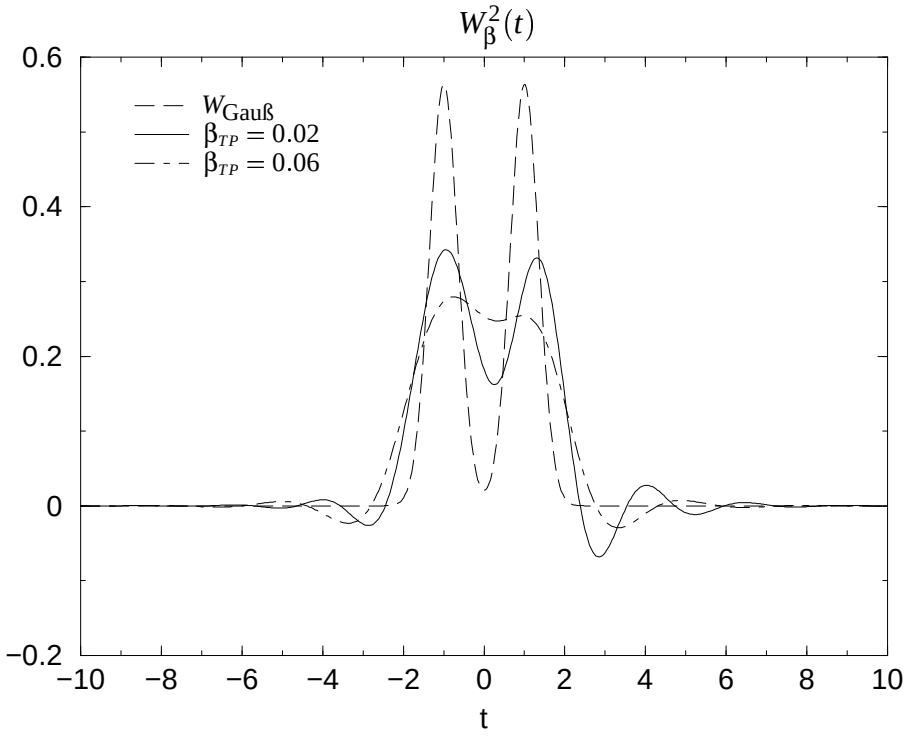

Abbildung 10.63: Doppelgaußdichte: Tikhonov-Phillips regularisierte W_β^2 bei diskreten Daten: $p = 1.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

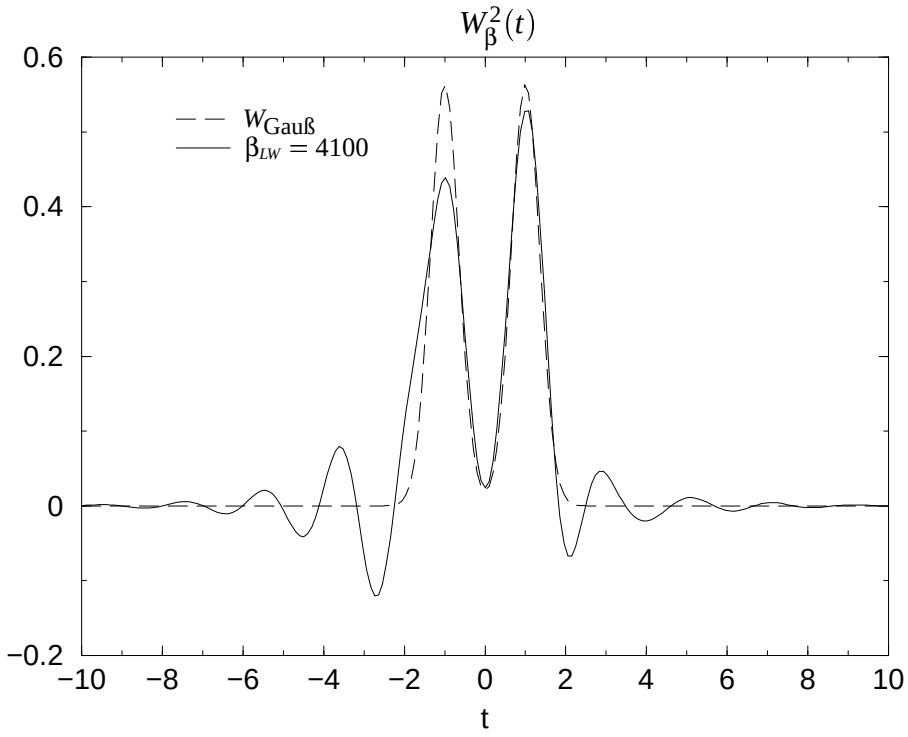

Abbildung 10.64: Doppelgaußdichte: Landweber-Regularisierte W_β^2 bei diskreten Daten: $p = 0.8$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

error“-Verfahren gewonnen haben, abgebildet worden ist.

Deutlicher als bei der Regularisierung mit dem Gaußfilter, können wir bei beiden abgebildeten Regularisierten eine Doppelpeak-Struktur erkennen. Störend sind jetzt jedoch die oszillatorischen Artefakte des Tikhonov-Phillips Filters, die sich offensichtlich nicht nur auf die Flanken, bei denen die Zugrundeliegende gegen Null strebt, sondern auf den gesamten Graphen auswirken. Vergleichen wir die beiden Abgebildeten, so können wir weder auf die relative Höhe zueinander der erkennbaren Maxima noch auf die Lage jener schließen. Gerade bezüglich der letzten Fragestellung beobachten wir, daß die Lage der Maxima bei einer Variation von β_{TP} zu wandern scheint. Dieses Phänomen der „wandernden Maxima“ werden wir im Anschluß noch (kurz) untersuchen.

Das letzte Verfahren, das wir zur Regularisierung des bis jetzt verwendeten Datensatzes zum Doppelgauß-Modell angewandt haben, ist die Landweber-Iteration, deren Entwicklung des Regularisierungsfehlers bei Variation des Parameters β_{LW} wir in der Tabelle 10.35 einmal ausführlich dokumentiert haben. Wir wollen bereits jetzt darauf hinweisen, daß ähnlich wir bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung der Parameter β_{LW} dekadenweise[151] variiert werden sollte, insbesondere da so ein *qualitativer* Vergleich der Parameter der verschiedenen Verfahren möglich ist. Diese Strategie wird noch zusätzlich (exemplarisch) durch die rechte Seite der Tabelle 10.35 untermauert, in der detailiert die Variation im Intervall $]3000;\ 5000[$ aufgelistet ist: der Regularisierungsfehler verändert sich dort nur minimal.

β_{LW}	$\|\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|\|_{L^2}^2$
1000	0.0511
2000	0.0374
3000	0.0320
4000	0.0303
5000	0.0310
6000	0.0336
7000	0.0377
8000	0.0431
9000	0.0494
10000	0.0568

β_{LW}	$\|\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|\|_{L^2}^2$	ε_2^2
3100	0.0317	
3200	0.0314	
3300	0.0312	
3400	0.0309	
3500	0.0308	
3600	0.0306	
3700	0.0305	
3800	0.0304	
3900	0.0303	
4000	0.0303	0.0010
4100	0.03026	
4200	0.03026	
4300	0.03028	
4400	0.03033	
4500	0.03040	
4600	0.03049	
4700	0.03059	
4800	0.03072	
4900	0.03087	

Tabelle 10.35: Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und der Landweber-Regularisierten W_β^2 und Datenfehler: $p = 0.8$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

In der Abbildung 10.64 auf der vorherigen Seite haben wir das Ergebnis der Landweber-Iteration nun grafisch dargestellt. Hier fallen übrigens die Graphen für die β_{LW}-Werte, die wir einmal nach dem „trial and error“-Verfahren und zum anderen über den minimalen Regularisierungsfehler bestimmen, zusammen, so daß wir nur einen abzubilden brauchten.

Betrachten wir die Regularisierte: ähnlich wie bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung, weist der Graph oszillatorische, den gesamten überlagern, numerische Artefakte auf. Die Doppelpeak-Struktur wir prinzi-

[151] Dieses steht wiederum im Zusammenhang mit der Art und Weise des Eingehens des Parameter β_{LW} im Filter der Landweber-Iteration.

piell recht deutlich, aber nicht vollständig qualitativ (geschweige denn quantitativ) wiedergegeben. Zwar wird der Gaußpeak bei $t = 1.0$ beinahe vollständig reproduziert, ebenso können wir deutlich einen Peak bei $t = -1.0$ erkennen, doch sind die relativen Höhen der Maxima nicht korrekt wiedergegeben. Dieses hat u.a. zur Konsequenz, daß die Breite des rechten Gaußpeaks zwar sehr gut reproduziert wird, die Breite des linken jedoch verfälscht. Insgesamt stellen wir also fest: die Landweber-Iteration liefert hier die qualitativ beste Approximation der zugrundeliegenden Doppelgauß-Dichte.

Bei der Anwendung des Tikhonov-Phillips Verfahrens haben wir, bei Variation des Regularisierungsparameters, ein „Wandern“ der Zentren der zu reproduzierenden zugrundeliegenden Gaußdichten beobachtet. Wir wollen nun kurz untersuchen, ob wir ein ähnliches oder das gleiche Verhalten bei der Regularisierung verschiedener Datensätze, die aber jedesmal den gleichen relativen mittleren Fehler aufweisen mögen, ansonsten wäre ein direkter Vergleich auch nur schwer möglich, beobachten. Die Spezifizierung der verwendeten reinen Datensätze und deren Abkürzungen haben wir in der Tabelle 10.36 aufgelistet.

Bezeichnung	Intervallänge (bzgl. t)	MD
Set:1	$[-20;\ 20]$	1024
Set:2	$[-10;\ 10]$	1024
Set:3	$[-10;\ 10]$	32
Set:4	$[-100;\ 100]$	1024

Tabelle 10.36: Spezifizierung der Datensätze

Bevor wir die Ergebnisse dieser Untersuchungen diskutieren, wollen wir noch folgendes bemerken: generell haben wir die Regularisierten mit den minimalem Regularisierungsfehler, den wir entsprechend numerisch bestimmt haben, angegeben. Der Leser möge uns vertrauen wenn wir darauf hinweisen, daß sich an den Ergebnissen grundsätzlich nichts ändert, wenn wir stattdessen die gemäß des „trial and error“-Verfahrens ermittelten Regularisierten angegeben hätten. Eine Ausnahme bildet der Gaußfilter respektive die auf regularisierenden Kerne basierende Darstellung der Anwendung des Gaußfilters insofern, als daß deren Regularisierten mit minimalen Regularisierungsfehler bereits einen deutlichen Datenfehlereinfluß aufweisen. Wir haben uns deswegen entschlossen, hier auch die „trial and error“ Ergebnisse anzugeben.

Exemplarisch für das regularisierende Kerne verwendende Verfahren, haben wir in der Abbildung 10.65 auf der nächsten Seite die Ergebnisse der regularisierten W_β^2 bei den verschiedenen Datensätzen angegeben. In den oberen Bildbereich der Abbildung, in den wir die Ergebnisse gemäß dem „trial and error“-Verfahren angegeben haben, können wir keine „Wanderung“ der sehr flachen Maxima erkennen. Erst wenn die Oszillationen des Datenfehlereinflusses deutlich erkennbar die Graphen stören, welches wir im unteren Bildbereich bei den Ergebnissen des minimalen Fehlers beobachten können, ändert sich, je nach Datensatz, die Lage der Maxima, wobei diese Änderung in einem begrenzten Bereich stattfinden und deutlich alleine durch den Datenfehlereinfluß bewirkt werden. Anders ausgedrückt, sind die Regularisierten des Gaußfilters zwar unscharfe, eine niedrige Auflösung aufweisende Abbildungen der Zugrundeliegenden, doch, solange der Datenfehlereinfluß noch keine wesentliche Rolle spielt, stabil bezüglich der reproduzierten Strukturen.

Ein dramatisch anderes Bild zeichnet sich jetzt bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung, Abbildung 10.66 auf Seite 325, und der Landweber-Iteration, Abbildung 10.67 auf Seite 325, ab: bei diesen beiden Regularisierungsverfahren können wir ein „Wandern“ der Maxima, abhängig vom Datensatz, und wie die vorangegangenen diskutierten Bilder gezeigt haben, auch vom Wert des Regularisierungsparameters[152], beobachten, welches sich jetzt nicht wie im Fall des Gaußfilters in einem kleinen Bereich erstreckt, so daß deutlich qualitativ falsche Ergebnisse bezüglich der Lage der Maxima geliefert werden. Auch wird die Gesamtheit der mit jenen beiden Verfahren erhaltenen Regularisierten keine sichere Aufschlüsse über die Lage, die relative Höhe und mitunter über die Breite der Maxima zulassen.

[152] Die Gültigkeit dieses Umstandes bei der Landweber-Iteration werden wir nicht explizit aufzeigen, da die präsentierten Ergebnisse dieses implizit bereits enthalten.

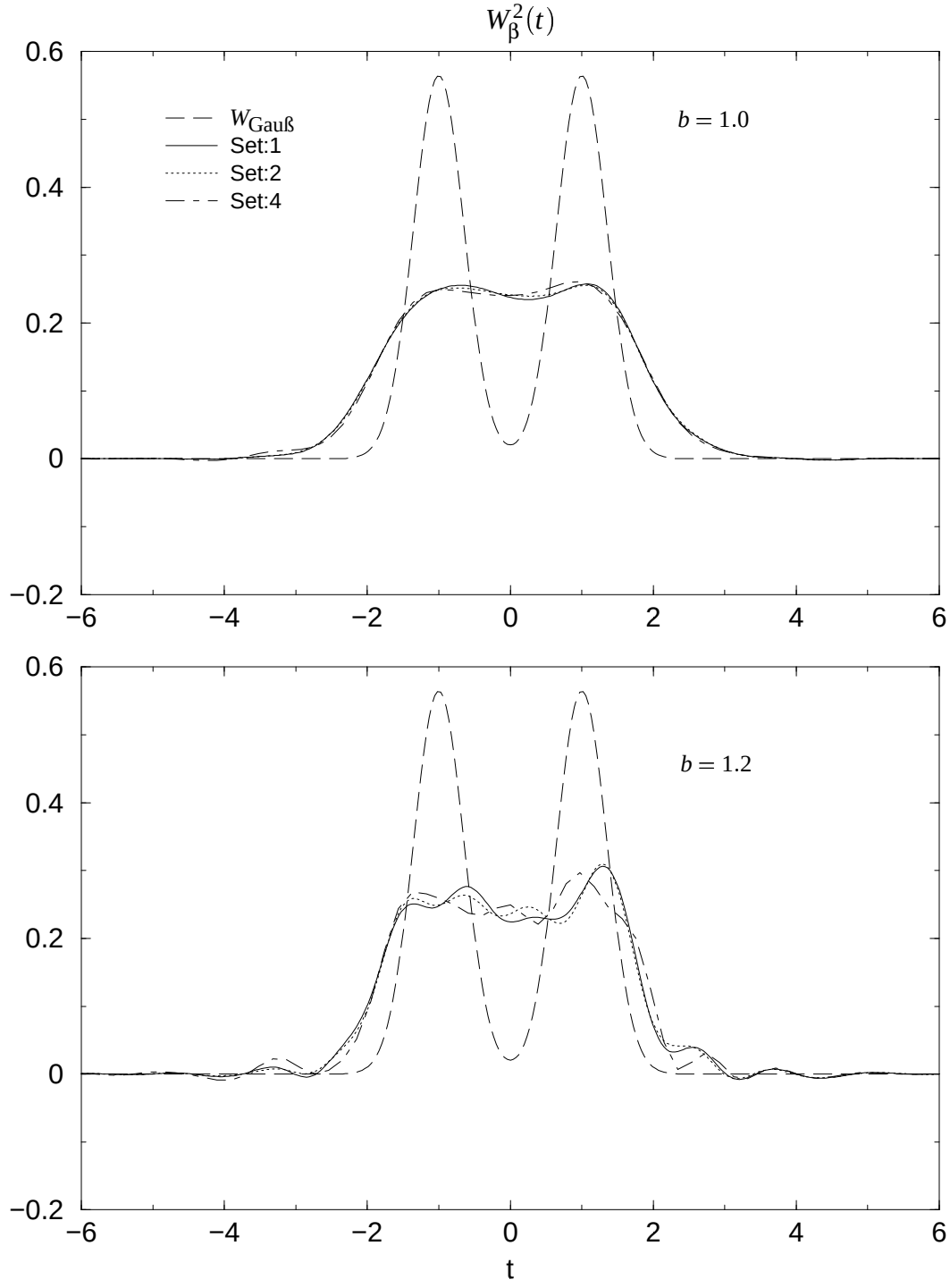

Abbildung 10.65: Doppelgaußdichte: Regularisierte W_β^2 bei verschiedenen Datensätze: $p = 1.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

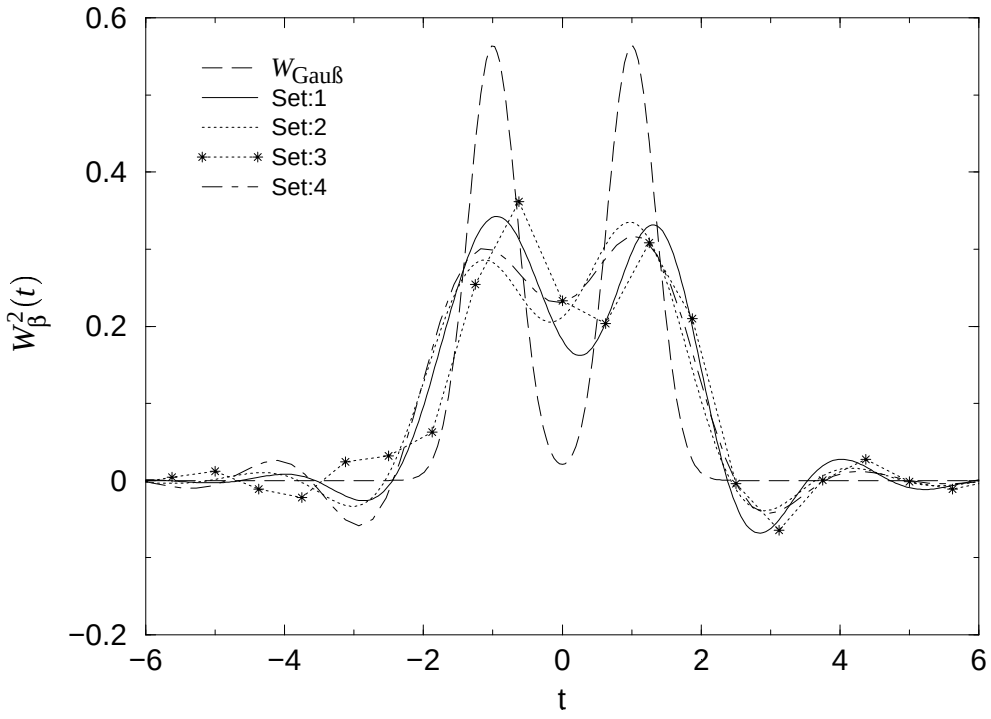

Abbildung 10.66: Doppelgaußdichte: Tikhonov-Phillips regularisierte W_β^2 bei verschiedenen Datensätze: $p = 1.0$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

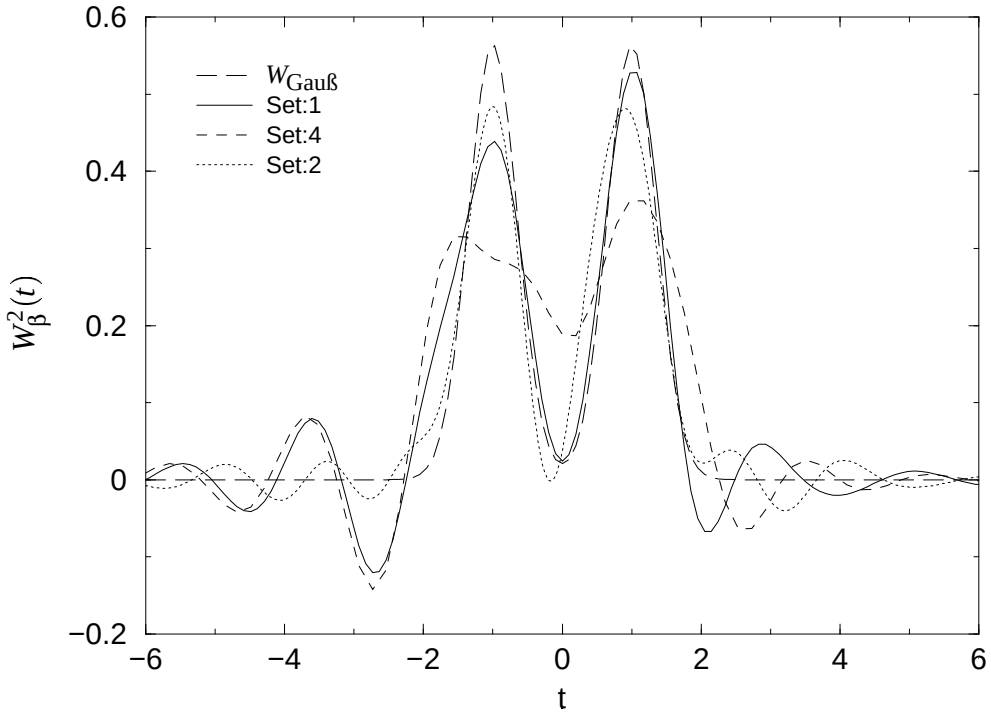

Abbildung 10.67: Doppelgaußdichte: Landweber-Regularisierte W_β^2 bei verschiedenen Datensätzen: $p = 0.8$; $MD = 1024$,$\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

Durch diese Eigenschaft dieser beiden Regularisierungsverfahren, werden die qualitativ etwas besseren Ergebnisse der Regularisierten, insbesondere die deutlichere Reproduktion der Gaußpeaks in der Landweber-Iteration, sofort wieder relativiert. Insbesondere besteht bei diesen beiden Verfahren die Problematik, wie bereits erwähnt, numerische Artefakte, in Form der den Graphen in deren Gesamtheit überlagernden Oszillationen, von nachzubildenden Maxima zu unterscheiden, denn im Gegensatz zu den Realisierungen des reinen Gaußfilters, können wir diese Oszillationenen bei Vorliegen von fehlerbehafteten Daten immer[153] beobachten.

Wir wollen die Untersuchungen der Gaußmodelle nun abschließen, in dem wir kurz auf das „Auflösevermögen“ der Regularisierungsverfahren eingehen werden. Konkret wollen wir das Doppelgaußmodell (10.20) untersuchen, bei dem wir, verglichen mit den bisher betrachteten, nur die Lage der Maxima verändert haben, und zwar indem wir jene jetzt auf $t_1 = -0.5$ und $t_2 = 0.5$ setzen wollen, also die Gaußpeaks näher zusammenbringen wollen. Desweiteren werden wir uns sofort fehlerbehafteten Daten zuwenden, wobei wir jetzt wieder einen Datensatz mit $MD = 1024$ in dem Intervall $[-20;\ 20]$ ausgewählt haben, der wieder einen mittleren relativen Fehler von $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$ aufgewiesen hat.

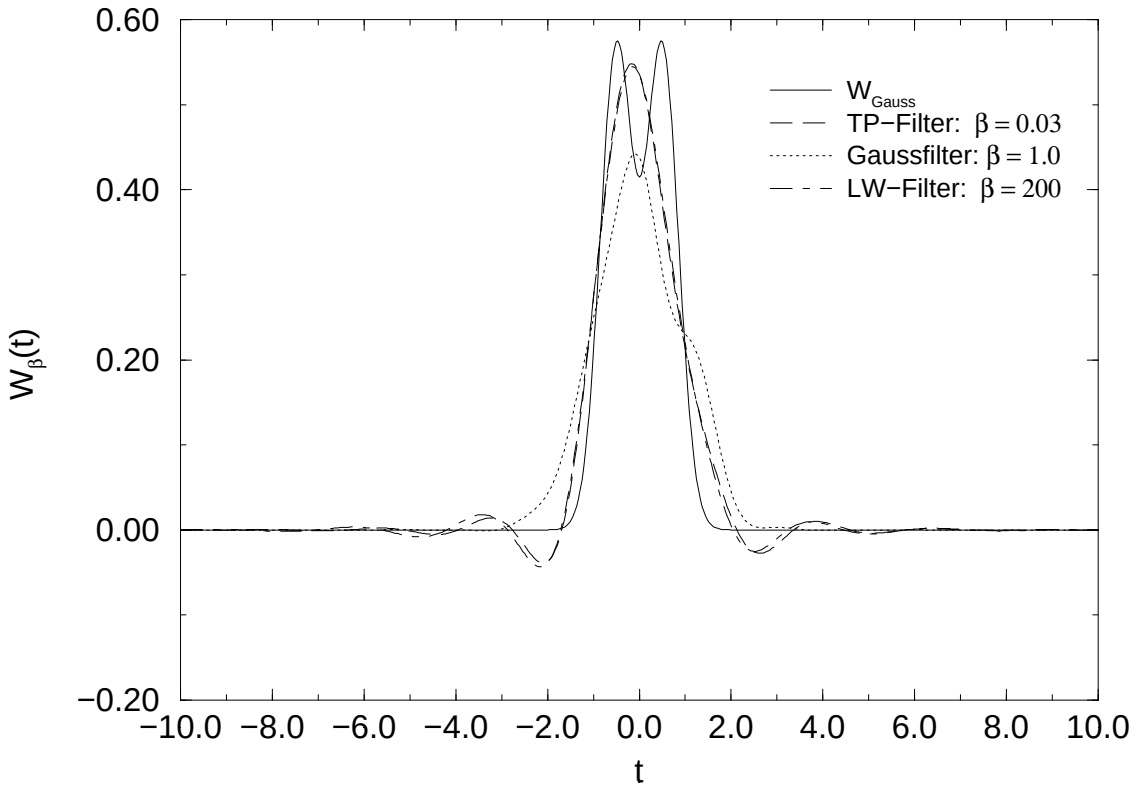

Abbildung 10.68: Doppelgaußdichte: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2: $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

In der Abbildung 10.68 auf dieser Seite haben wir die Ergebnisse der Regularisierung dieses Datensatzes mit den drei zu vergleichenden Verfahren wiedergegeben. Konkret haben wir die Regularisierten, die jeweils den minimalen Regularisierungsfehler aufweisen, in dieser Abbildung grafisch dargestellt, und die Regularisierungsfehler selbst haben wir in die zu dieser Abbildung gehörenden Tabelle 10.37 aufgelistet. Es fällt auf, daß keines der Regularisierungsverfahren auch nur andeutungsweise eine Doppelpeak-Struktur hat darstellen können, geschweige den detailierter reproduzieren konnten. Die recht vage Andeutung eines Peaks in

[153] Es sei diesbezüglich nochmals auf die Literatur hingewiesen, in der derartige oszillatorische Artefakte bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung und bei iterativen Regularisierungsverfahren beschrieben worden sind.

Verfahren	β	$\|W_{\text{Gauß}} - W_\beta^2\|_{L^2}^2$
TP-Filter	0.03	0.0296
LW-Filter	200	0.0297
Gauß-Filter	1.0	0.0701

Tabelle 10.37: Vergleich der Differenz zwischen $W_{\text{Gauß}}$ (Doppelgaußdichte) und W_β^2 bei verschiedenen Regularisierungsverfahren: $\sigma_{\text{rel}} = (1.3 \pm 0.9)\%$

der rechten Flanke der Gaußfilterregularisierten kann, bei alleiniger Kenntnis dieser Funktion, kaum mehr als ein recht schwaches Indiz für eine mögliche, zugrundeliegende feineren Struktur dienen. Weiter fällt auf, daß die Tikhonov-Phillips Regularisierte und die Landweber-Regularisierte hier sogar zusammenfallen und sich nur marginal unterscheiden. Bei beiden würde man auf einen einzelnen Gaußpeak schließen, aber kaum auf eine Doppelpeak-Struktur. Wir müssen somit feststellen, daß bei einem mittleren relativen Fehler im Prozentbereich die Regularisierungsverfahren bereits ein relativ geringes „Auflösevermögen“ aufweisen, bezogen auf dem hier betrachteten exponentiell schlecht gestelltem Problem.

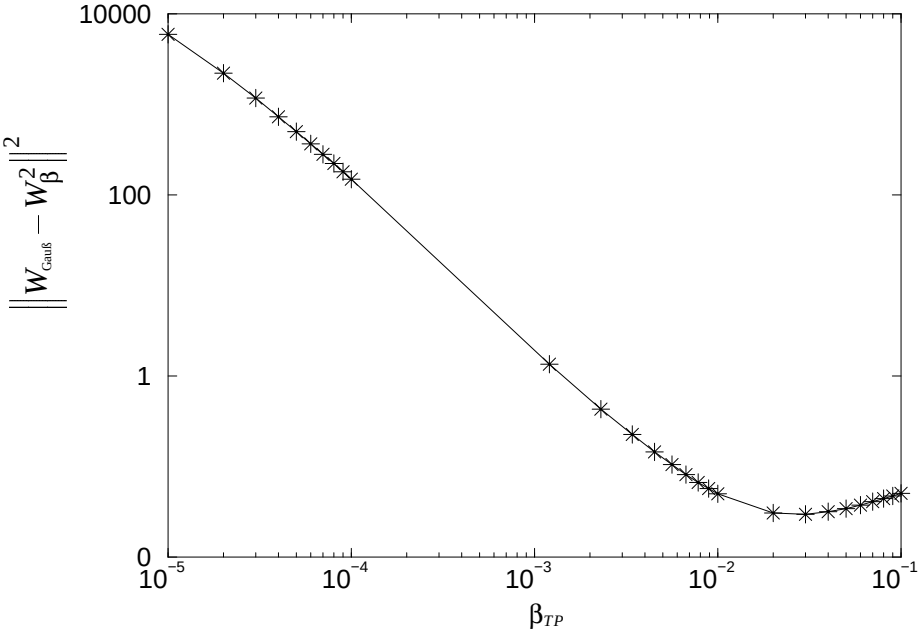

Abbildung 10.69: Tikhonov-Phillips Regularisierung: Quadratischer L^2-Regularisierungsfehler

Dieses führt uns nun dazu, doch noch kurz einen Blick auf den Datenfehlereinfluß, den hier die Tikhonov-Phillips Regularisierung und die Landweber-Iteration aufweisen, zu werfen. Die Datenfehler, die wir bei der Variation der Regularisierungsparameter in der Regularisierung des eben diskutierten Datensatzes des Doppelgauß-Modells erhalten haben, ist nun für die Tikhonov-Phillips Regularisierung in der Abbildung 10.69 auf dieser Seite und für die Landweber-Iteration in der Abbildung 10.70 auf der nächsten Seite dargestellt, wobei wir aufgrund der oben erwähnten dekadischen Variation der Parameter, um jene überhaupt sinnvoll qualitativ vergleichen zu können, die Daten doppellogarithmisch aufgetragen haben. Die Befürchtung, die uns bei der Betrachtung der Regularisierung fehlerbehafteter Daten beschleicht, bestätigt sich mit diesen beiden Abbildung: in dem genannten Sinne, weisen die Tikhonov-Phillips Regularisierung und die Landweber-Iteration ein *exponentiell divergenten Datenfehlereinfluß* auf! Die exponentielle Schlechtgestelltheit des phänomenologischen Ansatzes manifestiert sich also auch bei diesen beiden Verfahren durch

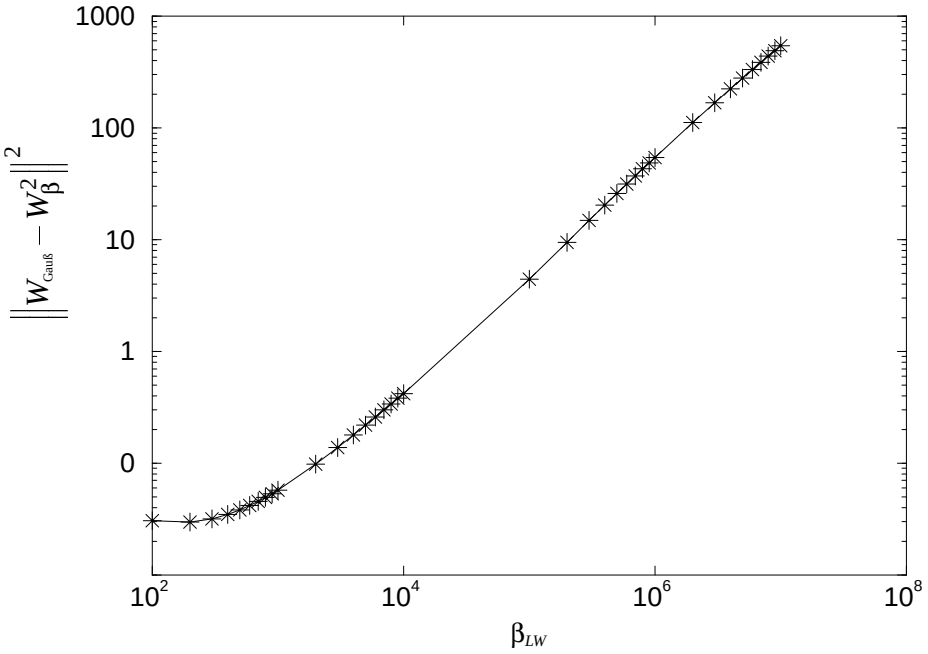

Abbildung 10.70: Landweber-Iteration: Quadratischer L^2-Regularisierungsfehler

eine exponentielle Divergenz des Datenfehlers. So verwundert es jetzt nicht mehr, daß die Regularisierten jener beider Verfahren, so wir die problematischen Eigenschaften jener Verfahren in unseren Überlegungen mit einschließen, gewissermaßen von vergleichbarer Qualität wie die Regularisierten des Gaußfilters sind , obwohl jene beiden Verfahren bei „doppelt genauen“ Daten unser hier untersuchtes Verfahren um Größenordnungen überlegen ist.

