

Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

Prof. Dr. Andreas Meister

Universität Kassel
Fachbereich 10 Mathematik und Naturwissenschaften
Institut für Mathematik

Geplante Inhalte

- ▶ Einschrittverfahren
 - ▶ Runge-Kutta-Verfahren
- ▶ Mehrschrittverfahren
 - ▶ Adams-Typ-Verfahren
 - ▶ Nystrom- und Milne-Simpson-Verfahren
 - ▶ BDF-Verfahren
- ▶ Konsistenz, Stabilität, Konvergenz
- ▶ Positivitätserhaltende, konservative Verfahren
- ▶ Differenzenverfahren für Randwertprobleme

- 1 Grundlagen
- 2 Einschrittverfahren
- 3 Mehrschrittverfahren
- 4 A-Stabilität
- 5 Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren
- 6 Schießverfahren bei Randwertproblemen

Grundlagen

Defintion: 1.1 Sei $[a, b] \in \mathbb{R}$ ein abgeschlossenes Intervall, $y_0 \in \mathbb{R}$ und

$$\mathbf{f} : [a, b] \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N \quad (1.1)$$

gegeben, dann heißt eine differenzierbare Funktion

$$\mathbf{y} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^N \quad (1.2)$$

Lösung des zugehörigen Anfangswertproblems (AWP) für ein System von N gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung, wenn

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \text{ für } t \in [a, b] \quad (1.3)$$

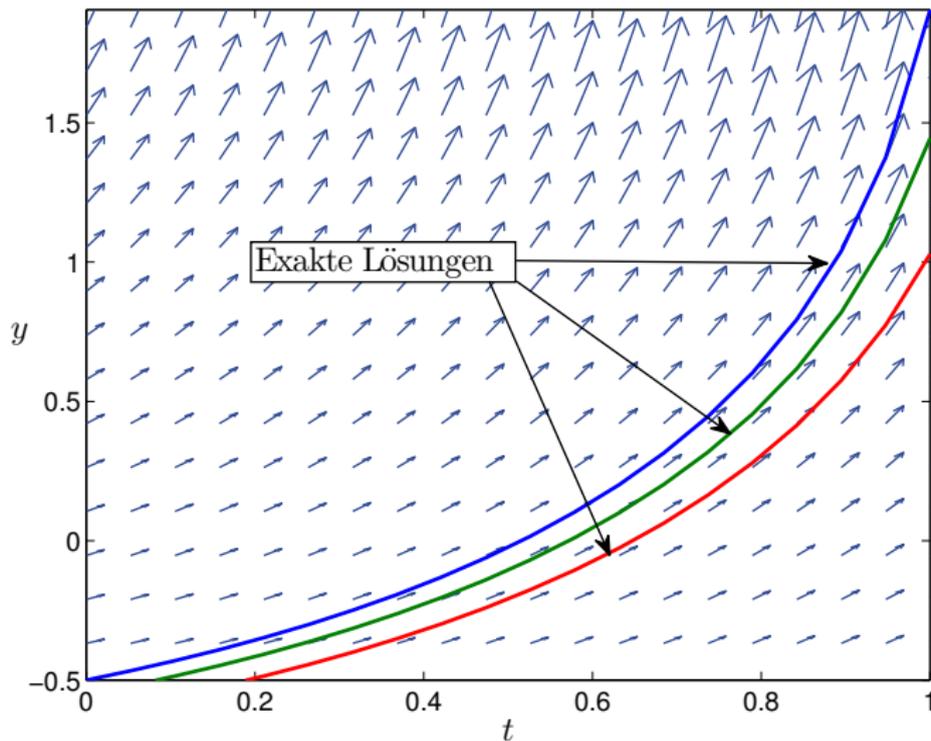
und

$$\mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_0 \quad (1.4)$$

gilt.

Grundlagen

Richtungsfeld und Lösungen zur Differentialgleichung $y'(t) = e^{y(t)}(1+t)$.



Grundlagen

Bemerkung: Die Betrachtung von Differentialgleichungssystemen 1. Ordnung liefert keine Einschränkung, da gewöhnliche Differentialgleichungen n -ter Ordnung

$$y^{(n)}(t) = f(t, y(t), y'(t), \dots, y^{(n-1)}(t))$$

äquivalent in das System

$$y_1'(t) = y_2(t),$$

$$y_2'(t) = y_3(t),$$

$$\vdots$$

$$y_{n-1}'(t) = y_n(t),$$

$$y_n'(t) = f(t, y_1(t), \dots, y_{n-1}(t)),$$

überführt werden kann, wobei $y_1 = y, y_2 = y', \dots, y_n = y^{(n-1)}$ gilt.

Satz: 1.2 Sei $\mathbf{f} : [a, b] \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ stetig und die Lipschitz-Bedingung

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{u}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{v})\| \leq L\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$$

für alle $t \in [a, b]$ und $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$ mit einer Konstanten $L > 0$ erfüllt, dann besitzt das AWP laut Definition 1.1 genau eine stetig differenzierbare Lösung $\mathbf{y} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^N$. Für differenzierbare Funktionen $\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^N$ mit

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \text{ für } t \in [a, b], \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_0,$$

$$\hat{\mathbf{y}}'(t) = \mathbf{f}(t, \hat{\mathbf{y}}(t)) \text{ für } t \in [a, b], \hat{\mathbf{y}}(a) = \hat{\mathbf{y}}_0$$

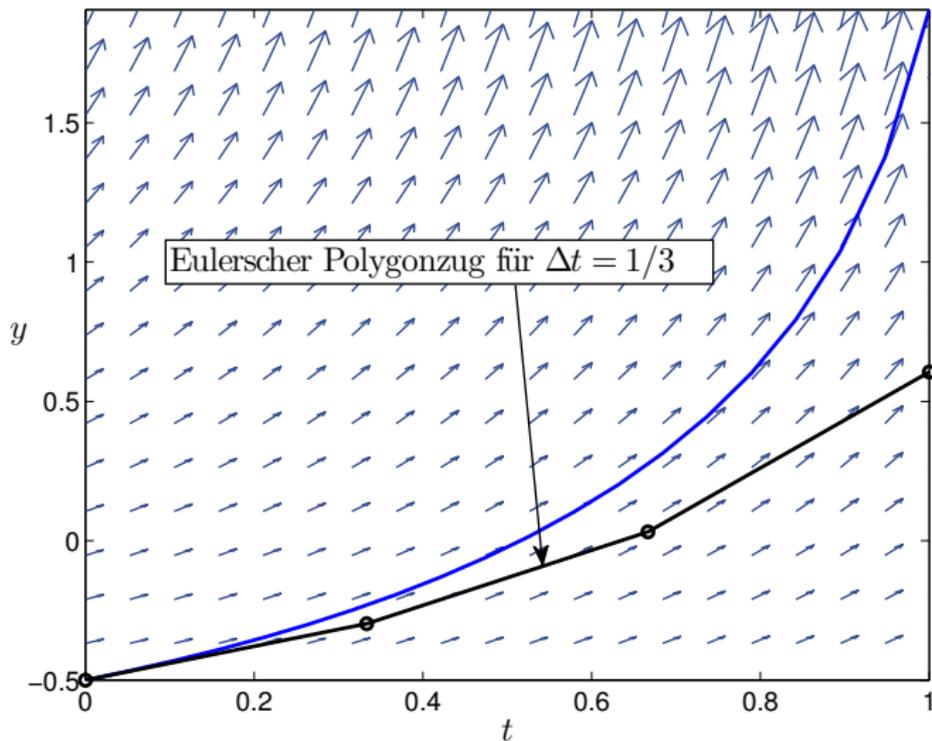
gilt die Abschätzung

$$\|\mathbf{y}(t) - \hat{\mathbf{y}}(t)\| \leq e^{L(t-a)}\|\mathbf{y}_0 - \hat{\mathbf{y}}_0\|$$

für $t \in [a, b]$. Für eine p -mal stetig differenzierbare Funktion \mathbf{f} ist die Lösung des AWP mindestens $p + 1$ -mal stetig differenzierbar.

Grundlagen

Explizites Euler-Verfahren zum AWP $y'(t) = e^{y(t)}(1+t)$, $y(0) = -1/2$.



- ① Grundlagen
- ② Einschrittverfahren**
- ③ Mehrschrittverfahren
- ④ A-Stabilität
- ⑤ Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren
- ⑥ Schießverfahren bei Randwertproblemen

Einschrittverfahren

Defintion: 2.1 Ein Einschrittverfahren zur näherungsweise Bestimmung einer Lösung des AWP (1.3),(1.4) ist von der Gestalt

$$y_0 = y(t_0) = y(a)$$
$$y_{i+1} = y_i + \Delta t \phi(t_i, y_i, y_{i+1}, \Delta t)$$

mit einer Verfahrensfunktion

$$\phi : [a, b] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$$

. Das Einschrittverfahren heißt explizit, falls

$$\phi = \phi(t_i, y_i, \Delta t)$$

gilt, sonst wird das Verfahren als implizit bezeichnet.

Einschrittverfahren

Bemerkungen:

- ▶ Die Approximation y_{i+1} hängt nicht von y_{i-1}, y_{i-2}, \dots ab, wodurch der Begriff Einschrittverfahren begründet ist
- ▶ Verfahren die auch y_{i-1}, y_{i-2}, \dots berücksichtigen heißen Mehrschrittverfahren.

Einschrittverfahren

Defintion: 2.2 Sei $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Lösung der Differentialgleichung

$$y'(t) = f(t, y(t)), t \in [a, b]$$

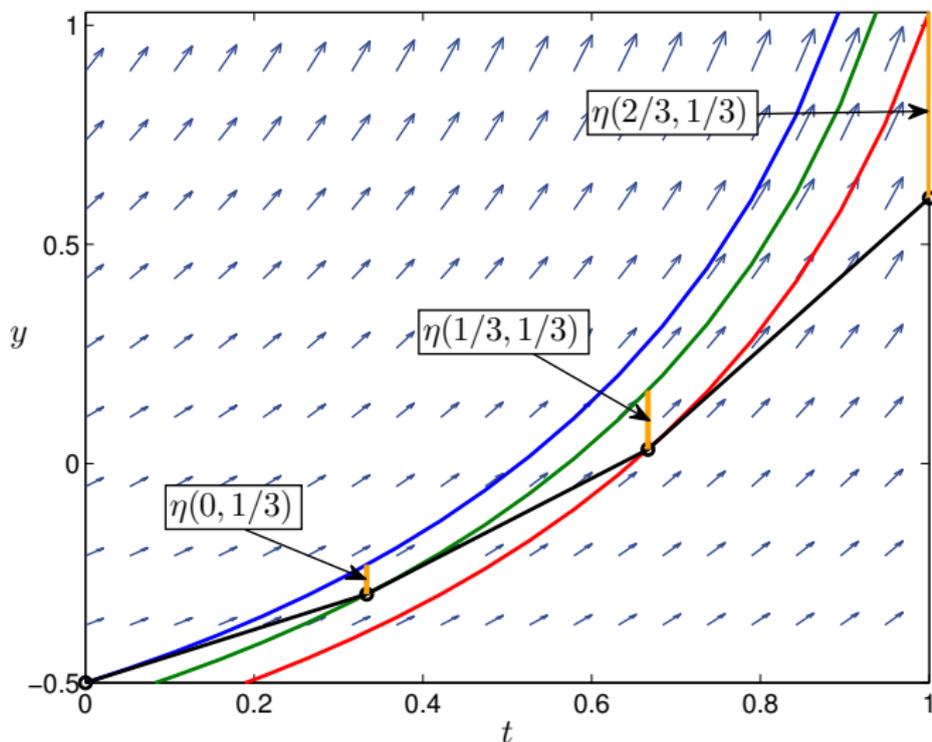
dann heißt

$$\eta(t, \Delta t) = \underbrace{y(t) + \Delta t \phi(t, y(t), y(t + \Delta t), \Delta t)}_{\text{Verfahrensvorschrift}} - y(t + \Delta t)$$

für $t \in [a, b]$, $0 \leq \Delta t \leq b - t$ lokaler Diskretisierungsfehler im Punkt $(t + \Delta t, y(t + \Delta t))$ bezüglich der Schrittweite Δt .

Einschrittverfahren

Lokaler Diskretisierungsfehler des expliziten Euler-Verfahrens zur Differentialgleichung $y'(t) = e^{y(t)}(1+t)$.



Einschrittverfahren

Definition: 2.3 Ein Einschrittverfahren heißt konsistent von der Ordnung $p \in \mathbb{N}$ zur Differentialgleichung (1.3), wenn

$$\eta(t, \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1}), \Delta t \rightarrow 0$$

für alle $t \in [a, b]$ gilt. Im Fall $p = 1$ spricht man auch einfach von Konsistenz.

Erinnerung:

- ▶ $f(x) = \mathcal{O}(g(x))$ für $x \rightarrow 0$, falls Konstanten $\epsilon, C > 0$ existieren, so dass für alle x mit $|x| < \epsilon$ stets

$$|f(x)| \leq C|g(x)|$$

gilt.

- ▶ $g(x) \neq 0, f(x) = \mathcal{O}(g(x))$ für $x \rightarrow 0$, falls

$$\limsup_{x \rightarrow 0} \frac{|f(x)|}{|g(x)|} < \infty.$$

Einschrittverfahren

Satz: 2.4 Das Euler-Verfahren ist konsistent von erster Ordnung zur Differentialgleichung $y'(t) = f(t, y(t))$.

Einschrittverfahren

Defintion: 2.5 Sei $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Lösung der Differentialgleichung

$$y'(t) = f(t, y(t)), t \in [a, b]$$

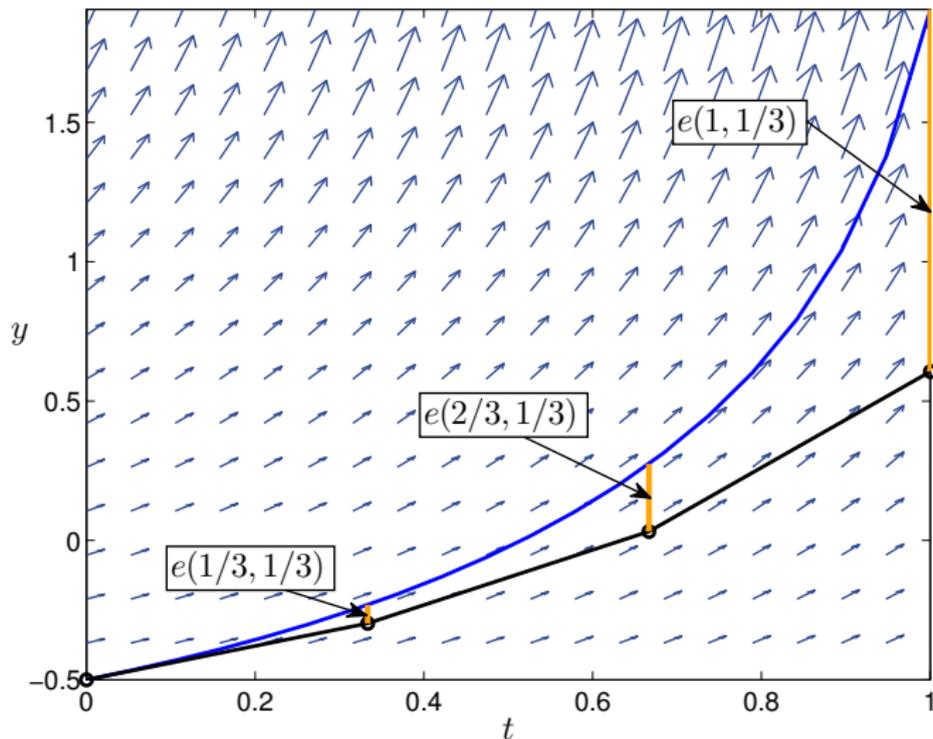
und y_i der durch ein Einschrittverfahren mit der Schrittweite Δt erzeugte Näherungswert an $y(t_i)$ mit $t_i = a + i\Delta t \in [a, b]$, dann heißt

$$e(t_i, \Delta t) = y(t_i) - y_i$$

der globale Diskretisierungsfehler zum Zeitpunkt t_i .

Einschrittverfahren

Globaler Diskretisierungsfehler des expliziten Euler-Verfahrens zum AWP
 $y'(t) = e^{y(t)}(1+t), y(0) = -1/2$.



Einschrittverfahren

Defintion: 2.6 Ein Einschrittverfahren heißt konvergent von der Ordnung $p \in \mathbb{N}$ zum Anfangswertproblem (1.3),(1.4), wenn

$$e(t_i, \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^p), \Delta t \rightarrow 0$$

für alle t_i , $i = 0, \dots, n$ gilt. Im Fall

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} e(t_i, \Delta t) = 0$$

für alle t_i , $i = 0, \dots, n$ sprechen wir von Konvergenz.

Einschrittverfahren

Satz: 2.7 Das Euler-Verfahren ist konvergent von erster Ordnung zur Differentialgleichung

$$y' = Ly$$

mit $L \in \mathbb{R}^+$.

Einschrittverfahren

Lemma: 2.8 Seien $\eta_i, \varrho_i, z_i \geq 0$ für $i = 0, \dots, m-1$ und gelte

$$z_{i+1} \leq (1 + \varrho_i)z_i + \eta_i, \quad i = 0, \dots, m-1,$$

dann folgt

$$z_i \leq \left(z_0 + \sum_{k=0}^{i-1} \eta_k \right) e^{\sum_{k=0}^{i-1} \varrho_k}$$

für $i = 0, \dots, m$.

Einschrittverfahren

Satz: 2.9 Sei ϕ die Verfahrensfunktion eines Einschrittverfahrens zur Lösung des AWP (1.3),(1.4), wobei der Startwert $y_0 \in \mathbb{R}$ nicht notwendigerweise mit $y(t_0)$ übereinstimmt. Genügt $\phi = \phi(t, y, \tilde{y}, \Delta t)$ bezüglich der zweiten und dritten Komponente einer Lipschitzbedingung, d. h. gelten

$$\begin{aligned} |\phi(t, u, \tilde{y}, \Delta t) - \phi(t, v, \tilde{y}, \Delta t)| &\leq L_1 |u - v|, \\ |\phi(t, y, u, \Delta t) - \phi(t, y, v, \Delta t)| &\leq L_2 |u - v| \end{aligned}$$

mit $L_1, L_2 \in \mathbb{R}^+$, dann gilt mit

$$L = \max\{L_1, L_2\} \in \mathbb{R}^+, \quad \eta(\Delta t) = \max_{[t_0, t_n]} |\eta(t, \Delta t)|$$

für den globalen Diskretisierungsfehler zum Zeitpunkt t_i im Fall $\Delta t < 1/L$ die Abschätzung

$$|e(t_i, \Delta t)| = |y(t_i) - y_i| \leq \left(|e(t_0, \Delta t)| + \frac{t_i - t_0}{1 - \Delta t L} \frac{\eta(\Delta t)}{\Delta t} \right) e^{2L \frac{t_i - t_0}{1 - \Delta t L}}$$

Einschrittverfahren

Korollar: 2.10 Es gelten die Voraussetzungen von Satz 2.9 und $y_0 = y(t_0)$. Ist ein Einschrittverfahren gemäß Definition 2.3 konsistent von der Ordnung p , so ist es auch konvergent von der Ordnung p .

Einschrittverfahren

Satz: 2.11 Das verbesserte Euler-Verfahren (2.1) besitzt die Verfahrensfunktion

$$\phi(t_i, y_i, \Delta t) = f(t_i + \Delta t/2, y_i + (\Delta t/2)f(t_i, y_i))$$

und ist konsistent sowie konvergent zur Differentialgleichung

$$y'(t) = f(t, y(t))$$

von zweiter Ordnung.

Einschrittverfahren

Satz: 2.14 Für ein Runge-Kutta-Verfahren $(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$, das den Bedingungen (2.5) genügt, gelten:

- 1 Das Verfahren hat mindestens Konsistenzordnung $p = 1$.
- 2 Das Verfahren hat genau dann mindestens Konsistenzordnung $p = 2$, wenn

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j = \frac{1}{2} \quad (2.6)$$

gilt.

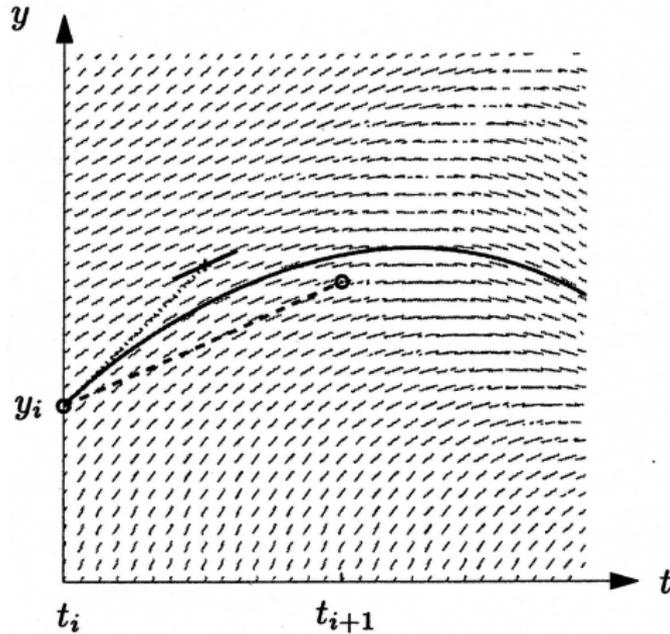
- 3 Das Verfahren hat genau dann mindestens Konsistenzordnung $p = 3$, wenn neben (2.6) zudem

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{j=1}^s b_j \sum_{\nu=1}^s a_{j\nu} c_\nu = \frac{1}{6} \quad (2.7)$$

gelten.

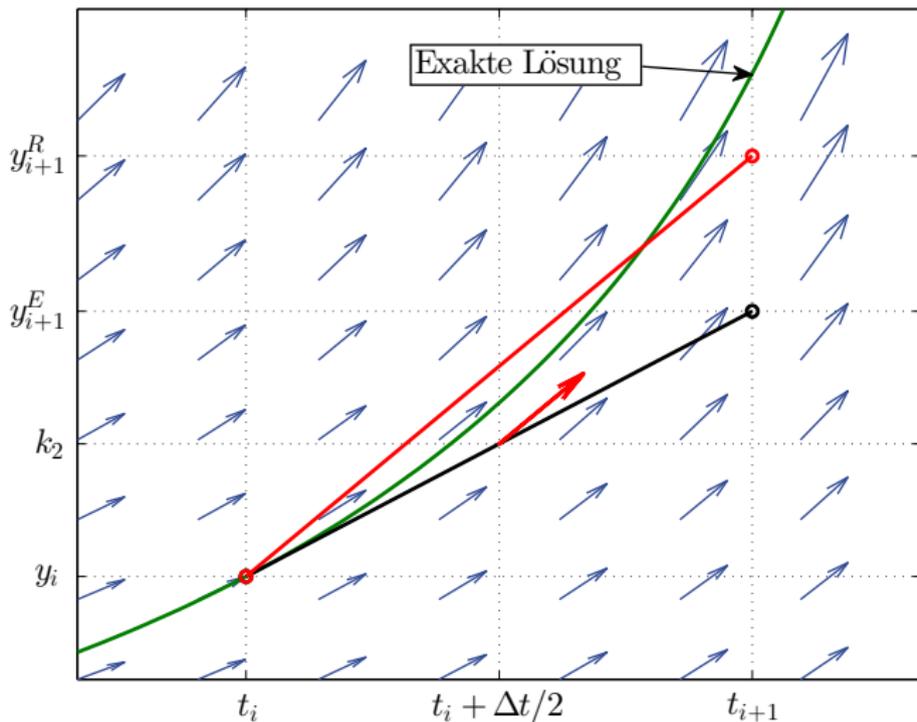
Einschrittverfahren

Auswertungstellen zum Runge-Verfahren



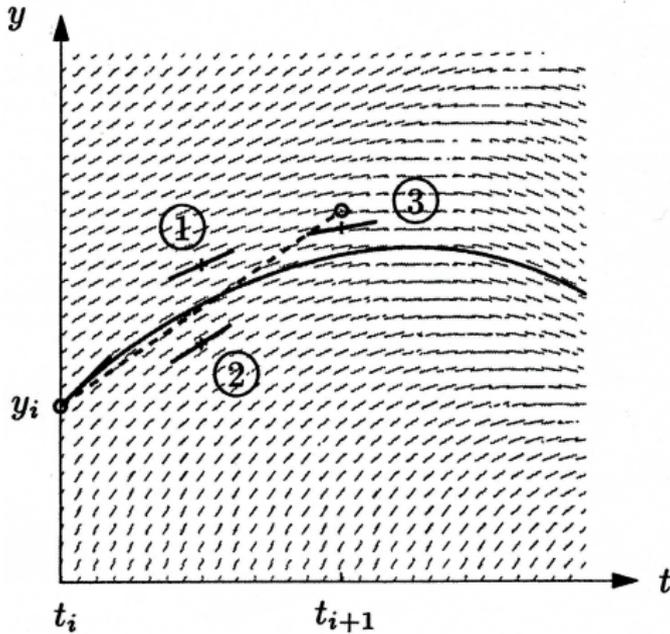
Einschrittverfahren

Berechnung der Näherungslösungen des Expliziten Euler-Verfahrens und des Runge-Verfahrens zur Differentialgleichung $y'(t) = e^{y(t)}(1+t)$.



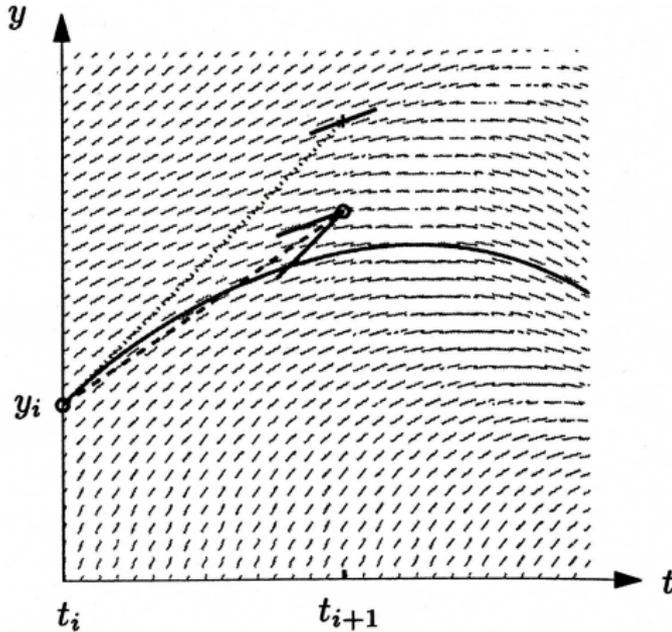
Einschrittverfahren

Auswertungstellen zum klassischen Runge-Kutta-Verfahren



Einschrittverfahren

Auswertungstellen zum Prädiktor-Korrektor-Verfahren



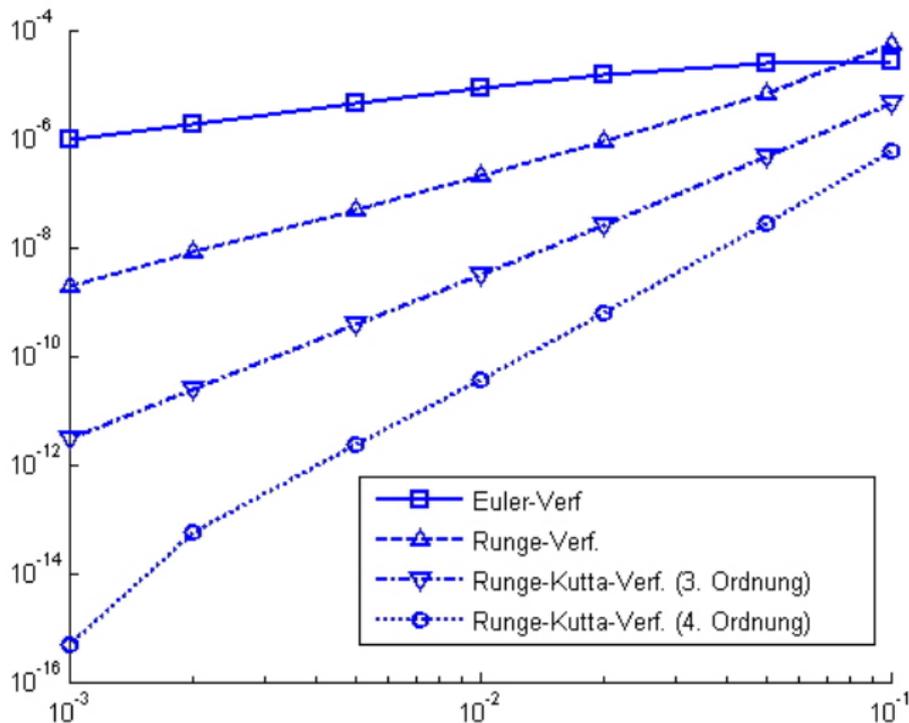
Einschrittverfahren

Konvergenzordnungen

Δt	Euler-Verf. 1. Ord.	Runge-Verf. 2. Ord.	Runge-Kutta Verfahren 3. Ord. (2.17)	Runge-Kutta Verfahren 4. Ord.
0.1	$2.6985e-05$	$5.4625e-05$	$4.3655e-06$	$5.8558e-07$
0.05	$2.4323e-05$	$6.8266e-06$	$4.6063e-07$	$2.8156e-08$
0.02	$1.4683e-05$	$8.6556e-07$	$2.5703e-08$	$6.1962e-10$
0.01	$8.4551e-06$	$2.0438e-07$	$3.0632e-09$	$3.6834e-11$
0.005	$4.5363e-06$	$4.9815e-08$	$3.7382e-10$	$2.2451e-12$
0.002	$1.8926e-06$	$7.8573e-09$	$2.3584e-11$	$5.6453e-14$
0.001	$9.5968e-07$	$1.9553e-09$	$2.9369e-12$	$4.9959e-16$

Einschrittverfahren

Konvergenzverhalten unterschiedlicher Runge-Kutta-Verfahren



Einschrittverfahren

Satz: 2.18 Sei $f : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und gelte

$$|f(t, \tilde{y}) - f(t, y)| \leq L|\tilde{y} - y|$$

mit einer Lipschitzkonstante $L > 0$ für alle $t \in \mathbb{R}^+$. Unter der Zeitschrittweitenbedingung

$$\Delta t < \frac{1}{L\|\mathbf{A}\|_\infty}$$

mit $\mathbf{A} = (a_{j\nu})_{j,\nu=1,\dots,s}$ konvergiert das Iterationsverfahren

$$r_j^{(m+1)} = f(t_i + c_j \Delta t, y_i + \Delta t \sum_{\nu=1}^s a_{j\nu} r_\nu^{(m)}), \quad j = 1, \dots, s$$

für $m \rightarrow \infty$ bei beliebigem Startvektor $\mathbf{r}^{(0)} \in \mathbb{R}^s$ gegen die eindeutig bestimmte Lösung $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^s$ des Gleichungssystems

$$r_j = f(t_i + c_j \Delta t, y_i + \Delta t \sum_{\nu=1}^s a_{j\nu} r_\nu), \quad j = 1, \dots, s.$$

- ① Grundlagen
- ② Einschrittverfahren
- ③ Mehrschrittverfahren**
- ④ A-Stabilität
- ⑤ Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren
- ⑥ Schießverfahren bei Randwertproblemen

Mehrschrittverfahren

Defintion: 3.2 Ein m -Schrittverfahren zur näherungsweise Bestimmung einer Lösung des AWP's (1.1), (1.2) besitzt auf einem äquidistanten Gitter die Gestalt

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = \Delta t \phi(t_i, y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+m}; \Delta t).$$

- ▶ Verfahrensfunktion: $\phi : [a, b] \times \mathbb{R}^{m+1} \times \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$
- ▶ Koeffizienten: $\alpha_j \in \mathbb{R}$ für $j = 0, \dots, m$ mit $\alpha_m \neq 0$
- ▶ Gitterpunkt: $t_i = a + i\Delta t$ für $i = 0, \dots, n$ mit $\Delta t = (b - a)/n$
- ▶ Gegebene Startwerte: $y_0, y_1, \dots, y_{m-1} \in \mathbb{R}$

Mehrschrittverfahren

Bemerkungen:

- ① Ein m -Schrittverfahren wird allgemein als Mehrschrittverfahren bezeichnet
- ② Die Berechnung der Startwerte y_1, \dots, y_{m-1} erfolgt häufig mit einem Einschrittverfahren und wird als Startphase bezeichnet. Das Einschrittverfahren muss eine mindestens so hohe Konsistenzordnung wie das Mehrschrittverfahren aufweisen.
- ③ In jedem Schritt der Laufphase werden Näherungswerte y_{i+m} , $i \geq 0$, für die exakten Lösungswerte $y(t_{i+m})$ bestimmt.
- ④ Hängt die Verfahrensfunktion von der Unbekannten y_{i+m} ab, so sprechen wir von einem impliziten, ansonsten von einem expliziten Mehrschrittverfahren.

Mehrschrittverfahren

- 5 Auf einem nicht äquidistanten Gitter hat die Verfahrensfunktion die Gestalt $\phi = \phi(t_i, \dots, t_{i+m}, y_i, \dots, y_{i+m}; \Delta t)$

- 6 Besitzt die Verfahrensfunktion die Form

$$\phi(t, u_0, \dots, u_m; \Delta t) = \sum_{j=0}^m \beta_j f(t + j\Delta t, u_j)$$

so sprechen wir von einem linearen Mehrschrittverfahren. Hierbei liegt ein echtes m -Schrittverfahren vor, falls $|\alpha_0| + |\beta_0| > 0$ gilt und das Verfahren ist explizit, falls $\beta_m = 0$

- 7 Der Speicheraufwand eines Mehrschrittverfahrens steigt linear mit dem Parameter m

Mehrschrittverfahren

Definition 3.3: Sei $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Lösung der Dgl (1.1), dann heißt

$$\eta(t, \Delta t) = \sum_{j=0}^m \alpha_j y(t + j\Delta t) - \Delta t \phi(t, y(t), y(t + \Delta t), \dots, y(t + m\Delta t); \Delta t) \quad (3.2)$$

für $t \in [a, b]$, $0 \leq \Delta t \leq (b - t)/m$ lokaler Diskretisierungsfehler im Punkt $(t + m\Delta t, y(t + m\Delta t))$ bezüglich der Schrittweite Δt

Mehrschrittverfahren

Defintion 3.4: Ein Mehrschrittverfahren heißt konsistent von der Ordnung $p \in \mathbb{N}$ zur Dgl (1.3), falls der durch (3.2) definierte lokale Diskretisierungsfehler der Bedingung

$$\eta(t, \Delta t) = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1}), \quad \Delta t \rightarrow 0$$

für alle $t \in [a, b]$ genügt. Im Fall $p = 1$ spricht man auch einfach von Konsistenz.