Die Vergleiche, und auch die numerischen Untersuchungen insgesamt, nun abschließend, werden wir jetzt noch kurz die, jeweils mit den unterschiedlichen Regularisierungverfahren gewonnen, regularisierten W_β^2 des Cole-Davidson Modells vergleichen.

Die Abbildung 10.71 auf der nächsten Seite zeigt das Ergebnis der Regularisierung kontinuierlicher „doppelt genauer“ Daten. Wir erkennen sofort, daß die Überlegenheit der Tikhonov-Phillips Regularisierung und der Landweber-Iteration bei dem Cole-Davidson Modell zusammenbricht, denn auch jene Verfahren können die schwache Divergenz nicht zweifelsfrei reproduzieren. Betrachten wir die Regularisierten jener beiden genauer, so können wir dasgleiche wie für den Gaußfilter feststellen: die Regularisierten könnten auch zu einer entsprechenden Dichte des Havriliak-Negami Modells gehören. Wir wollen aber der Ehrlichkeit wegen erwähnen, daß das Tikhonov-Phillips Verfahren bei kontinuierlichen[154] „doppelt genauen“ Daten eher auf die zugrundeliegende Cole-Davidson Dichte schließen[155] läßt, als es die beiden verbleibenden möglich machen.

Doch dieses wird sofort wieder zunichte, wenn wir die Abbildung 10.72 auf der nächsten Seite betrachten, in der wir die besten qualitativen Regularisierten bei Daten mit $MD = 1024$ und einem mittleren relativen Fehler von diesmal $\sigma_{\text{rel}} = (0.4 \pm 0.2)\%$, also noch unterhalb des Einprozentbereichs, wiedergegeben haben. Nach dem bisher dargelegten, ist es nun müßig, weiter über diese Abbildung zu diskutieren, so ist jene doch ein weitere Beweis für das pessimistische Urteil über die Möglichkeit der Identifizierung der Cole-Davidson Dichte, wodurch jene nun endgültig in die Havriliak-Negami Dichte aufgehoben zu denken ist.

[154] Um eine vergleichbare Reproduktion bei diskreten Daten zu erzielen, sind Datensätze mit $10^6 \leq MD$ notwendig.

[155] Nichtsdestotrotz ist aber auch dann eine zweifelsfrei Identifizierung aufgrund der überlagernden Oszillationen nur eingeschränkt möglich.

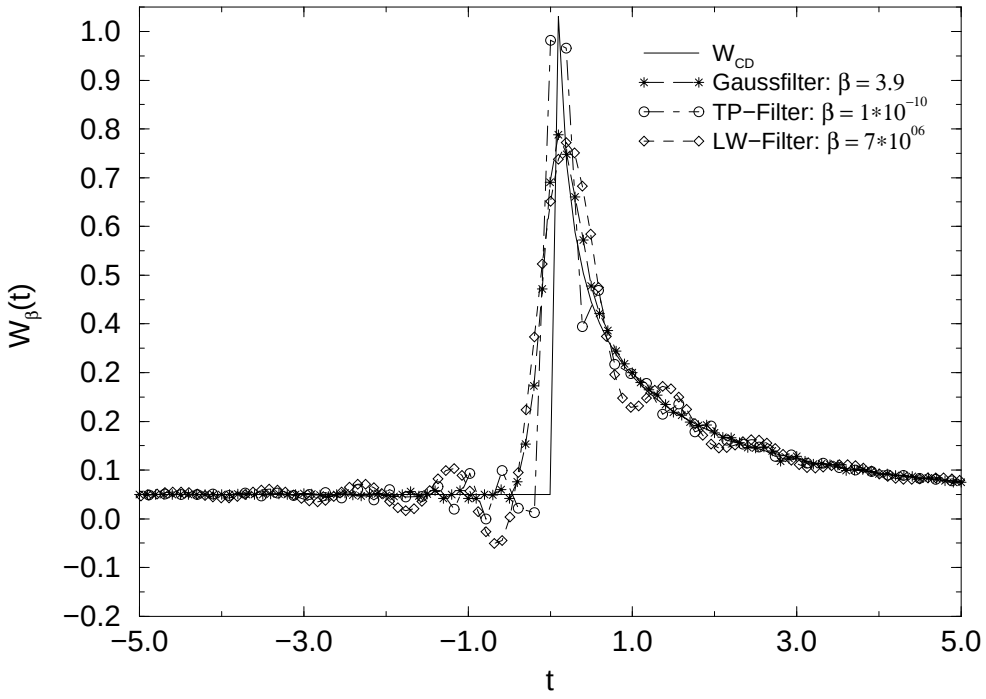

Abbildung 10.71: W_{CD}: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2; $\alpha = 0.5$

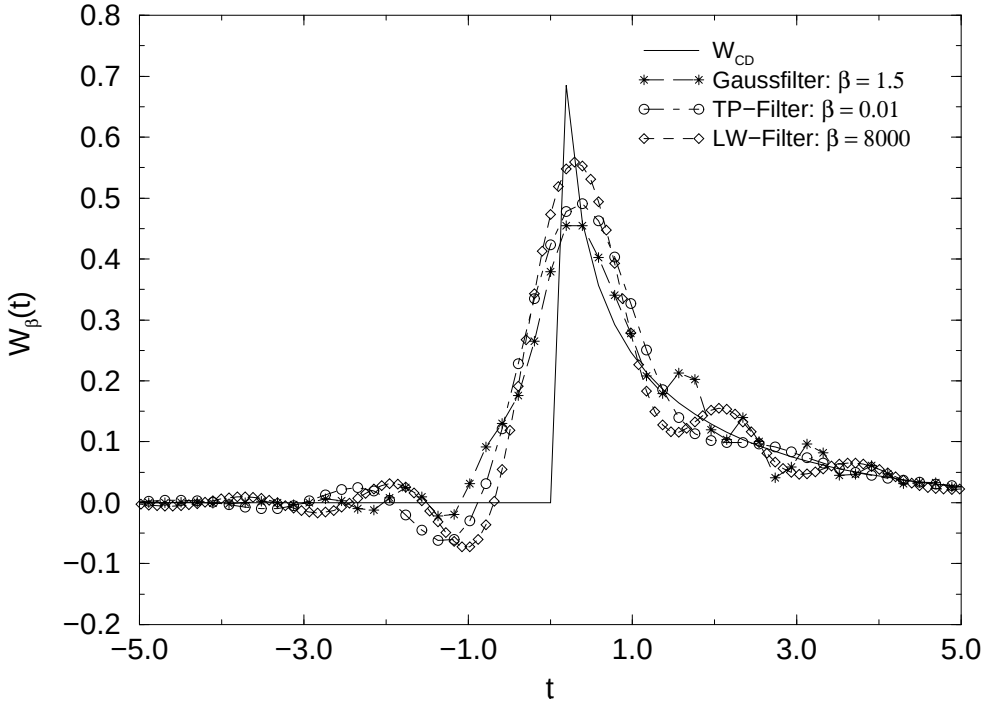

Abbildung 10.72: W_{CD}: Vergleich der mit verschiedenen Regularisierungverfahren gewonnen W_β^2; $\alpha = 0.5$; $MD = 1024$, $\sigma_{\text{rel}} = (0.4 \pm 0.2)\%$

Wir verzichten an dieser Stelle auf ein Fazit der Ergebnisse dieses Abschnitts und wollen uns lieber gleich dem abschließenden Resumee der präsentierten Untersuchungen zuwenden.

Kapitel 11

Resumee

11.1 Zusammenfassung der Ergebnisse

Wir habe in dieser Arbeit den phänomenologischen Ansatz, der mathematisch eine Fredholmsche Integralgleichung darstellt, die ihrerseits generell zu den schlecht gestellten Problemen gehören, zur Beschreibung dielektrischer Eigenschaften polarer amorpher Systeme untersucht. Dabei haben wir die analytischen Lösungen, einmal dargestellt durch die komplexe Umkehrformel der Mellin-Transformation und zum anderen dargestellt als Sprung der Dielektrizitätsfunktion längs ihres in der unteren komplexen Halbebene liegenden Verzweigungsschnitts, vorgestellt. Die Äquivalenz beider Lösungen, die eine Konsequenz der Eindeutigkeit der Lösung ist, beweist die Involvierung der analytischen Fortsetzung der vorgegebenen Dielektrizitätsfunktion bei der Lösung der Integralgleichung. Desweiteren folgt aus der Lösbarkeit der Integralgleichung durch die Mellin- respektive der Fourier-Laplace Transformation deren exponentieller Grad der Schlechtgestelltheit; die Transformierte des Integralkerns ist exponentiell abschätzbar, und da jene reziprok in die Lösung eingeht, folgt daraus unmittelbar die exponentielle Schlechtgestelltheit. Dieses hat für die hier benötigte analytische Fortsetzung zur Konsequenz, daß diese selbst wiederum exponentiell schlecht gestellt ist.

Die Lösungen haben wir nun zur Reproduktion bekannter Dichten von, selbst wiederum als phänomenologisch und heuristisch zu betrachtenden, Modellen der Dielektrizitätsfunktion, wie das Cole-Cole-, das Cole-Davidson- und die Drudeartigen Modelle, angewandt, konkret wurde die Darstellung durch die komplexe inverse Umkehrformel benutzt, und wir haben die bisher unbekannte Lösung des Havriliak-Negami Modells, das eine Verallgemeinerung des Cole-Cole- und Cole-Davidson Modells ist und jene als Spezialfälle beinhaltet, abgeleitet. Jene Lösung läßt sich durch die Foxsche H-Funktion ausdrücken, die ihrerseits durch ein Mellin-Barnes Integral definiert ist, für die wir eine Reihendarstellung haben angeben können, die nun zu einer numerischen Darstellung genutzt worden ist. Motiviert durch die Darstellung der Dichtefunktion als Foxsche H-Funktion, haben wir eine auf jene Funktion basierende „verallgemeinertes“ Modell bzw. eine „verallgemeinerte Modellösung“ formuliert. Dieses Modell kann sogar nochmals „verallgemeinert“ werden, was uns dann direkt auf ein, in der Statistik schon länger bekannt und angewandt, allgemeines (Wahrscheinlichkeits-)Modell führt. Jenes allgemeine Modell beinhaltet quasi alle verallgemeinerten Funktionen der Mathematik und mathematischen Physik und zeigt die immens breite Mannigfaltigkeit der Lösungen der phänomenologischen Gleichung auf. Dieses hat zur Konsequenz, daß die allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion keine einschränkenden Aussagen über die Dichte ergeben.

In diesen Zusammenhang haben wir noch das für verschwindende Relaxationszeiten asymptotische Verhalten der Dichten untersucht und dabei aufgezeigt, daß die eben erwähnten phänomenologischen Modelle eine schwache Divergenz aufweisen. Dieses war für das Cole-Cole- und das Cole-Davidson Modell zwar schon länger bekannt, aber für das Havriliak-Negami Modell bisher eine offene Frage. Weiter haben wir auf der Basis des allgemeinen Modells gezeigt, daß ansonsten jedes für eine Dichte mathematisch sinnvolle

Verhalten wird beobachtet werden können, also neben einer schwachen Divergenz die Konvergenz gegen einen konstanten Wert oder gegen Null, für $\tau \to 0$. Mit anderen Worten bedeutet dieses, daß die allgemeinen Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion nicht nur keine einschränkenden Aussagen über Dichten als solche machen können, sondern auch keine einschränkenden Aussagen über deren Asymptotik. Dieses gilt übrigens auch für die Asymptotik bei $\tau \to \infty$.

Nach den Untersuchungen der allgemeinen Eigenschaften der phänomenologischen Gleichung und der Lösungen der Modelldichten, haben wir uns der Regularisierung jener Gleichung zugewandt. Unser vordergründiges Ziel war es, eine regularisierte Lösung auf der Basis der Darstellung der analytischen durch die inverse Mellin-Transformation zu erhalten. Dieses ist mit der Einführung eines Filters (stabilisierenden Funktion) möglich, was zu dem genuin auf Filter basierenden Verfahren führt. Bedauerlicherweise wird sich in der mathematischen Literatur, mit Ausnahme allgemeiner Konzepte und deren mathematischen Existensaussagen, auf die Anwendung der Fourier-Transformation beschränkt, in deren Kontext Bedingungen und Eigenschaften regularisierender Filter[1] bereits abgeleitet worden sind. Nachdem wir die nur begrenzt mögliche direkte Adaptierbarkeit dieser Ergebnisse auf die Regularisierung unserer Problemstellung aufgezeigt haben, leiteten wir, basierend auf der Theorie der Distributionen und der Theorie der Mellin- respektive Fourier-Laplace Transformation, Eigenschaften für stabilisierende Funktionen bei der Anwendung jener komplexen Integraltransformationen ab. Dabei ist es wesentlich, sowohl die gesuchte Dichte als auch die Dielektrizitätsfunktion als Distributionen aufzufassen. Dieses ist übrigens keine wirkliche mathematische Erweiterung, sondern im mathematischen Sinne sogar ein notwendiger Schritt, da die Deltafunktion die Lösung der Drudeartigen Modelle ist. Es ist uns so nun gelungen, quasi ein „Rezept“ zur Konstruktion eines regularisierenden Filters angeben zu können. Weiter können wir mit einen so gefundenen regularisierenden Filter den dazu gehörenden regularisierenden Kern im Ursprungsraum bestimmen, der benötigt wird, um die ihrerseits Schlechtgestelltheit der komplexen Umkehrformeln zu umgehen. Die Darstellung der regularisierten Lösung durch einen regularisierenden Kern bietet auch den Vorteil, daß die Meßwerte direkt, d.h. ohne vorherige Integral-Transformation, in das Regularisierungsverfahren eingehen.

Der exponentielle Grad der Schlechtgestelltheit hat nun aber weitere drastische Konsequenzen, insbesondere auf die Regularisierung der phänomenologischen Gleichung. Wie wir dargelegt haben, ist der mathematisch, insbesondere bezüglich einer numerischen Realisierung, einfachste regularisierende Filter bei exponentiell schlecht gestellten Problemen, die mit den hier betrachteten komplexen Integral-Transformationen gelöst werden können, ein Gaußfilter. Diesen Gaußfilter können wir jetzt prinzipiell als Ausgangsbasis zu Konstruktion weiterer Regularisierender benutzen, wobei wir dann auf die, zumindest in diesem Kontext, von uns eingeführten „Multifilter“ oder „regularisierenden Folgen“ geführt werden. Aus der Struktur der „Multifilter“ folgt sofort, daß deren asymptotisches Verhalten für verschwindenden Regularisierungsparameter γ, von dem jegliche Regularisierungsverfahren per definitionem abhängen und für den, ebenfalls per definitionem, gilt, daß bei Konvergenz der fehlerbehafteten Vorgegebenen gegen die Theoretische, dieser gegen Null strebt, von dem Gaußterm dominiert, d.h. bestimmt wird.

Bezüglich der analytische Eigenschaften des genuin auf Filter basierenden Regularisierungsverfahrens, sind Gaußfilter, aufgrund deren analytischen Eigenschaften, eine Art „Glücksgriff“, konnten wir doch nun eine Reihe der untersuchten und interessierenden Eigenschaften tatsächlich analytisch ableiten, wobei wir hier stellenweise wieder die Distributionentheorie verwendet haben. Konkret haben wir die beiden Fehlerquellen des gesammten Regularisierungsfehlers untersucht, also zum einen den reinen Regularisierungs- oder Filterfehler, und zum anderen den Einfluß des Datenfehlers.

So zeigt es sich, daß der reine Fehler des Regularisierungsverfahrens bei Gaußartigen Filtern für $\gamma \to 0$ asymptotisch proportional zu γ^2 ist, was bezüglich der Abhängigkeit vom Regularisierungsparameter als sehr gut bezeichnet werden kann.

Desweiteren zeigt sich bei der Untersuchung des Filterfehlers, nicht ganz unerwartet, daß das genuin auf Filter basierende Verfahren effektiv und aunschaulich als eine Mittelung der gesuchten Dichte, oder, wenn wir die regularisierte Lösung wieder in das Ausgangsproblem einsetzen, um so die „regularisierten Daten“ E^+_γ zu erhalten, der vorgegebenen E^+ mit jenem Filter interpretierbar ist. Das Regularisierungsverfahren

[1] Damit bezeichnen wir, zur Erinnerung, die Filter, die einen Regularisierungsoperator erzeugen; siehe Kapitel 5

besteht somit effektiv aus einer stabilisierenden Mittelung. Diese Interpretation gilt bezüglich der „regularisierten“ Daten E_γ^+ übrigens generell - und nicht nur im Kontext des Filterfehlers.

Nach dem asymptotisch guten Verhalten des reinen Regularisierungs- bzw. Filterfehlers, haben wir den Einfluß des Fehlers der Daten E^+ untersucht, wobei wir einen exponentiell dominierten, als Funktion des Regularisierungsparameters, nachweisen konnten. Für $\gamma \to 0$ divergiert der Datenfehler also exponentiell, wodurch das ausgesprochen gute Verhalten des Filterfehlers sofort aufgehoben wird. Die Untersuchung dieses exponentiellen Einflusses hat gezeigt, daß deren Genesis wieder der exponentielle Grad der Schlechtgestelltheit der Integralgleichung ist. Wir wollen aber darauf hinweisen, daß der Einfluß des Datenfehlers bei der Regularisierung kontrollierbar ist; kontrolliert wird dieser über den Regularisierungsparameter, was als dessen vordergründigen Aufgabe interpretierbar ist.

Bevor wir die numerischen Ergebnisse rekapitulieren, wollen wir noch unsere mehr theoretischen Beiträge zur Wahl des Regularisierungsparameters erwähnen. Neben der Frage nach dem oder die geeigneten Regularisierungsverfahren, schwebt bei der Behandlung schlecht gestellter Probleme die Frage nach einer geeigneten Wahl des Regularisierungsparameters im Raum. Wie bereits mehrfach erwähnt, haben ARSENIN und TIKHONOV gezeigt, daß es prinzipiell beliebig viele Verfahren gibt, die der Definition der Regularisierung, die die Definition des Regularisierungsparameters beinhaltet, erfüllen. Konkret haben wir, neben den schon bekannten „trial and error“-Verfahren, das ausführlich untersuchte MOROZOVsche Diskrepanz-Prinzip vorgestellt um anschließend mögliche Modifikationen und Adaptionen auf einen Distributionenraum zu präsentieren. Dieses ist insofern „naheliegend“, weil wir, wie erwähnt, die Funktionen des Problems als Distributionen betrachtet haben. Der wesentliche Vorteil der Adaption bzw. Modifikation des Diskrepanz-Prinzips auf einen Distributionenraum besteht darin, daß mit der Distributionentheorie ein mächtiges Mittel zur Verfügung steht, explizite Ausdrücke und Abschätzungen zur Wahl des Parameters abzuleiten. So gelang es uns, eine Bestimmungsgleichung für die sogenannte „quasi optimale Wahl“ des Regularisierungsparameters abzuleiten, in der der Datenfehler als stochastischer respektive statistischer mittlerer relativer Fehler angegeben ist. Wir habe an dieser Stelle aber auch die explizite Abhängigkeit jenes Ausdrucks von den Grundfunktionen, genauer von einer Grundfunktion, kritisch angemerkt. Bisher ist es uns leider nicht gelungen, diese Abhängigkeit durch eine Mittelung über den Grundfunktionenraum zu eliminieren.

Neben den erwähnten Strategien, habe wir eine neue vorgeschlagen, das von uns so benannte „Konsistenzkriterium“: Basierend auf dem *Markov-Krein Theorem* aus der *Theorie der Tchebycheff-Systeme*, können auf gestörten Daten basierend rigorose obere und untere Schranken der theoretischen integrierten Dichtefunktion (numerisch) berechnet werden. Der Regularisierungsparameter sei jetzt so gewählt, daß die integrierte regularisierte Dichtefunktion konsistent mit diesen Schranken ist. Dieses führt jetzt i.d.R. nicht mehr auf eine eineindeutige Wahl des Parameters, sondern ergibt einen Bereich der im diesen Kontext erlaubten Werte des Parameters. Innerhalb dieser Arbeit haben wir am Beispiel der Delta-, der Gauß- und der Cole-Davidson Dichte die prinzipielle Anwendbarkeit des Konsistenzkriteriums, bei Vorliegen ungestörter diskreter Datensätze, gezeigt. Wie bei den betreffenden Untersuchungen erwähnt, sind aber sicherlich noch weitere Untersuchungen zum Konsistenzkriterium notwendig.

Die Gründe, die Wahl des Regularisierungsparameters schwerpunktmäßig theoretisch zu betrachten, werden zum einen durch den exponentiellen Datenfehlereinfluß und zum anderen durch die numerischen Ergebnisse deutlich, die wir zuerst rekapitulieren wollen. Die fundamentale Problematik bei der konkreten, numerischen Realisierung des phänomenologischen Ansatzes ist, daß die notwendig zu verwendenden regularisierenden Kerne, die notwendigerweise auf Gaußfiltern basieren müssen, mit kleiner werdenden Regularisierungsparameter immer stärker werdende Oszillationen aufweisen. Die Genesis dieser starken Oszillationen ist, und wir wagen es kaum zu formulieren, letztlich wieder der exponentielle Grad der Schlechtgestelltheit. Anders ausgedrückt: bei der Regularisierung der phänomenologischen Integralgleichung müssen wir numerisch über stark oszillierende Funktionen integrieren; das Problem ist aber ein fundamentales Problem der numerischen Mathematik. Glücklicherweise zeigte es sich jedoch, daß die Verwendung sogenannter Multipräzisionsalgorithmen zu einer Stabilisierung dieser numerischen Integration führt, selbst wenn die Daten selber anfangs nur als „herkömmliche“ numerische Datentypen vorliegen und im Laufe der Numerik zu „Multipräzisionszahlen“ konvertiert werden. Das allgemeine Konzept der numerischen Realisierung besteht somit darin, die regularisierenden Kerne sofort als „Multipräzisionszahlen“ vorzugeben, in dem verwendeten Algorithmus zur numerischen Integration Multipräzisionsalgorithmen anzuwen-

den und die Daten dementsprechend zu „Multipräzisionszahlen“ zu konvertieren. Dieses kann ohne einen großen programmiertechnischen Aufwand in der Programmiersprache C++ mit der Einbindung der Multipräzisionsbibliothek `mpfun++` realisiert werden. Zu erwähnen ist noch, daß wir sowohl die komplexwertige Integralgleichung, als auch deren Real- und Imaginärteil als eigenständige Integralgleichungen behandelt haben.

In der Präsentation der Ergebnisse haben wir dann zuerst gezeigt, daß wir mit den regularisierenden Kernen bei kontinuierlichen Daten die zugrundeliegenden Modelldichten reproduzieren können, so die Daten ebenso als „Multipräzisionszahlen“ vorliegen. Das hat zur Konsequenz der im diesen Kontext Synonymität von *exakten Daten* und *analytischem Ausdruck*. Letztlich können wir dieses Ergebnis wieder auf die exponentielle Schlechtgestelltheit zurückführen.

Was bereits bei der Betrachtung kontinuierlicher Daten auffiel, zeigte sich ebenso bei der Betrachtung diskreter Datensätze: die Numerik der Regularisierung der komplexwertigen Integralgleichung bricht deutlich eher, bezogen auf den Regularisierungsparameter, zusammen als die des Real- und Imaginärteils. Ein wesentliches Ergebnis ist, daß wir als Grenzen des Regularisierungsparameters $\beta = 1/2\gamma$, bis zu dem die Numerik aufgrund des Datenfehlereinflusses und des Fehlers der numerischen Integration über stark oszillierenden Funktionen noch nicht zusammengebrochen ist, bei fehlerlosen, kontinuierlichen „doppelt genauen“ Daten $\beta_{\max} = 1.3$ für die komplexwertige und $\beta_{\max} = 4.0$ für die Real- und Imaginärteilintegralgleichungen erhalten haben. Wie die Ergebnisse der Regularisierung diskreter Datensätze gezeigt haben, sind dieses tatsächlich die maximal erreichbaren Werte des Regularisierungsparameters β. Simulieren wir Meßwerte durch das Aufprägen eines stochastischen, gleichverteilten, numerischen Fehlers, so zeigt sich, daß bereits bei Fehlern im Promillebereich der maximale Wert um fast die Hälfte sinkt, was eine Bestätigung des exponentiellen Datenfehlereinflusses ist. Ebenso haben wir Argumente für einen ebenso exponentiellen Einfluß des reinen Numerikfehlers gegeben, jedoch nur in Form numerischer Untersuchungen. Wie wollen aber darauf hinweisen, daß eine solcher Numerikfehlereinflusses bei allen numerischen Untersuchungen konsistent beobachtet worden ist.

Die Regularisierung simulierter Datensätze hat letztlich die nur unzulängliche Reproduktion der zugrundeliegenden Dichte zum Ergebnis: die Regularisierung mit dem notwendigen Gaußfilter liefert bei einem realistischen Fehlerniveau ein nur „verschwommenes und unscharfes“ Bild der zugrundeliegenden Dichte. Etwaige Feinstrukturen lassen sich nicht reproduzieren.

Das Ende der numerischen Untersuchungen bildete der Vergleich der regularisierenden Kerne, der direkten Anwendung des Gaußfilters im Fourier-Raum, der Tikhonov-Phillips Regularisierung und der Landweber-Iteration[2] miteinander. Die letzten drei Verfahren wurden nur auf die Integralgleichung des Imaginärteils angewandt, da nur jener mit der Fourier-Transformation, analog zur Lösung der komplexwertigen mit der Mellin-Transformation, analytisch gelöst werden kann. Dabei hat es sich anfänglich gezeigt, daß zum einem es keinen qualitativen Unterschied gibt, ob wir einen Gaußfilter implizit als regularisierenden Kern oder explizit im Fourier-Raum realisieren, und zum anderen, daß die Tikhonov-Phillips Regularisierung und die Landweber-Iteration auf der Basis (diskreter) „doppelt genauer“ Daten die zugrundeliegende Dichte reproduzieren können - was bei dem von uns abgeleiteten und untersuchten Verfahren nicht möglich ist. Dieses Bild ändert sich bei der Anwesenheit eines stochastischen Datenfehlers aber drastisch, denn hier können die letzten beiden Verfahren womögliche Gaußartige Strukturen deutlich nachbilden, doch sind deren regularisierte Lösungen immer durch Oszillationen, deren Genesis sowohl in deren Filterfehler als auch im Datenfehlereinfluß liegt, überlagert. Die für die Praxis jedoch „zerstörenste“ Eigenschaft jener beiden Verfahren, die wir bei den auf einen Gaußfilter basierenden nicht beobachten können, ist jedoch die Instabilität einmal der Lage der reproduzierter Maxima und zum anderen der relative Höhe jener Maxima, wobei damit auch die Breite jener eingeschlossen ist. Erinnern wir uns noch daran, daß wir die Regularisierten in der Variablen t bestimmt haben, die mit den ursprünglichen (dimensionslosen) Relaxationszeiten τ durch $\tau = e^{-t}$ verknüpft ist, so können wir sofort die drastische Konsequenz der Unbestimmtheit der Lage der Maxima für die in τ ausgedrückte Dichte erkennen. Desweiteren weisen die numerischen Untersuchungen bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung und der Landweber-Iteration wiederum einen exponentiellen

[2] Wir wollen darauf hinweisen, daß die Ergebnisse der Landweber-Iteration auf alle linearen iterativen Verfahren zur Regularisierung übertragen werden können; siehe dazu auch [Lou89].

Datenfehlereinfluß auf. Das Fazit des Vergleiches dieser Verfahren bei der Anwendung auf den phänomenologischen Ansatz ist: Zwar können die Reproduktionen der Tikhonov-Phillips Regularisierung und der Landweber-Iteration stellenweise „schärfere“ Bilder der zugrundeliegenden, theoretischen Lösung liefern, doch sind die Bilder bezüglich Lage, relative Höhe und Breite der erkennbaren Strukturen unzuverlässig. Desweiteren ist eine eindeutige Unterscheidung einer Struktur von einer artefaktischen Oszillation, die die Regularisierten jener Verfahren hier immer überlagern, nicht immer möglich. Die Bilder der Gaußschen regularisierenden Kerne bzw. der direkt angewandte Gaußfilter liefern zwar diesbezüglich stabile Bilder, doch sind diese nur eine vage, „verschwommene und unscharfe“ Abbildung der Zugrundeliegenden. Da die Genesis für dieses Verhalten der Regularisierungsverfahren letztlich auf die exponentielle Schlechtgestelltheit des heuristischen Ansatzes zurückgeführt werden kann, sind bessere Ergebnisse mit anderen linearen Verfahren grundsätzlich nicht zu erwarten.

So ist nun klar, warum wir die Untersuchung zur Wahl des Regularisierungsparameters numerisch nicht weiter fortgeführt haben: Aufgrund des allgemein beobachteten exponentiellen Datenfehlereinflusses genügt das „trial and error“-Verfahren bereits vollständig, um im Rahmen der jetzt aufgezeigten sehr begrenzten Möglichkeiten der Verfahren zur approximativen Reproduktion der Zugrundeliegenden akzeptable Ergebnisse zu erzielen. Ein Anwenden des Morozovschen Diskrepanz-Prinzips würde nur einen unnötigen numerischen Aufwand bedeuten.