Bemerkung: Die Konsistenzordnung wird auch oft als Ordnung bezeichnet.

Mehrschrittverfahren

Satz 3.5: Ein lineares Mehrschrittverfahren besitzt genau dann die Konsistenzordnung p , wenn eine der folgenden äquivalenten Bedingungen

① $\sum_{j=0}^m \alpha_j = 0$ und $\sum_{j=0}^m \alpha_j j^q = q \sum_{j=0}^m \beta_j j^{q-1}$ für $q = 1, \dots, p$

② $\varrho(e^{\Delta t}) - \Delta t \sigma(e^{\Delta t}) = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1})$ für $\Delta t \rightarrow 0$

③ $\varrho(\xi)/\ln(\xi) - \sigma(\xi) = \mathcal{O}((\xi - 1)^p)$ für $\xi \rightarrow 1$

erfüllt ist. Hierbei bezeichnen ϱ und σ das erste bzw. zweite charakteristische Polynom

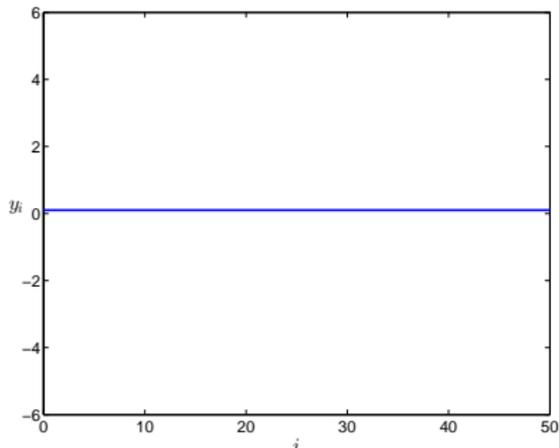
$$\varrho(\xi) = \sum_{j=0}^m \alpha_j \xi^j, \quad \sigma(\xi) = \sum_{j=0}^m \beta_j \xi^j.$$

Mehrschrittverfahren

Differentialgleichung: $y'(t) = 0$

Differenzgleichung: $y_{i+2} = 4/3y_{i+1} - 1/3y_i$ mit $y_0 = y_1 = 0.1$

i	y_i
0	1.0000000000000001e-01
5	1.0000000000000001e-01
10	1.0000000000000001e-01
15	1.0000000000000001e-01
20	1.0000000000000001e-01
25	1.0000000000000001e-01
30	1.0000000000000001e-01
35	1.0000000000000001e-01
40	1.0000000000000001e-01
45	1.0000000000000001e-01
50	1.0000000000000001e-01

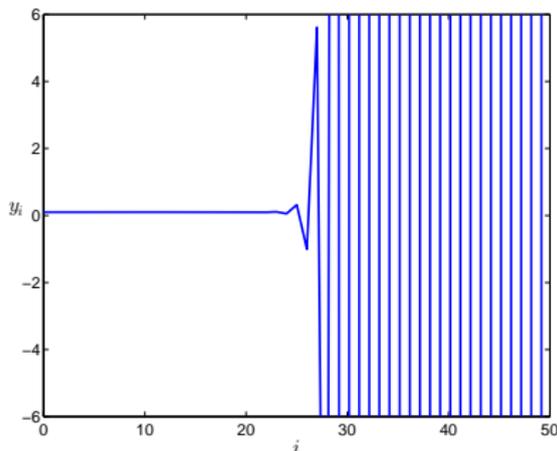


Mehrschrittverfahren

Differentialgleichung: $y'(t) = 0$

Differenzgleichung: $y_{i+2} = -4y_{i+1} + 5y_i$ mit $y_0 = y_1 = 0.1$

i	y_i
0	1.0000000000000001e-01
5	1.00000000000000231e-01
10	9.9999999992771982e-02
15	1.0000002258754526e-01
20	9.9929413921062138e-02
25	3.2058149668080738e-01
30	-6.8921717712752297e+02
35	2.1541162785235094e+06
40	-6.7316130577859659e+09
45	2.1036290805893746e+13
50	-6.5738408768417640e+16



Mehrschrittverfahren

Satz: Jede Lösung $(y_n)_{n \in \mathbb{N}}$ der homogenen Differenzgleichung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = 0 \text{ für } i = 0, 1, 2, \dots$$

mit $\alpha_j \in \mathbb{C}$ und $\alpha_m \neq 0$ ist von der Form

$$y_n = \sum_{k=1}^q \left[\sum_{l=0}^{p_k-1} \beta_{kl} n^l \right] \xi_k^n$$

mit $\beta_{kl} \in \mathbb{C}$. Dabei bezeichnet ξ_1, \dots, ξ_q die Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$\varrho(\xi) = \sum_{j=0}^m \alpha_j \xi^j$$

und p_1, \dots, p_q deren Vielfachheit. Weiter gilt $\sum_{k=1}^q p_k = m$.

Mehrschrittverfahren

Bemerkung: Sind alle Nullstellen ξ_k verschieden, d. h. $p_k = 1$ für $k = 1, \dots, m$, so ergibt sich die Darstellung der Lösung der homogenen Differenzgleichung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = 0 \text{ für } i = 0, 1, 2, \dots$$

mit $\alpha_j \in \mathbb{C}$ und $\alpha_m \neq 0$ in der Form

$$y_n = \sum_{k=1}^m \gamma_k \xi_k^n$$

mit $\gamma_k \in \mathbb{C}$.

Mehrschrittverfahren

Korollar: Folgende Aussagen sind äquivalent:

- ① Für jede Lösung der homogenen Differenzengleichung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = 0 \text{ für } i = 0, 1, 2, \dots$$

gilt

$$\sup_{n \in \mathbb{N}} |y_n| < \infty.$$

- ② Für jede Nullstelle ξ des charakteristischen Polynoms ϱ gilt:

$$|\xi| \leq 1 \text{ und hat Vielfachheit } 1, \text{ falls } |\xi| = 1$$

Mehrschrittverfahren

Definition 3.6: Ein m -Schrittverfahren zur Lösung des AWP (1.3), (1.4) heißt nullstabil, falls das zugehörige erste charakteristische Polynom

$$\varrho(\xi) = \sum_{j=0}^m \alpha_j \xi^j$$

der Dahlquist'schen Wurzelbedingung

▶ $\varrho(\xi) = 0 \Rightarrow |\xi| \leq 1$

▶ $\varrho(\xi) = 0, |\xi| = 1 \Rightarrow \xi$ ist einfache Nullstelle von ϱ

genügt.

Mehrschrittverfahren

Bemerkungen:

- 1 Anschaulich bedeutet die Nullstabilität, dass die parasitären Lösungskomponenten die Hauptlösungskomponente nicht zu stark beeinflussen.
- 2 Einschrittverfahren $y_{i+1} = y_i + \Delta t \phi(t_i, y_i, y_{i+1}; \Delta t)$ sind wegen $\varrho(\xi) = \xi - 1$ stets nullstabil. Daher gilt für Einschrittverfahren, dass aus Konsistenz direkt die Konvergenz folgt.
- 3 Die Existenz parasitärer Lösungskomponenten erklärt sich dadurch, dass eine Dgl erster Ordnung bei m -Schrittverfahren durch eine Differenzengleichung m -ter Ordnung mit m linear unabhängigen Lösungen approximiert wird.
- 4 Nullstabilität wird auch D-Stabilität in Würdigung von G. Dahlquist genannt.

Mehrschrittverfahren

Definition 3.7: Sei $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Lösung des AWP (1.5),(1.6) und y_i , $i = m, m + 1, \dots$ die durch ein m -Schrittverfahren bei Vorgabe der Startwerte y_0, \dots, y_{m-1} mit einer Schrittweite Δt erzeugten Näherungswerte an $y(t_i)$, $t_i = a + i\Delta t \in [a, b]$, dann heißt

$$e(t_i; \Delta t) = y(t_i) - y_i, \quad i = m, m + 1, \dots$$

der globale Diskretisierungsfehler zum Zeitpunkt t_i .

Mehrschrittverfahren

Definition 3.8: Ein m -Schrittverfahren mit Startwerten

$$y_j - y(t_j) = \mathcal{O}(\Delta t^p), \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad j = 0, \dots, m-1$$

heißt konvergent von der Ordnung p , wenn

$$\max_{j=m, \dots, n} |e(t_j; \Delta t)| = \mathcal{O}(\Delta t^p), \quad \Delta t \rightarrow 0$$

gilt.

Mehrschrittverfahren

Satz 3.9: Ein konvergentes lineares Mehrschrittverfahren ist notwendig konsistent und nullstabil.

Mehrschrittverfahren

Lemma 3.10: (Gronwall) Genügt die integrierbare Funktion $g : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ der Bedingung

$$g(t) \leq \alpha + \beta \int_0^t g(s) ds, \quad t \in [0, T] \quad (3.13)$$

mit Konstanten $\alpha \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}_0^+$, dann gilt

$$g(t) \leq \alpha e^{\beta t}, \quad t \in [0, T].$$

Mehrschrittverfahren

Lemma 3.11: (Diskretes Gronwall-Lemma)

Sei $h_0, \dots, h_{r-1} \in \mathbb{R}^+$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_0^+$ gegeben. Genügen die Zahlen $v_0, \dots, v_r \in \mathbb{R}$ den Ungleichungen

$$|v_0| \leq \alpha, \quad |v_l| \leq \alpha + \beta \sum_{j=0}^{l-1} h_j |v_j|, \quad l = 1, \dots, r,$$

dann gilt

$$|v_l| \leq \alpha \exp\left(\beta \sum_{j=0}^{l-1} h_j\right), \quad l = 0, \dots, r.$$

Mehrschrittverfahren

Lemma 3.12: Sei

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & 1 \\ -a_0 & \dots & -a_{m-2} & -a_{m-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m},$$

dann gilt

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = a_0 + a_1 \lambda + a_2 \lambda^2 + \dots + a_{m-1} \lambda^{m-1} + \lambda^m.$$

Mehrschrittverfahren

Lemma 3.13: Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, dann ist die Folge der Matrizen $(\mathbf{A}^k)_{k \in \mathbb{N}}$ genau dann beschränkt genau dann,

- 1 wenn der Spektralradius $\varrho(\mathbf{A})$ der Bedingung $\varrho(\mathbf{A}) \leq 1$ genügt
- 2 und wenn für jeden Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ von \mathbf{A} mit $|\lambda| = 1$ algebraische und geometrische Vielfachheit übereinstimmen.

Mehrschrittverfahren

Satz 3.14:

Ein m -Schrittverfahren $\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = \Delta t \phi(t_i, y_i, \dots, y_{i+m}; \Delta t)$ sei nullstabil und die Verfahrensfunktion ϕ genüge der Lipschitz-Bed.

$$|\phi(t, v_0, \dots, v_m; \Delta t) - \phi(t, w_0, \dots, w_m; \Delta t)| \leq L \sum_{j=0}^m |v_j - w_j| \quad (3.15)$$

mit $L \geq 0$. Dann existieren Konstanten $K \geq 0$ und $H \geq 0$ derart, dass für $0 < \Delta t = (b - a)/n \leq H$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} \max_{j=0, \dots, n} |y_j - y(t_j)| \\ \leq K \left(\max_{k=0, \dots, m-1} |y_k - y(t_k)| + 1/\Delta t \max_{a \leq t \leq b-m\Delta t} |\eta(t; \Delta t)| \right) \end{aligned}$$

mit der exakten Lösung y des AWP (1.3), (1.4) gilt.

Spezielle Mehrschrittverfahren

Definition 3.15: Für gegebene Daten $g_0, \dots, g_r \in \mathbb{R}$ sind die Rückwärtsdifferenzen $\nabla^k g_\nu$ für $0 \leq k \leq \nu \leq r$ rekursiv durch

$$\begin{aligned}\nabla^0 g_\nu &= g_\nu & \nu &= 0, \dots, r \\ \nabla^k g_\nu &= \nabla^{k-1} g_\nu - \nabla^{k-1} g_{\nu-1} & \nu &= k, k+1, \dots, r \\ & & k &= 1, 2, \dots, r\end{aligned}$$

erklärt.

Spezielle Mehrschrittverfahren

Lemma 3.16: Für die Rückwärtsdifferenzen $\nabla^k g_\nu$ eines Datensatzes $g_0, \dots, g_r \in \mathbb{R}$ gilt

$$\nabla^k g_\nu = \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k}{j} g_{\nu-j}$$

für $0 \leq k \leq \nu \leq r$.

Spezielle Mehrschrittverfahren

Lemma 3.17: Gegeben seien $r + 1$ äquidistante Stützstellen $t_i = t_0 + i\Delta t \in \mathbb{R}$ für $i = 0, \dots, r$ mit $\Delta t > 0$. Dann besitzt das zu den Stützpunkten $(t_0, g_0), \dots, (t_r, g_r) \in \mathbb{R}^2$ gehörige, eindeutig bestimmte Interpolationspolynom $p \in \Pi_r$ die Gestalt

$$p(t_r + s\Delta t) = \sum_{k=0}^r (-1)^k \binom{-s}{k} \nabla^k g_r, \quad s \in \mathbb{R},$$

wobei

$$\binom{-s}{k} = \frac{(-s)(-s-1)\cdots(-s-k+1)}{k!} = \frac{(-1)^k}{k!} s(s+1)\cdots(s+k-1)$$

gilt und wir $\binom{-s}{0} = 1$ setzen.

Spezielle Mehrschrittverfahren

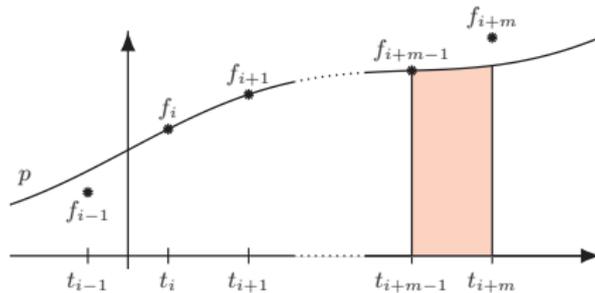
Lemma 3.18: Sei $g \in C^{r+1}[c, d]$ und $p \in \Pi_r$ das zu den äquidistanten Stützstellen $t_i = t_0 + i\Delta t \in [c, d]$ gehörige Interpolationspolynom mit $p(t_i) = g_i$ für $i = 1, \dots, r$, dann besitzt der Interpolationsfehler in $t_r + s\Delta t \in [c, d]$ die Darstellung

$$g(t_r + s\Delta t) - p(t_r + s\Delta t) = (-1)^{r+1} \binom{-s}{r+1} g^{(r+1)}(\xi(s)) \Delta t^{r+1}$$

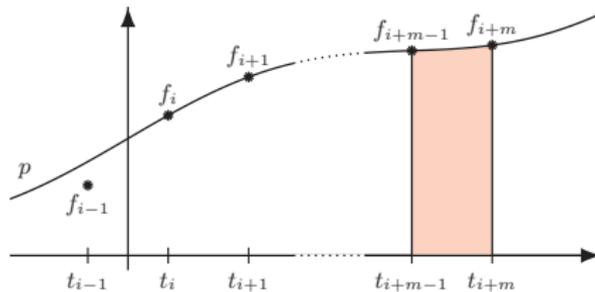
mit einer geeigneten Zwischenstelle $\xi(s) \in [c, d]$.

Adams-Verfahren

Adams-Bashfort



Adams Moulton



Adams-Verfahren

Definition 3.19: Legt man das in

$$y_{i+m} - y_{i+m-1} = \int_{t_{i+m-1}}^{t_{i+m}} p(t) dt, \quad i = 0, \dots, n - m,$$

aufretende Polynom p gemäß $p \in \Pi_{m-1}$ mit $p(t_j) = f_j := f(t_j, y_j)$ für $j = i, i + 1, \dots, i + m - 1$ fest, so spricht man von einem m -stufigen Adams-Bashfort-Verfahren.

Adams-Verfahren

Satz 3.20: Das m -schrittige Adams-Bashfort-Verfahren hat die Gestalt

$$y_{i+m} - y_{i+m-1} = \Delta t \sum_{k=0}^{m-1} \gamma_k \nabla^k f_{i+m-1}, \quad i = 0, 1, \dots, n - m \quad (3.20)$$

mit den Koeffizienten

$$\gamma_k = (-1)^k \int_0^1 \binom{-s}{k} ds, \quad k = 0, 1, \dots, m - 1, \quad (3.21)$$

die sich rekursiv durch

$$\frac{1}{k+1} \gamma_0 + \frac{1}{k} \gamma_1 + \dots + \frac{1}{2} \gamma_{k-1} + \gamma_k = 1, \quad k = 0, 1, \dots, m - 1 \quad (3.22)$$

berechnen lassen.