11.2 Kritische Schlußbemerkungen

Die relevanten Eigenschaften des phänomenologischen Ansatzes zur Beschreibung der Dielektrizitätsfunktion in polaren amorphen Systemen sind:

- In der Lösung des Ansatzes ist die analytische Fortsetzung der Dielektrizitätsfunktion in die untere komplexe Ebene involviert.
- Der phänomenologische Ansatz ist exponentiell schlechtgestellt.

Beide Eigenschaften hängen, wie die Untersuchungen in dieser Arbeit nun gezeigt haben sollten, zumindest implizit miteinander zusammen, ist doch diese analytische Fortsetzung, wie wir gezeigt haben, selber ebenso exponentiell schlecht gestellt. Und diese exponentielle Schlechtgestelltheit ist es gerade, die sich bis in fast jeder Eigenschaft des auf stabilisierenden Funktionen basierenden Regularisierungsverfahren auswirkt. Man möge jetzt nicht einwenden, daß dieses nur für genuin auf Filter basierende gilt, denn wie die Theorie der schlechtgestellten Probleme deutlich zeigt, und wir haben diese hier deswegen auch wiedergegeben, kann jedes Regularisierungsverfahren auf ein Filter abgebildet werden und dieses gilt insbesonders bei inversen Faltungproblemen. Die Konsequenz ist, daß auch bei Verfahren wie die Tikhonov-Phillips Regularisierung oder der Landweber-Iteration der exponentielle Grad einen direkten Einfluß in dessen Filter aufweist. Dieses wurde durch die numerischen Ergebnisse bestätigt, die generell einen exponentiellen Datenfehlereinfluß in dem gesammten Regularisierungsfehler aufzeigen. Jenes Verhalten konnten wir nun für den Gaußfilter sogar analytisch nachweisen.

Die allgemeinen Betrachtungen zur Asymptotik der Fehlerquellen des Gesamtregularisierungsfehlers legen die Vermutung nahe, daß wir diesen destruktiven exponentiellen Einfluß bei jedem linearen Regularisierungsverfahren werden beobachten können.

Die Konsequenz ist eine nur ungenügende Reproduktion der zugrundeliegenden Dichte, sobald wir auf fehlerbehaftete Daten angewiesen sind, und zwar unabhängig von den hier verglichenen Regularisierungsverfahren. Aus den genannten Gründen erwarten wir auch nicht, daß die Maximum Entropie-Methode wesentlich bessere Ergebnisse erzielen wird. Dieses wird auch in der Literatur[3] zur Maximum Entropie-Methode bestätigt, in der stellenweise auf die Ähnlichkeit der Qualität der Ergebnisse, verglichen mit der

[3] Wir wollen diesbezüglich auf [Gro93, Jay57, Jay68, Dav82] hinweisen.

Tikhonov-Phillips Regularisierung, hingewiesen wird. Da die Maximum Entropie-Methode ein Spezialfall des allgemeinen Tikhonov-Phillips Funktionals ist, sind qualitative Ähnlichkeiten zu erwarten bzw. zu erwarten gewesen.

Ebenso erwarten wir nicht, daß die Anwendung von *Wavelets*, deren Anwendbarkeit als stabilisierende Filter[4] bereits bekannt und untersucht worden ist, und deren Anwendung ebenso ein lineares Verfahren ist, zur Regularisierung des heuristischen Ansatzes wesentlich qualitativ bessere Ergebnisse liefern wird, da hier das Reziproke der Tranformierten des Integralkerns in einer analogen Art und Weise in die regularisierte Lösung eingeht wie im Fall „herkömmlicher“ Filter.

Eine weiteres schwerwiegendes Ergebnis dieser Arbeit haben wir im Anhang E vorgestellt: soweit es sich um physikalisch relevante Kerne handelt, dürfte jede Integralgleichung erster Art, die mit der Mellin-Transformation gelöst werden kann, exponentiell schlecht gestellt sein. Aus der Theorie der Mellin-Transformation[5] folgt, so der Integralkern längs des Integrationsgebiets eine analytische Funktion und dort polynomial abschätzbar ist, daß dessen Mellintransformierte in einem Vertikalstreifen, der das Integrationsgebiet der komplexen Umkehrformel einschließt, eine analytische Funktion ist, die dort einer Exponentialabschätzung genügt. Gemäß der Klassifizierung schlecht gestellter Probleme folgt daraus unmittelbar die exponentielle Schlechtgestelltheit.

Analoges gilt im Fall der Anwendbarkeit der Fourier-Laplace Transformation[6], wobei jetzt der Kern exponentiell abschätzbar sein möge. Bedenken wir im Kontext physikalisch relevanter Kerne, daß diese Abschätzbarkeit beinahe eine notwendige Bedingung für die mathematische Existenz der Fourier-Laplace Transformation darstellt, so gilt das entsprechende pessimistische Urteil.

Was bedeutet all dieses nun zusammengefaßt und kritisch bewertet?
Bereits in den Abschnitten 10.4.4 und 10.5.3 haben wir als Fazit gezogen, daß wir sowohl eine Deltadichte als auch die Cole-Davidson Dichte durch die regularisierten Lösungen nicht identifizieren werden können, oder anders ausgedrückt, werden jene beiden Dichten niemals eindeutig und zweifelsfrei reproduziert und identifiziert werden können. Es wird immer die Möglichkeit bestehen, im Fall der Delta- auf eine entsprechend schmale Gaußdichte und im Fall der Cole-Davidson- auf eine entsprechend parametrisierte Havriliak-Negami Dichte zu schließen. Dieses hat die vollständige Aufhebung jener beiden Modelle in das Gauß- respektive Havriliak-Negami Modell zur Konsequenz, womit die beiden ersteren letztlich ihre erkenntnistheoretische Bedeutung aufgeben.

Soweit es jetzt lineare Regularisierungsverfahren betrifft, können wir bei der Regularisierung exponentiell schlecht gestellter Probleme, und dieses werden all diejenigen physikalische Prozesse beschreibende Integralgleichungen erster Art sein, die vermöge der Mellin- respektive Fourier-Laplace Transformation gelöst werden können, einen generell exponentiell destruktiven Einfluß des Datenfehlers erwarten, so daß selbst bei Daten im Promillebereich die gewonnene Regularisierte bestenfalls ein unscharfes, vages, verwaschenes Bild sein dürfte, so im Fall der Gaußfilter, oder ein mitunter schärfere Strukturen aufweisendes Bild, wobei die Lage, relative Höhe und Breite jener Strukturen als zweifelhaft und nicht bestimmbar anzusehen sind, so bei der Tikhonov-Phillips Regularisierung und der Landweber-Iteration. Da die erhaltenen Regularisierten also nur eine vages Bild der zugrundeliegenden sind, sind diese für eine Interpretation der physikalischen Prozesse nicht geeignet. Mit anderen Worten, wir können auf der Basis der regularisierten Lösungen keine Erkenntnisse über die physikalischen Prozesse im System erhalten, womit jene, in den bisherigen Kontext, ihre phänomenologische und heuristische Bedeutung aufgibt.

Wir wollen aber noch darauf hinweisen, daß wir aufgrund der Natur[7] der schlechtgestellten Probleme die regularisierten Dichten benutzen könnten, um auf deren Basis beobachtbare Größen zu berechnen, in den

[4] Eine Einführung in die Wavelet-Transformationen und deren Anwendungen, insbesondere bei schlecht gestellten Problemen, gibt [LMR98].

[5] siehe [Doe71, Tit67]

[6] Beispiele für Integralgleichungen, die mit der Fourier-Laplace Transformation gelöst werden können, können wir in der Vielteilchentheorie finden, wie beispielsweise die Verknüpfung einer Greensfunktion mit der Spektraldichte, wobei letztere als Wahrscheinlichkeitsdichte, ein System bei einer bestimmten Frequenz anzuregen, interpretierbar ist.

[7] siehe [Lou89]

die Dichte wieder in Form einer schlechtgestellten Integralrelation eingeht, wie hier beispielsweise bei der Berechnung der Leitfähigkeit eines amorphen Systems[8]. Nur dürfen wir dann der Dichte selber keine physikalische Relevanz beimessen.

Das **Fazit dieser Untersuchungen** ist somit:

> Der phänomenologische Ansatz der Beschreibung physikalischer Größen durch eine Mittelung über exponentielle Zerfälle ist, bei der Anwendung linearer Regularisierungsverfahren, für einen Erkenntnisgewinn der physikalischen Prozesse des betrachteten Systems ungeeignet.

Wir wollen diese Arbeit nicht mit diesem pessimistischen Urteil beenden, sondern ebenso kritisch auf die Begrenztheit der Gültigkeit der insgesamt hier vorgestellten Ergebnisse im Kontext *linearer Regularisierungsverfahren* verweisen. Über das Verhalten *nicht linearer Regularisierungsverfahren* ist hier nichts ausgesagt worden. Wir bezweifeln nur, daß ein nicht lineares Verfahren ein um Größenordnungen besseres Fehlerverhalten bezüglich des Datenfehlereinflusses aufweisen wird. Doch sollten trotzdem die Anwendung solcher Regularisierungsverfahren, wobei wir beispielsweise das Verfahren der konjugierten Gradienten[9] vorschlagen wollen, auf den phänomenologischen Ansatz hin untersucht werden - wir wären die letzten, die positive Ergebnisse diesbezüglich nicht begrüßen würden.

Desweiteren wollen wir noch darauf hinweisen, daß die von uns benutzten oder abgeleiteten „Konzepte“ wie die Anwendung regularisierenden Kerne oder die „Multifilter“ auf ihre Anwendbarkeit bei nicht exponentiell schlechtgestellten Problemen untersucht werden sollten. Ebenso sollten die von uns abgeleiteten Eigenschaften stabilisierender Funktionen genutzt werden, um Filter für schlecht gestellte Probleme jenseits des Gaußfilters oder des idealen Tiefpasses zu konstruieren. Und letztlicht sollten unsere bescheidenen Beiträger zur Wahl des Regularisierungsparameters weiter verfolgt und untersucht werden, besonders das Konsistenzkriterium, welches möglicherweise eine wirkliche „konsistente“ Alternative zu den Diskrepanz-Prinzipien sein könnte.

[8] siehe [Zal83]

[9] siehe [Lou89]

Anhang A

Mellin-Barnes Integrale und die Fox'sche H-Funktion

Für weitere Details des nun folgenden, sei vorab schon einmal auf die Bücher von WHITTAKER und WATSON [WW69] und MATHAI und SAXENA [MS78], sowie auf [EMOT53] verwiesen.

Die *Fox'sche H-Funktion* ist bei einer Vielzahl von Problemen der Mathematik, der Statistik und der (mathematischen) Physik anwendbar. Die Bedeutung der H-Funktion liegt in der Tatsache, daß diese fast alle speziellen Funktionen, die in der Mathematik und Statistik, und somit auch in der Physik, vorkommen, als Spezialfälle beinhaltet. Zu diesen gehören beispielsweise die (verallgemeinerte) Besselfunktion und die hypergeometrischen Funktionen und deren Verallgemeinerungen, sowie die Meijer'sche G-Funktion.

A.1 Definition

Kommen wir nun zur Definition der *Mellin-Barnes Integrale* und der H-Funktion.

Definition A.1
Integrale der allgemeinen Form

$$H(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L h(s)\, z^{-s}\, ds \tag{A.1}$$

mit

$$h(s) = \frac{\prod_{i=1}^{m} \Gamma(b_i + \beta_i s) \prod_{j=1}^{n} \Gamma(1 - a_j - \alpha_j s)}{\prod_{i=m+1}^{q} \Gamma(1 - b_i - \beta_i s) \prod_{j=n+1}^{p} \Gamma(a_j + \alpha_j s)} \quad , \tag{A.2}$$

längs eines Integrationswegs L in der komplexen s-Ebene, wobei $a_j, b_j \in \mathbb{C}$ und α_j, β_j positive relle Zahlen sind und

$$z^s = \exp(s \ln|z| + i \arg z) \quad , \tag{A.3}$$

wobei sich hier nicht unbedingt auf den Hauptzweig des Logarithmus' beschränkt werden muß, werden als Mellin-Barnes Integrale *bezeichnet [EMOT53, Tit86, MS78, WW69], und die durch diese definierte Funktion*

$$H(z) = H_{p,q}^{m,n}(z) = H_{p,q}^{m,n}\left(z \,\middle|\, \begin{matrix} (a_1, \alpha_1), \ldots, (a_p, \alpha_p) \\ (b_1, \beta_1), \ldots, (b_q, \beta_q) \end{matrix} \right) \tag{A.4}$$

wird Fox'sche H-Funktion *genannt*[1] *[MS78].*

[1] Definition und Notation der Fox'schen H-Funktion sind nicht einheitlich. Eine zu (A.1) äquivalente und ebenso häufig verwendete

Leere Produkte werden hier als Eins interpretiert. Der Integrationsweg L sei für das weitere dahingehend spezifiziert, daß dieser die Pole von $\Gamma(b_j+\beta_j s)$ an den Punkten

$$s=-\frac{(b_j+\nu)}{\beta_j} \quad j=1,\ldots,m;\ \nu=0,1,\ldots \tag{A.5}$$

von den Polen von $\Gamma(1-a_j-\alpha_j)$ an den Punkten

$$s=\frac{(1-a_j+\lambda)}{\alpha_j} \quad j=1,\ldots,n;\ \lambda=0,1,\ldots \quad , \tag{A.6}$$

separiert, wobei ein derartiges L immer dann existiert, wenn

$$\alpha_j(b_k+\nu)\neq\beta_k(a_j-1-\lambda) \quad \forall\nu,\lambda=0,1,2,\ldots; \quad k=1,\ldots,m;\ j=1,\ldots n \tag{A.7}$$

gilt.

A.2 Existenz, Eigenschaften und Darstellung der H-Funktion

Führen wir nun die folgenden Größen,

$$\mu=\sum_{j=1}^{q}\beta_j-\sum_{j=1}^{p}\alpha_j \tag{A.8}$$

und

$$\beta=\prod_{j=1}^{p}\alpha_j^{\alpha_j}\prod_{j=1}^{q}\beta_j^{-\beta_j} \quad . \tag{A.9}$$

ein. Unter Zuhilfenahme dieser beiden Größen, kann bezüglich der *Existenz der H-Funktion* nun folgendes gezeigt werden:

Die Fox'sche H-Funktion, definert nach den Gleichungen (A.1) bis (A.4), existiert in den folgenden Fällen:

1. $q\geq 1$, $\mu>0$:
   $H(z)$ existiert für alle z, $z\neq 0$.
2. $q\geq 1$, $\mu=0$:
   $H(z)$ existiert für alle $|z|<\beta^{-1}$.
3. $p\geq 1$, $\mu<0$:
   $H(z)$ existiert für alle z, $z\neq 0$.
4. $p\geq 1$, $\mu=0$:
   $H(z)$ existiert für alle $|z|>\beta^{-1}$.

H ist dann eine analytische Funktion[2] in z und der Integrationsweg L kann dann auf $L_{(c-i\infty,c+i\infty)}$, also

$$\int_L ds\to\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \quad ,$$

ausgedehnt (deformiert) werden[3].

Definition ist [WW69]:

$$H_{p,q}^{m,n}(z)=\frac{1}{2\pi i}\int_L \frac{\prod_{i=1}^{m}\Gamma(b_i-\beta_i s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j+\alpha_j s)}{\prod_{i=m+1}^{q}\Gamma(1-b_i+\beta_i s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j-\alpha_j s)}\,z^s\,ds \quad .$$

Beide Definitionen gehen hier durch $s\to -s$ ineinander über.

[2] Das beinhaltet auch, so die Integraldarstellung (A.1) nur für $z\in\mathbb{R}$ konvergiert, daß dann H eine analytische Funktion für reelle z ist, die (in einem Winkelraum) analytisch fortgesetzt werden kann; siehe dazu [EMOT53] und hier das nachfolgende Kapitel A.3.

[3] Allgemeiner gilt, daß dann H von der konkreten Form des Integrationswegs L unabhängig ist.

Bevor wir uns der Darstellung der H-Funktion, neben der als Mellin-Barnes Integral, widmen, sollen noch einige ihrer *grundsätzlichen Eigenschaften* angegeben werden, die gerade auch von praktischer Interesse und Bedeutung sind:

1. Ist $\alpha_1 = \ldots = \alpha_p = \beta_1 = \ldots = \beta_q = 1$, so reduziert sich die H- auf die Meijer'sche G-Funktion
$$H_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}(a_1,1),\ldots,(a_p,1)\\(b_1,1),\ldots,(b_q,1)\end{matrix}\right.\right) = G_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}a_1,\ldots,a_p\\b_1,\ldots,b_q\end{matrix}\right.\right) \tag{A.10}$$
2.
$$H_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right.\right) = H_{q,p}^{n,m}\left(\frac{1}{z} \left| \begin{matrix}(1-b_1,\beta_1),\ldots,(1-b_q,\beta_q)\\(1-a_1,\alpha_1),\ldots,(1-a_p,\alpha_p)\end{matrix}\right.\right) \tag{A.11}$$
Diese Eigenschaft erlaubt es, die H-Funktion mit dem Argument z in die mit dem Argument $\frac{1}{z}$ zu transformieren, respektive den Fall $\mu > 0$ in den Fall $\mu < 0$ und vice versa.
3.
$$z^{\sigma} H_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right.\right) = H_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}(a_1+\sigma\alpha_1,\alpha_1),\ldots,(a_p+\sigma\alpha_p,\alpha_p)\\(b_1+\sigma\beta_1,\beta_1),\ldots,(b_q+\sigma\beta_q,\beta_q)\end{matrix}\right.\right) \tag{A.12}$$
4.
$$\frac{1}{k} H_{p,q}^{m,n}\left(z \left| \begin{matrix}(a_1,\alpha_1),\ldots,(a_p,\alpha_p)\\(b_1,\beta_1),\ldots,(b_q,\beta_q)\end{matrix}\right.\right) = H_{p,q}^{m,n}\left(z^k \left| \begin{matrix}(a_1,k\alpha_1),\ldots,(a_p,k\alpha_p)\\(b_1,k\beta_1),\ldots,(b_q,k\beta_q)\end{matrix}\right.\right) \quad k > 0 \tag{A.13}$$

Für weitere Eigenschaften sei besonders auf [MS78] verwiesen.

Kommen wir nun zu einer (eventuell numerisch) berechenbaren *Darstellung* der H-Funktion, die auf den *Residuensatz* [BS76, Tit86] basiert. Nehmen wir im folgenden noch zusätzlich an, daß der Integrand (A.2) nur Pole erster Ordnung besitzen möge. Basierend auf die Existenzaussagen 1. bis 4., können dann die folgende Fälle unterschieden und die H-Funktion dann folgendermaßen dargestellt werden:

I Für die Fälle 1. und 2. kann die H-Funktion durch die Summe der Residuen der Pole (erster Ordnung) von $\Gamma(b_j+\beta_j a)$, $j = 1,\ldots,m$ bei $s = -\frac{(b_j+\nu)}{\beta_j}$ dargestellt werden:
$$\begin{aligned} H_{p,q}^{m,n}(z) &= \sum_{h=1}^{m}\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\prod_{j=1,j\neq h}^{m}\Gamma\left(b_j-\beta_j\frac{(b_h+\nu)}{\beta_h}\right)\prod_{j=1}^{n}\Gamma\left(1-a_j+\alpha_j\frac{(b_h+\nu)}{\beta_h}\right)}{\prod_{j=m+1}^{q}\Gamma\left(1-b_j+\beta_j\frac{(b_h+\nu)}{\beta_h}\right)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma\left(a_j-\alpha_j\frac{(b_h+\nu)}{\beta_h}\right)} \\ &\times \frac{(-1)^{\nu} z^{\frac{(b_h+\nu)}{\beta_h}}}{\beta_h \nu!} \quad . \end{aligned} \tag{A.14}$$

II Für die Fälle 3. und 4. kann die H-Funktion durch die Summe der Residuen der Pole (erster Ordnung) von $\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)$, $j = 1,\ldots,n$ bei $s = \frac{(1-a_j+\lambda)}{\alpha_j}$ dargestellt werden:
$$\begin{aligned} H_{p,q}^{m,n}(z) &= \sum_{h=1}^{n}\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\prod_{j=1,j\neq h}^{n}\Gamma\left(1-a_j-\alpha_j\frac{(1-a_h+\nu)}{\alpha_h}\right)\prod_{j=1}^{m}\Gamma\left(b_j+\beta_j\frac{(1-a_h+\nu)}{\alpha_h}\right)}{\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma\left(a_j+\alpha_j\frac{(1-a_h+\nu)}{\alpha_h}\right)\prod_{j=m+1}^{q}\Gamma\left(1-b_j-\beta_j\frac{(1-a_h+\nu)}{\alpha_h}\right)} \\ &\times \frac{(-1)^{\nu} z^{-\frac{(1-a_h+\nu)}{\alpha_h}}}{\alpha_h \nu!} \quad . \end{aligned} \tag{A.15}$$

Für den *allgemeineren Fall*, bei dem die Pole von $\Gamma(b_j+\beta_j s)$ respektive $\Gamma(1-a_j-\alpha_j s)$ auch von höhrer Ordnung sein dürfen, läßt sich ebenso eine Reihendarstellung angeben, die jedoch um einiges komplexer ist; für weitere Details sei wiederum auf [MS78] verwiesen.

A.3 Zum Konvergenzverhalten und zur Asymptotik der H-Funktion

Es sollen nun kurz die, gerade auch für die Praxis relevanten, Ergebnisse zur Konvergenz der Mellin-Barnes Integrale (Gleichung (A.1) und (A.2)) und zum asymptotischen Verhalten für kleine und große Argumente der H-Funktion

wiedergegeben werden. Bevor wir die Ergebnisse präsentieren, führen wir die folgenden Größen ein:

$$a = \sum_{j=1}^{n}\alpha_j - \sum_{j=n+1}^{p}\alpha_j + \sum_{j=1}^{m}\beta_j - \sum_{j=m+1}^{q}\beta_j \tag{A.16}$$

$$\beta = \prod_{j=1}^{p}\alpha_j^{\alpha_j}\prod_{j=1}^{q}\beta_j^{-\beta_j} \tag{A.17}$$

$$\mu = \sum_{j=1}^{q}\beta_j - \sum_{j=1}^{p}\alpha_j \tag{A.18}$$

$$\gamma = \sum_{j=1}^{q}b_j - \sum_{j=1}^{p}a_j + \frac{p}{2} - \frac{q}{2} \tag{A.19}$$

$$\lambda = \sum_{j=1}^{m}\beta_j - \sum_{j=m+1}^{q}\beta_j - \sum_{j=1}^{p}\alpha_j \tag{A.20}$$

Mit Hilfe des asymptotischen Ausdrucks der Γ-Funktion für große Argumente [WW69, EMOT53] kann das Konvergenzverhalten des Mellin-Barnes Integrals untersucht werden.[4] Der Absolutwert des Integranden (A.2) für $|t| \to \infty$ ist dann mit

$$e^{-\frac{1}{2}a\pi|t|}\,|t|^{-\mu c+\gamma}\,R^{-c}e^{\Phi t}\beta^{c} \tag{A.21}$$

abschätzbar, wobei wir von einen Integrationsweg $L_{c-i\infty,c+i\infty}$ parallel zur imaginären Achse ausgegangen sind, und wobei $s=\sigma+it$ und $z=Re^{i\Phi}$ sei. Es können nun vier verschiedene Fälle unterschieden werden:

1. $a>0$: Das Integral (A.1) konvergiert absolut für $|\Phi|<a\frac{\pi}{2}$ und definiert eine im Winkelraum $|\arg z|<\min(\pi,a\frac{\pi}{2})$, unter Ausschluß des Nullpunktes, analytische Funktion.
2. $a=0$, $\mu\neq 0$: Das Integral (A.1) konvergiert zwar nicht für komplexe z, jedoch für $z>0, z\in\mathbb{R}$ absolut, wenn c derart gewählt wird, daß $\mu c>1+\gamma$ gilt und es exisitiert dann eine analytische Funktion in z, definiert im Winkelraum $|\arg z|<\pi$, deren Wert für positive z durch (A.1) gegeben ist.
3. $a=\mu=0$, $\gamma<-1$: Das Integral (A.1) konvergiert für alle $z\in\mathbb{R}^+$ absolut und repräsentiert eine stetige Funktion von z in $0<z<\infty$. Es existiere nun, jeweils für $0<|z|<\beta^{-1}$ und $|z|>\beta^{-1}$, im Winkelraum $|\arg z|<\pi$ zwei analytische Funktionen, deren Wert für $0<z<\beta^{-1}$ und $z>\beta^{-1}$ (z sei jetzt reell) durch (A.1) gegeben sind.
4. $a=\mu=0$, $-1\leq\gamma<0$: Das Intergral (A.1) konvergiert, zwar nicht absolut, für $z<\beta^{-1}$ und für $z>\beta^{-1}$, $z\in\mathbb{R}^+$. Wie im Fall 3., exisitieren zwei analytische Funktionen, jeweils für $0<|z|<\beta^{-1}$ und $|z|>\beta^{-1}$, im Winkelraum $|\arg z|<\pi$, deren Wert für $0<z<\beta^{-1}$ und $z>\beta^{-1}$ (z sei jetzt reell) durch (A.1) gegeben sind. An dem Punkt $z=\beta$ besitzt das Integral eine Unstetigkeit, an der es höchstens im Sinne eines Hauptwertintegrals existieren könnte.

Kommen wir nun zur *Asymptotik* der H-Funktion. Gemäß den Ausführungen in [EMOT53, MS78], lassen sich folgende Aussagen, basierend auf der Asymptotik der Γ-Funktion oder auf den Reihendarstellungen, wie beispielsweise (A.14) und (A.14), herleiten:

1. Es sei
$$\mu\geq 0 \quad\text{und}\quad c=\min\mathfrak{Re}\left(\frac{b_j}{\beta_j}\right) \quad .$$
Für $z\to 0$ gilt dann (asymptotisch):
$$H_{p,q}^{m,n}(z)=O\left(|z|^c\right) \quad . \tag{A.22}$$
2. Es sei
$$\mu\geq 0,\ a>0,\ |\arg z|<a\frac{\pi}{2} \quad\text{und}\quad d=\max\mathfrak{Re}\left(\frac{a_j-1}{\alpha_j}\right) \quad .$$
Für $x\to\infty$ gilt dann (asymptotisch):
$$H_{p,q}^{m,n}(x)=O\left(|x|^d\right) \quad . \tag{A.23}$$

[4] Wir folgen hier den Ausführungen in [EMOT53], die bezüglich des Konvergenzverhaltens etwas detalierter sind als [MS78].

A.4 Einige Spezialfälle der H-Funktion

Wie bereits erwähnt, beinhaltet die H-Funktion fast alle speziellen Funktionen der Mathematik, und somit auch der mathematischen Physik, als Spezialfälle. Um diese „Universalität“ der H-Funktion zu illustrieren, wollen wir kurz einige derer Spezialfälle angeben:

1.
$$H_{0,1}^{1,0}\left(z\left|\begin{matrix}-\\(b,B)\end{matrix}\right.\right)=B^{-1}z^{\frac{b}{B}}\exp\left(-z^{1/B}\right) \tag{A.24}$$

2.
$$H_{p,q}^{m,n}\left(z\left|\begin{matrix}(a_1,1),\ldots,(a_p,1)\\(b_1,1),\ldots,(b_q,1)\end{matrix}\right.\right)=G_{p,q}^{m,n}\left(z\left|\begin{matrix}a_1,\ldots,a_p\\b_1,\ldots,b_q\end{matrix}\right.\right) \tag{A.25}$$

3.
$$H_{1,1}^{1,1}\left(z\left|\begin{matrix}(1-\nu,1)\\(0,1)\end{matrix}\right.\right)=\Gamma(\nu)\,(1+z)^{-\nu}=\Gamma(\nu)\;{}_1F_0(\nu;-z) \tag{A.26}$$

4.
$$H_{0,2}^{1,0}\left[\frac{z^2}{4}\left|\begin{matrix}\left(\frac{a+\nu}{2},1\right),\left(\frac{a-\nu}{2},1\right)\end{matrix}\right.\right]=\left(\frac{z}{2}\right)^a J_\nu(z)\quad, \tag{A.27}$$

   wobei $J_\nu(z)$ die *Besselfunktion erster Art* ist.

5. Die nächsten beiden Beispiele lassen sich nicht als Spezialfälle der G-Funktion ableiten:
$$H_{0.2}^{1,0}\left(z\left|(0,1),(-\nu,\mu)\right.\right)=J_\nu^\mu(z)\quad, \tag{A.28}$$

   wobei $J_\nu^\mu(z)$ die *verallgemeinerte Besselfunktion* ist.

6.
$$\begin{aligned}H_{p,q+1}^{1,p}\left(z\left|\begin{matrix}(1-a_p,\alpha_p)\\(0,1),(1-b_q,\beta_q)\end{matrix}\right.\right) &= \sum_{r=0}^{\infty}\frac{\prod_{j=1}^{p}\Gamma(a_j+\alpha_j r)}{\prod_{j=1}^{p}\Gamma(b_j+\beta_j r)}\frac{(-z)^r}{r!}\\ &= {}_p\psi_q\left(\begin{matrix}(a_p,\alpha_p)\\(b_q;\beta_q)\end{matrix};-z\right)\quad,\end{aligned} \tag{A.29}$$

   wobei ${}_p\psi_q$ *Maitland's verallgemeinerte hypergeometrische Funktion* genannt wird.

Anhang B

Funktionalanalysis und Distributionen

In diesem Anhang wollen wir einen kurzen Überblick über die Grundbegriffe, Konzepte und Ergebnisse aus der *Funktionalanalysis* und eine sehr kurze Einführung, eher mehr einen Überblick, über die *Theorie der Distributionen*, die auch *Theorie der verallgemeinerten Funktionen* genannt wird, geben, wobei wir allgemein das Hauptaugenmerk auf die für diese Arbeit wichtigen Konzepte und Ergebnisse richten wollen. Eine ausführliche Einführung in die Funktionalanalysis gibt beispielsweise[1] WERNERs Buch [Wer95], der in seinem Buch auch kurz auf Distributionen zu sprechen kommt. Ausführliche Einführungen in die Distributionentheorie und deren Anwendung geben beispielsweise die Bücher von BLANCHARD und BRÜNING [BB93][2] und WALTER [Wal94], und desweiteren wollen wir noch auf [Bre65, Lig66, Roo69] verweisen.

B.1 Grundbegriffe

Im weiterem bezeichnen wir kurz mit $\mathbb{K}$ den Körper $\mathbb{R}$ der reellen oder den Körper $\mathbb{C}$ der komplexen Zahlen, also $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$.

B.1.1 Integrale

Der verwendete Integralbegriff ist im allgemeinen der des *Lebesgue-Integrals*, wobei die zentralen Sätze auch für das *Riemann-Integral* sinnvoll sind, nur dann weniger allgemein [Wal94, Wer95].

Integrale ohne Angaben des Integrationsgebietes sind über den ganzen $\mathbb{R}^N$ zu erstrecken[3]:

$$\int f(x)\, dx = \int\limits_{\mathbb{R}^N} f(x)\, dx \quad . \tag{B.1}$$

Wir schreiben also bei N-dimensionalem Raumintegralen dx für $dx_1 \ldots dx_N$.