Adams-Verfahren

Satz 3.21: Das m -schrittige Adams-Bashfort-Verfahren ist nullstabil. Für $f \in C^m([a, b] \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$ besitzt es die Konsistenzordnung $p = m$.

Adams-Verfahren

Definition 3.22: Legt man das in

$$y(t_{i+m}) - y(t_{i+m-1}) = \int_{t_{i+m-1}}^{t_{i+m}} p(t) dt, \quad i = 0, \dots, n - m,$$

aufretende Polynom p gemäß $p \in \Pi_m$ mit $p(t_j) = f_j := f(t_j, y_j)$ für $j = i, i + 1, \dots, i + m$ fest, so spricht man von einem m -schrittigen Adams-Moulton-Verfahren.

Adams-Verfahren

Satz 3.23: Das m -schrittige Adams-Moulton-Verfahren hat die Gestalt

$$y_{i+m} - y_{i+m-1} = \Delta t \sum_{k=0}^m \gamma_k^* \nabla^k f_{i+m}, \quad i = 0, 1, \dots, n - m \quad (3.20)$$

mit den Koeffizienten

$$\gamma_k^* = (-1)^k \int_0^1 \binom{-s}{k} ds, \quad k = 0, 1, \dots, m, \quad (3.21)$$

die sich rekursiv durch $\gamma_0^* = 1$ und

$$\frac{1}{k+1} \gamma_0^* + \frac{1}{k} \gamma_1^* + \dots + \frac{1}{2} \gamma_{k-1}^* + \gamma_k^* = 0, \quad k = 1, \dots, m \quad (3.22)$$

berechnen lassen.

Adams-Verfahren

Satz 3.24: Das m -schrittige Adams-Moulton-Verfahren ist nullstabil. Für $f \in C^{m+1}([a, b] \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$ besitzt es die Konsistenzordnung $p = m + 1$.

Milne-Simpson-Verfahren

Das m -schrittige Milne-Simpson-Verfahren ergibt sich für $m \geq 2$ durch Verwendung des Polynoms $p \in \Pi_{m-1}$ mit $p(t_j) = f_j := f(t_j, y_j)$ für $j = i, i+1, \dots, i+m$ innerhalb der Gleichung (3.27).

Es hat die Gestalt

$$y_{i+m} - y_{i+m-2} = \Delta t \sum_{k=0}^m \gamma_k^* \nabla^k f_{i+m}, \quad i = 0, 1, \dots, n-m$$

mit den Koeffizienten

$$\gamma_k^* = (-1)^k \int_{-2}^0 \binom{-s}{k} ds, \quad k = 0, \dots, m$$

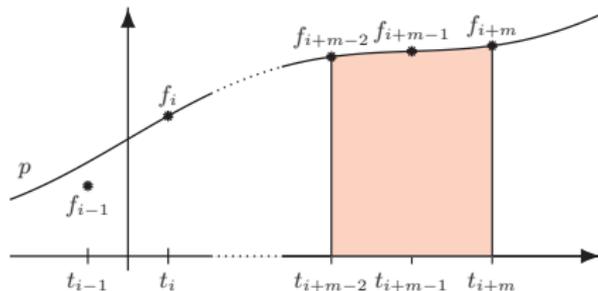
die sich rekursiv durch $\gamma_0^* = 2$, $\gamma_1^* = -2$ und

$$\frac{1}{k+1} \gamma_0^* + \frac{1}{k} \gamma_1^* + \dots + \frac{1}{2} \gamma_{k-1}^* + \gamma_k = 0, \quad k = 2, \dots, m$$

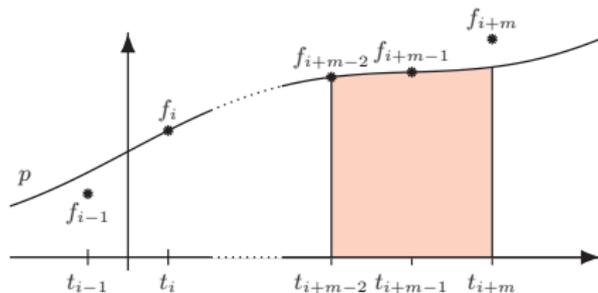
berechnen lassen.

Milne-Simpson- und Nyström-Verfahren

Milne-Simpson-Verfahren



Nyström-Verfahren



Milne-Simpson-Verfahren

In klassischer Form lautet das Verfahren

$$y_{i+m} - y_{i+m-2} = \Delta t \sum_{j=0}^m \beta_{m,j}^* f_{i+j}, \quad i = 0, \dots, n - m$$

mit

$$\beta_{m,j}^* = (-1)^{m-j} \sum_{k=m-j}^m \binom{k}{m-j} \gamma_k^*, \quad j = 0, \dots, m.$$

Wir erhalten die von m unabhängigen Koeffizienten

$$\gamma_0^* = 2, \gamma_1^* = -2, \gamma_2^* = 1/3, \gamma_3^* = 0, \gamma_4^* = -1/90$$

und somit die Milne-Simpson-Verfahren

$$y_{i+2} = y_i + (1/3)\Delta t(f_{i+2} + 4f_{i+1} + f_i)$$

$$y_{i+4} = y_{i+2} + (1/90)\Delta t(29f_{i+4} + 124f_{i+3} + 24f_{i+2} + 4f_{i+1} - f_i)$$

Milne-Simpson-Verfahren

- ▶ Für $m = 2$ erhält man das sogenannte Verfahren nach Milne, das der Simpson-Regel zur numerischen Integration entspricht.
- ▶ Für $m = 3$ ergibt sich ein zu $m = 2$ analoges Verfahren.
- ▶ Das m -schrittige Milne-Simpson-Verfahren ist für $m \geq 2$ stets nullstabil und weist für eine hinreichend glatte Funktion f die Konsistenzordnung

$$p = \begin{cases} 4, & m = 2 \\ m + 1, & m \geq 3 \end{cases}$$

auf.

- ▶ Nach Konstruktion sind Milne-Simpson-Verfahren stets implizit.

BDF-Verfahren

Definition 3.25: Bei gegebenen Werten y_i, \dots, y_{i+m-1} mit zugehörigen Zeitpunkten $t_{i+j} = t_i + j\Delta t$ für $j = 0, \dots, m-1$ ermittelt ein m -schrittiges BDF-Verfahren mit $m \geq 1$ den Wert y_{i+m} zum Zeitpunkt $t_{i+m} = t_i + m\Delta t$ durch

$$y_{i+m} = p(t_{i+m}) \quad (3.28)$$

mit dem durch

$$p(t_{i+j}) = y_{i+j}, \quad j = 0, \dots, m-1 \quad (3.29)$$

und

$$p'(t_{i+m}) = f(t_{i+m}, y_{i+m}) \quad (3.30)$$

festgelegten Polynom $p \in \Pi_m$.

Satz 3.26: Das m -schrittige BDF-Verfahren hat die Gestalt

$$\sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \nabla^k y_{i+m} = \Delta t f_{i+m} \quad (3.31)$$

für $i = 0, 1, 2, \dots, n - m$.

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

- ▶ Modellproblem:

$$\begin{aligned}y'(t) &= k(c_0 - y(t)), & t \in \mathbb{R}_0^+ \\ y(0) &= 0\end{aligned}$$

mit $k = 0.3$ und $c_0 = 10$.

- ▶ Lösung:

$$y(t) = c_0(1 - e^{-kt})$$

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Gruppe A: Explizite Einschrittverfahren

Verfahrensname	Ordnung p	Abkürzung
Explizites Euler-Verfahren	1	EE
Runge-Verfahren	2	Runge
Heun-Verfahren	2	Heun
3-stufiges Runge-Kutta-Verfahren	3	ERK3
Klassisches Runge-Kutta-Verfahren	4	ERK4

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Gruppe B: Implizite Einschrittverfahren

Verfahrensname	Ordnung p	Abkürzung
Implizites Euler-Verfahren	1	IE
Implizite Mittelpunkregel	2	IM
Implizite Trapezregel	2	IT
SDIRK-Verfahren	3	SDIRK
Implizites Verfahren nach Hammer und Hollingsworth	4	IHH

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Gruppe C: Explizite Mehrschrittverfahren

Verfahrensname	Ordnung p	Abkürzung
Adams-Bashfort-Verfahren $m = 2$	2	AB2
Adams-Bashfort-Verfahren $m = 3$	3	AB3
Nyström-Verfahren $m = 2$	2	NYS2
Nyström-Verfahren $m = 3$	3	NYS3

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Gruppe D: Implizite Mehrschrittverfahren

Verfahrensname	Ordnung p	Abkürzung
Adams-Moulton-Verfahren $m = 2$	3	AM2
Adams-Moulton-Verfahren $m = 3$	4	AM3
Milne-Simpson-Verfahren $m = 2$	4	MS2
BDF(2)-Verfahren $m = 2$	2	BDF2
BDF(3)-Verfahren $m = 3$	3	BDF3

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Fehlerverläufe für $|e(5, \Delta t)| = |y(5) - y_{num}(5, \Delta t)|$

Gruppe A: Explizite Einschrittverfahren

Δt	EE	Runge/Heun	ERK3	ERK4
1	$5.51 \cdot 10^{-1}$	$6.37 \cdot 10^{-2}$	$4.79 \cdot 10^{-3}$	$2.90 \cdot 10^{-4}$
0.5	$2.63 \cdot 10^{-1}$	$1.41 \cdot 10^{-2}$	$5.31 \cdot 10^{-4}$	$1.60 \cdot 10^{-5}$
0.1	$5.07 \cdot 10^{-2}$	$5.14 \cdot 10^{-4}$	$3.86 \cdot 10^{-6}$	$2.32 \cdot 10^{-8}$
0.05	$2.52 \cdot 10^{-2}$	$1.27 \cdot 10^{-4}$	$4.76 \cdot 10^{-7}$	$1.43 \cdot 10^{-9}$
0.01	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$5.04 \cdot 10^{-6}$	$3.77 \cdot 10^{-9}$	$2.27 \cdot 10^{-12}$

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Fehlerverläufe für $|e(5, \Delta t)| = |y(5) - y_{num}(5, \Delta t)|$

Gruppe B: Implizite Einschrittverfahren

Δt	IE	IM/IT	SDIRK	IHH
1	$4.62 \cdot 10^{-1}$	$2.53 \cdot 10^{-2}$	$6.39 \cdot 10^{-4}$	$3.79 \cdot 10^{-5}$
0.5	$2.41 \cdot 10^{-1}$	$6.29 \cdot 10^{-3}$	$7.62 \cdot 10^{-5}$	$2.36 \cdot 10^{-6}$
0.1	$4.98 \cdot 10^{-2}$	$2.51 \cdot 10^{-4}$	$5.88 \cdot 10^{-7}$	$3.77 \cdot 10^{-9}$
0.05	$2.50 \cdot 10^{-2}$	$6.28 \cdot 10^{-5}$	$7.31 \cdot 10^{-8}$	$2.35 \cdot 10^{-10}$
0.01	$5.02 \cdot 10^{-3}$	$2.51 \cdot 10^{-6}$	$5.83 \cdot 10^{-10}$	$3.81 \cdot 10^{-13}$

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Fehlerverläufe für $|e(5, \Delta t)| = |y(5) - y_{num}(5, \Delta t)|$

Gruppe C: Explizite Mehrschrittverfahren

Δt	AB2	AB3	NYS2	NYS3
1	$1.19 \cdot 10^{-1}$	$2.87 \cdot 10^{-2}$	$2.18 \cdot 10^{-2}$	$3.04 \cdot 10^{-2}$
0.5	$3.08 \cdot 10^{-2}$	$3.99 \cdot 10^{-3}$	$2.25 \cdot 10^{-2}$	$5.64 \cdot 10^{-4}$
0.1	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.35 \cdot 10^{-5}$	$5.95 \cdot 10^{-4}$	$7.90 \cdot 10^{-6}$
0.05	$3.13 \cdot 10^{-4}$	$4.22 \cdot 10^{-6}$	$1.37 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{-6}$
0.01	$1.25 \cdot 10^{-5}$	$3.39 \cdot 10^{-8}$	$5.12 \cdot 10^{-6}$	$1.42 \cdot 10^{-8}$

Ein- und Mehrschrittverfahren im Vergleich

Fehlerverläufe für $|e(5, \Delta t)| = |y(5) - y_{num}(5, \Delta t)|$

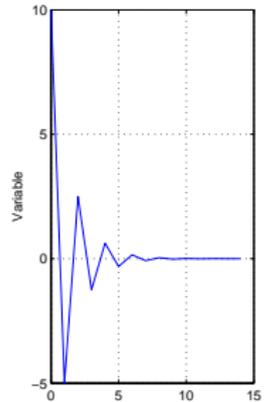
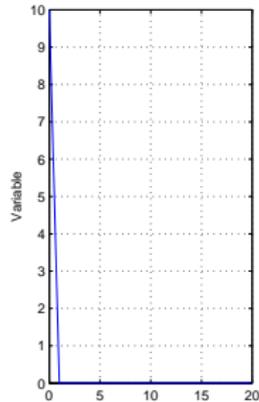
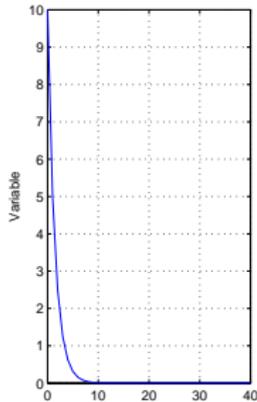
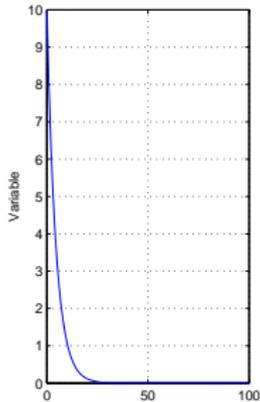
Gruppe D: Implizite Mehrschrittverfahren

Δt	AM2	AM3	MS2	BDF2	BDF3
1	$3.45 \cdot 10^{-3}$	$4.36 \cdot 10^{-4}$	$1.46 \cdot 10^{-4}$	$8.56 \cdot 10^{-2}$	$1.62 \cdot 10^{-2}$
0.5	$4.50 \cdot 10^{-4}$	$3.72 \cdot 10^{-5}$	$1.67 \cdot 10^{-5}$	$2.39 \cdot 10^{-2}$	$2.55 \cdot 10^{-3}$
0.1	$3.73 \cdot 10^{-6}$	$6.94 \cdot 10^{-8}$	$1.75 \cdot 10^{-8}$	$9.96 \cdot 10^{-4}$	$2.23 \cdot 10^{-5}$
0.05	$4.67 \cdot 10^{-7}$	$4.41 \cdot 10^{-9}$	$1.02 \cdot 10^{-9}$	$2.50 \cdot 10^{-4}$	$2.80 \cdot 10^{-6}$
0.01	$3.76 \cdot 10^{-9}$	$7.07 \cdot 10^{-12}$	$1.61 \cdot 10^{-12}$	$1.00 \cdot 10^{-5}$	$2.26 \cdot 10^{-8}$

A-Stabilität

Stabilität beim expliziten Euler-Verfahren

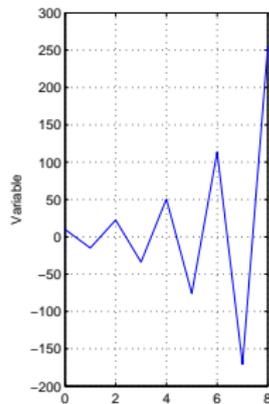
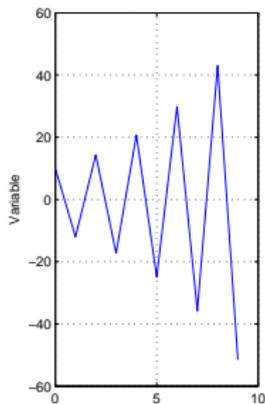
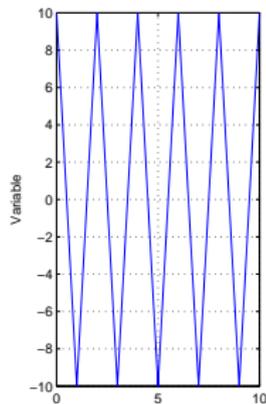
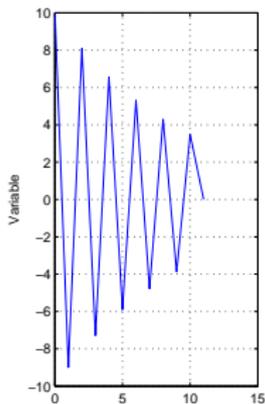
$$\Delta t = 0.2, 0.5, 1.0, 1.5$$