B.1.2 Funktionenklassen

$\mathcal{C}^k(G)$ ist die Menge der in der offenen Menge $G \subset \mathbb{R}^N$ stetigen und mit stetigen partiellen Ableitung bis zur Ordnung k versehenen Funktionen $\varphi(x) = \varphi(x_1, \ldots, x_N)$ $(0 \leq k \leq \infty)$. Insbesondere ist $\mathcal{C}^0(G)$ die Klasse der stetigen, $\mathcal{C}^\infty(G)$

[1] Es existiert eine Vielzahl von sehr guten Einführungen in die Funktionalanalysis. WERNERs Buch sei hier nur als ein Beispiel genannt.

[2] Das Buch von BLANCHARD und BRÜNING wendet sich gerade auch an den (theoretischen) Physiker und enthält Beispiele für die Anwendung der Theorie der Distributionen in der Physik.

[3] Zwar gilt für das von uns behandelte Problem $N = 1$, nichtsdestotrotz wollen wir die allgemeinen Darstellungen und Ergebnisse für beliebige N wiedergeben.

die Klasse der beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen. Die Klasse $\mathcal{C}_0^k(G)$ enthält alle Funktionen aus $\mathcal{C}^k(G)$, welche außerhalb einer kompakten[4] Teilmenge von G identisch verschwindet. Im Fall $G = \mathbb{R}^N$ schreiben wir einfach $\mathcal{C}^k$ bzw. $\mathcal{C}_0^k$ statt $\mathcal{C}^k\left(\mathbb{R}^N\right)$ respektive $\mathcal{C}_0^k\left(\mathbb{R}^N\right)$. Die Klasse $\mathcal{C}_0^k$ enthält also alle Funktionen aus $\mathcal{C}^k$, die außerhalb einer beschränkten Menge identisch verschwinden.

Die betrachteten Funktionen sind immer reell oder komplexwertig. Ist $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$ komplexwertig, $\varphi_1 = \mathfrak{Re}\,\varphi$, $\varphi_2 = \mathfrak{Im}\,\varphi$, so bedeutet $\varphi \in \mathcal{C}^k$ natürlich, daß $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{C}^k$ ist[5].

Ebenso werden auch die Räume $L^p(G)$ $(p \geq 1)$ der in G meßbaren Funktionen f mit endlichen L^p-Norm

$$\|f\|_{L^p} = \left(\int\limits_G |f(x)|^p \, dx \right)^{\frac{1}{p}} < \infty \tag{B.2}$$

betrachtet. Ist $f : G \to \mathbb{C}$ meßbar und $|f|^p$ über jedes in G gelegenen Kompaktum integrierbar, so gehört f zu der Klasse $L^p_{LOC}(G)$. Im Fall $G = \mathbb{R}^N$ schreiben wir kurz L^p und L^p_{LOC}.

An dieser Stelle wollen wir folgende **Bemerkung** machen: Die Räume $\left(L^p, \|\ldots\|_p\right)$ sind für $p \geq 1$ *Banachräume*. Obwohl die L^p-Räume eigentlich keine Räume von Funktionen, sondern von Äquivalenzklassen von Funktionen sind, behandelt man ihre Elemente, als wären es Funktionen. Man schreibt also $f \in L^p$ statt $[f] \in L^p$ usw. In der Regel treten dadurch keine Komplikationen auf. Beispielsweise ist $f \longmapsto \int\limits_G f d\lambda$ eine wohldefinierte Abbildung auf $L^1(G)$, *nicht* jedoch $f \longmapsto f(x_0)$. Von besonderer Bedeutung sind die Räume $L^2(G)$; diese sind bekanntlich die sogenannten *Hilbert-Räume*.

B.1.3 Finite Funktionen, Träger einer Funktion

Eine in $\mathbb{R}^N$ erklärte Funktion $\varphi(x)$ ist *finit*, wenn diese außerhalb einer beschränkten Menge verschwindet. Der Träger[6] von φ, supp φ, ist die abgeschlossene Hülle aller Punkte x mit $\varphi(x) \neq 0$, in Formeln

$$\text{supp}\,\varphi = \text{cl}\,\{x : \varphi(x) \neq 0\} \quad . \tag{B.3}$$

Der Träger enthält gewissermaßen die Punkte, welche für φ „wesentlich“ sind. Außerhalb des Trägers verschwindet φ in dem folgendem Sinne: Zu $x \notin \text{supp}\,\varphi$ gibt es eine Umgebung $U(x)$, in welche $\varphi \equiv 0$ ist. Die drei Aussagen:

- φ ist finit,
- φ hat einen kompakten Träger,
- φ verschwindet außerhalb eine beschränkten Menge,

sind äquivalent. Die finiten Funktionen aus $\mathcal{C}^k$ bilden die Klasse $\mathcal{C}_0^k$ (= Funktionen aus $\mathcal{C}^k$, welche außerhalb eine kompakten Teilmenge von G identisch verschwinden).

Für komplexwertiges $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$ gilt

$$\text{supp}\,\varphi = (\text{supp}\,\varphi_1) \cup (\text{supp}\,\varphi_2) \quad . \tag{B.4}$$

B.1.4 Vektorräume

Unter einem reellen bzw. komplexen *Vektorraum*, auch *linearer Raum* genannt, versteht man ein Menge $\mathcal{T}$, in welcher eine Addition $a+b$ und eine Multiplikation λa mit reellen bzw. komplexen Zahlen erklärt ist, wobei $\mathcal{T}$ bezüglich der Addition eine Abelsche Gruppe darstellt und außerdem für $a, b \in \mathcal{T}$, $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ bzw. $\mathbb{C}$ die Gesetze

$$\lambda(a+b) = \lambda a + \lambda b \quad , \tag{B.5}$$

$$(\lambda\mu)a = \lambda(\mu a) \quad , \tag{B.6}$$

$$(\lambda+\mu)a = \lambda a + \mu a \quad , \tag{B.7}$$

[4] Eine Menge $A \subset \mathbb{R}^N$ ist genau dann kompakt, wenn sie beschränkt und abgeschlossen ist.

[5] Entsprechendes gilt bei den anderen Funktionenklassen.

[6] engl. *support*

gelten.

Von großer Bedeutung ist die folgende

Definition B.1
Der Raum $L(X,\mathbb{K})$ der stetigen linearen Funktionale auf einem normierten (topologischen) Raum X heißt Dualraum *von X und wird mit X' bezeichnet.*

Es läßt sich nun folgendes zeigen [Wer95]:

Korollar B.1
Der Dualraum eines normierten Raumes, versehen mit der Maximumsnorm

$$\|x'\| = \sup_{\|x\|\leq 1} |x'(x)| \quad , \tag{B.8}$$

ist stets ein Banachraum.

B.1.5 Lineare Funktionale (Linearformen) und lineare Operatoren

Definition B.2
Eine auf $\mathcal{T}$ definierte komplexwertige Funktion

$$T : \mathcal{T} \to \mathbb{C} \tag{B.9}$$

wird Funktional *(auf $\mathcal{T}$) genannt. Ein Funktional ist also eine Vorschrift, welches jedes Element $\varphi \in \mathcal{T}$ eine komplexe Zahl $T[\varphi]$, auch kurz in Anlehnung an der Operatorschreibweise $T\varphi$ geschrieben, zuordnet. Das Funktional heißt* linear, *wenn*

$$T[\lambda\varphi + \mu\psi] = \lambda T\varphi + \mu T\psi \quad \text{für } \varphi,\psi \in \mathcal{T},\ \lambda,\mu \in \mathbb{C} \tag{B.10}$$

ist. Lineare Funktionale werden auch als Linearformen *bezeichnet.*

Nur der Vollständigkeit halber wollen wir auch noch folgende Definition der linearen Operatoren angeben:

Definition B.3
Eine stetige lineare Abbildung $T : X \to Y$ zwischen den normierten Räumen X und Y heißt linearer Operator. *Ist der Bildraum der Skalarkörper, so sagen wir, gemäß der Definition B.2,* Funktional *statt Operator.*

Ein stetiger Operator $T : X \to Y$ erfüllt eine der äquivalenten Bedingungen [Wer95], wobei x_n eine (Funktionen-)Folge in X sei:

1. Falls $\lim_{n\to\infty} x_n = x$, so gilt $\lim_{n\to\infty} Tx_n = Tx$.
2. Für alle $x_0 \in X$ und alle $\varepsilon > 0$ existiert ein $\delta > 0$ mit
$$\|x - x_0\| \leq \delta \Rightarrow \|Tx - Tx_0\| \leq \varepsilon \quad . \tag{B.11}$$
3. Für alle offenen Mengen $O \subset Y$ ist
$$T^{-1}(O) = \{x \in X : Tx \in O\} \tag{B.12}$$
offen in X.

Von größter Bedeutung in der Funktionalanalysis ist die folgende Charakterisierung stetiger Operatoren [Wer95]:

Satz B.1
Seien X und Y normierte Räume, und sei $T : X \to Y$ linear. Dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

1. *T ist stetig.*
2. *T ist stetig bei 0.*
3. *Es existiert ein $M \geq 0$ mit*
$$\|Tx\| \leq M\|x\| \quad \forall\, x \in X \quad . \tag{B.13}$$

4. T ist gleichmäßig stetig.

Definition B.4
Die kleinste in (B.13) des Satzes B.1 auftauchende Konstante wird mit $\|T\|$, die Norm *des Operators T, bezeichnet, d.h.*

$$\|T\| := \inf\{M \geq 0 : \|Tx\| \leq M\|x\| \quad \forall\, x \in X\} \quad . \tag{B.14}$$

Es gilt offensichtlich

$$\|Tx\| = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Tx\|}{\|x\|} = \sup_{\|x\|=1} \|Tx\| = \sup_{\|x\|\leq 1} \|Tx\| \quad , \tag{B.15}$$

sowie die fundamentale Ungleichung:

$$\|Tx\| \leq \|T\|\,\|x\| \quad \forall\, x \in X \quad . \tag{B.16}$$

Da stetige Operatoren nach Satz B.1 die (abgeschlossene) Einheitskugel $\bar{B}_X\{x \in X : \|x\| \leq 1\}$ auf eine beschränkte Menge abbilden, spricht man auch von *beschränkten* Operatoren.

Betrachten wir nun

$$L(X,Y) := \{T : X \to Y : T \text{ ist linear und stetig}\} \quad . \tag{B.17}$$

Es ist jetzt $L(X,Y)$ bezüglich der algebraischen Operationen

$$(S+T)(x) = Sx + Tx \tag{B.18}$$

$$(\lambda T)(x) = \lambda Tx \tag{B.19}$$

ein Vektorraum [Wer95].

Führen wir diesen Abschnitt abschließend noch das Konzept des kompakten Operators ein:

Definition B.5
Eine lineare Abbildung, respektive ein linearer Operator, T zwischen normierten Räumen X und Y heißt kompakt*, wenn $T(\bar{B}_X)$ relativkompakt ist, was äquivalent mit der Aussage ist, daß $\overline{T(B_X)}$ kompakt ist. Die Gesamtheit der kompakten Operatoren wird mit $K(X,Y)$ bezeichnet; ferner setzen wir $K(X) = K(X,X)$.*

Offenbar ist eine lineare Abbildung $T : X \to Y$ genau dann kompakt, wenn T beschränkte Mengen auf relativkompakte Mengen abbildete, bzw. wenn für jede beschränkte Folge $\{x_n\}$ in X die Folge $\{Tx_n\} \subset Y$ eine konvergente Teilfoge enthält [Wer95]. Da kompakte Mengen beschränkt sind, sind kompakte Operatoren stetig; es gilt also stets $K(X,Y) \subset L(X,Y)$ [Wer95].

Wir wollen noch erwähnen, daß ein *Integraloperator*

$$T_k : L^2\left(\mathbb{R}^N\right) \to L^2\left(\mathbb{R}^N\right) \quad , \quad T_k f(x) = \int k(x,y)\; f(y)\; dy \tag{B.20}$$

dann kompakt ist, wenn $k \in L^2\left(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N\right)$, also

$$\int dx \int dy\, |k(x,y)|^2 < \infty \tag{B.21}$$

gilt.

B.2 Grundfunktionenräume der Distributionentheorie und deren Eigenschaften

Im folgendem wollen wir die wichtigsten Grundfunktionenräume $\mathcal{T}$, die in der Theorie der Distributionen angewendet werden, und deren Eigenschaften vorstellen. Ganz allgemein handelt es sich bei allen Grundfunktionenräume übrigens um *Hausdorffsche lokal konvexe topologische Vektorräume*. Da wir diese Tatsache in dieser Arbeit aber nicht explizit ausnutzen respektive verwenden werden, wollen wir auf weitere Details[7] diesbezüglich verzichten und die Räume in ihren alternativ üblichen, bezüglich theoretischen und praktischen Untersuchungen nichtsdestotrotz eleganten, äquivalenten Formulierungen angeben.

[7] Zur Definition und für weitere Details bezüglich topologischen Vektorräume im allgemeinen und Hausdorffsche lokal konvexe topologische Vektorräume im besonderen sei beispielsweise auf [BB93, Wer95] verwiesen.

B.2.1 Der Grundraum $\mathcal{D}$

Als erstes wollen wir den „Basisraum“ $\mathcal{D}$ der Distributionentheorie einführen und die wichtigsten Eigenschaften und Ergebnisse, die mit diesem Raum zusammenhängen, kurz diskutieren.

Definition B.6
Der Grundraum $\mathcal{D}$ ist die Menge $\mathcal{C}_0^\infty\left(\mathbb{R}^N\right)$ aller im $\mathbb{R}^N$ finiten und beliebig oft differenzierbaren (komplexwertigen) Funktionen. Diese werden Grundfunktionen *oder* Testfunktionen[8] *genannt.*

Da $\varphi \in \mathcal{D}$ eine finite Funktion ist, was äquivalent zu Aussage ist, „φ verschwindet außerhalb einer beschränkten Menge“, ist φ nach obigen Aussagen eine beschränkte Funktion.

Den Grundfunktionenraum $\mathcal{D}$ können wir kurz, aber offensichtlich völlig äquivalent zu obigen Definition B.6, auch noch folgendermaßen einführen:
Bezeichnen wir mit $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ eine offene und nichtleere Menge. Mit $\mathcal{D}(\Omega)$ wird dann der *Testfunktionenraum aller $\mathcal{C}^\infty$-Funktionen auf Ω mit kompakten Träger in* Ω bezeichnet.

B.2.1.1 Beispiel einer Grundfunktion

Wir wollen nun ein Beispiel einer Grundfunktion in $\mathcal{D}$ geben. Es sei für $x \in \mathbb{R}^N$:

$$h(x) = g(1-x^2) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{1-x^2}\right) & \text{für} \quad |x| < 1 \\ 0 & \text{für} \quad |x| \geq 1 \end{cases} \tag{B.22}$$

Da $g(t)$ und $t = 1-x^2$ beliebig oft stetig differenzierbar sind, gilt dasselbe[9] für h. Es ist somit $h \in \mathcal{D}$ und supp $h = \bar{B_1}$, wobei B_1 die abgeschlossene Einheitskugel im $\mathbb{R}^N$ bezeichnet. Durch Multiplikation von h mit einer Normierungskonstante C erhalten wir die Funktion $\rho(x) = Ch(x) \in \mathcal{D}$, die dann offensichtlich die nützliche Eigenschaft

$$\int \rho(x)\, dx = \int\limits_{|x|<1} \rho(x)\, dx = 1 \tag{B.23}$$

besitzt; somit können wir ρ als Dichtefunktion interpretieren. Führen wir jetzt noch, basierend auf ρ, die Funktion

$$\rho_\alpha(x) = \alpha^{-N}\, \rho\left(\frac{x}{\alpha}\right) \tag{B.24}$$

mit $\alpha > 0$ ein, so besitzt diese offensichtlich ebenso die Eigenschaften

$$\rho_\alpha(x) = \rho_\alpha(-x) \tag{B.25}$$

und, was mit der Substitution $x = \alpha y$, $dx = \alpha dy$ sofort nachweisbar ist,

$$\int \rho_\alpha(x)\, dx = 1 \quad . \tag{B.26}$$

Die so definierte Funktion ρ_α ist eine Grundfunktion in $\mathcal{D}$, für die $\rho_\alpha(x) \equiv 0$ für $|x| \geq \alpha$ gilt.

B.2.1.2 Mittelwert von Funktionen, Generierung von Grundfunktionen auf $\mathcal{D}$

Mit Hilfe der Funktion ρ_α läßt sich nun eine Fülle von Grundfunktionen in $\mathcal{D}$ angeben. Für $f \in \mathcal{C}^0$ wird mit f_α der „bewichtete Mittelwert“

$$f_\alpha(x) := \int f(\xi)\rho_\alpha(x-\xi)\, d\xi \quad \xi \in \mathbb{R}^N \tag{B.27}$$

bezeichnet; das Integral erstreckt sich tatsächlich nur über die Kugel $|x-\xi| \leq \alpha$. Obiges Integral läßt sich auch in der Form

$$f_\alpha(x) = \int\limits_{|\xi|<\alpha} f(x-\xi)\rho_\alpha(\xi)\, d\xi = \int\limits_{|\xi|<1} f(x-\alpha\xi)\rho(\xi)\, d\xi \tag{B.28}$$

[8] Die Elemente eines Grundfunktionenraumes werden ganz allgemein als *Grundfunktionen* oder *Testfunktionen* bezeichnet.

[9] Dieses folgt offensichtlich direkt aus der Kettenregel.

schreiben. Das Wort „Mittelwert“ ist angebracht, denn nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung gilt, falls f reellwertig ist, wegen $\rho_\alpha \geq 0$ und der Normierung von ρ_α auf Eins:

$$f_\alpha(x) = f(x') \int \rho_\alpha(x-\xi)\, d\xi = f(x') \tag{B.29}$$

für ein x' mit $|x'-x| \leq \alpha$. Ist f komplexwertig, so besteht eine Gleichung der Form (B.29) für $\mathfrak{Re}\, f$ und für $\mathfrak{Im}\, f$. Insbesondere ist $f_\alpha(x_0) = c$, wenn $f(x) \equiv c$ in $B_\alpha(x_0)$ ist[10]. Daraus folgt, daß f_α finit ist, wenn dasselbe für f gilt. Ebenso erkennt man leicht, daß $f_\alpha \in \mathcal{C}^\infty$ ist. Im Integral (B.27) kann man nämlich dem Parameter x beliebig oft unter dem Integralzeichen partiell differenzieren, da es sich um ein Integral mit festen, endlichen Integrationsgebiet handelt[11]. Durch die Mittelwertoperation (B.27) wird also f geglättet. Der durch die Gleichung (B.27) definierte Operator T_α,

$$T_\alpha f(x) := \int\limits_{\mathbb{R}^N} f(\xi)\rho_\alpha(x-\xi)\, d\xi \quad , \tag{B.30}$$

wird *Friedrichscher Glättungsoperator* genannt. Seine Bedeutung in der Funktionalanalysis und besonders in der Theorie der Distributionen fassen wir in den folgenden Lemma zusammen [Wal94, Wer95]:

Lemma B.1
Es sei $f \in \mathcal{C}^0$. Dann ist $f_\alpha \in \mathcal{C}^0$. Ist $f(x) \equiv c$ in $B_\alpha(x_0)$, so ist $f_\alpha(x_0) = c$; ist f finit, so ist f_α eine Grundfunktion in $\mathcal{D}$. Für den Träger von f_α gilt supp $f_\alpha \subset (\text{supp } f)_\alpha$.

B.2.1.3 Konvergenzbegriff in $\mathcal{D}$

Definition B.7
Wir sagen, die Folge $\{\varphi_k\}$ von Grundfunktionen konvergiert in $\mathcal{D}$ gegen 0 und schreiben dafür

$$\varphi_k \to 0 \quad \textit{für } k \to \infty \quad \textit{oder} \quad \lim_{k\to\infty} \varphi_k = 0 \quad , \tag{B.31}$$

wenn

1. *alle φ_k außerhalb ein und derselben beschränkten Menge identisch verschwinden,*
2. *die Folge $\{\varphi_k\}$ und jede daraus durch partielle Ableitung (von beliebige Ordnung) gewonnene Folge gleichmäßig im $\mathbb{R}^N$ gegen 0 konvergiert.*

Die folgende Bezeichnung ist häufig von Nutzen und wird in der Literatur quasi „standardmäßig“ benutzt. Ist $p = (p_1, \ldots, p_n)$ ein Mehrfach-Index, auch als Multi-Index bezeichnet, d.h. $p_i \geq 0$ und ganzzahlig, so ist[12]

$$|p| = p_1 + \ldots + p_N, \qquad x^p = x_1^{p_1} \cdots x_N^{p_N} \tag{B.32}$$

$$D^p = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{p_1} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial x_N}\right)^{p_N} \quad = \quad \frac{\partial^{|p|}}{\partial x_1^{p1} \cdots \partial x_N^{p_N}} \tag{B.33}$$

Die zweite Konvergenzbedingung läßt sich dann auch als

$$\lim_{k\to\infty} D^p \varphi_k = 0 \quad \text{gleichmäßig im } \mathbb{R}^N \tag{B.34}$$

(für jedes p) schreiben. Man beachte: *Nicht* verlangt ist die gleichmäßige Konvergenz in x *und* p, also $|D^p\varphi_k(x)| < \varepsilon$ für *alle x, alle p* und *alle $k \geq k_0(\varepsilon)$*.

Hiermit ist natürlich für $\varphi_k, \varphi \in \mathcal{D}$ auch die Bezeichnung $\varphi_k \to \varphi$ erklärt:

$$\varphi_k \to \varphi \quad \text{bedeutet} \quad (\varphi_k - \varphi) \to 0 \tag{B.35}$$

$$\varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k \quad \text{bedeutet} \quad s_k = \varphi_1 + \varphi_2 + \ldots + \varphi_k \to \varphi \quad . \tag{B.36}$$

---

[10] Wir bezeichnen mit $B_r(x_0)$ die offene Kugel mit Mittelpunkt $x_0 \in \mathbb{R}^N$ und Radius r:
$B_r(x_0) = \{x \in \mathbb{R}^N : |x - x_0| < r\}$.

[11] Für alle x mit $|x| < R$ können wir als Integrationsgebiet $|\xi| \leq R + \alpha$ wählen.

[12] Faßt man D als Vektor auf, so ist die Definition (B.33) bereits in der Potenzdefinition (B.32) enthalten.

Entsprechend sind Limites der Form „$\varphi_\lambda \to \varphi$ für $\lambda \to \lambda_0$“ definiert. Sind etwa eine Familie von Grundfunktionen $\{\varphi_\lambda\}_{\lambda\in\Lambda}$, mit $\Lambda \subset \mathbb{R}$ oder auch $\Lambda \subset \mathbb{R}^N$, und eine Grundfunktion φ gegeben und ist λ_0 ein Häufungspunkt von Λ, so bedeutet

$$\lim_{\lambda\to\lambda_0} \varphi_\lambda = \varphi \quad \text{in } \mathcal{D} \tag{B.37}$$

oder auch $\varphi_\lambda \to \varphi$ für $\lambda \to \lambda_0$, daß

1. ein Kompaktum K mit supp $\varphi_\lambda \subset K$ für alle $\lambda \in \Lambda \cap U$ existiert, wobei U eine Umgebung von λ_0 ist;
2. für jeden Multi-Index p
$$\lim_{\lambda\to\lambda_0} D^p\varphi_\lambda = D^p\varphi \quad \text{gleichmäßig in } \mathbb{R}^N \tag{B.38}$$
gilt.

Dieser Konvergenzbegriff läßt sich, genau wie klassische Konvergenzbegriffe, auf die Konvergenz von Folgen zurückführen. Es besteht der

Satz B.2
Es gilt $\varphi_\lambda \to \varphi$ für $\lambda \to \lambda_0$ (in $\mathcal{D}$) genau dann, wenn für jede Folge (λ_i) aus Λ mit $\lambda_i \to \lambda$ die Beziehung $\varphi_{\lambda_i} \to \varphi$ für $i \to \infty$ (in $\mathcal{D}$) besteht.

Bei Konvergenzfragen in $\mathcal{D}$ ist es oft bequem, die *Maximumsnorm*, auch *Supremumsnorm* genannt, zu benutzen. Für eine im $\mathbb{R}^N$ erklärte Funktion g ist bekanntlich die Maximumsnorm durch

$$\|g\|_\infty := \sup\{|g(x)| : x \in \mathbb{R}^N\} \tag{B.39}$$

gesetzt. Dabei darf g vektorwertig sein, wobei dann $|g(x)|$ die Euklidnorm bezeichnet. Damit läßt sich die Beziehung (B.34) in der Form

$$\lim_{k\to\infty} \|D^p\varphi_k\|_\infty = 0 \tag{B.40}$$

schreiben. Mehr noch, wir können mit der Maximumsnorm die Definition der Konvergenz in $\mathcal{D}$ auch noch bequemer folgendermaßen formulieren:

Die Folge $\{\varphi_k\}$ von Grundfunktionen konvergiert in $\mathcal{D}$ gegen 0,

$$\varphi_k \to 0 \quad \text{für } k \to \infty \quad \text{oder } \lim_{k\to\infty} \varphi_k = 0 \quad , \tag{B.41}$$

wenn

1. alle φ_k außerhalb ein und derselben beschränkten Menge identisch verschwinden;
2. $\lim_{k\to\infty} \|D^p\varphi_k\|_\infty = 0$ für jedes p gleichmäßig in $\mathbb{R}^N$.

Ohne es zu beweisen, wollen wir noch darauf hinweisen, daß die Konvergenz bezüglich der Maximumsnorm gleichbedeutend mit gleichmäßiger Konvergenz ist [Wal94, Wer95].

Zusammenfassung

Am Ende dieses Abschnittes wollen wir folgendes bezüglich des Grundfunktionenraumes $\mathcal{D}$ zusammenfassen:

(i) Der Grundraum $\mathcal{D}$ ist die Menge $\mathcal{C}_0^\infty\left(\mathbb{R}^N\right)$ aller im $\mathbb{R}^N$ finiten und beliebig oft stetig differenzierbaren (komplexwertigen) Funktionen φ.

(ii) Die Funktionen $\varphi \in \mathcal{D}$ sind beschränkt.

(iii) Bei Konvergenzfragen ist es nützlich (und elegant), die Maximums- bzw. Supremumsnorm zu benutzen:

$$\|\varphi\|_\infty := \sup\{|\varphi(x)| : x \in \mathbb{R}^N\} \quad . \tag{B.42}$$

(iv) Die Konvergenz bezüglich der Maximumsnorm ist gleichbedeutend mit der gleichmäßiger Konvergenz im $\mathbb{R}^N$.

(v) Gemäß der Definition B.2, wird eine auf $\mathcal{D}$ definierte komplexwertige Funktion $T : \mathcal{D} \to \mathbb{K}$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$) Funktional auf $\mathcal{D}$ genannt.

B.2.2 Der Grundraum $\mathcal{S}$

Definition B.8
Die Funktion $\varphi \in \mathcal{C}^\infty$ gehört zu $\mathcal{S}$, wenn für beliebige Multi-Indizes p, q

$$\|x^q D^p \varphi\|_\infty = \sup_{x\in\mathbb{R}^N} |x^q D^p \varphi(x)| < \infty \tag{B.43}$$

ist[13]*. Gleichwertig dazu ist die Bedingung*

$$\left\| \left(1+x^2\right)^m D^p \varphi \right\|_\infty \tag{B.44}$$

für beliebige $m \geq 0$ und p also

$$|D^p \varphi(x)| \leq \frac{C}{\left(1+x^2\right)^m} \quad \text{mit } C = \left\| \left(1+x^2\right)^m D^p \varphi \right\|_\infty \quad . \tag{B.45}$$

Der Grundfunktionenraum $\mathcal{S}$ wird auch als Schwarz-Raum *oder* Testfunktionenraum aller überpolynomial abfallenden $\mathcal{C}^\infty$-Funktionen *bezeichnet.*

Die Funktion aus $\mathcal{S}$ nehmen also für $|x| \to \infty$ schneller ab als jede Potenz $1/|x|^m$. Man macht sich ohne Mühe klar, daß mit φ und ψ auch $\lambda\varphi$ und $\varphi + \psi$ zu $\mathcal{S}$ gehören; $\mathcal{S}$ ist also ein komplexer Vektorraum. Übrigens gehört auch $\varphi\psi$ zu $\mathcal{S}$, d.h. $\mathcal{S}$ ist, ebenso wie $\mathcal{D}$, eine kommutative Algebra [BB93, Wal94, Wer95].

Kompakter, aber offensichtlich völlig äquivalent zur Definition B.8, wird der Raums $\mathcal{S}$ auch noch folgendermaßen eingeführt:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^N) = \left\{ \varphi \in \mathcal{C}^\infty \;\middle|\; p_{m,l}[\varphi] < \infty \quad \forall\, m, l = 0, 1, 2, \ldots \right\} \tag{B.46}$$

$$p_{m,l}[\varphi] = \sup \left\{ \left(1+x^2\right)^{\frac{m}{2}} |D^\alpha \varphi| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N,\ |\alpha| \leq l \right\} \quad . \tag{B.47}$$

Offenbar sind alle Grundfunktionen aus $\mathcal{S}$, d.h. $\mathcal{D}$ ist ein Unterraum von $\mathcal{S}$: $\mathcal{D} \subset \mathcal{S}$. Doch es gilt sogar noch mehr, denn durch einfache Beispiele lassen sich folgende Inklusionen zeigen[14]:

$$\mathcal{D}(\mathbb{R}^N) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^N) \subset L^1(\mathbb{R}^N) \quad . \tag{B.48}$$

B.2.2.1 Beispiel einer Grundfunktion in $\mathcal{S}$

Das einfachste und wichtigste Beispiel einer Grundfunktion $\varphi \in \mathcal{S}$ ist

$$\varphi(x) = P(x) e^{-\alpha x^2} \in \mathcal{S} \tag{B.49}$$

wobei $P(x)$ ein Polynom und $\alpha > 0$ sei.

B.2.2.2 Konvergenzbegriff in $\mathcal{S}$

Wir führen in $\mathcal{S}$ den folgenden Konvergenzbegriff ein.

Definition B.9
Ist $\varphi_k \in \mathcal{S}$ für $k = 1, 2, \ldots$, so bedeutet

$$\lim_{k\to\infty} \varphi_k = 0 \quad \textit{oder } \varphi_k \to 0 \quad \textit{für } k \to \infty \quad , \tag{B.50}$$

daß für beliebige Multi-Indizes p, q

$$\lim_{k\to\infty} \|x^q D^p \varphi_k\|_\infty = 0 \tag{B.51}$$

gilt.

---

[13] Zur Erinnerung: $x^p = x_1^{q_1} \cdots x_N^{q_N}$.

[14] Bezüglich der Beweise sei auf [BB93, Wal94] verwiesen.

Dieses trifft genau dann zu, wenn die folgenden beiden Aussagen bestehen:

(i) Zu jedem p, q gibt es eine Konstante C_{pq} mit

$$\|x^q D^p \varphi_k\|_\infty \leq C_{pq} \quad \text{für } k = 1, 2, \ldots \quad . \tag{B.52}$$

(ii) Für jedes p gilt

$$D^p \varphi_k \to 0 \quad \text{für } k \to \infty \tag{B.53}$$

gleichmäßig auf kompakten Teilmengen von $\mathbb{R}^N$.