A-Stabilität

Stabilität beim expliziten Euler-Verfahren

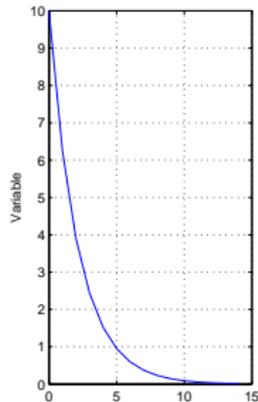
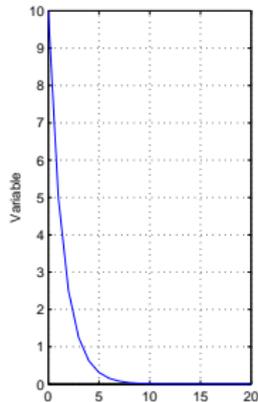
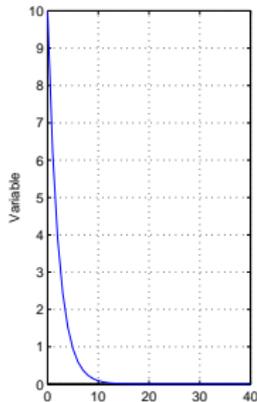
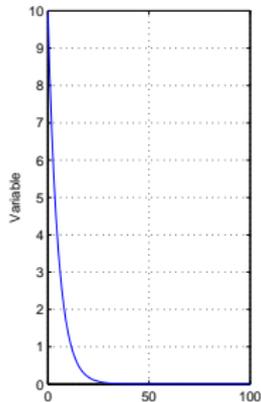
$$\Delta t = 1.9, 2.0, 2.2, 2.5$$



A-Stabilität

Stabilität beim expliziten Runge-Verfahren

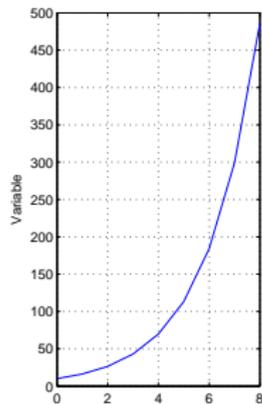
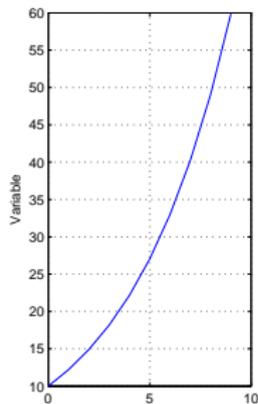
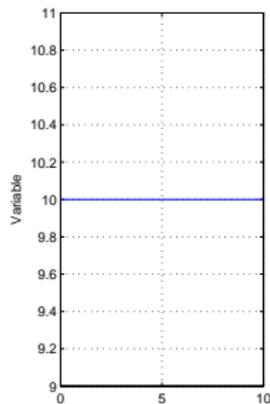
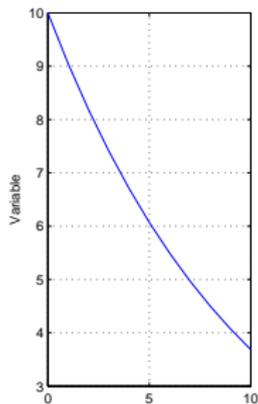
$$\Delta t = 0.2, 0.5, 1.0, 1.5$$



A-Stabilität

Stabilität beim expliziten Runge-Verfahren

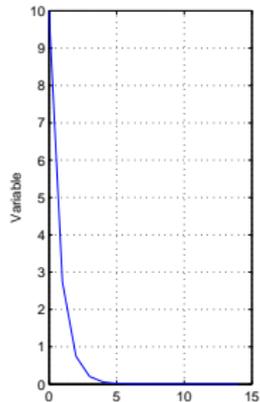
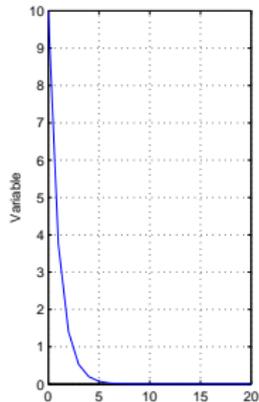
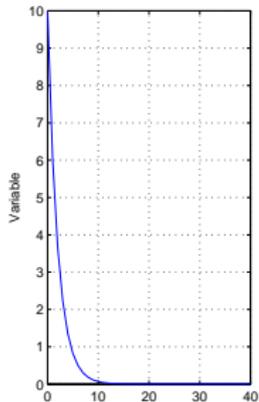
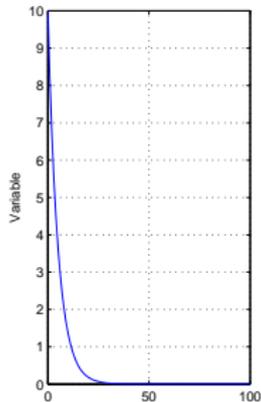
$$\Delta t = 1.9, 2.0, 2.2, 2.5$$



A-Stabilität

Stabilität beim klassischen Runge-Kutta-Verfahren

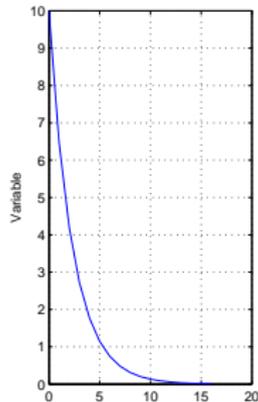
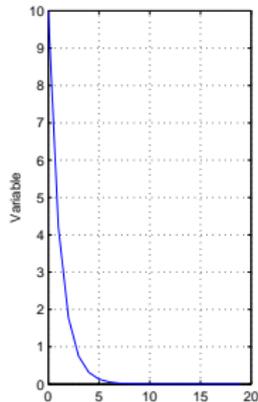
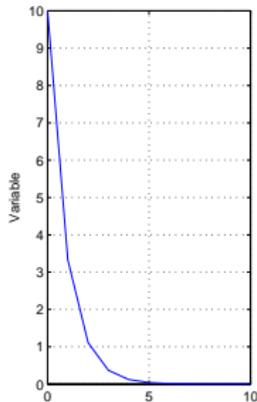
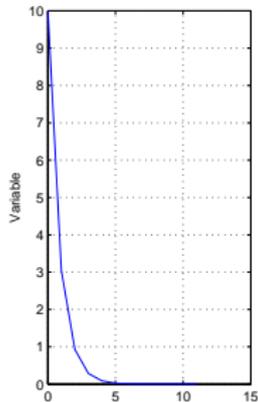
$$\Delta t = 0.2, 0.5, 1.0, 1.5$$



A-Stabilität

Stabilität beim klassischen Runge-Kutta-Verfahren

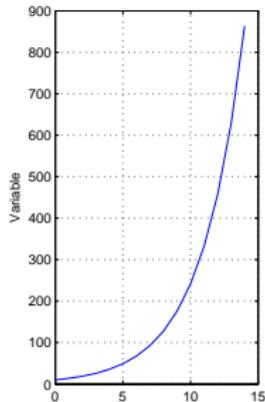
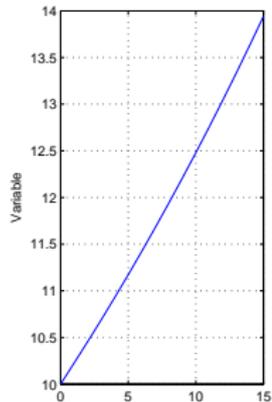
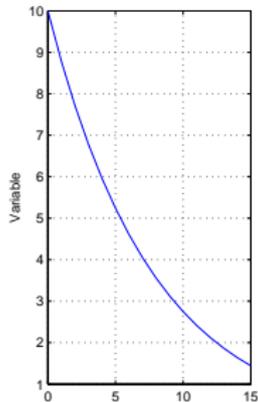
$$\Delta t = 1.9, 2.0, 2.2, 2.5$$



Einschrittverfahren

Stabilität beim klassischen Runge-Kutta-Verfahren

$$\Delta t = 2.7, 2.8, 3.0$$



Definition 4.2:

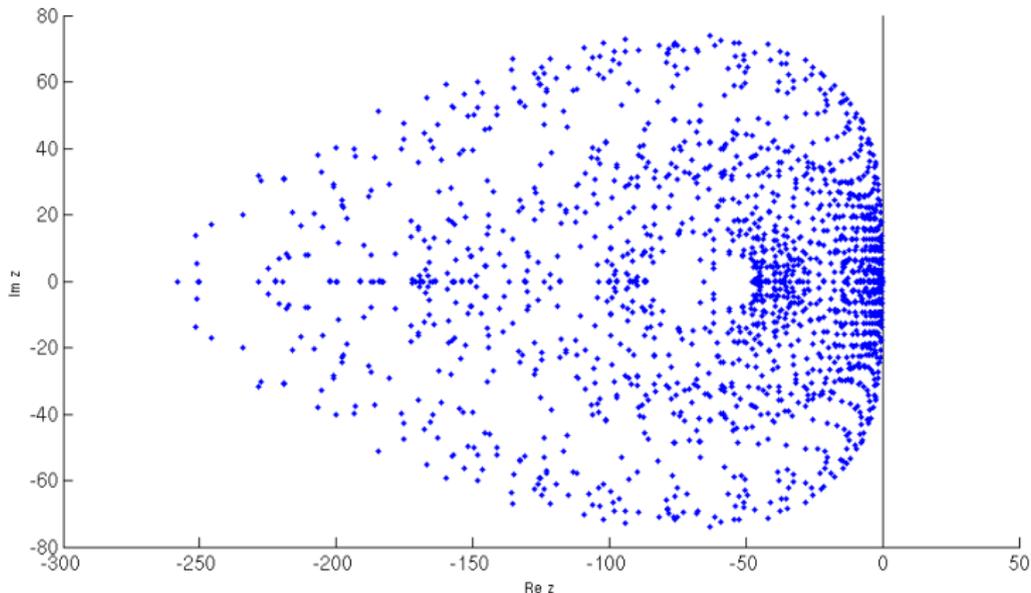
Seien y_i die Näherungen des Testproblems (4.1), (4.2) mit $C = 1$. Dann bezeichnet man ein Verfahren als A-stabil (absolut stabil), falls für beliebiges $\lambda \in \mathbb{C}^- = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re}(\lambda) < 0\}$ die Näherungen bei beliebiger, aber fester Zeitschrittweite $\Delta t > 0$ kontraktiv sind, d.h.

$$|y_{i+1}| < |y_i|$$

für alle $i = 0, 1, \dots$ gilt.

A-Stabilität

Eigenwerte einer 2D Navier-Stokes Discontinuous Galerkin Diskretisierung bei Reynoldszahl $Re = 100$, auf einem 6×6 Gitter mit Ansatzfunktionen 4ter Ordnung.



A-Stabilität

Definition 4.4: Es sei $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$ und $\hat{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$. Die Funktion $R : \hat{\mathbb{C}} \rightarrow \hat{\mathbb{C}}$ mit

$$R(\xi) = \mathbf{1} + \xi \mathbf{b}^T (\mathbf{I} - \xi \mathbf{A})^{-1} \mathbf{1} \quad (4.4)$$

heißt Stabilitätsfunktion zum Runge-Kutta-Verfahren $(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$.

Satz 4.5:

Die zum Runge-Kutta-Verfahren $(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ gehörige Stabilitätsfunktion $R : \hat{\mathbb{C}} \rightarrow \hat{\mathbb{C}}$ ist eine rationale Funktion, deren Zähler- und Nennergrad höchstens s ist und die allenfalls in den Kehrwerten der Eigenwerte von \mathbf{A} Polstellen besitzt.

Bei expliziten Runge-Kutta-Verfahren ist R ein Polynom.

A-Stabilität

Satz 4.6: Ein Runge-Kutta-Verfahren ist genau dann A-stabil, wenn die zugehörige Stabilitätsfunktion R der Bedingung

$$|R(\xi)| < 1$$

für alle $\xi \in \mathbb{C}^-$ genügt.

A-Stabilität

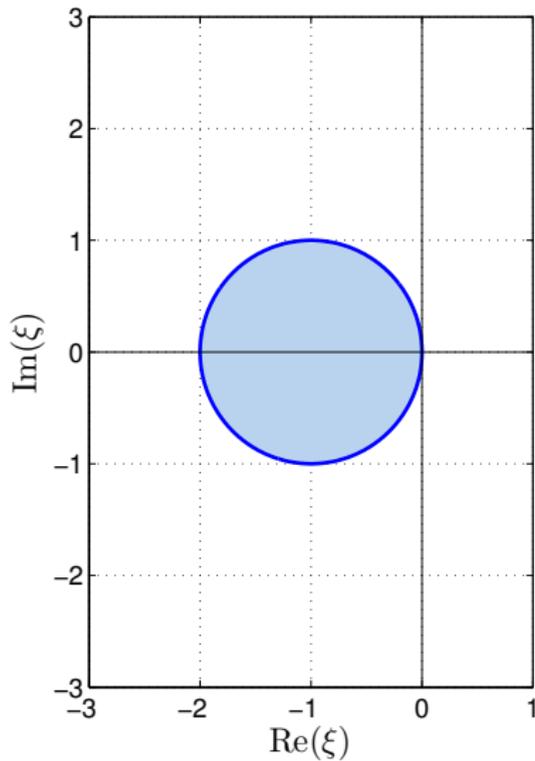
Definition 4.7: Die Menge

$$S = \{\xi \in \mathbb{C} \mid |R(\xi)| < 1\}$$

wird als Stabilitätsgebiet des zu R gehörigen Runge-Kutta-Verfahrens bezeichnet.

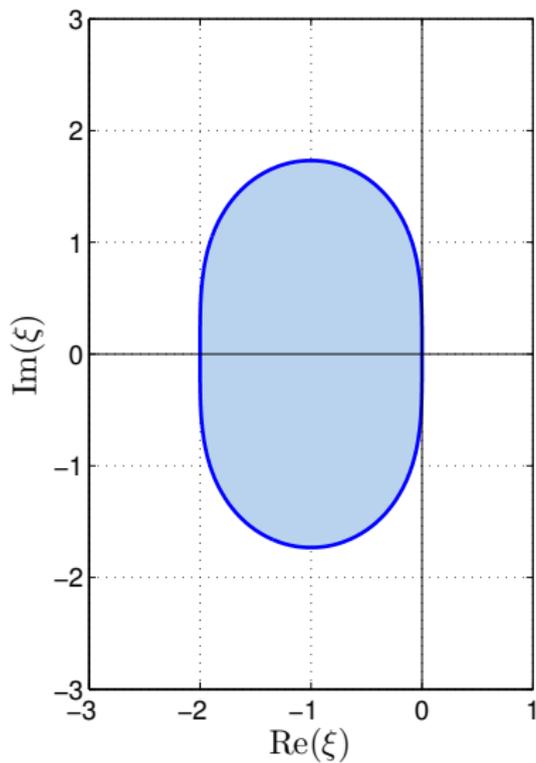
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet des expliziten Euler-Verfahrens



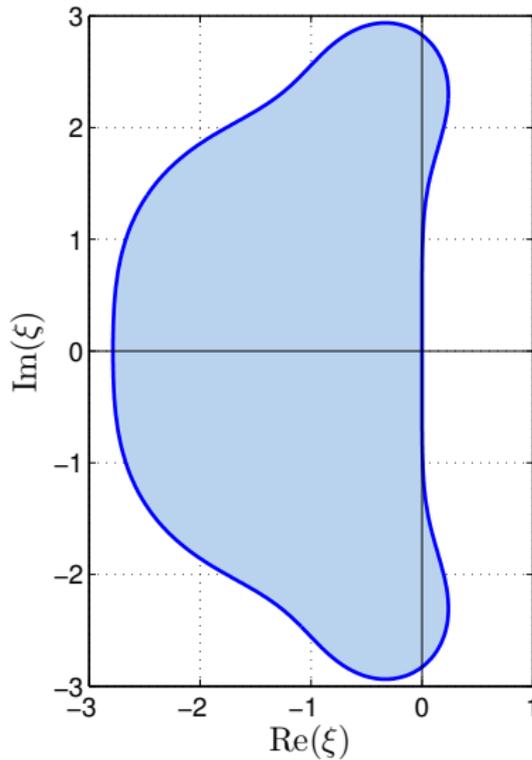
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet der expliziten Mittelpunkregel



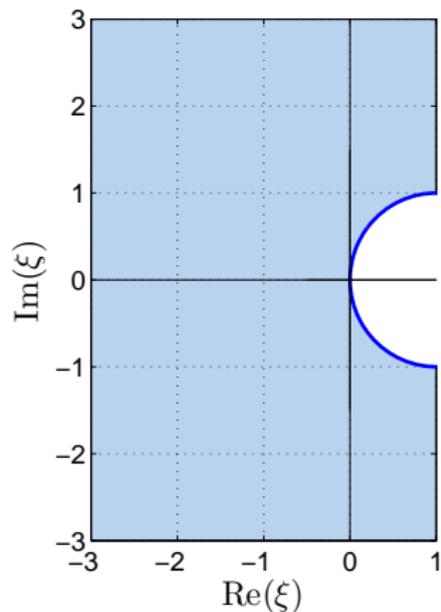
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens



A-Stabilität

Stabilitätsgebiet des impliziten Euler-Verfahrens



Satz 4.9: Sei R die Stabilitätsfunktion eines Runge-Kutta-Verfahrens der Ordnung p , dann gilt

$$R(\Delta t) - e^{\Delta t} = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1})$$

für $\Delta t \rightarrow 0$.