Hier folgt (i) aus der Beschränktheit der Nullfolgen $\|x^q D^p \varphi_k\|_\infty$ und (ii), in dem wir in (B.51) $q = 0$ setzen. Umgekehrt folgt aus (i), daß (zu vorgegebenen p und q) eine Konstante C_1 mit $\|x^q \left(1+x^2\right) D^p \varphi_k\|_\infty < C_1$ existiert. Zu $\varepsilon > 0$ gibt es also ein R mit

$$|x^q D^p \varphi_k(x)| \leq \frac{C_1}{1+x^2} < \varepsilon \quad \text{für } |x| > R \quad . \tag{B.54}$$

Aus (ii) folgt dann

$$|x^q D^p \varphi_k(x)| < \varepsilon \quad \text{für alle } k \geq k_0 \quad , \tag{B.55}$$

d.h. es gilt (B.51).

B.2.2.3 Zwei stetige Abbildungen

Aus der Gleichung (B.43) der Definition B.8 können wir ablesen, daß aus $\varphi \in \mathcal{S}$ folgt $x^p \varphi(x) \in \mathcal{S}$ und $D^p \varphi(x) \in \mathcal{S}$. Die Abbildungen $\varphi \longmapsto x^p \varphi$ und $\varphi \longmapsto D^p \varphi$ von $\mathcal{S}$ in sich sind offenbar linear. Sie sind sogar stetig, aus $\varphi_k \to \varphi$ folgt $x^p \varphi_k \to x^p \varphi$ und $D^p \varphi_k \to D^p \varphi$ in $\mathcal{S}$.

Erinnern wir uns jetzt daran, daß die Fourier-Transformation im wesentlichen die Ableitung D^α und die Multiplikation x^α miteinander vertauschen, so können wir schon erahnen, daß der Grundfunktionenraum $\mathcal{S}$ bezüglich der Fourier-Transformation eine besondere Rolle spielen wird.

B.2.2.4 Normen in $\mathcal{S}$

Wir führen in $\mathcal{S}$ die Normen

$$\|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} = \sup \left\{ (1+|x|)^m \, D^p \, \varphi(x) \;\middle|\; |p| \leq m, x \in \mathbb{R}^N \right\} \quad , \tag{B.56}$$

wobei $m \geq 0$ sei, und die dazu äquivalenten Normen[15]

$$p_{m,l}[\varphi] = \sup \left\{ \left(1+x^2\right)^{\frac{m}{2}} |D^\alpha \varphi| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N, \; |\alpha| \leq l \right\} \quad . \tag{B.57}$$

ein.

Es bestehen dann folgende Aussagen:

(a) für $\varphi \in \mathcal{C}^\infty$ gilt:

$$\varphi \in \mathcal{S} \Leftrightarrow \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} < \infty \quad \forall \, m \quad . \tag{B.58}$$

(b) Für $\varphi_k \in \mathcal{S}$ gilt

$$\lim_{k\to\infty} \varphi_k = 0 \quad \text{in } \mathcal{S} \Leftrightarrow \lim_{k\to\infty} \|\varphi_k\|_m^{\mathcal{S}} = 0 \tag{B.59}$$

für jedes m.

[15] siehe [BB93, Wal94, Wer95] und hier obige Gleichung (B.47); in dieser Arbeit werden beide Normen gleichberechtigt nebeneinander benutzt.

B.2.3 Der Grundraum $\mathcal{E}$

Der in gewisser Hinsicht „breiteste“ Grundfunktionenraum, d.h. derjenige mit den meisten Elementen, ist folgendermaßen definiert:

Definition B.10
Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ offen und nicht leer. Mit $\mathcal{E}(\Omega)$ bezeichnen wir den Grundfunktionenraum aller $\mathcal{C}^\infty$-Funktionen auf Ω.

Am Rand von Ω unterliegen die Grundfunktionen aus $\mathcal{E}$ keinen Restriktionen im Unterschied zu den Funktionen aus $\mathcal{D}$ und $\mathcal{S}$.

B.3 Distributionen

Kommen wir nun endlich zu Definition der Distribution. Die allgemeinste Definition ist wie folgt:

Definition B.11
Eine Distribution *T, auch* verallgemeinerte Funktion *genannt, ist ein auf den Grundfunktionenraum $\mathcal{T}$, wobei $\mathcal{T} = \mathcal{D}$, $\mathcal{T} = \mathcal{S}$ oder $\mathcal{T} = \mathcal{E}$ sei, erklärtes stetiges lineares Funktional.*

Betrachten wir kurz die hier vorgestellten Grundfunktionen und die auf diesen definierten Distributionen etwas genauer.

B.3.1 Der Distributionen-Raum $\mathcal{D}'$

Gemäß der allgemeinen Definition B.11, ist eine *Distribution* ein auf $\mathcal{D}$ erklärtes stetiges lineares Funktional. Der Raum $L(\mathcal{D}, \mathbb{K})$ der stetigen linearen Funktionale auf $\mathcal{D}$ ist aber gerade gemäß der Definition B.1 der Dualraum $\mathcal{D}'$ von $\mathcal{D}$, d.h. die Gesamtheit aller Distributionen (auf $\mathcal{D}$), der Raum der Distributionen $\mathcal{D}'$, entspricht dem (topologischen) Dualraum von $\mathcal{D}$.

Bevor wir uns den weiteren Eigenschaften des Distributionen-Raums $\mathcal{D}'$ zuwenden, wollen wir als Einschub eine, nicht nur für die Theorie der Distributionen, der bedeutesten und wichtigsten Arten von Funktionalen betrachten.

Integrierbare Funktionen als Funktionale

Wir nennen eine für $x \in \mathbb{R}^N$ erklärte reelle- oder komplexwertige Funktion f *lokal integrierbar* oder auch *lokal integrabel*, wenn $f(x)$ über jede kompakte Menge (oder auch über jede Kugel) integrierbar ist. Wir schreiben dafür dann $f \in L^1_{LOC}$.

Hierbei wird der Lebesguesche Integralbegriff zugrundegelegt. Eine komplexwertige Funktion $f = f_1 + i f_2$ ist also genau dann lokal integrierbar, wenn die reellen Funktionen f_j meßbar sind und $\int\limits_K |f_j(x)|\ dx < \infty$ für jede kompakte Menge K ist $(j = 1, 2)$. Das Integral $\int\limits_K f(x)\ dx$ ist per definitionem gleich $\int\limits_K f_1(x)\ dx + i \int\limits_K f_2(x)\ dx$.

Jedoch sind, wie bereits am Anfang dieses Anhanges erwähnt, die noch folgenden Ergebnisse und Sätze mit ihren Beweisen auch im Rahmen des Riemann-Integrals sinnvoll, nur eben weniger allgemein [Wal94, Wer95]. Lokale Integrierbarkeit von $f = f_1 + i f_2$ im Riemann'schen Sinne bedeutet, daß die Funktionen f_j und $|f_j|$ über jede Kugel des $\mathbb{R}^N$ eigentlich oder uneigentlich Riemann integrierbar sind.

Jeder *lokal integrierbaren* Funktion f ist jetzt in natürlicher Weise ein lineares Funktional F gemäß

$$F[\varphi] = \int f(x)\ \varphi(x)\ dx \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^N) \tag{B.60}$$

zugeordnet. Das Integral existiert, da φ außerhalb einer Kugel identisch verschwindet und das Integral demgemäß nur über diese Kugel zu erstrecken ist. Außerdem sieht man sofort, daß F ein lineares Funktional ist. Es gilt der

Satz B.3
Jede im $\mathbb{R}^N$ erklärte, lokal integrierbare Funktion f erzeugt ein auf dem Grundraum $\mathcal{D}$ definiertes lineares Funktional gemäß Formel (B.60). Ist $f \in \mathcal{C}^0$, ist f durch „sein" Funktional eindeutig bestimmt; zur Bestimmung des Funktionswertes $f(x_0)$ aus F kann man z.B. die Grundfunktion $\varphi(x) = \rho_\alpha(x - x_0)$ benutzen:

$$F[\rho_\alpha(x-x_0)] \to f(x_0) \quad \text{für } \alpha \to 0^+ \quad . \tag{B.61}$$

Allgemein läßt sich aus (B.61) der Wert einer lokal integrierbaren Funktion f an jeder Stetigkeitstelle x_0 gewinnen. Im besonderen ist also für $N = 1$ eine stückweise stetige Funktion f durch ihr Funktional F bis auf die Werte an den Sprungstellen vollständig bestimmt.

Unter Zuhilfenahme von Sätzen aus der Theorie des Lebesgue-Integrals läßt sich allgemein zeigen:

Korollar B.2
Eine lokal integrierbare Funktion $f(x)$ ist durch $F[\varphi]$ bis auf eine (Lebesguesche) Nullmenge eindeutig definiert. Auch in diesem Fall gilt (B.61) für alle $x_0 \notin N$, wobei N eine (Lebesguesche) Nullmenge ist.

Aufgrund dieser Ergebnisse kann man eine lokal integrierbare Funktion $f(x)$ und das von dieser erzeugte Funktional $F[\varphi]$ als zwei Seiten ein und derselben Sache ansehen. Wir schreiben deshalb auch $f[\varphi]$ oder (f, φ) oder $\langle f, \varphi \rangle$ statt $F[\varphi]$

$$(f, \varphi) \equiv \langle f, \varphi \rangle \equiv f[\varphi] := \int f(x)\, \varphi(x)\, dx \quad . \tag{B.62}$$

Normalerweise steht in der Analysis der erste Gesichtspunkt im Vordergrund: f ist definiert als Abbildung, welche jedem $x \in \mathbb{R}^N$ eine Zahl $f(x)$ zuordnet. Die Theorie der Distributionen knüpft gerade an die andere Möglichkeit an, f durch ein Funktional zu kennzeichnen, welches jedem $\varphi \in \mathcal{D}$, respektive $\varphi \in \mathcal{T}$, eine Zahl $f[\varphi]$ zuordnet[16].

Offenbar ist das durch eine lokal integrierbare Funktion f erzeugte Funktional $f[\varphi]$ stetig, also eine Distribution. Gilt nämlich $\varphi_k \to 0$, so ist erstens $\varphi_k \equiv 0$ außerhalb einer beschränkten Menge A, und ferner wegen

$$\lim_{k\to\infty} \|D^p \varphi_k\|_\infty \to 0 \tag{B.63}$$

für $p = (0, \cdots, 0)$. Die Distributionen verallgemeinern also den begriff der lokal integrierbaren Funktion[17]. Diese Verallgemeinerung wird, um unsere bisherigen Überlegungen zusammenzufassen, gewonnen aufgrund einer Charakterisierung von f nicht als Punktfunktion $f(x)$, sondern als Funktional $\langle f, \varphi \rangle$. Auch bei Distributionen werden übrigens die Bezeichnungen

$$\hat{T}\varphi = T[\varphi] = (T, \varphi) = \langle T, \varphi \rangle = \langle T(x), \varphi(x) \rangle \tag{B.64}$$

nebeneinander benutzt.

Wir wollen nun anhand einiger Beispiele Eigenschaften der Distributionen und weitere Konzepte vorstellen und erläutern:

(a) *Reguläre Distributionen* nennt man nennt man die durch lokal integrierbare Funktionen f erzeugte Distributionen

$$\langle f, \varphi \rangle = \int f(x)\, \varphi(x)\, dx \quad . \tag{B.65}$$

(b) Die wohl bekannteste Distribution ist die *Dirac'sche Delta-Funktion*

$$\langle \delta, \varphi \rangle := \varphi(0) \quad , \tag{B.66}$$

auf die im Rahmen der Regularisierung unser besonderes Interesse liegt. Daß δ ein lineares Funktional ist, ist sofort zu sehen. Ebenso ist die Stetigkeit evident: aus $\varphi_k \to 0$ (in $\mathcal{D}$) folgt $\delta(\varphi_k) = \varphi_k(0) \to 0$. Es ist ebenso

[16] Man beachte, daß diese Kennzeichnung der Funktion f durch das Funktional $\langle f, \varphi \rangle$ nicht für alle, sondern nur für lokal integrierbare Funktionen möglich ist. Ferner vereinbaren wir, daß zwei lokal integrierbare Funktionen, welche sich nur auf einer (Lebesgueschen) Nullmenge unterscheiden, identifiziert werden, wodurch erreicht wird, daß verschiedene Funktionen f auch verschiedene Funktionale $\langle f, \varphi \rangle$ entsprechen. Tatsächlich handelt es sich, wie bereits erwähnt, bei den L^p-Räumen ja nicht um Räume von Funktionen, sondern um Räume von Äquivalenzklassen von Funktionen.

[17] Eine kurze Bemerkung zur Historie: Der Name „Distribution" wurde von L. SCHWARTZ eingeführt. Daneben hat sich seit dem Erscheinen der Arbeiten von GELFAND-SCHILOW der längere, aber vielleicht treffendere Name „verallgemeinerte Funktionen" durchgesetzt.

leicht zu sehen, daß δ *keine reguläre* Distribution ist, d.h. also, es existiert keine lokal integrierbare Funktion $\delta(x)$ mit der Eigenschaft

$$\int \delta(x)\ \varphi(x)\ dx = \varphi(0) \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{D}\ (\varphi \in \mathcal{S}) \quad . \tag{B.67}$$

Obwohl δ keine Funktion (im herkömmlichen Sinne) ist, werden wir in Übereinstimmung mit (B.64) $\delta(x)$ und $\langle \delta(x), \varphi(x) \rangle$ schreiben und weiterhin auch von der „δ-Funktion“ sprechen.

(c) Ist $f \in L^1_{LOC}$, also eine lokal integrierbare Funktion, und D^p eine partielle Ableitung, so wird durch

$$\langle S, \varphi \rangle := \int f(x)\ D^p\varphi(x)\ dx \quad (\varphi \in \mathcal{D}) \tag{B.68}$$

eine Distribution S definiert.

(d) Ist allgemeiner F eine Distribution, so wird durch

$$\langle S, \varphi \rangle := \langle F, D^p\varphi \rangle \quad (\varphi \in \mathcal{D}) \tag{B.69}$$

(p fest gewählt) eine neue Distribution[18] erklärt. Offensichtlich ist S ein lineares Funktional. Da mit φ_k auch $\psi_k = D^p\varphi_k$ in $\mathcal{D}$ gegen Null konvergiert, gilt

$$\langle S, \varphi_k \rangle = \langle F, \psi_k \rangle \to 0 \quad , \tag{B.70}$$

d.h. S ist auch stetig.

(e) **Stieltjes-Integral als Distribution:**
Es sei $N = 1$ und $g : (R) \to \mathbb{R}$ eine monoton wachsende Funktion. Dann wir durch das *Riemann-Stieltjes Integral*

$$T[\varphi] := \int \varphi(t) dg \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{D} \tag{B.71}$$

eine Distribution definiert. Es handelt sich hier um ein Integral $\int_a^b \varphi(t)\ dg$, wobei supp $\varphi \subset [a,b]$ ist. Sein Wert ist von der Wahl von a, b unabhängig. Offenbar ist dieses Funktional auf $\mathcal{D}$ erklärt. Ist $\{\varphi_k\}$ eine Nullfolge von Grundfunktionen und supp $\varphi_k \subset [a,b]$ für alle k, so ist mit der Bezeichnung $c_k = \|\varphi\|_\infty$

$$|T[\varphi_k]| \le \int_a^b |\varphi_k(t)|\ dg \le c_k \int_a^b dg = c_k\ (g(b) - g(a)) \quad (k \to \infty) \quad . \tag{B.72}$$

Insbesondere ist die Delta-Funktion als Riemann-Stieltjes Integral darstellbar[19]. Mit der *Heaviside-Funktion* $H(t)$

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad t \le 0 \\ 1 & \text{für} \quad t > 0 \end{cases} \tag{B.73}$$

ist nämlich

$$\int \varphi(t)\ dH = \varphi(0) = \langle \delta, \varphi \rangle \quad . \tag{B.74}$$

B.3.1.1 Addition und Multiplikation

Addition zweier Distributionen und Multiplikation einer Distribution mit einem Skalar bieten keine Schwierigkeiten. Es ist:

Definition B.12
Sind F, G zwei Distributionen, so verstehen wir unter $F + G$ die Distributionen

$$\langle F + G, \varphi \rangle := \langle F, \varphi \rangle + \langle G, \varphi \rangle \quad . \tag{B.75}$$

Ist λ eine komplexe Zahl, so verstehen wir unter λF die durch

[18] Die Gleichungen (B.68) und (B.69) weisen bereits auf eine (mögliche) Definition der Ableitung von Distributionen hin.

[19] DOETSCH führt beispielsweise in seinem hervorragenden Buch über die Laplace-Transformation [Doe71] die Delta-Distribution über das Riemann-Stieltjes Integral ein.

$$\langle \lambda F, \varphi \rangle := \langle F, \lambda\varphi \rangle = \lambda \langle F, \varphi \rangle \tag{B.76}$$

definierte Distribution.

In der Menge $\mathcal{D}'$ der Distributionen (auf $\mathcal{D}$) ist somit eine Addition und eine skalare Multiplikation erklärt worden. Es kann jetzt gezeigt werden, daß diese Menge tatsächlich einen (komplexen) Vektorraum bildet, den Raum $\mathcal{D}'$ der Distributionen. Unsere schon vorausgreifende Bezeichnung von $\mathcal{D}'$ als einem Raum ist somit also gerechtfertigt gewesen.

Betrachten wir als *Beispiel* das *Distributivgesetz*

$$(\lambda+\mu)F = \lambda F + \mu F \quad . \tag{B.77}$$

Einem Element $\varphi \in \mathcal{D}$ wird nach (B.75) und (B.76) durch die Distribution

$$(\lambda+\mu)F \quad \text{die Zahl} \quad \langle F, (\lambda+\mu)\varphi \rangle \quad , \tag{B.78}$$

$$\lambda F + \mu F \quad \text{die Zahl} \quad \langle F, \lambda\varphi \rangle + \langle F, \mu\varphi \rangle \tag{B.79}$$

zugeordnet. Diese beiden Zahlen sind aufgrund der Linearität von F gleich. Damit ist auch die Schreibweise $\langle F, \varphi \rangle$ statt $F[\varphi]$ gerechtfertigt. Es ist nämlich $\langle F, \varphi \rangle$ eine *Bilinearform*, d.h. es besteht Linearität in den beiden Argumenten:

$$\langle F, \lambda\varphi + \mu\psi \rangle = \lambda \langle F, \varphi \rangle + \mu \langle F, \psi \rangle \quad , \tag{B.80}$$

$$\langle \lambda F + \mu G, \varphi \rangle = \lambda \langle F, \varphi \rangle + \mu \langle G, \varphi \rangle \quad . \tag{B.81}$$

Ist $f \in L^1_{LOC}$ und $a(x)$ unendlich oft differenzierbar ($a \in \mathcal{C}^\infty$), so ist $a \cdot f$ ebenfalls lokal integrierbar, und für diese reguläre Distribution ist

$$\langle af, \varphi \rangle = \int a(x)\ f(x)\ \varphi(x)\ dx = \langle f, a\varphi \rangle \quad . \tag{B.82}$$

Es wird aufgrund dessen die folgende Definition getroffen:

Definition B.13
Für $F \in \mathcal{D}'$, $a(x) \in \mathcal{C}^\infty$ wird das Produkt $aF \equiv Fa$ gemäß

$$\langle aF, \varphi \rangle := \langle F, a\varphi \rangle \tag{B.83}$$

definiert, aF ist eine Distribution.

Bemerkung: Es sei darauf hingewiesen, daß $a(x)$ nicht finit zu sein braucht und daß im Falle $a(x) = \text{const.} = \lambda$ die beiden Definitionen (B.76) und (B.83) übereinstimmen.

Von wesentlicherer Bedeutung ist aber die zweite **Bemerkung**: Das Produkt $F \cdot G$ zweier Distributionen läßt sich im allgemeinen *nicht* in sinnvoller Weise definieren. Im besonderen ist es *nicht* möglich, das Quadrat der Delta-Funktion δ^2 zu bilden.

B.3.1.2 Konvergenzbegriff

In naheliegender Art und Weise wird durch die folgende Definition ein Konvergenzbegriff in $\mathcal{D}'$ eingeführt:

Definition B.14
Sind F und $F_1, F_2, \ldots$ Distributionen, so bedeutet $F_k \to F$ $(k \to \infty)$ oder $\lim\limits_{k\to\infty} F_k = F$, daß

$$\lim_{k\to\infty} \langle F_k, \varphi \rangle = \langle F, \varphi \rangle \tag{B.84}$$

für jede Grundfunktion φ ist.

Die Konvergenz einer (unendlichen) Reihe $s = F_1 + F_2 + \ldots$ $(s, F_k \in \mathcal{D}')$ ist wie üblich als Konvergenz der Teilsummen $s_k = F_1 + \ldots + F_k$ definiert. Gleichbedeutend damit ist also

$$s = \sum F_k \Leftrightarrow \langle s, \varphi \rangle = \sum \langle F_k, \varphi \rangle \quad \text{für jedes } \varphi \in \mathcal{D} \quad . \tag{B.85}$$

Entsprechend verfährt man bei von einem Parameter λ, der eine reelle oder komplexe Zahl oder auch ein Element des $\mathbb{R}^N$ sein kann, abhängigen Distributionen F_λ. Ist also $F_\lambda \in \mathcal{D}'$, so bedeutet

$$\lim_{\lambda\to\lambda_0} F_\lambda = G \Leftrightarrow \lim_{\lambda\to\lambda_0} \langle F_\lambda, \varphi\rangle = \langle G, \varphi\rangle \quad \text{für jedes } \varphi \in \mathcal{D} \quad . \tag{B.86}$$

Neben bei bemerkt, ist somit auch die stetige Abhängigkeit der Distribution F_λ vom Parameter λ erklärt: Man nennt F_λ stetig im Punkt λ_0, wenn $F_\lambda \to F_{\lambda_0}$ für $\lambda \to \lambda_0$ gilt.

Man sieht leicht, daß der oben definierte Limes eindeutig bestimmt ist und daß er mit den algebraischen Operationen vertauschbar ist; letzteres besagt, daß aus $F_k \to F$, $G_k \to G$ folgt

$$\lambda F_k + \mu G_k \to \lambda F + \mu G \quad , \tag{B.87}$$

aus $F_k \to F$, $a \in \mathcal{C}^\infty$ folgt $aF_k \to aF$.

B.3.1.3 Abschätzung von Distributionen, Maximumsnorm in $\mathcal{C}_0^k$

Satz B.4 (Abschätzungssatz)
Es sei $F \in \mathcal{D}'$ und K eine kompakte Menge. Dann gibt es eine Konstante $C > 0$ und eine nicht negative ganze Zahl k, so daß für alle $\varphi \in \mathcal{D}$ mit supp K

$$|\langle F, \varphi\rangle| \le C \sup\left\{ |D^p\varphi(x)| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N;\ |p| \le k \right\} \tag{B.88}$$

gilt.

Mit Hilfe der *Maximumsnorm in* $\mathcal{C}_0^k$

$$\|\varphi\|_k = \sup\left\{ |D^p\varphi(x)| \;\middle|\; x \in \mathbb{R}^N;\ |p| \le k \right\} \tag{B.89}$$

läßt sich das Behauptete kurz in der Form

$$|\langle F, \varphi\rangle| \le C\, \|\varphi\|_k \tag{B.90}$$

für alle $\varphi \in \mathcal{D}$ mit supp $\varphi \subset K$ schreiben. Übrigens erhält man für $k = 0$ die (herkömmliche) Maximumsnorm $\|\varphi\|_\infty$.

Wir notieren noch zwei Eigenschaften der Norm $\|\cdot\|_k$:

(a) Für $\varphi, \psi \in \mathcal{D}$ und $k \ge 0$ ist

$$\|\varphi\psi\|_k \le 2^k\, \|\varphi\|_k\, \|\psi\|_k \quad . \tag{B.91}$$

(b) Es ist offenbar $\|\operatorname{grad}\varphi(x)\| \le \sqrt{N}\|\varphi\|_1$; $\sqrt{N}\|\varphi\|_1$ ist also ein *Lipschitzkonstante* für φ und allgemeiner ist $\sqrt{N}\|\varphi\|_{k+1}$ eine Lipschitzkonstante für $D^p\varphi$ mit $|p| \le k$.

B.3.1.4 Distributionen von endlicher Ordnung

Wir stellen den folgenden nützlichen Begriff vor:

Definition B.15
F heißt Distribution von endlicher Ordnung*, wenn im Abschätzungssatz B.4 die Zahl k unabhängig von der Menge K gewählt werden kann, anders gesagt, wenn es eine ganze Zahl $k \ge 0$ gibt, so daß zu jeder kompakten Menge K eine Zahl $C = C_k$ mit supp $\varphi \subset K$ existiert. Das kleinste k von dieser Art wird* Ordnung von F *genannt.*

Satz B.5
Ist supp F kompakt, so ist F eine Distribution von endlicher Ordnung. Bezeichnet k die Ordnung von F, so gibt es eine Konstante C derart, daß die Abschätzung

$$|\langle F, \varphi\rangle| \le C\, \|\varphi\|_k \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{D} \tag{B.92}$$

besteht.

Das Wesentliche an dieser verschärften Abschätzung ist die Aussage, daß man hier mit einer Konstanten C für alle φ auskommt.

Für uns eventuell interessant sind noch die folgenden Aussagen:

(a) Jede reguläre Distribution ist von der Ordnung 0. Daraus folgt aber *nicht*, daß jede Distribution von der Ordnung 0 eine reguläre Distribution wäre. Wird die reguläre Distribution von einer über den ganzen $\mathbb{R}^N$ absolut integrierbaren Funktion erzeugt, so gilt die schärfere Abschätzung (B.92) mit $k = 0$.

(b) *Positive Distributionen*: Eine Distribution F wird *reell* genannt, wenn $F\varphi$ reell für alle $\varphi \in \mathcal{D}$ (respektive $\varphi \in \mathcal{S}$) ist. Die reelle Distribution heißt *positiv*, wenn aus $\varphi \geq 0$ folgt $F\varphi \geq 0$.

(c) Die Delta-Distribution ist eine positive Distribution der Ordnung 0.

(d) Interessanter weise kann gezeigt werden, daß eine Summe der Form

$$F = \sum_p c_p \, D^p \delta \tag{B.93}$$

keine Distribution darstellt, wenn *unendlich* viele $c_p \neq 0$ sind. Natürlich ist jede endliche Summe dieser Form eine Distribution, deren Träger nur aus dem Nullpunkt besteht, also nach dem obigen Satz eine Distribution von endlicher Ordnung (was man auch direkt sehen kann). Umgekehrt ist jede Distribution F mit $\operatorname{supp} F = \{0\}$ als endliche Summe $\sum c_p D^p \delta$ darstellbar.

B.3.1.5 Differentiation oder die Ableitung als lineare und stetige Operation

Die Differentiation einer Distribution ist folgendermaßen definiert:

Definition B.16
Für $F \in \mathcal{D}'$ ist durch

$$\langle D^p F, \varphi \rangle = (-1)^{|p|} \langle F, \varphi \rangle \tag{B.94}$$

eine Distribution $D^p F$, die Differentiation der Distribution *F, definiert.*

Es gelten die **Differentiationsregeln:**

(i) Für $F, G \in \mathcal{D}'$ ist für $i = 1, \ldots, N$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\lambda F(x) + \mu G(x)) = \lambda \frac{\partial}{\partial x_i} F(x) + \mu \frac{\partial}{\partial x_i} G(x) \quad . \tag{B.95}$$

(ii) Ist $a \in \mathcal{C}^\infty$ und $F \in \mathcal{D}'$, so gilt für $i = 1, \ldots, N$ die *Produktregel*

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(a(x)F(x)) = \left(\frac{\partial}{\partial x_i} a(x)\right) F(x) + a(x) \left(\frac{\partial}{\partial x_i} F(x)\right) \quad . \tag{B.96}$$

(iii) Die *Kettenregel* können wir nur für den Sonderfall der linearen Substitution erklären, da $F(g(t))$ nur für lineares[20] $g(t)$ erklärt ist. Diese lautet dann genauso wie bei Funktionen

$$\frac{d}{dt} F(at + b) = aF'(at + b) \quad , \tag{B.97}$$

falls[21] $a \neq 0$.

Die Ableitung[22] ist eine Abbildung $F \to F'$ von $\mathcal{D}'$ in sich. Diese Operation ist linear. Sie ist auch - und das ist ein zentrales Ergebnis der Distributionentheorie - stetig, wie der folgende Satz zeigt.

---

[20] Genauer kann $F(g(t))$ für all diejenigen Funktionen $g(t)$ erklärt werden, welche als *stetige Variablentransformationen* interpretiert werden können [Wal94, BB93, Bre65].

[21] Im Falle $a = 0$ ist $F(at + b)$ nicht erklärt.

[22] Wir beschränken uns kurzfristig ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf $N = 1$ und auf die erste Ableitung.

Satz B.6 (über die gliedweise Differentiation)
Es seien F_k und F bzw. S' Distributionen. Dann gilt

$$\text{aus} \quad F_k \to F \quad \text{folgt} \quad F_k' \to F' \quad (k \to \infty) \tag{B.98}$$

$$\text{aus} \quad S = \sum_{k=1}^{\infty} F_k \quad \text{folgt} \quad S' = \sum_{k=1}^{\infty} F_k' \quad . \tag{B.99}$$

Man „darf“ also konvergente Folgen und Reihen von Distributionen gliedweise differenzieren, und zwar in jedem Fall und ohne zusätzliche Voraussetzungen, wie diese bei den entsprechenden Sätzen der klassischen Analysis notwendig sind.

B.3.2 Der Distributionen-Raum $\mathcal{S}'$

Kommen wir nun zu den auf den Grundfunktionenraum $\mathcal{S}$ definierten Distributionen, welche, gemäß der allgemeinen Definition B.11, folgendermaßen definiert sind:

Definition B.17
Ein auf $\mathcal{S}$ erklärtes lineares und stetiges (komplexes) Funktional f wird temperierte Distribution *genannt.*

Die Menge aller temperierten Funktionen bildet einen Vektorraum[23], der mit $\mathcal{S}'$ bezeichnet wird. Der Zusammenhang zwischen $\mathcal{S}$ und $\mathcal{S}'$ ist also genau derselbe wie jener zwischen $\mathcal{D}$ und $\mathcal{D}'$, d.h. $\mathcal{S}'$ ist der (topologische) *Dualraum* von $\mathcal{S}$. Wir schreiben wieder $\langle f, \varphi \rangle$ für die durch $f \in \mathcal{S}'$ dem Element $\varphi \in \mathcal{S}$ zugeordnete komplexen Zahl.

Integrierbare Funktionen als Funktionale

Ist f eine lokal integrierbare Funktion und wächst f höchstens so stark wie eine Potenz von $|x|$ für $|x| \to \infty$, etwas allgemeiner respektive konkreter

$$|f(x)| \leq p(x)\ (1+|x|)^m \quad \text{mit } p \in L^1,\ p \geq 0 \quad , \tag{B.100}$$

so existiert das Integral

$$\langle f, \varphi \rangle = \int f(x)\ \varphi(x)\ dx \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{S} \tag{B.101}$$

und stellt ein stetiges, lineares Funktional, also eine temperierte Distribution, dar[24]. Wir sprechen wieder von einer *regulären (temperierten) Distribution*.

Funktionen, für die $f \in L^1_{LOC}$ und (B.100) gelten, werden auch *schwach wachsende Funktionen* genannt [Lig66].

Zusammenfassend: Definitionen, Eigenschaften, Bemerkungen

Die bisherigen auf den Raum $\mathcal{D}'$ bezogenen Resultate lassen sich, gelegentlich mit kleinen Änderungen, auch für den Raum $\mathcal{S}'$ beweisen. Wir wollen jetzt kurz einige Definitionen, Ergebnisse und Bemerkungen speziell für den Raum $\mathcal{S}'$ zusammenstellen:

1. Da, wir früher schon erwähnt haben, die identische Einbettung von $\mathcal{D}$ in $\mathcal{S}$ stetig ist, ist jedes stetige lineare Funktional auf $\mathcal{S}$ auch ein stetiges lineares Funktional auf $\mathcal{D}$, d.h.

   $$\mathcal{S}' \subset \mathcal{D}' \quad . \tag{B.102}$$

   Jede temperierte Distribution ist also eine Distribution. Aber $\mathcal{S}'$ ist echt kleiner als $\mathcal{D}'$, denn beispielsweise ist die reguläre Distribution $F(x) = e^{x^2}$, $F \in \mathcal{D}'$ keine temperierte Distribution, da F nicht auf die Grundfunktion $\varphi = e^{-\frac{1}{2}x^2}$, $\varphi \in \mathcal{S}$ anwendbar ist:

   $$\langle F, \varphi \rangle = \int e^{x^2}\ e^{-\frac{1}{2}x^2}\ dx = „+\infty“$$

[23] Der Beweis ist beispielsweise in [BB93, Wal94] zu finden.

[24] Denn für das Polynom $p(x) = 2(1+x^2)$ ist $1+|x| \leq p(x)$. Wegen $(1+|x|)^m|\varphi(x)| \leq \|p^m(x)\varphi\|_\infty < \infty$ ist $f\varphi \in L^1$, und aus $\varphi_k \to 0$ folgt $\|p^m(x)\varphi_k\|_\infty \to 0$, also $\langle f, \varphi_k \rangle \to 0$.

ist divergent.

2. Addition zweier Distributionen und Multiplikation einer Distribution mit einem Skalar sind formal genauso wie in $\mathcal{D}'$ definiert, die *Addition zweier Distributionen* also gemäß der Gleichung (B.75) und die *Multiplikation einer Distribution mit einem Skalar* gemäß der Gleichung (B.76).

3. *Differentiation:* Für $f \in \mathcal{S}'$ ist durch
$$\langle D^p f, \varphi \rangle = (-1)^{|p|} \ \langle f, D^p \varphi \rangle \tag{B.103}$$
eine temperierte Distribution $D^p f$ definiert. Es gelten ebenso die im Abschnitt B.3.1.5 angegebenen Differentiationsregeln.

4. Die *Multiplikation* $a(x) f(x)$
$$\langle af, \varphi \rangle := \langle f, a\varphi \rangle \tag{B.104}$$
ist in $\mathcal{S}'$ definiert, wenn $a \in \mathcal{C}^\infty$ ist und zu jedem Multi-Index p zwei Konstanten $C > 0$ und $m \geq 0$ mit
$$|D^p a(x)| \leq C(1+|x|)^m \tag{B.105}$$
existieren[25]. Im besonderen sind in $\mathcal{S}'$ die Multiplikation mit x^p, also mit Polynomen, und mit Grundfunktionen $a \in \mathcal{S}$ erklärt.

5. Allgemeiner gilt sogar: Eine lineare Funktion $f : \mathcal{S} \to \mathbb{K}$ ist genau dann eine temperierte Distribution, wenn es eine Konstante C_f und ganze Zahlen m_f, l_f existieren, so daß
$$|\langle f, \varphi \rangle| = |f[\varphi]| \quad \leq \quad C_f \ p_{m_f, l_f}[\varphi] \quad \forall \varphi \in \mathcal{S} \quad \text{mit} \tag{B.106}$$
$$p_{m,l}[\varphi] \quad = \quad \sup \left\{ \left(1+x^2\right)^{\frac{m}{2}} |D^\alpha \varphi| \ \middle| x \in \mathbb{R}^N, \ |\alpha| \leq l \right\} \tag{B.107}$$
gilt.

6. Für temperierte Distributionen läßt sich, ebenso wie für Distributionen (aus $\mathcal{D}'$), ein *Darstellungssatz* beweisen. Er ist wesentlich einfacher als der entsprechende Satz[26] für $\mathcal{D}'$ und lautet: f ist genau dann ein Element aus $\mathcal{S}'$, falls es eine Zahl $k_f \in \mathbb{N}$ und stetige polynomial beschränkte Funktionen g_α, $|\alpha| \leq k_f$, d.h.
$$|g_\alpha(x)| \leq C_\alpha (1+|x|)^{m_\alpha}, \quad m_\alpha \in \mathbb{N} \tag{B.108}$$
gibt, so daß für alle $\varphi \in \mathcal{S}$ gilt
$$\langle f, \varphi \rangle = \sum_{|\alpha| \leq k_f} \int g_\alpha(x) \ D^p \varphi(x) \ dx \quad . \tag{B.109}$$

7. Jede stetig langsam wachsende Funktion (schwach wachsende Funktion), also jede polynomial beschränkte, ist eine reguläre Distribution in $\mathcal{S}'$, aber nicht jede stetige Funktion, die zu $\mathcal{S}' \cap \mathcal{D}'_{reg}$ gehört, ist langsam wachsend; ein Beispiel dafür ist $f \in \mathcal{S}' \cap \mathcal{D}'_{reg}$,
$f(x) = e^x \, sin(e^x) = -\frac{d}{dx}(cos(e^x))$.

8. *Konvergenz in $\mathcal{S}'$:* Diese ist formal genauso wie in $\mathcal{D}'$ definiert[27]. Für $f_k \in \mathcal{S}'$ gilt:
$$f_k \to f \quad \text{in } \mathcal{S}' \Leftrightarrow \langle f_k, \varphi \rangle \to \langle f, \varphi \rangle \quad \text{für jede Funktion } \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{B.110}$$
Sind die f_k reguläre Distributionen und existieren eine ganze Zahl $m \geq 0$ und eine Funktion $p \in L^1$ derart, daß für alle k eine Abschätzung
$$|f_k(x)| \leq p(x)(1+|x|)^m \tag{B.111}$$
besteht, so folgt aus der punktweisen Konvergenz $\lim f_k(x) = f(x)$ für alle $x \in \mathbb{R}^N$, daß f eine reguläre temperierte Distribution ist und $f_k \to f$ in $\mathcal{S}'$ gilt.

9. Bevor wir uns den parameterabhängigen Distributionen zuwenden, erinnern wir uns an respektive führen wir die *Konvergenz in $\mathcal{S}$* ein: Ist $\{\varphi_\lambda\}$ eine Familie von Funktionen aus $\mathcal{S}$, wobei λ etwa in einem Intervall $J \subset \mathbb{R}$ variiert, so ist die Konvergenz $\varphi_\lambda \to \varphi$ in $\mathcal{S}$ für $\lambda \to \lambda_0$ in Analogie zur Folgenkonvergenz durch
$$\|x^q D^p (\varphi_\lambda - \varphi)\|_\infty \to 0 \quad \text{für } \lambda \to \lambda_0 \tag{B.112}$$

[25] Die Konstanten dürfen von p abhängen.

[26] Wir haben den Darstellungssatz für Distributionen aus $\mathcal{D}'$ hier nicht angegeben, da wir diesen im Rahmen dieser Arbeit nicht benötigen; siehe bezüglich dieses Satzes [BB93, Wal94].

[27] siehe Definition B.14

(p, q beliebig) definiert. Entsprechend ist die stetige Abhängigkeit vom Parameter λ durch die Forderung

$$\varphi_\lambda \to \varphi_{\lambda_0} \quad \text{für } \lambda \to \lambda_0 \tag{B.113}$$

erklärt. Der auf $\mathcal{D}$ bezogene Satz B.2 hat sein Analogon in $\mathcal{S}$:

$$\varphi_\lambda \to \varphi \text{ für } \lambda \to \lambda_0 \Leftrightarrow \varphi_{\lambda_k} \to \varphi \tag{B.114}$$

für jede Folge in J mit $\lambda_k \to \lambda_0$.

10. Wenden wir uns jetzt den parameterabhängigen temperierten Distributionen zu, indem wir die *Konvergenz in $\mathcal{S}'$* einführen:
Für eine Schar von Distributionen $f_\lambda \in \mathcal{S}'$ ($\lambda \in J$) ist die Konvergenz für $\lambda \to \lambda_0 \in J$ in $\mathcal{S}'$ nach dem Vorbild der Konvergenz in $\mathcal{D}'$ erklärt:
$$f_\lambda \to f \text{ in } \mathcal{S}' \Leftrightarrow \langle f_\lambda, \varphi\rangle \to \langle f, \varphi\rangle \tag{B.115}$$
für alle $\varphi \in \mathcal{S}$ ($\lambda \to \lambda_0$). Damit sind auch die stetige Abhängigkeit von f_λ vom Parameter λ und die Differenzierbarkeit nach λ definiert. Für reguläre Distributionen $f_\lambda \in \mathcal{S}'$ besteht Konvergenz in $\mathcal{S}'$, wenn punktweise Konvergenz $f_\lambda(x) \to f(x)$ für $x \in \mathbb{R}^N$ besteht und ein $m \geq 0$ und eine Funktion $p \geq 0$ aus L^1 existiert mit
$$|f_\lambda(x)| \leq p(x)(1+|x|)^m \quad \text{für } \lambda \in J \quad . \tag{B.116}$$

11. Geben wir jetzt *Abschätzungen* für Distributionen in $\mathcal{S}'$ an: Zu jeden $f \in \mathcal{S}'$ gibt es ein m und ein C mit
$$|\langle f, \varphi\rangle| \leq C \, \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{B.117}$$

12. *Vortsetzbarkeit nach $\mathcal{S}'$:* Eine Distribution $f \in \mathcal{D}'$ läßt sich genau dann zu $f \in \mathcal{S}'$ vortsetzen, wenn eine Abschätzung
$$|\langle f, \varphi\rangle| \leq C \, \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{D} \quad . \tag{B.118}$$
gültig ist. Die Fortsetzung ist eindeutig, und für diese gilt die vorstehende Abschätzung in $\mathcal{S}$.

B.4 Faltung, Approximation und Fourier-Transformation

Um beispielsweise zu sehen, unter welchen Bedingungen wir ein Faltungsprodukt für Distributionen erwarten können, darauf werden wir dann am Ende dieses Kapitels eingehen, betrachten wir zunächst die Faltung von Funktionen. Da man die Faltung nicht für beliebige Funktionen sinnvoll definieren kann, betrachten wir anfänglich spezielle Klasse von Funktionen, bevor die Ergebnisse auf allgemeinere Funktionenklassen übertragen werden.

B.4.1 Allgemeines zur Faltung

Die *Faltung* oder das *Faltungsprodukt der Funktionen u und v* wird ganz allgemein durch die Formel

$$(u * v)(x) = \int u(x-y)\, v(y)\, dy \tag{B.119}$$

erklärt, so das Integral mathematisch sinnvoll ist und existiert.

Geben wir jetzt, ohne Beweis[28], einige *Eigenschaften der Faltung* wieder:

(i) Es gilt: $u * v = v * u \;\forall\, u, v \in \mathcal{C}^0\left(\mathbb{R}^N\right)$.

(ii) $u * v$ ist stetig, denn da u und v stetig und finit sind ($u \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^N)$ und $v \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^N)$), folgt daraus, daß $u * v$ ebenfalls stetig und finit ist.

(iii) Ist u stetig und finit ($u \in \mathcal{C}^0$) und v stetig, so ist $u * v$ stetig.

(iv) $\operatorname{supp}(u * v) \subseteq \operatorname{supp} u + \operatorname{supp} v$.

(v) Falls $u \in \mathcal{C}_0^k\left(\mathbb{R}^N\right)$ und $v \in \mathcal{C}^0\left(\mathbb{R}^N\right)$ ist, so gilt $u * v \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^N)$ und $D^p(u * v) = D^p u * v \;\forall\, |p| \leq k$ und entsprechend gilt, falls $v \in \mathcal{C}_0^k\left(\mathbb{R}^N\right)$, $u \in \mathcal{C}^0\left(\mathbb{R}^N\right)$: $D^p(u * v) = u * D^p v \;\forall\, |p| \leq k$.

[28] siehe [BB93, Wal94, Wer95]

(vi) Es gelten die Abschätzungen:

$$\|u*v\|_\infty \leq \|u\|_\infty \|v\|_{L^1} \quad , \tag{B.120}$$
$$\|u*v\|_\infty \leq \|u\|_{L^1} \|v\|_\infty \quad . \tag{B.121}$$

(vii) Es sei jetzt $u \in L^p$, $v \in L^q$ mit $\frac{1}{q} + \frac{1}{q} = 1$, dann ist $u*v$ beschränkt und stetig und es gilt die Abschätzung:

$$\|u*v\|_\infty \leq \|u\|_{L^p} \|v\|_{L^q} \quad . \tag{B.122}$$

(viii) Sind u und v aus L^1, so existiert das Faltungsprodukt für fast alle[29] x, es ist dann $u*v \in L^1$ und es besteht die Abschätzung

$$\|u*v\|_{L^1} \leq \|u\|_{L^1} \|v\|_{L^1} \quad . \tag{B.123}$$

(ix) Diese Aufzählung abschließend, sei $u \in L^2 \cap L^1$ und $v \in L^2$. Dann ist $u*v \in L^2$ und es gilt die Abschätzung:

$$\|u*v\|_{L^2} \leq \|u\|_{L^1} \|v\|_{L^2} \tag{B.124}$$

Setzen wir $u(x-y) = k(x,y)$, so nimmt die Faltungsoperation die Gestalt

$$T_u v(x) = \int k(x,y)\, v(y)\, dy \tag{B.125}$$

an. Es gilt hier jetzt jedoch $k \notin L^2\left(\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N\right)$, denn

$$\int dx \int dy\, |k(x,y)|^2 = \|f\|_{L^2}^2 \int dx = \infty \quad . \tag{B.126}$$

Faltungsoperatoren sind daher keine *Hilbert-Schmidt- Operatoren*[30], sind sind, aufgrund obiger Gleichung (B.126), nicht einmal kompakt.

Wie wir später sehen werden, ist eine der wichtigsten Anwendungen der Faltung die Approximation von Funktionen und Distributionen durch reguläre (glatte) Funktionen.

B.4.2 Faltung mit Grundfunktionen

Ist in der Formel

$$h(x) = (f*g)(x) = \int f(\xi)\, g(x-\xi)\, d\xi \tag{B.127}$$

die Funktion g eine Grundfunktion, genauer sei $g \in \mathcal{D}$, so läßt sich diese Formel auch als

$$h(x) = (f*g)(x) = \int f(\xi)\, g(x-\xi)\, d\xi = \langle f(\xi), g(x-\xi)\rangle \tag{B.128}$$

schreiben. Das legt die Vermutung nahe, daß für eine beliebige Distribution $F \in \mathcal{D}'$

$$F*g = \langle F(\xi), g(x-\xi)\rangle \tag{B.129}$$

gilt. Tatsächlich läßt sich folgender Satz aussprechen:

Satz B.7
Ist $F \in \mathcal{D}'$ und g eine reguläre, von einer Funktion $g \in \mathcal{D}$ erzeugte Distribution, so ist $F*g$ ebenfalls eine reguläre Distribution. Diese wird von einer Funktion $h \in \mathcal{C}^\infty$ erzeugt und es ist

$$h(x) = (F*g)(x) = \langle F(\xi), g(x-\xi)\rangle \quad . \tag{B.130}$$

Das nachfolgende Korollar wollen wir der Vollständigkeit wegen nicht unerwähnt lassen:

---

[29] Damit ist die Existenz bis auf eine Menge vom Lebesgueschen Maße Null gemeint.

[30] zu *Hilbert-Schmidt-Operatoren* siehe beispielsweise [BB93, Wer95]

Korollar B.3
Ist $F \in \mathcal{E}'$, also eine Distribution mit kompakten Träger, und $g \in \mathcal{E} = \mathcal{C}^\infty$, so ist $h = F * g \in \mathcal{C}^\infty$; h läßt sich nach (B.130) berechnen. Dabei ist zu beachten, daß (B.130) jetzt im Sinne von

$$h(x) = \langle F\xi, \alpha(\xi) g(x-\xi) \rangle \tag{B.131}$$

zu verstehen ist, wobei $\alpha \in \mathcal{D}$ und $\alpha = 1$ in eine Umgebung von supp F ist[31].

Somit ist, die bisherigen Ergebnisse zusammengefaßt, die *Faltung einer Distribution $F \in \mathcal{D}'$ mit einer Grundfunktion* $\varphi \in \mathcal{D}$ durch

$$(F * \varphi)(x) = \langle F(\xi), \varphi(x-\xi) \rangle \equiv \langle F, \varphi_x \rangle \quad , \tag{B.132}$$

mit $\varphi_x(\xi) = \varphi(x-\xi)$, erklärt.

Fassen wir noch kurz die wesentlichsten Eigenschaften dieser Faltung zusammen [BB93, Wal94]:

1. Es ist $F * \varphi \in \mathcal{C}^\infty\left(\mathbb{R}^N\right)$ und es gilt

$$D^p(F * \varphi) = T * D^p\varphi = D^p F * \varphi \quad \forall\, p \in \mathbb{N}^N \quad . \tag{B.133}$$

2. supp $(F * \varphi) \subseteq$ supp $F +$ supp φ .
3. Per definitionem gilt: $\langle F, \check{\varphi} \rangle = (F * \varphi)(0)$, mit der Notation $\check{\varphi}(x) \equiv \varphi(-x)$.
4. Es sei $\varphi, \psi \in \mathcal{D}$ und $F \in \mathcal{D}'$. Dann gilt

$$(F * \varphi) * \psi = F * (\varphi * \psi) \quad . \tag{B.134}$$

Kommen wir jetzt zur **Faltung in $\mathcal{S}'$:**
Die Faltung $\varphi_1 * \varphi_2$ zweier Funktionen $\varphi_i \in \mathcal{S}$ ist offensichtlich definiert und gehört, wie sich zeigen läßt, wieder zu $\mathcal{S}$ [BB93, Wal94][32]. Dieses legt nun nahe, die *Faltung der Distribution $f \in \mathcal{S}'$ mit der Grundfunktion* $\varphi_1 \in \mathcal{S}$ durch die Formel

$$\langle f * \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \langle f, \check{\varphi}_1 * \varphi_2 \rangle \tag{B.135}$$

zu definieren.

Wir wollen vorwegnehmend erwähnen, daß sowohl die Formel (B.132) als auch die Formel (B.135) die Ausgangbasis für die sogenannte *Regularisierung einer Distribution*, die von ihrem Wesen her eine *Approximation einer Distribution* ist, darstellt.

B.4.3 Approximationssatz für Distributionen oder die Regularisierung

Aus den Eigenschaften und Sätze zur Faltung einer Distribution mit einer Grundfunktion respektive aus der Faltung auf dem Raum der Distributionen lassen sich Aussagen über die *Approximation der Distributionen* herleiten.

Wenden wir uns zuerst den **Approximationen der Distributionen in $\mathcal{D}'$** zu. Es gilt:

Satz B.8 (Approximationssatz für Distributionen in $\mathcal{D}'$)
Zu jedem $F \in \mathcal{D}'$ gibt es eine Folge von regulären Distributionen $h_k \in \mathcal{C}^\infty$ mit

$$h_k \to F \quad \text{für } k \to \infty \quad (\text{in } \mathcal{D}') \tag{B.136}$$

Dieser Satz sagt also aus, daß $\mathcal{C}^\infty$ dicht in $\mathcal{D}'$ liegt.

Übrigens ist $\langle F * \rho_\varepsilon, \varphi \rangle = \langle F(x), \langle \rho_\varepsilon(\xi), \varphi(x+\xi) \rangle \rangle$, wobei die Funktion ρ_ε durch Gleichung (B.24) gegeben sei. Wegen $\rho_\varepsilon(x) = \rho_\varepsilon(-x)$ ist $\langle \rho_\varepsilon(\xi), \varphi(x+\xi) \rangle = \varphi_\varepsilon(x)$. Führen wir noch die Notation[33] $F_\varepsilon = F * \rho_\varepsilon$ ein, so gilt also

$$F_\varepsilon \in \mathcal{C}^\infty, \quad \langle F_\varepsilon, \varphi \rangle = \langle F, \varphi_\varepsilon \rangle \tag{B.137}$$

[31] Bezüglich Einzelheiten sei auf [Wal94] verwiesen.

[32] siehe auch nachfolgenden Abschnitt B.4.4

[33] Mit dieser Notation schreiben wir also: $\varphi_\varepsilon = \varphi * \rho_\varepsilon$.

und $F_\varepsilon \to F$ für $\varepsilon \to 0^+$.

Hieraus lassen sich weitere Aussagen über die Approximation gewinnen. Ist etwa F von der Ordnung m und gilt die Abschätzung

$$|\langle F, \varphi\rangle| \leq C\|\varphi\|_m \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D} \quad , \tag{B.138}$$

so folgt

$$|\langle (F_\varepsilon - F), \varphi\rangle| = |\langle F, (\varphi_\varepsilon - \varphi)\rangle| \leq C_1 \varepsilon \|\varphi\|_{m+1} \quad , \tag{B.139}$$

da $\|\varphi - \varphi_\varepsilon\|_m \leq \varepsilon\sqrt{N}\|\varphi\|_{m+1}$ ist. Man nennt in diesem Zusammenhang $F_\varepsilon = F * \rho_\varepsilon$ die *Regularisierung*[34] *von* F.

Eine für diese Arbeit wichtigere Konsequenz des Approximationssatzes B.8 ist aber:

Ergebnis 4
Die Delta-Funktion kann als Limes von regulären Distributionen dargestellt werden, sogar von solchen, die durch Grundfunktionen[35] *erzeugt werden. Insbesondere gilt für die Grundfunktion* ρ_ε *die Beziehung:* $\rho_\varepsilon \to \delta$ *für* $\varepsilon \to 0^+$.

Betrachten wir nun die **Regularisierung in $\mathcal{S}'$:**
Wir greifen auf die Bezeichnungen und Ergebnisse aus der Regularisierung in $\mathcal{D}'$ zurück. Insbesondere ist $\varphi_\varepsilon = \langle \rho_\varepsilon, \varphi(x+y)\rangle$ der oben eingeführte Mittelwert.

(a) Ist $\varphi \in \mathcal{S}$, so ist auch $\varphi_\varepsilon \in \mathcal{S}$, und für $0 < \varepsilon < 1$ gilt

$$\|\varphi_\varepsilon\|_m^{\mathcal{S}} \leq 2^m \, \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} \tag{B.140}$$

sowie

$$\|\varphi_\varepsilon - \varphi\|_m^{\mathcal{S}} \leq 2^m \, \sqrt{N} \, \varepsilon \, \|\varphi\|_{m+1}^{\mathcal{S}} \tag{B.141}$$

Insbesondere strebt $\varphi_\varepsilon \to \varphi$ in $\mathcal{S}$ für $\varepsilon \to 0^+$.

(b) Ist $f \in \mathcal{S}'$, so ist $f_\varepsilon = f * \rho_\varepsilon$ eine reguläre Distribution aus $\mathcal{C}^\infty$ und $\mathcal{S}'$. Es gilt auch in $\mathcal{S}$ die Gleichung

$$\langle f_\varepsilon, \varphi\rangle = \langle f, \varphi_\varepsilon\rangle \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{S} \quad . \tag{B.142}$$

Besteht für f die Abschätzung (B.117), so gibt es Konstanten C_1, C_2 mit

$$|\langle f_\varepsilon, \varphi\rangle| \leq C_1 \, \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} \quad \text{für } 0 < \varepsilon < 1 \quad , \tag{B.143}$$

$$|\langle f_\varepsilon - f, \varphi\rangle| \leq C_2 \, \varepsilon \, \|\varphi\|_m^{\mathcal{S}} \quad \text{für } 0 < \varepsilon < 1 \tag{B.144}$$

und alle $\varphi \in \mathcal{S}$. Insbesondere folgt $f_\varepsilon \to f$ in $\mathcal{S}'$.

Abschließen wollen wir diesen Abschnitt mit einer weiteren Version des Approximationssatzes für Distributionen, der uns quasi ein „Rezept“ für konkrete und praktische Approximationen liefert. Diese konkretisierte Version[36] lautet:

Satz B.9
Es sei $F \in \mathcal{D}'$, *respektive* $F \in \mathcal{S}'$, *eine Distribution und* $\{\varphi_j\}$ *eine* regularisierende Folge, *die folgendermaßen definiert ist:*

i) $\varphi_j \in \mathcal{D}\left(\mathbb{R}^N\right)$, *respektive* $\varphi_j \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right)$,
ii) $\varphi_j(x) \geq 0 \; \forall \, x \in \mathbb{R}^N \; \forall \, j \in \mathbb{N}$,

[34] Es sei darauf hingewiesen, daß in [BB93] als *Regularisierte der Distribution* T ganz allgemein die Faltung $T * \varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$ (siehe vorangegangenen Abschnitt B.4.2) bezeichnet wird, der Begriff der Regularisierten einer Distribution in der Literatur also *nicht* einheitlich ist. Auch wollen wir nocheinmal davor warnen, den Begriff der Regularisierung im Rahmen der Theorie der Distributionen mit der Regularisierung schlecht gestellter Probleme zu identifizieren. Trotz deren gemeinsamen „Ziels“, der Approximation mathematischer Entitäten, sind die konzeptionellen Unterschiede offensichtlich erheblich; so ist der Begriff der Regularisierung schlecht gestellter Probleme allgemeiner, und damit „weiter“, gefaßt als der der Distributionen. Doch werden es andereseits gerade die Gemeinsamkeiten sein, aufgrund deren die Regularisierung von Distributionen ein wertvolles Mittel bei der Regularisierung schlecht gestellter Probleme sein wird; weiteres diesbezüglich siehe Kapitel 7.2.

[35] Dieses gilt für Grundfunktionen sowohl aus $\mathcal{D}$ als auch aus $\mathcal{S}$.

[36] Ursprünglich wird dieser Satz in [BB93] im Zusammenhang mit der Approximation für Distributionen aus $\mathcal{D}'$ angegeben. Doch gilt der Satz, bei entsprechenden Modifikationen des in [BB93] angegebenen Beweises, ebenso für Distributionen aus $\mathcal{S}'$.

iii) $\int\limits_{\mathbb{R}^N} \varphi_j(x)\, dx = 1 \;\forall\; j \in \mathbb{N}$,

iv) $\varphi_j(x) = j^N \varphi(jx)\;\; j \in \mathbb{N}$, $\varphi \in \mathcal{D}\left(\mathbb{R}^N\right)$, *respektive* $\varphi \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right)$, *fest.*

Dann gilt:

1. $F_j = F * \varphi_j \in \mathcal{C}^\infty\left(\mathbb{R}^N\right)$, $\forall\; j \in \mathbb{N}$, *insbesondere gilt also* $F_j \in \mathcal{D}'\left(\mathbb{R}^N\right)$, *respektive* $F_j \in \mathcal{D}'\left(\mathbb{R}^N\right)$, $\forall\; j \in \mathbb{N}$.
2. $F = \lim\limits_{j\to\infty} F_j = \lim\limits_{j\to\infty} F * \varphi_j$ *in* $\mathcal{D}'\left(\mathbb{R}^N\right)$, *respektive in* $\mathcal{S}'\left(\mathbb{R}^N\right)$.

B.4.4 Faltung und Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ und $\mathcal{S}'$

Neben der Approximation interessiert uns im Rahmen dieser Arbeit auch noch die Integraltransformationen von Distributionen. Da die diesbezüglichen Ergebnisse ebenso von großer Bedeutung für die Theorie partieller Integralgleichungen, und auf Umwegen sogar bis in die Vielteilchentheorie hineinreichen, wollen wir zwar kurz, aber allgemein die Fourier-Transformation, und darin eingeschlossen auch die Anwendung der Fourier-Laplace Transformation, diskutieren.

B.4.4.1 Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$

Betrachten wir als Ausgangsbasis die Fourier-Transformation auf dem Raum $\mathcal{S}$, dessen besondere Bedeutung für die Fourier-Transformation der nun folgende Satz aufweißt:

Satz B.10
Der Operator der Fourier-Transformation $\mathcal{F}$ ist ein Automorphismus in $\mathcal{S}$, d.h. $\mathcal{F}$ bildet $\mathcal{S}$ linear, stetig und bijektiv auf $\mathcal{S}$ ab, und die Umkehrabbildung, die inverse Fourier-Transformation, respektive der inverse Operator, $\mathcal{F}^{-1}$ besitzt dieselben Eigenschaften.

Bezeichnen wir mit „$*$“ wieder die Faltungsoperation

$$\omega(x) = \int\limits_{\mathbb{R}^N} \varphi(x-\xi)\; \psi(\xi)\; d\xi \quad . \tag{B.145}$$

Sind jetzt φ und ψ aus $\mathcal{S}$, so ist auch, wie bereits im vorangegangenen Abschnitt B.4.2 erwähnt, $\omega = \varphi * \psi$ aus $\mathcal{S}$. Daraus folgt übrigens sofort, daß $\mathcal{S}$ mit der Operation $+$ und $*$ eine kommutative Algebra bildet [BB93, Wal94]. Desweiteren sollten wir jetzt noch, im Zusammenhang mit der Fourier-Transformation, festhalten:

(a) Durch die Abbildung $\langle \varphi, \psi \rangle \longmapsto \varphi * \psi$ wird eine stetige Abbildung von $\mathcal{S} \times \mathcal{S}$ in $\mathcal{S}$ definiert.

(b) Der Zusammenhang zwischen Faltung und Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ wird, wie auch nicht anders zu erwarten, durch den Faltungssatz beschrieben, in Formeln durch[37]

$$\mathcal{F}(\varphi * \psi) = \mathcal{F}\varphi \cdot \mathcal{F}\psi \tag{B.146}$$
$$\mathcal{F}(\varphi \cdot \psi) = (2\pi)^{-N}\, \mathcal{F}\varphi * \mathcal{F}\psi \tag{B.147}$$

ausgedrückt.

B.4.4.2 Fourier-Transformation in $\mathcal{S}'$

Führen wir nun die Fourier-Transformation in $\mathcal{S}'$ ein. Das Rezept ist uns von anderen Operationen, wie beispielsweise die Multiplikation und die Differentiation, bekannt: Man wälze die Operation auf die Grundfunktion ab.

[37] Zur verwendeten Form der Fourier-Transformation siehe Gleichung B.149.

Definition B.18
Die Fouriertransformiert $\mathcal{F}f$ einer temperierten Distribution $f \in \mathcal{S}'\left(\mathbb{R}^N\right)$ ist durch

$$\langle \mathcal{F}f, \varphi \rangle := \langle f, \mathcal{F}\varphi \rangle \quad \forall\, \varphi \in \mathcal{S}\left(\mathbb{R}^N\right) \tag{B.148}$$

definiert.

Dieses Funktional ist auf $\mathcal{S}$ erklärt, linear und stetig, da aus $\varphi_k \to 0$ auch $\mathcal{F}\varphi_k \to 0$ und damit $\langle f, \mathcal{F}\varphi_k \rangle \to 0$ folgt, also eine temperierte Distribution. Ferner stimmt diese Definition für $f \in L^1$ mit der durch

$$(\mathcal{F}f)(\xi) = \tilde{f}(\xi) = \int f(x)\, e^{-i\xi x}\, dx \tag{B.149}$$

gegebenen klassischen Definition überein, da

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{f}(\xi), \varphi(\xi) \right\rangle &= \int \varphi(\xi) \int e^{-i\xi x}\, f(x)\, dx\, d\xi \\ &= \langle f(x), \tilde{\varphi}(x) \rangle \end{aligned}$$

ist[38].

Es gilt der wichtige Satz:

Satz B.11
Die Fourier-Transformation $\mathcal{F} : f \longmapsto \tilde{f}$ ist ein Automorphismus in $\mathcal{S}'$, d.h. $\mathcal{F}$ und $\mathcal{F}^{-1}$ sind lineare, stetige und bijektive Abbildungen von $\mathcal{S}'$ auf $\mathcal{S}'$.