Satz 4.10: Ein s -stufiges explizites Runge-Kutta-Verfahren besitzt höchstens die Konsistenzordnung $p = s$.

A-Stabilität

Satz 4.11: Das Stabilitätsgebiet eines expliziten Runge-Kutta-Verfahrens ist immer beschränkt.

Korollar 4.12:

Es gibt kein A -stabiles explizites Runge-Kutta-Verfahren.

Definition 4.13:

Zu einem linearen Mehrschrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{i+j} = \Delta t \sum_{j=0}^m \beta_j f_{i+j}$$

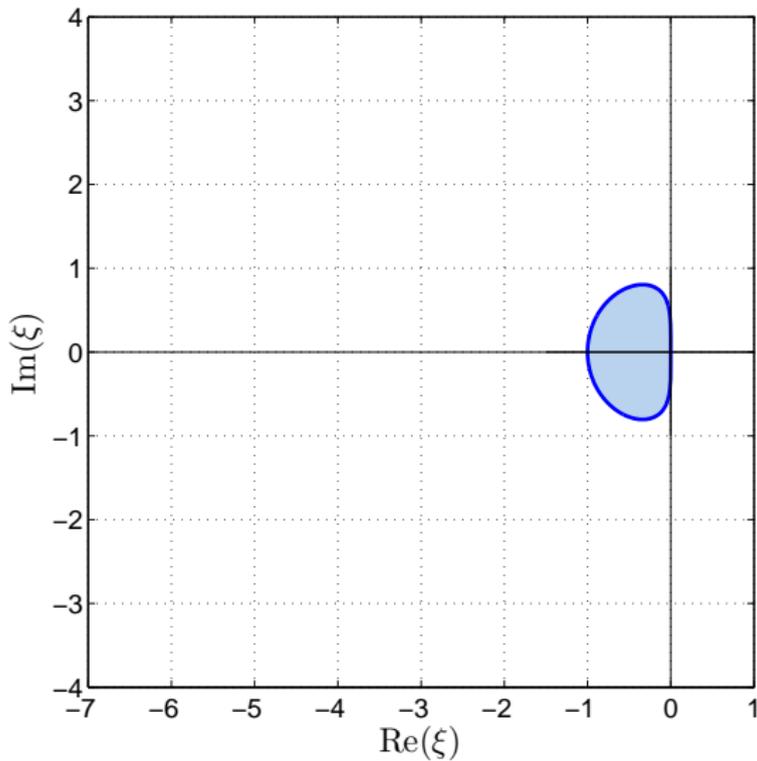
heißt die Menge S aller komplexen Zahlen $\mu = \lambda \Delta t$ mit $\Delta t > 0$, $\lambda \in \mathbb{C}$ für die die charakteristische Gleichung

$$\varphi_\mu(\xi) = \varrho(\xi) - \mu\sigma(\xi) = 0$$

ausschließlich Nullstellen im inneren des komplexen Einheitskreises besitzt, Stabilitätsgebiet des Verfahrens. Gilt $\mathbb{C}^- \subset S$, so wird das Verfahren als A-Stabil bezeichnet.

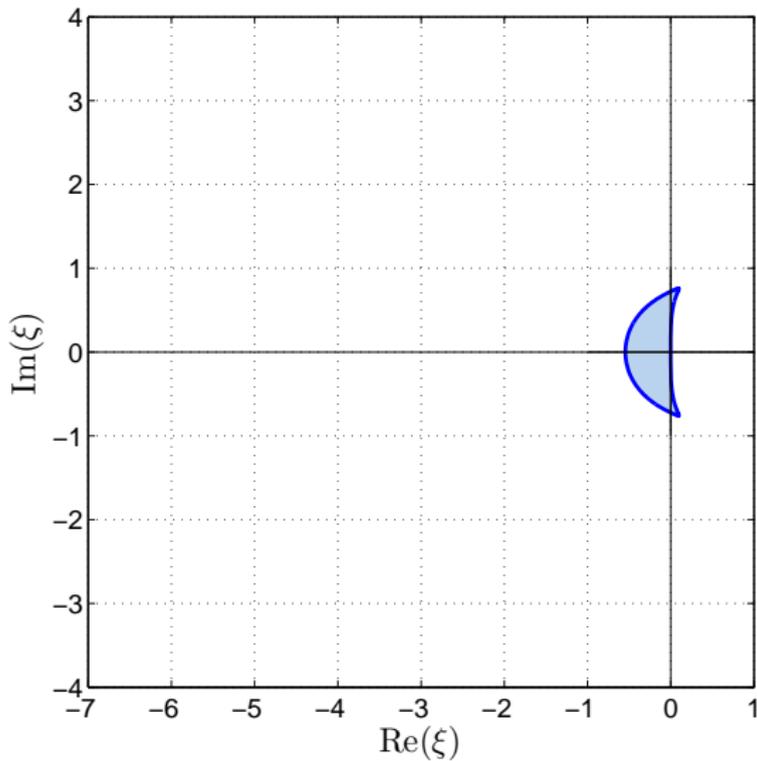
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet AB2:



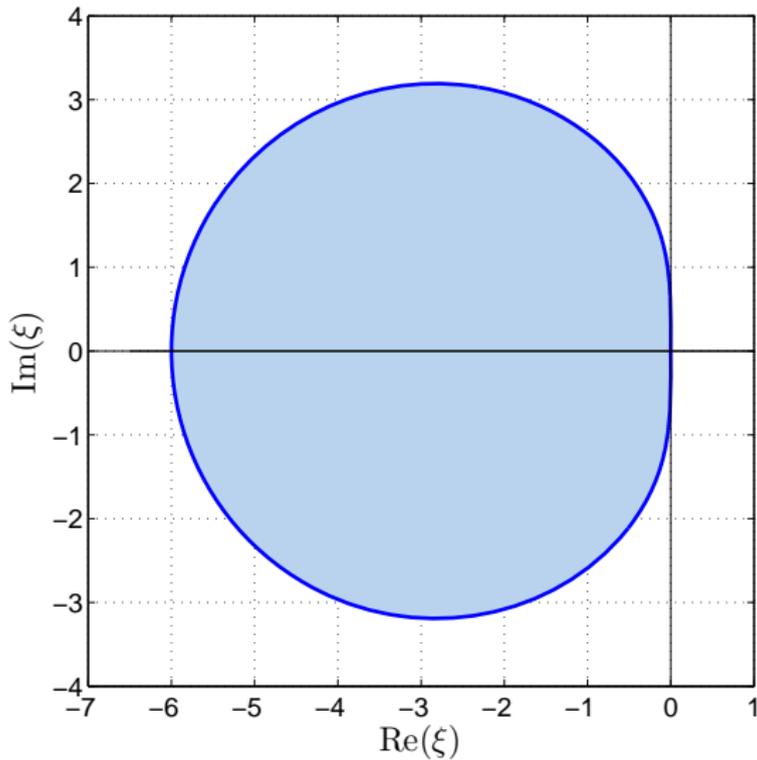
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet AB3:



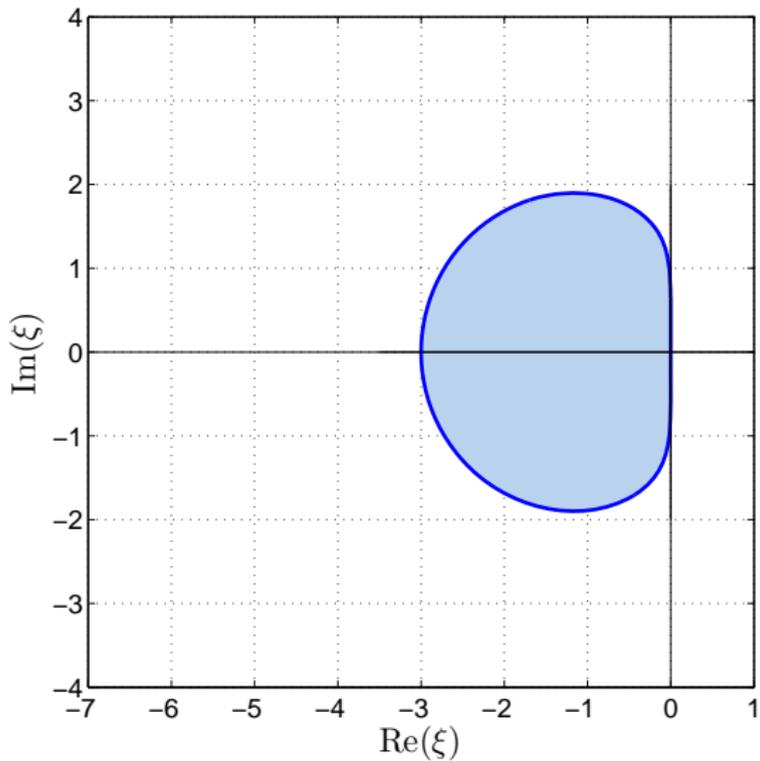
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet AM2:



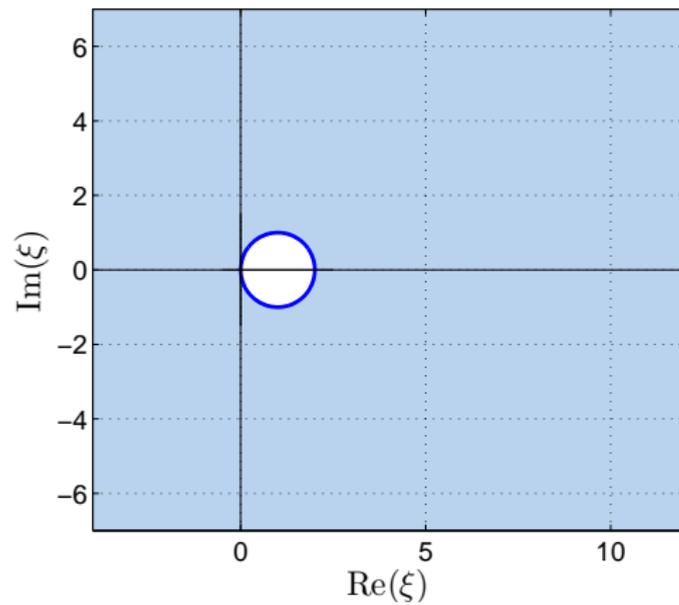
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet AM3:



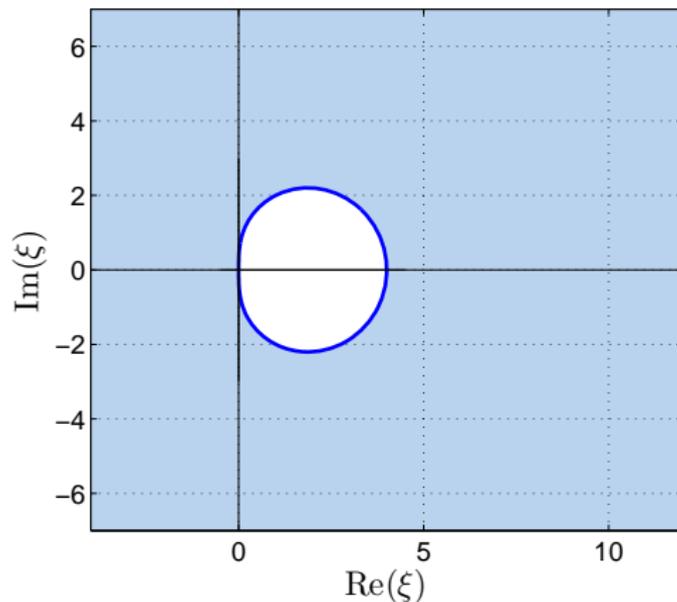
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet BDF1:



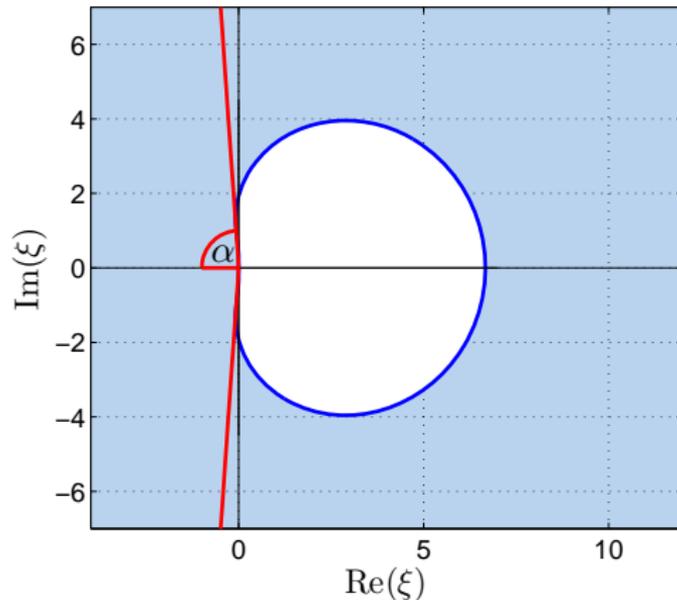
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet BDF2:



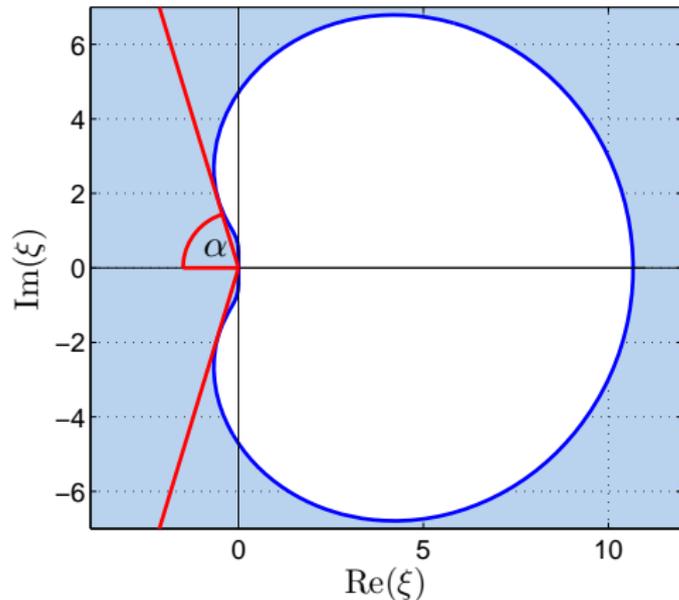
A-Stabilität

Stabilitätsgebiet BDF3: $\alpha = 86^\circ$



A-Stabilität

Stabilitätsgebiet BDF4: $\alpha = 73^\circ$



Zweite Dahlquist-Barriere:

Ein A-stabiles lineares Mehrschrittverfahren hat maximal die Konvergenzordnung $\rho = 2$.

Unter allen A-stabilen Verfahren zweiter Ordnung hat die Trapezregel mit $C = 1/12$ die kleinste Fehlerkonstante.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Defintion 5.1: Sei $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$, dann heißt \mathbf{A} positiv ($\mathbf{A} > 0$) respektive nicht-negativ ($\mathbf{A} \geq 0$), wenn $a_{ij} > 0$ respektive $a_{ij} \geq 0$ für alle $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, n$ gilt.

Defintion 5.2: Das AWP (5.1) heißt positiv respektive nicht-negativ, wenn für alle $c^0 > 0$ respektive $c^0 \geq 0$ stets $c(t) > 0$ respektive $c(t) \geq 0$ für alle $t \in \mathbb{R}^+$ gilt.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lemma 5.3: Das AWP (5.1) ist nicht-negativ, wenn für alle $i = 1, \dots, N$ die Eigenschaft

$$\lim_{c_i \searrow 0} D_i(c) = 0 \quad (5.3)$$

gilt.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Definition 5.4: Das AWP (5.1) heißt unter Berücksichtigung von (5.2) und (5.4) konservativ, wenn für alle $i, j = 1, \dots, N$ und $c \in \mathbb{R}^N$

$$p_{ij}(c) = d_{ji}(c) \quad (5.5)$$

gilt. Es heißt absolut konservativ, wenn neben (5.5) zudem

$$p_{ii}(c) = d_{ii}(c) = 0$$

für $i = 1, \dots, N$ gilt.

Bemerkung:

- ▶ $p_{ij}(c)$ und $d_{ji}(c)$ stehen für das Maß in dem pro Zeiteinheit die j -te Komponente von c in die i -te überführt wird.
- ▶ Jedes konservative System lässt sich in ein äquivalentes absolut konservatives System überführen.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

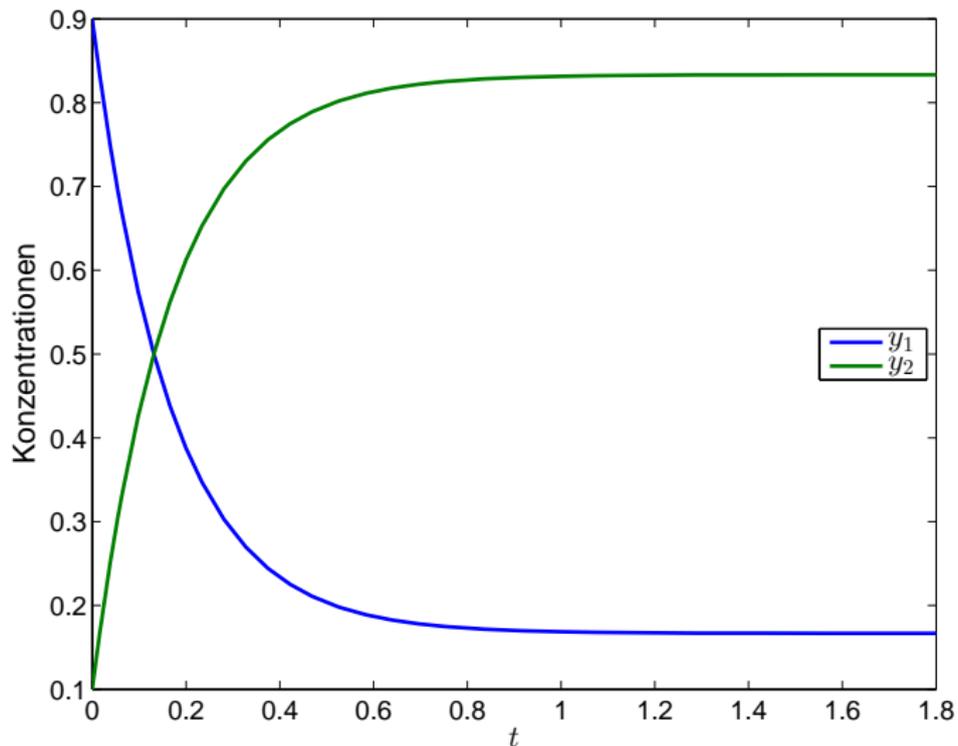
Lemma 5.5: Für jedes konservative AWP (5.1) gilt

$$\sum_{i=1}^N c'_i(t) = 0$$

für alle $t > 0$.

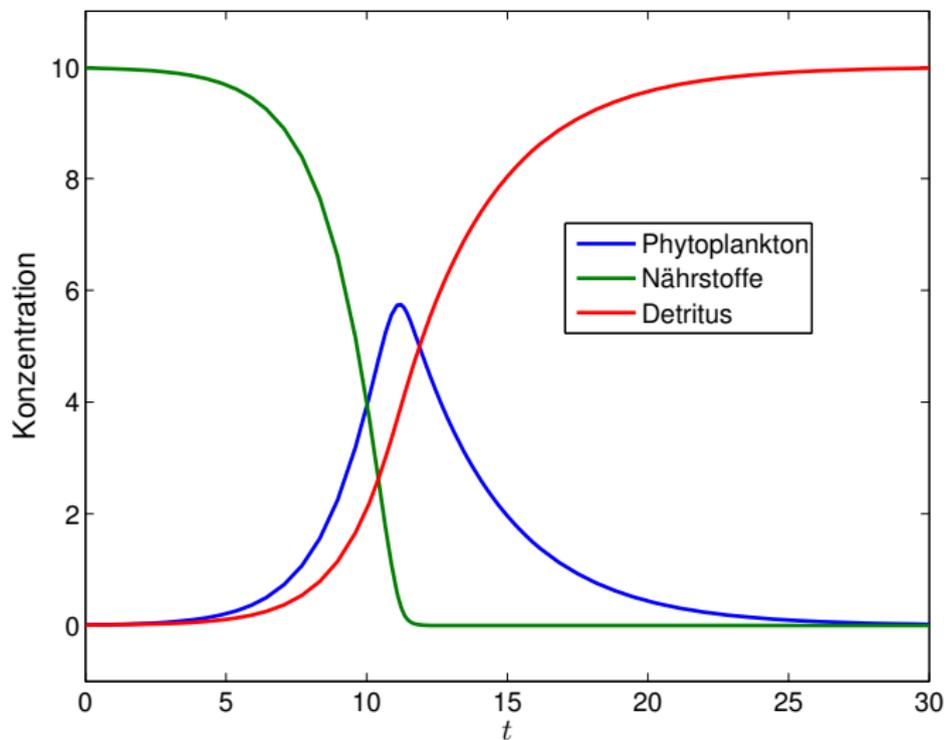
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lineares Modellproblem:



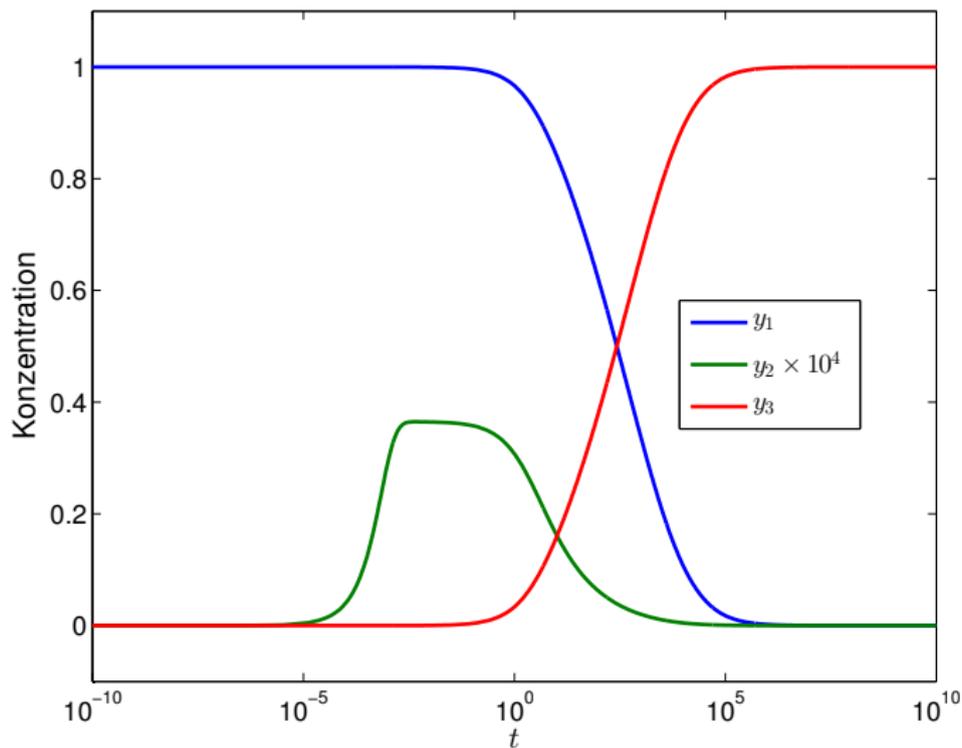
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Phytoplanktonmodell



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Robertson-Testfall für chemische Reaktionen



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Definition 5.7: Das explizite Einschrittverfahren

$$c^{n+1} = c^n + \Delta t \phi(t_n, c^n; \Delta t) \quad (5.8)$$

heißt positiv, wenn es, angewendet auf ein positives AWP (5.1) für alle $n \in \mathbb{N}$ und $\Delta t \geq 0$ für $c^n > 0$ stets $c^{n+1} > 0$ liefert.

Definition 5.8: Das Verfahren (5.8) heißt konservativ, wenn es, angewendet auf ein absolut konservatives System (5.1) für alle $n \in \mathbb{N}_0$ und $\Delta t \geq 0$ der Bedingung

$$\sum_{i=1}^N (c_i^{n+1} - c_i^n) = 0$$

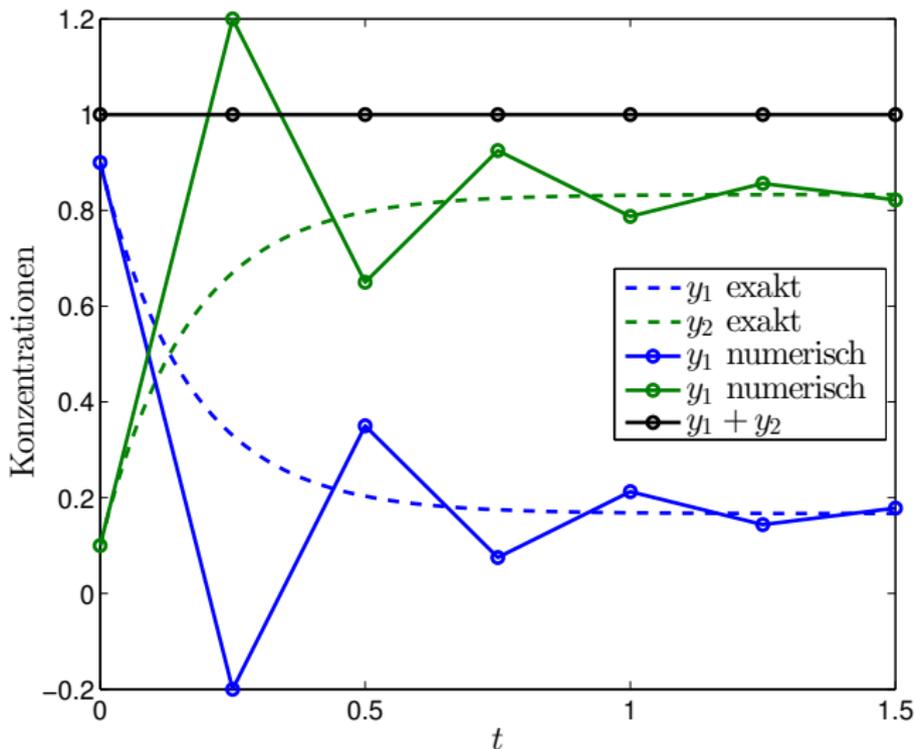
genügt.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Satz 5.9: Das Euler-Verfahren ist konservativ, aber nicht positiv.

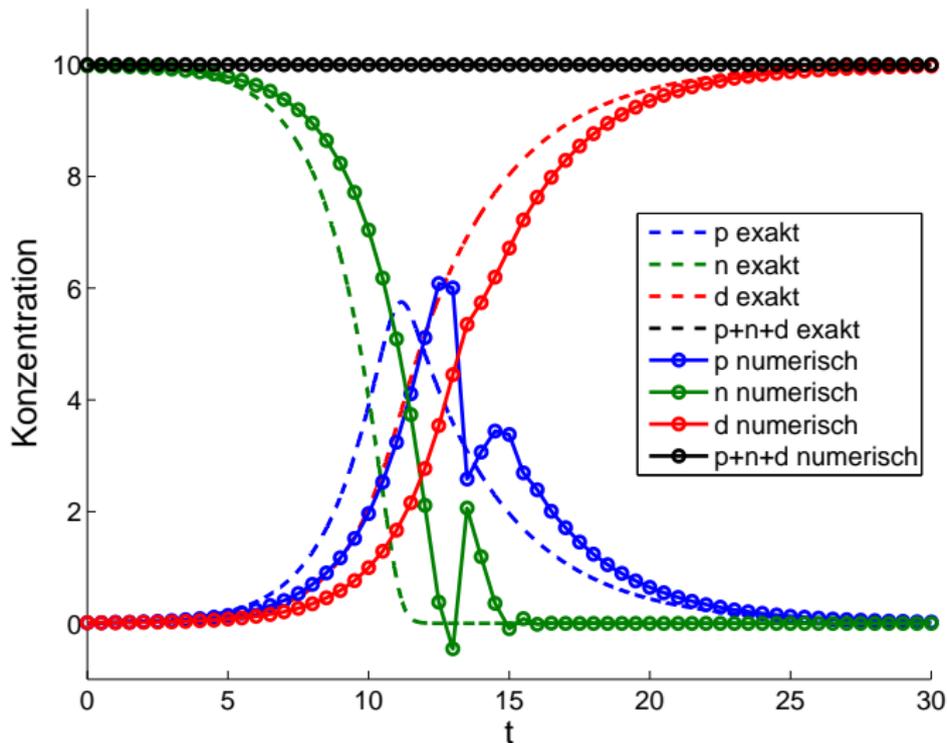
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lineares Modellproblem gelöst mit Euler-Verfahren:



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Modellproblem gelöst mit Euler-Verfahren:



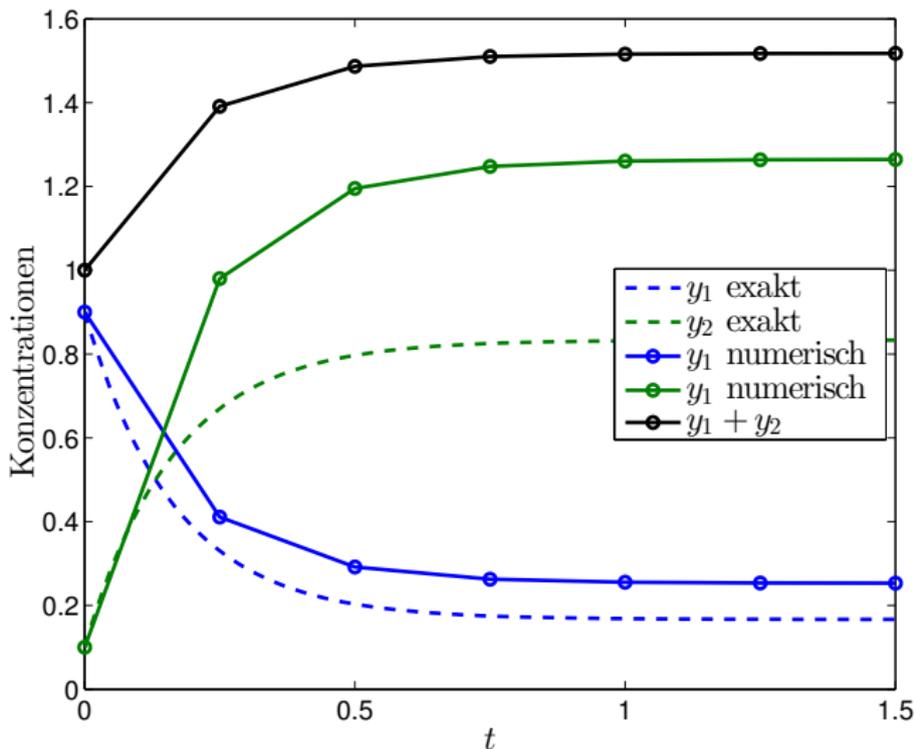
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Satz 5.11: Das Patankar-Euler-Verfahren ist positiv

Satz 5.12: Das Patankar-Euler-Verfahren ist nicht konservativ

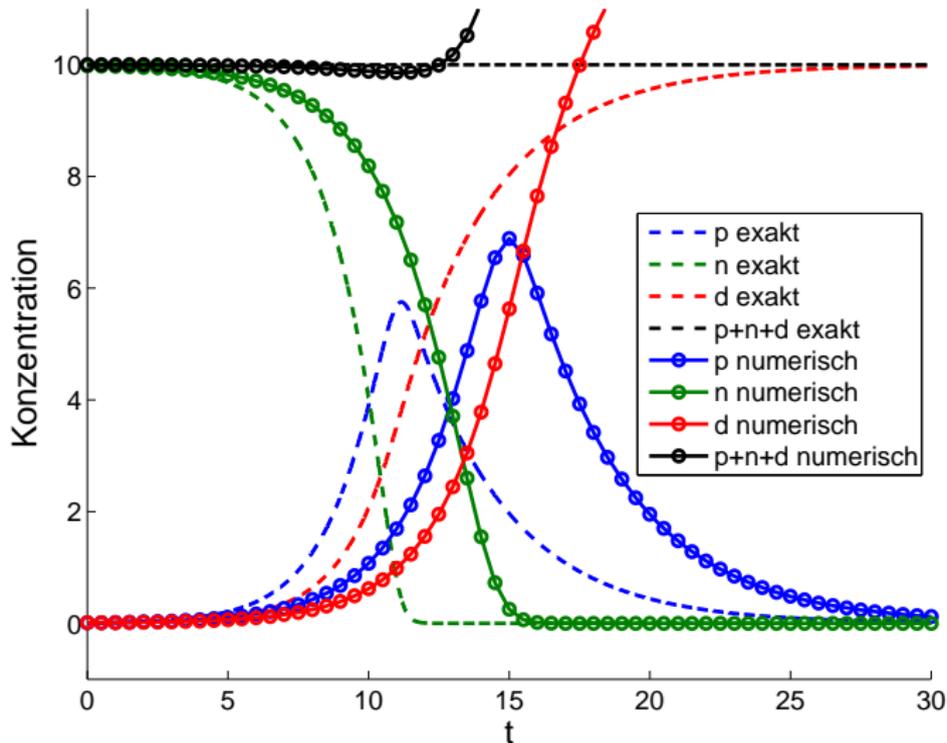
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lineares Modellproblem gelöst mit Patankar-Euler-Verfahren:



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Modellproblem gelöst mit Patankar-Euler-Verfahren:



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Satz 5.14: Das MPE-Verfahren ist konservativ

Satz 5.15: Das MPRK-Verfahren ist konservativ

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lemma 5.16: Sei $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Gilt $\varrho(\mathbf{M}) < 1$, dann ist $\mathbf{I} - \mathbf{M}$ invertierbar mit

$$(\mathbf{I} - \mathbf{M})^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{M}^j \quad (5.9)$$

Konvergiert die Reihe (5.9), dann folgt $\varrho(\mathbf{M}) < 1$.