Die inverse Fourier-Transformation ist nun durch

$$\left\langle \mathcal{F}^{-1}f, \varphi \right\rangle = \left\langle f, \mathcal{F}^{-1}\varphi \right\rangle \quad (f \in \mathcal{S}',\ \varphi \in \mathcal{S}) \tag{B.150}$$

gegeben. Setzt man

$$f(-x) = f^*(x) \quad \text{d.h. also} \quad \langle f^*, \varphi \rangle = \langle f(x), \varphi(-x) \rangle \quad ,$$

so kann man die inverse Fourier-Transformation auch durch

$$\mathcal{F}^{-1}f = (2\pi)^{-N}\, \mathcal{F}f^* \tag{B.151}$$

$$\text{oder} \quad \mathcal{F}\mathcal{F}f = (2\pi)^{-N}\, f^* \tag{B.152}$$

charakterisieren.

Daran anschließend wollen wir noch ein paar Eigenschaften bzw. Rechenregeln angeben.

(a) $\mathcal{F}\left(D_x^p f\right)(\xi) = (i\xi)^p\, (\mathcal{F}f)(\xi)$,

(b) $D_\xi^p (\mathcal{F}f)(\xi) = \mathcal{F}(-i\xi)^p f(\xi)$,

(c) Ist $f \in \mathcal{S}'$, so gilt in Analogie zu (B.146)

$$\mathcal{F}(f * \rho_\varepsilon) = \mathcal{F}f \cdot \mathcal{F}\rho_\varepsilon \quad , \tag{B.153}$$

kurz $\tilde{f}_\varepsilon = \tilde{f} \cdot \tilde{\rho}_\varepsilon$.

Bemerkungen: Sei

$$P(D) = \sum_{|p| \le m} a_p D^p \tag{B.154}$$

ein partieller Differenzialoperator mit konstanten Koeffizienten. Aus der obigen Formel (a) folgt dann:

$$\mathcal{F}\left[P(D)f\right](\xi) = P(-i\xi)\, \tilde{f}(\xi) \quad . \tag{B.155}$$

Diese Relation deutet an, wie wichtig die Theorie der Fourier-Transformation von Distributionen bei der Untersuchung partieller Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten ist. Setzen wir in der Rechenregel (a) beispielsweise $f = \delta$, so erhalten wir

[38] Das Integral ist absolut konvergent, man darf also zuerst nach ξ und dann nach x integrieren; es gilt der Satz von FUBINI.

$$\mathcal{F}\left(D_x^p\right)(\xi) = (i\xi)^p \; (\mathcal{F}\delta)(\xi) = (i\xi)^p \tag{B.156}$$

und setzen wir in (b) $f = 1$, so erhalten wir bekanntlich

$$\mathcal{F}\left((-ix)^p\right)(\xi) = (2\pi)^N \, D_\xi^p \delta(\xi) \quad . \tag{B.157}$$

Die Theorie der Fourier-Transformation in $\mathcal{S}$ und $\mathcal{S}'$ läßt sich folgendermaßen schematisch zusammenfassen[39]:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{S}'\left(\mathbb{R}_x^N\right) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & \mathcal{S}'\left(\mathbb{R}_\xi^N\right) \\ \uparrow & & \uparrow \\ L^2\left(\mathbb{R}_x^N\right) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & L^2\left(\mathbb{R}_\xi^N\right) \quad \text{(unitär)} \\ \uparrow & & \uparrow \\ \mathcal{S}\left(\mathbb{R}_x^N\right) & \xrightarrow{\mathcal{F}} & \mathcal{S}\left(\mathbb{R}_\xi^N\right) \end{array}$$

B.4.4.3 Fourier-Transformation in $\mathcal{D}$

Ist $\varphi \in \mathcal{D}$, so ist wegen $\varphi \in \mathcal{S}$ auch $\tilde{\varphi} = \mathcal{F}\varphi \in \mathcal{S}$. Wir können jedoch viel mehr beweisen. Ist $\varphi \in \mathcal{D}$ und supp $\varphi \in \bar{B}_R = \left\{x \in \mathbb{R}^N \mid \; |x| \le R\right\}$, so ist

$$\tilde{f}(\xi) = \int\limits_{B_R} \varphi(x) \; e^{-i\xi x} \, dx \quad . \tag{B.158}$$

Dieses Integral existiert auch, wenn man für ξ beliebige Werte aus $\mathbb{C}^N$ zuläßt, und es stellt eine ganze holomorphe Funktion dar:

$$\tilde{\varphi}(\zeta) = \int\limits_{B_R} \varphi(x) \; e^{-i\zeta x} \, dx \quad \text{für } \zeta \in \mathbb{C}^N \tag{B.159}$$

mit $\zeta x = \zeta_1 x_1 + \ldots + \zeta_N x_N$. Man sieht sofort, daß $\tilde{\varphi}(\zeta)$ stetig differenzierbar im $\mathbb{C}^N$ und

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(\zeta)}{\partial \zeta_\nu} = -\int\limits_{B_R} i x_\nu \; \varphi(x) \; e^{-i\zeta x} \, dx \tag{B.160}$$

ist.

Man nennt übrigens eine Fourier-Transformation, bei welcher wie in (B.158) die Variable ξ auch komplexwertig sein darf, *Fourier-Laplace Transformation.* Es ist also $\tilde{\varphi}(\zeta)$ die Fourier-Laplace Transformierte von $\varphi \in \mathcal{D}$.

Satz B.12 (von PALYE-WIENER)
Die Fourier-Laplace Transformierte (B.158) bildet den Raum aller $\varphi \in \mathcal{D}$ mit supp $\varphi \subset \bar{B}_R$ ($R > 0$) bijektiv ab auf den Raum aller ganzen holomorphen Funktionen $\tilde{\varphi}(\zeta)$ mit der Eigenschaft, daß zu jedem Multi-Index p ein $C_p > 0$ mit

$$|\zeta^p \tilde{\varphi}(\zeta)| \le C_p \; e^{R|\eta|} \quad (\zeta = \xi + i\eta) \tag{B.161}$$

existiert. Dabei bezeichnet $|\eta|$ die Euklid-Norm von $|\eta|$.

Hat also eine ganze holomorphe Funktion $\tilde{\varphi}(\zeta)$ die Eigenschaft (B.161), so ist $\tilde{\varphi}(\xi) \in \mathcal{S}$ und $\varphi \in \mathcal{F}^{-1}\tilde{\varphi} \in \mathcal{D}$ mit supp $\subset \bar{B}_R$.

[39] Die Pfeile in der Vertikalen mögen stetige (identische) Einbettung bedeuten.

B.4.4.4 Fourier-Transformation in $\mathcal{E}'$

Für reguläre Distributionen f aus L^1 läßt sich die Fourier-Transformation in der Form

$$\tilde{f}(\xi) = \left\langle f(x), e^{-i\xi x} \right\rangle$$

schreiben. Es ist naheliegend zu vermuten, daß diese Formel immer dann gilt, wenn sie sinnvoll ist, d.h. wenn $\left\langle f(x), e^{-i\xi x} \right\rangle$ definiert ist. Das letztere ist der Fall, wenn $f \in \mathcal{E}'$, dem Raum der Distributionen mit kompakten Träger, dieser ist wiederum der (topologische) Dualraum des Grundfunktionenraums $\mathcal{E}$, ist. Noch mehr, es ist auch zulässig, daß ξ komplexe Werte annimmt. Es gilt einmal der Satz:

Satz B.13
Für $f \in \mathcal{E}'$ ist durch

$$\tilde{f}(\xi) = \left\langle f(x), e^{-i\xi x} \right\rangle \tag{B.162}$$

eine ganze holomorphe Funktion definiert, und es ist $\mathcal{F} f = \tilde{f}$.

Die Analogie zu der Fourier-Transformation in $\mathcal{D}$ ist offensichtlich, so daß die Existenz einer Version des Satzes von PALYE-WIENER B.12 für die Fourier-Transformation in $\mathcal{E}'$ nicht verwundert:

Satz B.14
Der Raum der Distributionen $f \in \mathcal{E}'$ mit supp $f \in \overline{B}_R$ ($R > 0$) wird durch die Fourier-Transformation bijektiv auf den Raum aller ganzen holomorphen Funktionen $\tilde{f}(\zeta)$ abgebildet, welche einer Abschätzung

$$|\tilde{f}(\zeta)| \leq C\ (1+|\zeta|)^m\ e^{R|\eta|} \quad (\zeta = \xi + i\eta) \tag{B.163}$$

genügen[40].

B.4.4.5 Der Faltungssatz für Distributionen

Sei nun f_1 eine (temperierte) Distribution mit kompakten Träger, $f_1 \in \mathcal{E}'$ und sei $f_2 \in \mathcal{S}'$, so ist $\mathcal{F} f_1 \cdot \mathcal{F} f_2$ gemäß des Satzes B.13 eine wohldefinierte (temperierte) Distribution. Also ist $\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F} f_1 \cdot \mathcal{F} f_2)$ in $\mathcal{S}'$ wohldefiniert. Aus der Kompaktheit von supp f_1 folgt jetzt, daß $f_1 * f_2$, das Faltungsprodukt von f_1 und f_2, in $\mathcal{D}'$ wohldefiniert ist [BB93, Wal94]. Der Faltungssatz sagt nun die Übereinstimmung von $f_1 * f_2$ mit $\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F} f_1 \cdot \mathcal{F} f_2)$ aus[41]:

Satz B.15 (Faltungssatz)
Es sei $f_1 \in \mathcal{D}'$, supp f_1 kompakt, in anderen Worten sei $f_1 \in \mathcal{E}'$, und $f_2 \in \mathcal{S}'$. Dann ist zum einen $f_1 * f_2$ wohldefiniert und es gilt $f_1 * f_2 \in \mathcal{S}'$ und es gilt zum anderen

$$\mathcal{F}(f_1 * f_2) = (2\pi)^N\ \mathcal{F} f_1 \cdot \mathcal{F} f_2 = (2\pi)^N\ \tilde{f}_1 \cdot \tilde{f}_2 \quad . \tag{B.164}$$

[40] C und m dürfen von f abhängen.

[41] Dieses ist auch ein überraschendes Ergebnis der Theorie der Distributionen: Obwohl das Produkt zweier Distributionen nicht sinnvoll definiert werden kann, existiert aber unter bestimmten (restriktiven) Bedingungen die Faltung zweier Distributionen und bildet wieder eine Distribution.

Anhang C

Die Kramers-Kronig Relation im Mellin-Raum

In diesem Anhang wollen wir das „universelle“ Verhältnis der Mellintransformierten, das wir im Abschnitt 2.4.3 für die phänomenologische Integralgleichung (2.47) abgeleitet haben, allgemein für bestimmte Funktionen beweisen, die den Kramers-Kronig Relationen genügen.

Formulieren wir zuerst den

Satz C.1
Es sei $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ eine in der oberen komplexen Halbebene, einschließlich der reellen Achse, analytische Funktion, deren Realteil ε_1, der eine gerade Funktion sei, und deren Imaginärteil ε_2, der eine ungerade Funktion sei, den Kramers-Kronig Relationen genügen mögen. Desweiteren seien ε_1 und ε_2 als Mellintransformierte darstellbar, d.h. deren Mellintransformierten $\tilde{\varepsilon}_1$ und $\tilde{\varepsilon}_2$ mögen zumindest im Sinne des Cauchyschen Hauptwerts existieren. Dann gelten für die Mellintransformierten die Beziehungen

$$\tilde{\varepsilon}_1(s) = \tilde{\varepsilon}_2(s)\,\cot\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \quad (0 < \mathfrak{Re}\, s < 2) \tag{C.1}$$

$$\tilde{\varepsilon}_2(s) = \tilde{\varepsilon}_1(s)\,\tan\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \quad (0 < \mathfrak{Re}\, s < 1) \tag{C.2}$$

Kommen wir nun zu dem **Beweis:**
Die Funktion $\varepsilon(z)$ sei also in der oberen komplexen Halbebene - einschließlich der reellen z-Achse - eine analytische Funktion[1]. Wir wissen dann, daß sich aus der Cauchyschen Integralformel die Kramers-Kronig Relationen für den Realteil $\mathfrak{Re}\,\varepsilon(z) = \varepsilon_1(z)$ und den Imaginärteil $\mathfrak{Im}\,\varepsilon(z) = \varepsilon_2(z)$ ableiten lassen[2]:

$$\varepsilon_1(x) = \frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon_2(\omega)}{\omega - x}\,d\omega \tag{C.3}$$

$$\varepsilon_2(x) = -\frac{1}{\pi}\,\text{V.P.}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\omega - x}\,d\omega \quad , \tag{C.4}$$

mit $x, \omega \in \mathbb{R}$, wobei die Integrale als Cauchysche Hauptwertintegrale längs der reellen ω-Achse zu verstehen sind. Die obigen Kramers-Kronig Relationen können wir, da nach Voraussetzung ε_1 eine gerade und ε_2 eine

[1] siehe auch die Bemerkung am Ende dieses Anhanges

[2] siehe [AM76, Jac75, Roo69]

ungerade Funktion ist, bekanntlich noch in die Form

$$\varepsilon_1(x) = \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{\omega\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega^2 - x^2}\,d\omega \tag{C.5}$$

$$\text{und} \qquad \varepsilon_2(x) = -\frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{x\,\varepsilon_1(\omega)}{\omega^2 - x^2}\,d\omega \tag{C.6}$$

bringen[3].

Die nächste Voraussetzung des Satzes ist: Die Funktionen ε_1 und ε_2, und somit auch die Funktion ε, seien als Mellintransformierte darstellbar[4], d.h. es gelte

$$\varepsilon_1(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\tilde{\varepsilon}_1(s)\,ds \tag{C.7}$$

$$\text{und} \qquad \varepsilon_2(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\tilde{\varepsilon}_2(s)\,ds \quad , \tag{C.8}$$

und somit auch

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s}\,\tilde{\varepsilon}(s)\,ds \quad . \tag{C.9}$$

Hierbei sind $\tilde{\varepsilon}_1$ und $\tilde{\varepsilon}_2$ respektive $\tilde{\varepsilon}$ die Mellintransformierten der Funktionen ε_1 und ε_2 respektive ε. Aus den Sätzen zur Darstellbarkeit einer Funktion als Mellintransformierte wissen wir, daß für diese dann zumindest

$$\tilde{\varepsilon}_{1,2}(s) = \text{V.P.}\int_0^\infty x^{s-1}\,\varepsilon_{1,2}(x)\,dx \tag{C.10}$$

gilt[5].

Als erstes wollen wir jetzt die Mellintransformierte $\tilde{\varepsilon}_2$ des Imaginärteils ε_2 berechnen. Die Kramers-Kronig Relation (C.6), die den Imaginär- durch den Realteil darstellt, können wir noch zu

$$\varepsilon_2(x) = -\frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{x\,\varepsilon_1(\omega)}{(\omega+x)(\omega-x)}\,d\omega \tag{C.11}$$

umschreiben, womit die Mellintransformierte $\tilde{\varepsilon}_2$ durch

$$\begin{aligned}
\tilde{\varepsilon}_2(s) &= \text{V.P.}\int_0^\infty x^{s-1}\,\varepsilon_2(x)\,dx \\
&= \text{V.P.}\int_0^\infty x^{s-1}\left[\left(-\frac{2}{\pi}\right)\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{x\,\varepsilon_1(\omega)}{(\omega+x)(\omega-x)}\,d\omega\right]\,dx \\
&= \text{V.P.}\int_0^\infty \left[\left(-\frac{2}{\pi}\right)\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{(\omega+x)(\omega-x)}\,d\omega\right]\,\frac{dx}{x}
\end{aligned} \tag{C.12}$$

[3] siehe Abschnitt 2.1

[4] Zu der Darstellbarkeit einer Funktion als Fourier-Laplace- respektive Mellintransformierte siehe [Doe71].

[5] Das bedeutet, daß die Mellin-Transformation (C.10) zumindest im Sinne des Cauchyschen Hauptwerts existiert.

gegeben ist.

Die Integrationsreihenfolge in (C.12) dürfen wir jetzt nicht einfach vertauschen, Hauptwertintegrale erfüllen die Voraussetzungen des Satzes von FUBINI nicht, sondern wir müssen hier die Formel von POINCÁRE-BERTRAND[6],

$$\int\limits_L \frac{dt}{t-t_0} \int\limits_L \frac{\varphi(t,t_1)\,dt_1}{t-t_1} = -\pi^2\,\varphi(t_0,t_0) + \int\limits_L dt_1 \int\limits_L \frac{\varphi(t,t_1)\,dt}{(t-t_0)(t_1-t)} \quad , \tag{C.13}$$

anwenden. Hier ist also: $x \hat{=} t$, $\omega \hat{=} t_1$, $t_0 = 0$ und

$$\varphi(t,t_1) \hat{=} \frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{\omega+x} \quad .$$

Als nächstes müssen wir die Limites $\omega \to 0$ und $x \to 0$, da wir in der Formel (C.13) von POINCÁRE-BERTRAND den Wert $\varphi(t_0,t_0)$ benötigen, betrachten. Es ist zum einen, was wir unmittelbar ablesen können

$$\lim_{\omega\to 0}\left(\lim_{x\to 0}\frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{\omega+x}\right) = 0 \quad , \tag{C.14}$$

und zum anderen

$$\begin{aligned}\lim_{x\to 0}\left(\lim_{\omega\to 0}\frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{\omega+x}\right) &= \lim_{x\to 0}\frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(0)}{x} \\ &= \varepsilon_1(0)\lim_{x\to 0} x^s = 0 \quad ,\end{aligned} \tag{C.15}$$

solange $\mathfrak{Re}\, s > 0$ ist[7]. Für die Mellintransformierte erhalten wir somit:

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_2(s) &= \text{V.P.}\int\limits_0^\infty \frac{dx}{x}\left[\left(-\frac{2}{\pi}\right)\text{V.P.}\int\limits_0^\infty \frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{\omega+x}\,\frac{1}{\omega-x}\,d\omega\right] \\ &= \left(-\frac{2}{\pi}\right)\text{V.P.}\int\limits_0^\infty d\omega\,\text{V.P.}\int\limits_0^\infty dx\,\frac{x^{s+1}\,\varepsilon_1(\omega)}{(\omega+x)}\,\frac{1}{x(\omega-x)} \\ &= \left(-\frac{2}{\pi}\right)\text{V.P.}\int\limits_0^\infty d\omega\,\varepsilon_1(\omega)\text{V.P.}\int\limits_0^\infty dx\,x^s\,\frac{1}{(\omega+x)(\omega-x)} \quad .\end{aligned} \tag{C.16}$$

Die Mellin-Transformation in (C.16), die Integration über die Variable x, ist nun wohlbekannt[8] und wir erhalten:

$$\text{V.P.}\int\limits_0^\infty dx\,x^s\,\frac{1}{(\omega+x)(\omega-x)} = \frac{\pi}{2}\,\omega^{s-1}\left[\frac{1}{\sin(\pi(s+1))} + \cot(\pi(s+1))\right] \;(0 < \mathfrak{Re}\, s < 1)\,, \tag{C.17}$$

also:

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_2(s) &= \left(-\frac{2}{\pi}\right)\text{V.P.}\int\limits_0^\infty d\omega\,\varepsilon_1(\omega)\frac{\pi}{2}\,\omega^{s-1}\left[\frac{1}{\sin(\pi(s+1))} + \cot(\pi(s+1))\right] \\ &= -\left[\frac{1}{\sin(\pi(s+1))} + \cot(\pi(s+1))\right]\,\text{V.P.}\int\limits_0^\infty d\omega\,\varepsilon_1(\omega)\omega^{s-1} \\ &= -\tilde{\varepsilon}_1(s)\left[\frac{1}{\sin(\pi(s+1))} + \cot(\pi(s+1))\right] \quad .\end{aligned} \tag{C.18}$$

[6] siehe beispielsweise [Mus65, Smi88]

[7] Wir haben bei den Limites die Analytizität der Funktion ε_1 auf der reellen Achse ausgenutzt.

[8] Für Details siehe [Doe71, Tit67, EMOT53]; tatsächlich existiert das Integral nur im Sinne des Cauchyschen Hauptwertes.

Bezüglich der trigonometrischen Funktionen gilt bekanntlich:

$$\sin(\pi+x) = -\sin(x) \quad , \tag{C.19}$$

$$\cot(\pi+x) = \cot(x) \tag{C.20}$$

$$\text{und} \qquad \tan\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1-\cos x}{\sin x} \quad . \tag{C.21}$$

Berücksichtigen wir diese Eigenschaften, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_2(s) &= \tilde{\varepsilon}_1(s)\left[\frac{1}{\sin(\pi s)} - \cot(\pi s)\right] \\ &= \frac{\tilde{\varepsilon}_1(s)}{\sin(\pi s)}\left[1-\cos(\pi s)\right] \quad , \end{aligned}$$

und mit (C.21) erhalten wir die zu zeigende Beziehung (C.2):

$$\tilde{\varepsilon}_2(s) = \tilde{\varepsilon}_1(s)\ \tan\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \quad (0 < \Re\mathrm{e}\, s < 1) \quad . \tag{C.22}$$

Analog berechnen wir nun die Mellintransformierte $\tilde{\varepsilon}_1$ des Realteils ε_1: Mit der entsprechenden Kramers-Kronig Relation (C.5),

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(x) &= \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{\omega\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega^2-x^2}\,d\omega \\ &= \frac{2}{\pi}\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{\omega\,\varepsilon_2(\omega)}{(\omega+x)(\omega-x)}\,d\omega \quad , \end{aligned}$$

bestimmt sich diese über:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_1(s) &= \text{V.P.}\int_0^\infty x^{s-1}\varepsilon_1(x)\,dx \\ &= \text{V.P.}\int_0^\infty \frac{dx}{x}\,\frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{\omega\,x^s\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega+x}\,\frac{1}{(\omega-x)}\,d\omega \quad . \end{aligned} \tag{C.23}$$

Für die Formel von POINCÁRE-BERTRAND, die wir natürlich hier ebenfalls anwenden müssen, gilt analog: $x \hat{=} t$, $\omega \hat{=} t_1$, $t_0 = 0$ und

$$\varphi(t,t_1) \mathrel{\hat{=}} \frac{\omega\,x^s\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega+x} \quad .$$

Betrachten wir die wiederum benötigten Limites:

$$\begin{aligned} \lim_{\omega\to 0}\left(\lim_{x\to 0}\frac{\omega\,x^s\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega+x}\right) &= \lim_{\omega\to 0}\left(\omega\,\varepsilon_2(\omega)\,\lim_{x\to 0}\frac{x^s}{\omega+x}\right) \\ &= 0 \quad \text{für} \quad \Re\mathrm{e}\, s > 0 \end{aligned} \tag{C.24}$$

$$\text{und} \qquad \lim_{x\to 0}\left(\lim_{\omega\to 0}\frac{\omega\,x^s\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega+x}\right) = 0 \quad . \tag{C.25}$$

Die Anwendung der POINCÁRE-BERTRANDschen Formel liefert uns jetzt den Ausdruck

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_1(s) &= \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{dx}{x}\,\text{V.P.}\int_0^\infty \frac{\omega\, x^s\,\varepsilon_2(\omega)}{\omega+x}\,\frac{1}{(\omega-x)}\,d\omega \\ &= \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty d\omega\,\omega\,\varepsilon_2(\omega)\,\text{V.P.}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{s-1}}{(\omega+x)(\omega-x)} \quad . \end{aligned} \tag{C.26}$$

Die Mellin-Transformation in (C.26), das Integral über die Variable x, ist bekannt[9] und wir erhalten als Zwischenergebnis:

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_1(s) &= \frac{2}{\pi}\,\text{V.P.}\int_0^\infty d\omega\,\omega\,\varepsilon_2(\omega)\,\frac{\pi}{2\omega}\left[\omega^{s-1}\frac{1}{\sin(\pi s)}+\omega^{s-1}\cot(\pi s)\right] \\ &= \text{V.P.}\int_0^\infty d\omega\,\varepsilon_2(\omega)\,\omega^{s-1}\left[\frac{1}{\sin(\pi s)}+\cot(\pi s)\right] \quad , \\ \text{also}\qquad \tilde{\varepsilon}_1(s) &= \tilde{\varepsilon}_2(s)\,\frac{1+\cos(\pi s)}{\sin(\pi s)} \quad \text{mit} \quad 0<\Re\mathfrak{e}\,s<2 \quad . \end{aligned} \tag{C.27}$$

Es gilt nun

$$\cot\left(\frac{x}{2}\right)=\frac{1+\cos x}{\sin x} \quad , \tag{C.28}$$

womit wir letztlich bei der zu zeigenden Beziehung (C.1) angelangt sind:

$$\tilde{\varepsilon}_1(s)=\tilde{\varepsilon}_2(s)\,\cot\left(\frac{1}{2}\pi s\right) \quad (0<\Re\mathfrak{e}\,s<2) \quad . \tag{C.29}$$

Wir haben also den Satz C.1 bewiesen. □

Abschließend wollen wir noch bemerken: Die Analytizitätseigenschaften der Funktionen ε_1 und ε_2 - respektive der Funktion $\varepsilon=\varepsilon_1+i\varepsilon_2$ - und somit auch die Kramers-Kronig Relationen, sind die mathematische Manifestation des Kausalitätsprinzips[10]. Da die Beziehungen (C.1) und (C.2) des Satzes C.1 als die in dem Mellin-Raum transformierten Kramers-Kronig Relationen interpretiert werden können, sind diese ebenso als eine Folge und als Ausdruck der Kausalität zu betrachten; die Kausalität äußert sich also in dem „universellen“ Verhältnis (C.1) respektive (C.2) der Mellintransformierten $\tilde{\varepsilon}_1$ und $\tilde{\varepsilon}_2$.

[9] Für Details sei wiederum auf [Doe71, Tit67, EMOT53] verwiesen; auch hier existiert das Integral nur als Cauchyscher Hauptwert.

[10] Das Kausalitätsprinzip ist im Zusammenhang mit dem Determinismus der Möglichkeiten, d.h. daß die Scheidung, was möglich ist und was unmöglich ist mit Notwendigkeit, wobei es sich bei dieser immer um eine hypotetische, keine kategorische, handelt, ausgesagt werden kann, zu denken. So drückt Kausalität einen Konnex zwischen einem steuerbaren Faktor und seinen Effekt aus; siehe dazu beispielsweise [Haa83, Kan95].

Anhang D

Berechnung der Schranken der integrierten Dichtefunktion

Neben der *direkten* numerischen Behandlung der Integralgleichung (2.13) im Sinne einer Regularisierung, eine andere direkte Behandlung wäre unsinnig, die zu einer approximativen Lösung der Gleichung führen würde, können wir diese auch noch auf einer alternativen Art und Weise numerisch behandeln, bei der wir letztendlich *indirekte* Informationen über die eigentlich gesuchte Dichtefunktion p erhalten werden. Die nun im folgenden kurz vorgestellte Methode ist zum ersten Mal von URBANEK und TAN auf die Integralgleichung (2.13) angewandt worden [UT95].

Basierend auf dem *Markov-Krein Theorem* aus der *Theorie der Tchebycheff-Systeme* [KS66] können *rigorose obere und untere Schranken* I^+ und I^- für die *integrierte Verteilungsdichte* $I(\tau_0)$ der *exakten* Lösung p_T, die durch die Gleichung

$$I(\tau_0) = \int_0^\infty \Theta(\tau - \tau_0)\, p_T(\tau)\, d\tau = \int_{\tau_0}^\infty p_T(\tau)\, d\tau \tag{D.1}$$

definiert ist, also die zur Verteilungsfunktion $P(\tau_0)$ Komplementäre[1], berechnet werden. Die Funktion $\Theta(\tau - \tau_0)$ ist die Theta-Funktion[2]:

$$\Theta(\tau - \tau_0) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad \tau > \tau_0 \\ 0 & \text{für} \quad \tau < \tau_0 \end{cases} \quad . \tag{D.2}$$

Offensichtlich gilt

$$I(0) = \int_0^\infty p_T(\tau)\, d\tau = 1 \tag{D.3}$$

und aufgrund der Schrankeneigenschaften

$$I^-(\tau_0) \le I(\tau_0) \le I^+(\tau_0) \quad \forall\, \tau_0 \in \mathbb{R}^+ \quad . \tag{D.4}$$

In [UT95] wurde konkret die Integralgleichung des Realteils (2.17)

$$E_1(\omega) = \int_0^\infty p(\tau)\, \frac{1}{(\omega\tau)^2 + 1}\, d\tau \quad , \tag{D.5}$$

[1] siehe [Str63a]

[2] Die Theta-Funktion ist, ebenso wie die Delta-Funktion, eine Distribution; siehe [BB93, Lig66, Wal94]

zur Berechnung der rigorosen Schranken herangezogen[3], doch eignet sich die Integralgleichung des Imaginärteils, Gleichung (2.18) auf Seite 10, grundsätzlich ebenso[4]. Die Schranken der integrierten Verteilungsdichte $I(\tau_0)$ (D.1) werden nun, am Beispiel der Realteilgleichung demonstriert, wie folgt bestimmt:

1. Es wird das Integral
$$I(\tau_0) = \int_0^\infty \Theta(\tau - \tau_0)\, p(\tau)\, d\tau \tag{D.6}$$
unter den m-Nebenbedingungen[5]
$$E_1(\omega_i) = \int_0^\infty p(\tau)\, \frac{1}{(\omega_i\tau)^2 + 1}\, d\tau \tag{D.7}$$
und der Nebenbedingung
$$p(\tau) \geq 0 \quad \forall\, \tau \tag{D.8}$$
minimiert. Nebenbedingungen, die in Form einer Ungleichung wie in (D.8) ausgedrückt werden, führen auf die Methode der *verallgemeinerten Lagrange-Multiplikatoren*, die detailiert beispielsweis in [KS66] diskutiert wird. Für eine Funktion, die sich nicht durch ein Polynom, dessen Ordnung kleiner als m ist, darstellen läßt, wie im Fall der Theta-Distribution, bei der es sich bekanntlich um keine reguläre Distribution handelt, und somit sich nicht durch eine Potenzreihe bzw. ein Polynom darstellen läßt[6], erhält man eine extremalisierende Dichtefunktion der Form
$$p^{(\pm)}(\tau) = \sum_i W_i^{(\pm)}\, \delta(\tau - \tau_i^{(\pm)}) \quad , \tag{D.9}$$
wobei die Anzahl der Stützstellen τ_i endlich sei[7]. Dabei sind die Gewichte $W_i^{(\pm)}$, die zur Stützstelle τ_i gehören, nicht-negativ.

2. Anschließend setzen wir die extremalisierende Dichtefunktion $p^{(\pm)}$ in (D.6) ein und erhalten so die gesuchten oberen und unteren Schranke
$$I^{(\pm)} = \sum_i W_i^{(\pm)}\, \Theta(\tau_i^{(\pm)} - \tau_0) \quad . \tag{D.10}$$
Hier bezeichne $I^+(\tau)$ die obere und $I^-(\tau)$ die untere Schranke der integrierten Dichtefunktion $I(\tau)$.

3. Nur wenn die obere und die untere Schranke identisch sind, erhalten wir (offensichtlich) die Dichtefunktion durch die Berechnung der Ableitung
$$p(\tau) = -\frac{dI(\tau)}{d\tau} \quad . \tag{D.11}$$
Ansonsten können wir auf der Basis der Schranken nur indirekt auf die Dichtefunktion schließen[8].

[3] Der Grund für eine Beschränkung auf den Realteil oder den Imaginärteil bei dieser Methode ist der, daß die zur Berechnung der Schranken benutzten numerische Algorithmen nur für reellwertige Variablen und Funktionen gültig sind. Das Markov-Krein Theorem gilt aber ebenso für die gesamte, komplexwertige Integralgleichung.

[4] Im Abschnitt 9.5.2 haben wir, wie dort erwähnt, sowohl die Integralgleichung des Real- als auch die des Imaginärteils zur Berechnung der Schranken verwendet.

[5] Mit $E_1(\omega_i)$ sei der i-te Datenpunkt aus der Menge der m-Datenpunkte bezeichnet.

[6] siehe [BB93, Wal94] und hier Anhang B.3

[7] Wir wollen betonen, daß die extremalisierende Dichtefunktion selber keine Schrankeneigenschaften bezüglich der gesuchten Dichtefunktion besitzt; siehe [KS66, GP73].

[8] Die indirekten Schließung auf die Dichtefunktion über die Schranken ist in Anbetracht der exponentiellen Schlechtgestelltheit der Integralgleichung kein wirklicher Nachteil des Verfahrens.

Für die praktische numerische Berechnung wurde die „linear programming“ Methode von PLATZ und GORDON benutzt [GP73, UT95]. Desweiteren werden bei der Berechnung der Schranken die Fehler respektive das Fehlerniveau der Funktion E_1 berücksichtigt.

Die Schranken können theoretisch als zusätzliche Informationen bei der Regularisierung der Integralgleichung (2.13) dienen, beispielsweise in Form des in den Abschnitten 8.3 und 9.5.2 dargelegten *Konsistenzkriterium zur Wahl des Regularisierungsparameters* γ.

Anhang E

Zum Grad der Schlechtgestelltheit von Entfaltungsproblemen

In diesem Anhang wollen wir uns einem Korollar über den Grad der Schlechtgestelltheit von Entfaltungsproblemen, die mit Hilfe der Fourier-Laplace- bzw. der Mellin-Transformation[1] (formal) gelöst werden können, zuwenden. Wir wollen darauf hinweisen, daß wir den Inhalt dieses Korollars innerhalb dieser Arbeit implizit bereits erwähnt haben, doch soll es aufgrund seiner theoretischen und praktischen Bedeutung in diesen Anhang explizit formuliert werden.

Korollar E.1 (Über den Grad der Schlechtgestelltheit von Entfaltungsproblemen)
Das Entfaltungsproblem

$$G(t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(t-\tau)\, F(\tau)\, d\tau \quad t,\, \tau \in \mathbb{R} \tag{E.1}$$

sei unter Anwendung der (komplexen) Fourier-Laplace Transformation, das Entfaltungsproblem

$$g(z) = \int_{0}^{\infty} k\left(\frac{z}{\zeta}\right)\, f(\zeta)\, \frac{d\zeta}{\zeta} \quad z,\, \zeta \in \mathbb{R} \tag{E.2}$$

unter Anwendung der Mellin-Transformation lösbar. Gilt für den Integralkern der Integralgleichung (E.1) $K \in \mathfrak{A}_{II}$, so ist dieses Entfaltungsproblem (asymptotisch) exponentiell schlecht gestellt*, und gilt analog für den Integralkern der Integralgleichung (E.2) $k \in \mathfrak{B}$, so ist dieses Entfaltungsproblem ebenso* (asymptotisch) exponentiell schlecht gestellt.

Wir wollen an dieser Stellen bemerken, daß in der Mellinschen Faltungsgleichung der Form (E.2) die Darstellung

$$g(z) = \int_{0}^{\infty} k\left(z\bar{\zeta}\right)\, f(\bar{\zeta})\, \frac{d\bar{\zeta}}{\zeta} \quad z,\, \bar{\zeta} \in \mathbb{R}$$

subsumiert zu denken ist.

Der **Beweis** des Korollars E.1 sieht nun folgendermaßen aus:
Die Klassifizierung schlechtgestellter Probleme haben wir im Abschnitt 4.3 dargestellt und dort erwähnt,

[1] Es sei zum Begriff „Fourier-Laplace Transformation“ an die Fußnote 7 auf Seite 11 erinnert.

daß der Grad der Schlechtgestelltheit von Entfaltungsproblemen an der Integraltransformierten des Faltungskerns (unmittelbar) ablesbar ist. Wir müssen uns somit den Transformierten der Integralkerne zuwenden, und aus der Theorie der Fourier-Laplace Transformation[2] folgt diesbezüglich jetzt:
Gilt $K \in \mathfrak{A}_{II}$, d.h. die Funktion K ist in einem Horizontalstreifen $-\eta_1 \leq \eta \leq \eta_2$, mit $t \to t = \xi + i\eta$, der, entsprechend der Integralgleichung (E.1), hier also die reelle t-Achse einschließen möge, eine analytischen Funktion, die dort einer Exponentialabschätzung der konkreten Form

$$|K(t)| \leq C\, e^{x_1 \xi} \quad \text{für } \xi \geq 0 \quad , \tag{E.3}$$
$$|K(t)| \leq C\, e^{x_2 \xi} \quad \text{für } \xi < 0 \quad , \tag{E.4}$$

wobei $x_1 < x_2$ sei, genügt, dann gilt für deren Fourier-Laplacetransformierte $\tilde{K} \in \mathfrak{a}_{II}$, d.h. $\tilde{K}$ ist in einem Vertikalstreifen $x_1 \leq x \leq x_2$ ($s = x + iy$) eine analytischen Funktionen, die einer Exponentialabschätzung der folgenden Form

$$|\tilde{K}(s)| \leq C\, e^{-\eta_1 y} \quad \text{für } y \geq 0 \quad , \tag{E.5}$$
$$|\tilde{K}(s)| \leq C\, e^{\eta_2 y} \quad \text{für } y < 0 \quad , \tag{E.6}$$

genügt.

Entsprechend folgt aus der Theorie der Mellin-Transformation[3]: Gilt $k \in \mathfrak{B}$, d.h. der Kern der Integralgleichung (E.2) ist in einem Winkelraum $-\vartheta_1 \leq \vartheta \leq \vartheta_2$, $z \to z = \rho\, e^{i\vartheta}$, mit eventuellem Ausschluß des Nullpunktes - der Winkelraum soll entsprechend der Integralgleichung (E.2) also wiederum die reelle z-Achse beinhalten - eine analytische Funktion, die dort einer Potenzabschätzung der Form

$$|k(z)| \leq C\, \rho^{-x_1} \quad \text{für } \rho \leq 1 \quad , \tag{E.7}$$
$$|k(z)| \leq C\, \rho^{-x_2} \quad \text{für } \rho > 1 \quad , \tag{E.8}$$

mit $x_1 < x_2$, genügt, dann gilt für deren Mellintransformierte $\tilde{k} \in \mathfrak{b}$, d.h. $\tilde{k}$ ist in einem Vertikalstreifen $x_1 \leq x \leq x_2$ eine analytische Funktion, die dort der Exponentialabschätzung

$$|\tilde{k}(s)| \leq C\, e^{-\vartheta_2 y} \quad \text{für } y \geq 0 \quad , \tag{E.9}$$
$$|\tilde{k}(s)| \leq C\, e^{\vartheta_1 y} \quad \text{für } y < 0 \quad , \tag{E.10}$$

genügt.

Aus den paarweisen *Exponentialabschätzungen*, also den Ungleichungen (E.5) und (E.6) für die Transformierte $\tilde{K}$ und (E.7) und (E.8) für die Transformierte $\tilde{k}$, folgt nun unmittelbar die, zumindest asymptotische, *exponentielle Divergenz* der Reziproken der Transformierten Integralkerne, woraus sofort, entsprechend des oben gesagten zur Bestimmung des Grades der Schlechtgestelltheit bei Entfaltungsproblemen, die (asymptotisch) *exponentielle Schlechtgestelltheit* der Integralgleichungen (E.1) und (E.2) folgt. Somit haben wir das Korollar E.1 bewiesen. □

Aufgrund des Korollars E.1 drängt sich die Vermutung auf, daß die vermöge der komplexen Fourier-Laplace- bzw. der Mellin-Transformation lösbaren, physikalisch relevanten Entfaltungsprobleme exponentiell schlechtgestellt sein werden. Diese gilt inbesondere für die mit der Mellin-Transformation lösbaren Faltungsgleichung (E.2), denn hier ist die Bedingung $k \in \mathfrak{B}$ bei physikalisch relevanten Kernen am ehesten erfüllt. Ein Beispiel[4], um diesen Sachverhalt zu demonstrieren, ist hierfür gerade die hier behandelte Integralgleichung (2.13), Seite 9 bzw. (2.47), Seite (2.47) und deren real- und imaginärteiligen Integralgleichungen, deren Integralkerne sowie die im Kapitel 3 betrachteten Modelle, die ihrerseits als Integralkerne für alternative phänomenologische, Dichtefunktionen beinhaltende Ansätze dienen könnten, in der Darstellung

$$k(x) = \frac{1}{(1 + a x^h)^\nu} \quad \text{mit } |\arg a| < \pi,\ h > 0 \quad , \tag{E.11}$$

[2] siehe wiederum [Doe71, Tit67, Tit86] und hier Abschnitt 7.2

[3] a.a.O.

[4] Wir wollen diesbezüglich auch auf die Ausführungen des Kapitels 2 hinweisen.

subsumiert sind, deren Mellintransformierte nun, was schon länger bekannt ist[5], durch

$$\tilde{k}(s) = h^{-1}\, a^{-\frac{s}{h}}\, B\left(\frac{s}{h},\, \nu - \frac{s}{h}\right) \quad \text{mit } 0 < \mathfrak{Re}\, s < h\, \mathfrak{Re}\, \nu \tag{E.12}$$

gegeben ist. Ohne hier jetzt näher darauf eingehen zu wollen, erfüllt die Beta-Funktion in (E.12), insbesondere für $|y| \to \infty$, Exponentialabschätzungen der (geforderten) Form (E.9) und (E.10) - woraus die exponentielle Schlechtgestelltheit der Integralgleichungen, die Kerne der allgemeinen Form (E.12) aufweisen, folgt.

Der physikalische Ursprung des Kerns (E.11) ist eine gestreckt-exponentiell zerfallende Korrelationsfunktion $\mathfrak{K}$ in der Zeitdomäne, der Kern selber ist gerade die durch die Fourier-Laplace Tranformation in die Frequenzdomäne transformierte jener Korrelationsfunktion[6]. Erinnern wir uns also an den allgemeinen phänomenologischen Ansatz[7] (2.25) für eine durch eine Dichtefunktion dargestellte Korrelationsfunktion, so könnten wir auf die Idee kommen, die Integralgleichung gleich in der Zeitdomäne zu formulieren[8]. Diese Integralgleichungen, die wieder die allgemeine Form (E.2) aufweisen würden, werden dann Kerne, die wir durch

$$k(x) = \exp\left(-ax^h\right) \quad \text{mit} \quad \mathfrak{Re}\, a > 0,\ h > 0 \tag{E.13}$$

subsumieren können, aufweisen. Die Mellintransformierte des Ausdrucks (E.13) ist wiederum wohlbekannt[9] und durch

$$\tilde{k}(s) = h^{-1}\, a^{-\frac{s}{h}}\, \Gamma\left(\frac{s}{h}\right) \quad \text{mit} \quad \mathfrak{Re}\, s > 0 \tag{E.14}$$

gegeben. Die Gammafunktion erfüllt bekanntlich wieder die Exponentialabschätzung[10] (E.9) und (E.10), insbesondere für $|y| \to \infty$, wodurch diese Entfaltungsproblem, wie erwartet, wieder exponentiell schlechtgestellt sind. Tatsächlich hätten wir die exponentielle Schlechtgestelltheit der Kerne (E.11), des Kerns in der Frequenzdomäne, und (E.13), des Kerns in der Zeitdomäne, an deren Eigenschaft, Elemente des Funktionenraums $\mathfrak{B}$ zu sein, sofort ablesen können.

Wir wollen darauf hinweisen, daß die Mellinsche Faltungsgleichung (E.2) nicht nur im Kontext der hier diskutierten phänomenologischen Ansätze, sondern beispielsweise in der Optik sowohl bei der Streuung an (in Suspensionen gelösten) Kolloiden und als auch an biologischen Systemen formuliert wird[11].

Die Ausführungen zum Korollar E.1 abschließend, wollen wir bemerken, daß aus diesen Korollar natürlich nicht eine generelle exponentielle Schlechtgestelltheit der unter Anwendung der „reellen“ Fourier-Transformation, es handelt sich bei den Variablen in der Tranformation um reelle, lösbaren Entfaltungsproblemen folgt. Beispiele dafür liefern auch sowohl die mathematische Literatur als auch die Praxis zu genüge.

---

[5] siehe [Doe71, Tit86, Tit67, EMOT54] und es sei ebenso auf den Abschnitt **3.4 Das Havriliak-Negami Modell** verwiesen

[6] Bezüglich dieses Zusammenhanges sei insbesondere auf [AM76, Bre65, BB93, Jac75] und im Kontext der Physik amorpher Systeme zusätzlich auf [Ell83, Zal83] verwiesen.

[7] siehe Abschnitt 2.3, Seite 11

[8] Wir fokussieren unsere Betrachtungen auf die Modellierungen respektive auf Ansätze in der Physik.

[9] siehe wieder [Doe71, Tit86, Tit67, EMOT54, WW69]

[10] siehe insbesondere [Doe71, EMOT53, Tit67, WW69]

[11] Detailierter werden durch Mellinsche Faltungsgleichung formulierte inverse (Streu-)Probleme in der Optik beispielsweise in [BDMP90] besprochen.

Literaturverzeichnis

[AM76] Neil W. Ashcroft und David N. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, New York, London, 1976.

[Arc66] R. Arcangeli. *Pseudo-solution de l'equation $Ax = y$*. Series A, 263 (No. 8). C. R. Acad. Sci. Paris, 1966.

[AS68] Milton Abramowitz und Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., London, 1968.

[AT77] Vasiliy Y. Arsenin und Andrey N. Tikhonov. *Solution of Ill-Posed Problems*. V.H Winston & Sons, Washington D.C, 1977.

[Bai90] David H. Bailey. A portable high performance multiprecision package. Technical Report RNR-90-022, Numerical Aerodynamic Simulation Systems Division, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, 1990.

[Bai93] David H. Bailey. Multiprecision translation and execution of Fortran programs. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 19(3):288–319, 1993.

[BB93] Philippe Blanchard und Erwin Brüning. *Distributionen und Hilbertraumoperatoren*. Mathematische Methoden der Physik. Springer-Verlag, Wien, New York, 1993.

[BDMP90] M. Bertero, C. De Mol, und E. R. Pike. Application of singular systems to some data reduction problems in modern optics. In P. C. Sabatier, editor, *Inverse Methods in Action*, pages 248–261, Berlin, Heidelberg, New York, 1990. Springer-Verlag.

[Bec88] P. A. Beckmann. Spectral densities and nuclear spin relaxation in solids. *Phys. Rep.*, 171:85, 1988.

[Bre65] Hans Bremermann. *Distributions, Complex Variables, and Fourier Transforms*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Massachusetts, London, New York, 1965.

[BS76] Heinrich Behnke und Friedrich Sommer. *Theorie der analytischen Funktionen einer komplexen Veränderlichen*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1976.

[BW82] Douglas M. Bates und Grace Wahba. Computational methods for generalized cross-validation. In Christopher T. H. Baker and Geoffrey F. Miller, editors, *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, pages 283–296. Academic Press, London, 1982.

[CC41] K.S. Cole und R.H. Cole. *J. Chem. Phys.*, 9:341, 1941.

[CH68a] R. Courant und D. Hilbert. *Methoden der mathematischen Physik*, Band 1. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1968.

[CH68b] R. Courant und D. Hilbert. *Methoden der mathematischen Physik*, Band 2. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1968.

[Cha94] Siddhartha Chatterjee. A `C++`-based multiprecision system, September 1994. Dokumentation.

[Dav82] A. R. Davies. On the maximum likelihood regularization of the fredholm convolution equtions of the first kind. In Christopher T. H. Baker und Geoffrey F. Miller, editors, *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, pages 95–105. Academic Press, London, 1982.

[DC51] D. W. Davidson und R. H. Cole. Dielectric relaxation in glycerol, propylene glycol, and n-propanol. *J. Chem. Phys.*, 19:1484, 1951.

[Doe71] Gustav Doetsch. *Handbuch der Laplace-Transformationen*, Band 1: Theorie der Laplace-Transformation. Birkhäser Verlag, Basel und Stuttgart, 1950,1971.

[Doe72] Gustav Doetsch. *Handbuch der Laplace-Transformationen*, Band 2: Anwendungen der Laplace-Transformation, Teil 1. Birkhäser Verlag, Basel und Stuttgart, 1955,1972.

[Doe73] Gustav Doetsch. *Handbuch der Laplace-Transformationen*, Band 3: Anwendungen Laplace-Transformation, Teil 2. Birkhäser Verlag, Basel und Stuttgart, 1956,1973.

[DR84] Philip J. Davis und Philip Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, Orlando, London, 2. edition, 1984.

[Dru00a] P. Drude. *Ann. Physik*, 1:566, 1900.

[Dru00b] P. Drude. *Ann. Physik*, 3:369, 1900.

[Ell83] Stephen Richard Elliot. *Physics of Amorphous Materials*. Longman, Inc., London, New York, 1983.

[EMOT53] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, und F. G. Tricomi. *Higher Transcendental Functions*, volume I. Mc Graw-Hill Book Company, Inc., New York, Toronto, London, 1953.

[EMOT54] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, und F. G. Tricomi. *Tables of Integral Transforms*, volume I. Mc Graw-Hill Book Company, Inc., New York, Toronto, London, 1954.

[Fer70] J. D. Ferry. *Visvoelastic Properties of Polymers*. John Wiley & Sons, Inc., 1970.

[Gig62] Olof Gigon. Das hellinistische Erbe. In Golo Mann und Alfred Heuß (Hrsg.), *Propyläen Weltgeschichte*, Band 3: Griechenland, Die hellinistische Welt. Propyläen Verlag, Berlin, Frankfurd am Main, 1962.

[GKM82] C. W. Groetsch, J. T. King, und D. Murio. A finite element method. In Christopher T. H. Baker und Geoffrey F. Miller, editors, *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, pages 1–11. Academic Press, London, 1982.

[GP73] R.G. Gorden und O. Platz. Rigorous bounds for time-dependent correlation funktions. *Phys. Rev. Lett*, 30:264, 1973.

[Gro84] C. W. Groetsch. *The theory of Tikhonov regularisation for Fredholm equations of the first kind*. Number 105 in Research Notes in Mathematics. Pitman Advanced Publishing Program, Boston, London, Melbourne, 1984.

[Gro93] C. W. Groetsch. *Inverse problems in the mathematical sciences*. Number 6 in Theory and Practice of Applied Geophysics. Friedrich Vieweg & Sohn Verlag, Wiesbaden, Braunschweig, 1993.

[Haa83] Karl Heinz Haag. *Der Fortschritt in der Philosophie*. Suhrkamp Verlag, Frankfurt am Main, 1983.

[HN66] S. Havriliak und S. Negami. *J. Polym. Sci. C*, 14:69, 1966.

[Hon89] J. Honerkamp. Ill-posed problems in rheology. *Rheol. Acta*, 28:363–371, 1989.

[HS52] M.R. Hestenes und E. Stiefel. Method of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, Sec. B 49:409–432, 1952.

[HZ87] L.C. Hsu und Y.S. Zhou. Approximate computation of strongly oscillatory integrals with compound precision. In Patrick Keast und Graeme Fairweahter, editors, *Numerical Integration*, volume 203 of *NATO ASI Series C: Marthematical and Physical Sciences*, pages 91–101, Dordrecht, Boston, Lancaster, Tokyo, 1987. D. Reidel Publishing Company.

[Iva76] V. V. Ivanov. *The Theory of Approximate Methods And Their Application to the Numerical Solution of Singular Integral Equation*. Noordhoff International Publishing, Leyden, 1976.

[Jac75] John David Jackson. *Classical Electrodynamik*. John Wiley & Sons, Inc., New York, Brisbane, Toronto, Singapore, 1975.

[Jay57] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Phys. Rev.*, 106:620–630, 1957.

[Jay68] E. T. Jaynes. Prior probabilities. *IEEE Trans. Solid-State Circuits*, SC-4:227–241, 1968.

[JEL66] Jahnke, Emde, und Losch. *Tafeln höherer Funktionen*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1966.

[Kan95] Immanuel Kant. *Kritik der reinen Vernunft*. Könemann Verlagsgesellschaft mbH, Köln, 1995. Nach der Ausgabe von Kants gesammelten Schriften, herausgegeben von der Königlichen Preußischen Akedemie der Wissenschaften, Berlin 1902/10.

[KF87] Patrick Keast und Graeme Fairweahter, editors. *Numerical Integration*, volume 203 of *NATO ASI Series C: Marthematical and Physical Sciences*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, Lancaster, Tokyo, 1987.

[KR98] H. Keiter und M. Rosenberg. On the probability distribution of relaxation times in glasses. *Eur. Phsy J. B*, 5:599, 1998.

[KS66] Samuel Karlin und William J. Studden. *Tchebycheff Systems: With Applications in Analysis and Statistics*, volume XV of *Pure and Applied Mathematics*. Intersience Publishers, New York, London, Sydney, 1966.

[Lan51] L. Landweber. An iteration formula for fredholm integral equations of the first kind. *Amer, J. Math.*, 73:615–624, 1951.

[Lav67] M. M. Lavrentiev. *Some Improperly Posed Problems of Mathematical Physics*, volume 11 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1967.

[LBP91] N. Link, S. Bauer, und B. Ploss. Analysis of signals from superposed relaxation process. *J. Appl. Phys.*, 69:2795, 1991.

[Lig66] M. J. Lighthill. *Einführung in die Theorie der Fourieranalyse und der verallgemeinerten Funktionen*. B.I.-Wissenschaftsverlag, Mannheim, Wien, Zürich, 1966.

[LM90] A. K. Louis und P. Maaß. A mollifier method for linear operator equations of the first kind. *Inverse Problems*, 6:427–440, 1990.

[LMR98] Alfred K. Louis, Peter Maaß, und Andreas Rieder. *Wavelets*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 2. Auflage, 1998.

[Lou89] Alfred Karl Louis. *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, 1989.

[Lue73] D. G. Lueneberger. *Intrduction to linear and nonlinear programming*. Addison-Wesley, Reading 1973.

[Mar82] J. T. Marti. On a regularization method for fredholm equations of the first kind using sobolev spaces. In Christopher T. H. Baker und Geoffrey F. Miller, editors, *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, pages 59–66. Academic Press, London, 1982.

[Mic62] Solomon G. Michlin. *Variationsmethoden der mathematischen Physik*. Akademie-Verlag, Berlin, 1962.

[Mil74] G.F. Miller. Fredholm equation of the first kind. In L. M. Delves und J. Walsh, editors, *Numerical Solution of Integral Equations*, chapter 13. Clarendon Press, Oxford, 1974.

[Mor84] V.A: Morozov. *Methods for Solving Incorrectly Posed Problems*. Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, Tokyo, 1984.

[MS78] A.M. Mathai und R. K. Saxena. *The H-function with Applications in Statistics and Other Disciplines*. Wiley Eastern Limited, Delhi, Bangalose, Bombay, 1978.

[Mus65] N. I. Muschelischwili. *Singuläre Integralgleichungen*. Akademie-Verlag, Berlin, 1965.

[PS93] L. Päivärinta und E. Somersalo. Introduction. In L. Päivärinta und Somersalo, editors, *Inverse Problems in Mathematical Physics*, Lecture Notes in Physics, pages iv–xviii, Berlin, Heidelberg, New York, 1993. Springer-Verlag.

[PTVF92] William H. Press, Sauk A. Teukolsky, William T. Vetterling, und Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, Port Chester, Melbourne, Sydney, 2. edition, 1988, 1992.

[RC82] R. S. Rutman und L. M. Cabral. Descriptive regularization. In Christopher T. H. Baker und Geoffrey F. Miller, editors, *Treatment of Integral Equations by Numerical Methods*, pages 313–323. Academic Press, London, 1982.

[Roo69] Bernard W. Roos. *Analytic Funktions and Distributions in Physics and Engineering*. John Wiley & Sons, Inc., 1969.

[Ros95] Magnus Rosenberg. Untersuchungen zur Dielektrizitätsfunktion eines amorphen Systems. Diplomarbeit, Institut für Physik, Universität Dortmund, 1995. unveröffentlicht.

[Sab90] P. C. Sabatier. Modelling or solving inverse problems. In P. C. Sabatier, editor, *Inverse Methods in Action*, pages 1–14, Berlin, Heidelberg, New York, 1990. Springer-Verlag.

[SB00] Josef Stoer und Roland Bulirsch. *Numerische Mathematik*, Band 2. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 4 edition, 2000.

[SG85] C. R. Smith und W. T. Grandy, editors. *Maximum-Entropy and Bayesian Methods in inverse Problems*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, Lancaster, 1985.

[Sim93] Barry Simon. *Statistical Mechanics of Lattice Gases*, volume 1. University Presses of California, Columbia and Princeton, New Jersey, 1993.

[Smi88] W. I. Smirnow. *Lehrgang der höheren Mathematik*, Band IV/1. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1988.

[Sto99] Josef Stoer. *Numerische Mathematik*, Band 1. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 8 edition, 1999.

[Str63a] R. L. Stratonovich. *Topics in the Theorey of Random Noise*, volume 1. Gorden und Breach, Science Publishers, INC, New York, 1963.

[Str63b] R. L. Stratonovich. *Topics in the Theorey of Random Noise*, volume 2. Gorden und Breach, Science Publishers, INC, New York, 1963.

[Str91] Bjarne Stroustrup. *C++ Programming Language*. Addison-Wesley Longman (Higher Education Division, Pearson Education), New York, 1991.

[TGSY95] A.N. Tikhonov, A.V. Goncharsky, V.V Stepanov, und A.G. Yagola. *Numerical Methods for the Solution of Ill-Posed Problems*, volume 328 of *Mathematics and Its Applications*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1995.

[Tit67] E.C. Titchmarsh. *Introduction to the Theory of Fourier Integrals*. Clarendon Press, Oxford, 2 edition, 1948, 1967.

[Tit86] E.C. Titchmarsh. *The Theory of Functions*. Oxford University Press, Ely House, London, 2 edition, 1939,1986.

[UT95] M. P. Urbanek und C. Z. Tan. Dielectric relaxationspectrum for glassy systems. unveröffentlicht, 1995.

[Vin72] V.A. Vinokurov. Two notes on the choice of regularization parameter. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, 12(2):249–253, 1972.

[Wal94] Wolfgang Walter. *Einführung in die Theorie der Distributionen*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 3. edition, 1994.

[Wel62] Bradford C. Welles. Die hellinistische Welt. In Golo Mann und Alfred Heuß (Hrsg.), *Propyläen Weltgeschichte*, Band 3: Griechenland, Die hellinistische Welt. Propyläen Verlag, Berlin, Frankfurd am Main, 1962.

[Wer95] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.

[WW69] E. T. Whittaker und G. N. Watson. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge Iniversity Press, Cambridge, 4 edition, 1969.

[WW92] Klaus Weise und Wolfgang Wöger. Eine Bayessche Theorie der Meßunsicherheit. PTB-Bericht N-11, Physikalisch Technische Bundesanstalt, Braunschweig, 1992.

[WW99] Klaus Weise und Wolfgang Wöger. *Meßunsicherheit und Meßdatenauswertung*. Forschen - Messen - Prüfen, Monographienreihe der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt. Wiley-VCH, Weinheim, New York, Chichester, Brisbane, Singapore, Toronto, 1999.

[Zal83] Richard Zallen. *The Physics of Amorphous Solids*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 1983.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken[12], die direkt oder indirekt an der Entstehung dieser Arbeit beteiligt waren, wobei einige ihrer Unterstützung wohl kaum bewußt gewesen sein dürfte.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. H. Keiter für die interessante Themenstellung, für die fortwährenden Bereitschaft zu anregenden und fruchtbaren Diskussionen und seiner persönlichen Anteilnahme.
Danken möchte ich allen Mitgliedern des Lehrstuhls TI für das angenehme Arbeitsklima und die fortwährende Bereitschaft zur Diskussionen und zur Hilfe. Besonders möchte ich mich bei Dr. Frank Stephan für das angenehme Arbeitsklima im Büro, für die anfängliche Hilfe bei Computerproblemen und für seine besonderen Anteilnahme bedanken.
Ebenso besonders danke ich Philipp Stampfuß, für das angenehme Arbeitsklima im Büro, für seine Hilfs- und Diskussionsbereitschaft, insbesondere bei programmiertechnischen Problemen, für das Korrekturlesen meiner Arbeit und seiner besonderen Anteilnahme.
Desweiteren möchte ich mich bei Klaus Baumgartner für die anregenden Diskussion, seiner Hilfe bei der Korrektur meiner Arbeit und seiner besonderen Anteilnahme bedanken.
Weiter möchte ich Dr. Bernd Burghardt danken, nicht nur für seine Diskussions- und Hilfsbereitschaft und für seine Hilfe bei der Korrektur der Arbeit.
Nicht vergessen zu danken möchte ich Dirk Otto und Kay Hamacher für ihre jeweiligen Hilfs- und Diskussionsbereitschaft und ihrer Anteilnahme, ebenso möchte ich mich bei Herrn apl. Prof. Dr. Joachim Stolze für seine Hilfs- und Diskussionsbereitschaft und seiner Anteilnahme bedanken.
Weiter gilt mein Dank Dr. Markus Urbanek, nicht nur für das Überlassen des Programms zur Berechnung der Schranken, Dr. Georg Hülsenbeck, Alexander Schug, Thomas Herges, Dr. Jochen Gruneberg, Dr. Andreas Giesekus, Dr. Timo Leuders, Dr. Heiko Krabbe und insbesondere noch priv. Doz. Dr. Wolfgang Wenzel für seine Ideen zur Lösung einiger numerischer Probleme, und allen anderen, nicht genannten Mitgliedern wärend meiner Zeit am Lehrstuhl.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen meinen Freuden und Bekannten, die mich in der Zeit der Entstehung der Arbeit unterstützt haben. Ganz besonders bedanken möchte ich mich bei Jörg Berner, Dirk & Ulla Lubjuhn, Jens & Susanne Federlein für ihrer Hilfe und ihren Beistand in der Zeit, als ich jenen benötigt habe.

Meinen besonders herzlichen Dank gilt meinem Bruder und seiner Familie, Andree, Reinhild und Isabel Rosenberg und meiner Schwester und ihrer Familie, Anja, Reiner und Philipp Hilcke, für ihrer Hilfe und Unterstützung bereits wärend des Studiums und in der Zeit der Entstehung der Arbeit, insbesondere für unsere gegenseitige Hilfe und ihrer Liebe.

Und zum Schluß möchte ich ganz besonders herzlich meinen Eltern, Horst und Waltraud Rosenberg, für die Ermöglichung des Studium und ihrer Unterstützung wärend des Studiums und für die Zeit ihres Lebens währende Hilfe, Unterstützung, Beistand, gegebene Hoffnung und ihrer Liebe danken.

Einige Teile dieser Arbeit sind im Graduiertenkolleg „Festkörperspektroskopie“ des Fachbereichs Physik der Universität Dortmund entstanden.

[12] Die Reihenfolge der Erwähnungen ist letztlich willkürlich.