Lemma 5.17: Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $\mathbf{A} \geq 0$ und $\alpha \in \mathbb{R}$, dann sind die Aussagen

① $\alpha > \varrho(\mathbf{A})$

② $\alpha \mathbf{I} - \mathbf{A}$ ist invertierbar und $(\alpha \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \geq 0$

äquivalent.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lemma 5.18: Sei $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $a_{ij} \leq 0$ für $i \neq j$, dann sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- 1 \mathbf{A} ist regulär und $\mathbf{A}^{-1} \geq 0$.
- 2 $a_{ii} > 0$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$ und für $\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{D}\mathbf{A}$ mit $\mathbf{D} = \text{diag}\{a_{11}^{-1}, \dots, a_{nn}^{-1}\}$ gilt $\mathbf{B} \geq 0$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}^k = 0$.

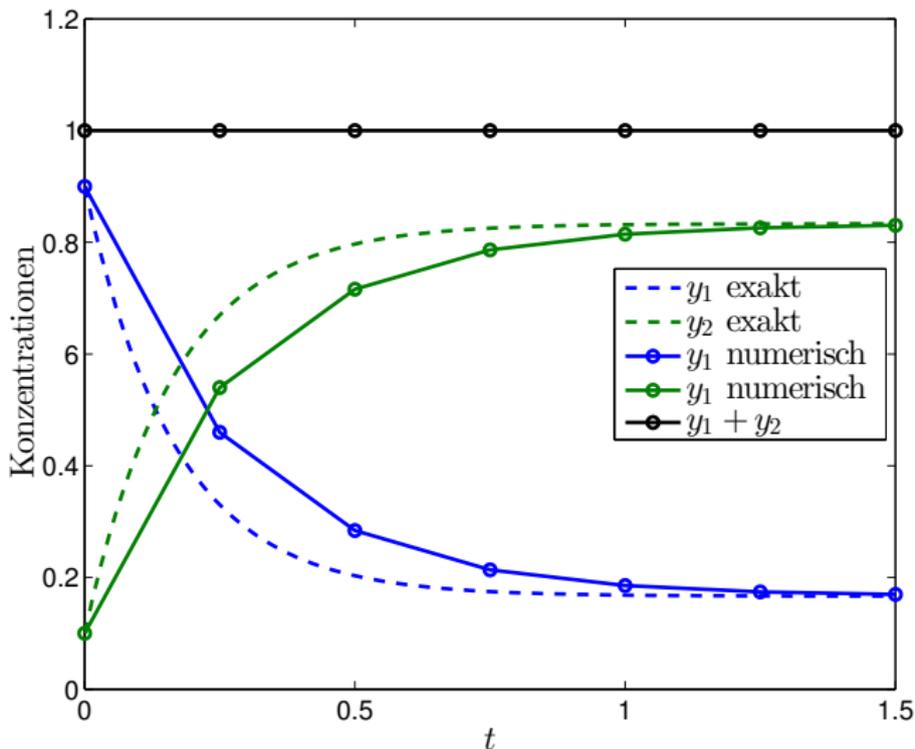
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Satz 5.19: Das MPE-Verfahren laut (5.14) ist positiv.

Satz 5.20: Das MPRK-Verfahren laut (5.15) ist positiv.

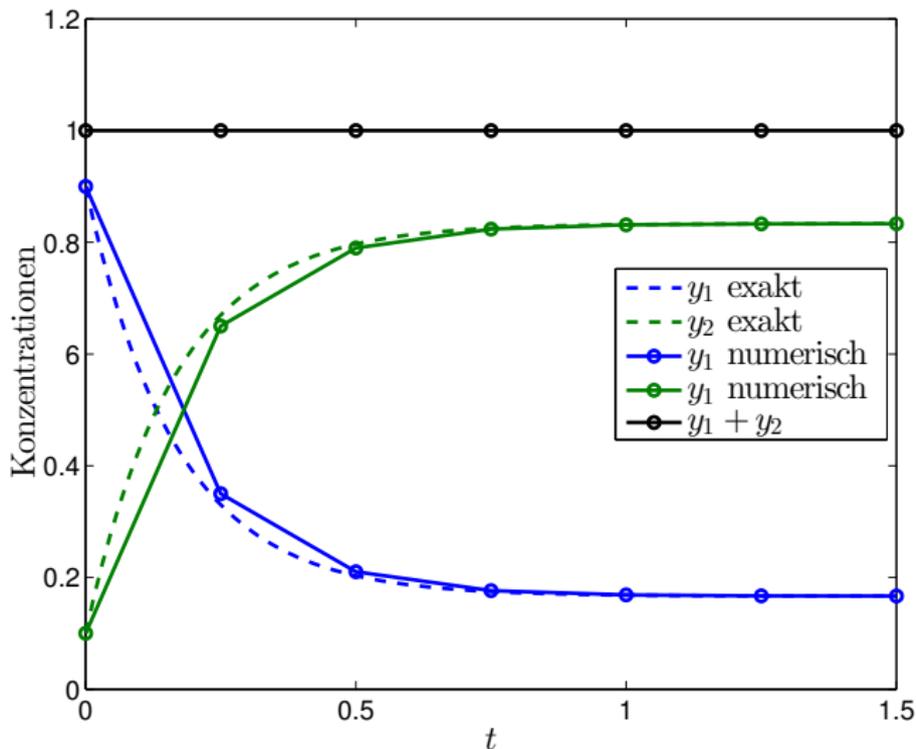
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lineares Modellproblem gelöst mit modifiziertem Patankar-Euler-Verfahren:



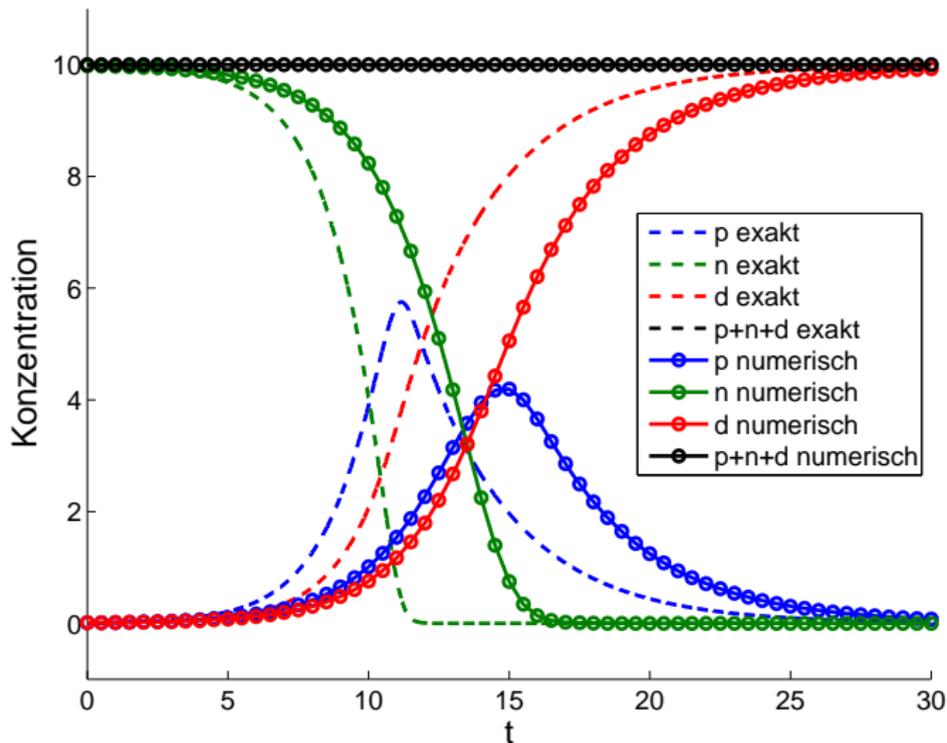
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lineares Modellproblem gelöst mit modifiziertem Patankar-RK-Verfahren:



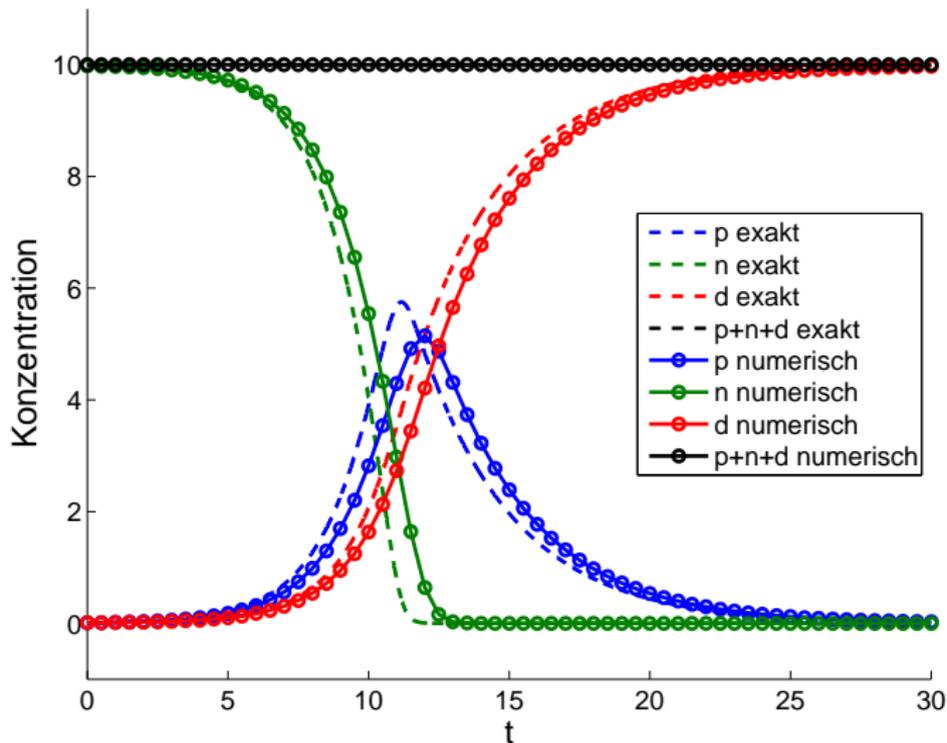
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Modellproblem gelöst mit modifiziertem Patankar-Euler-Verfahren:



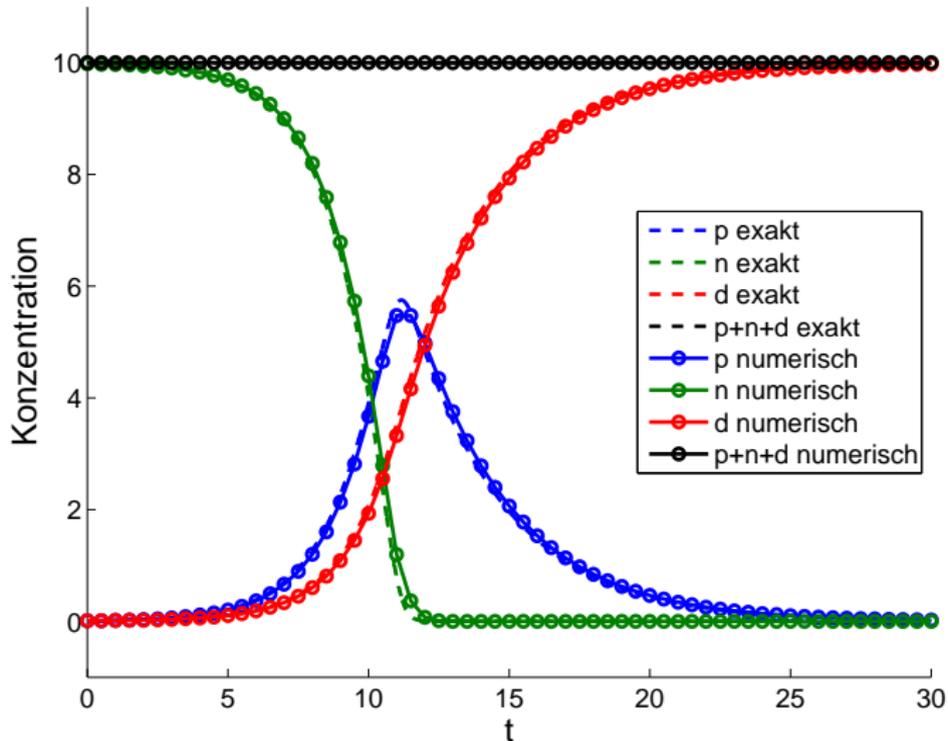
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Modellproblem gelöst mit modifiziertem Patankar-RK-Verfahren:



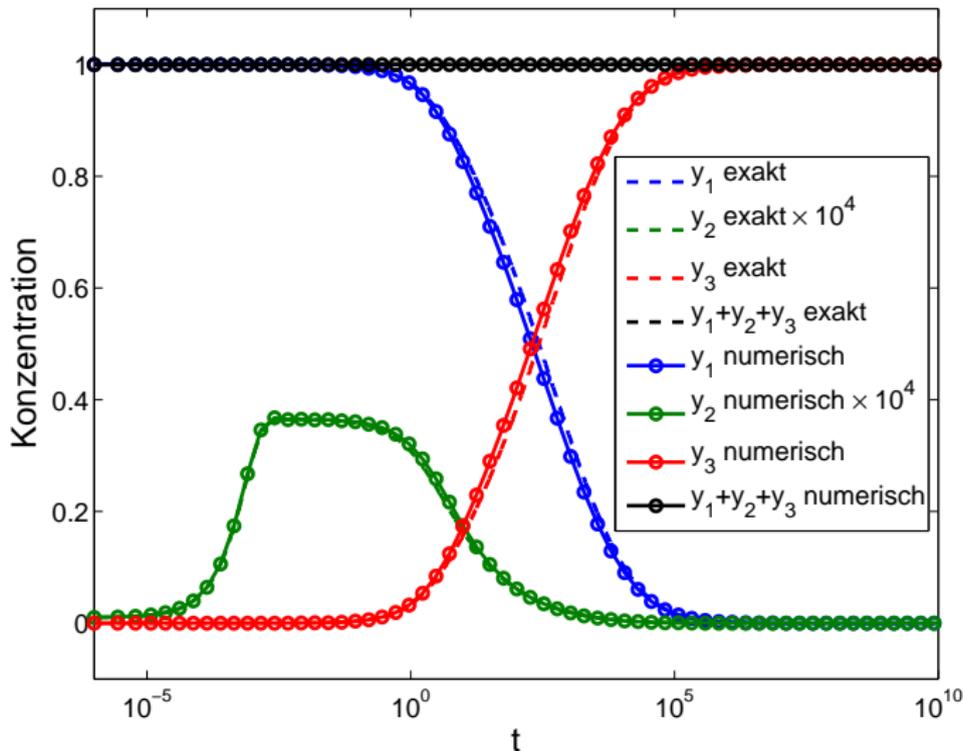
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Nichtlineares Modellproblem gelöst mit hybridem MPRK-Verfahren:



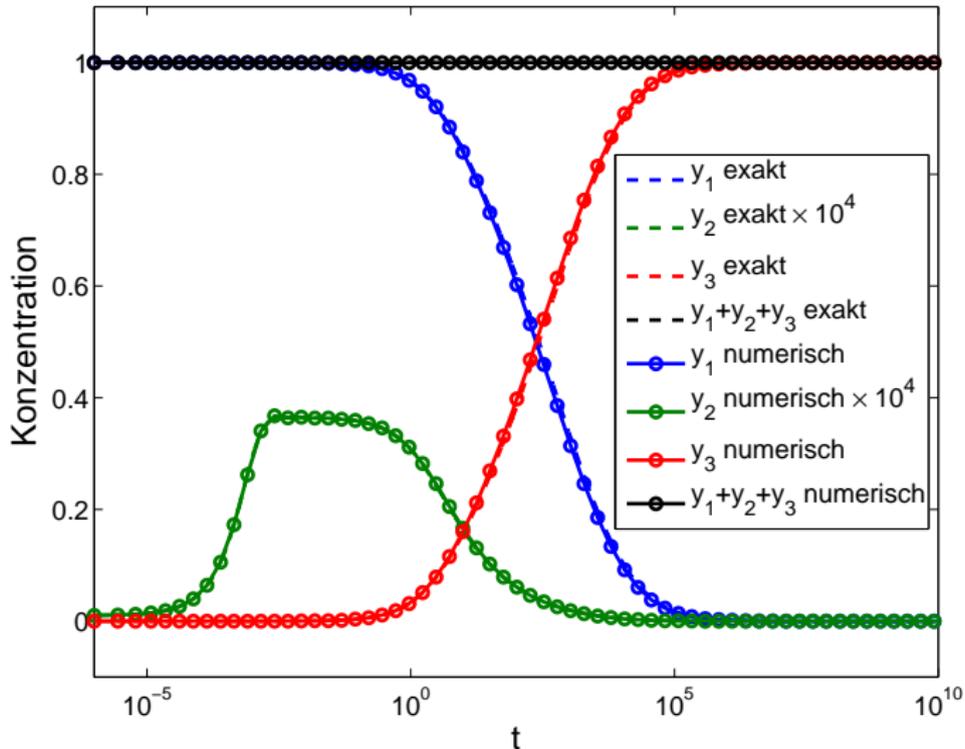
Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Robertson Testfall gelöst mit modifiziertem Patankar-Euler-Verfahren:



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Robertson Testfall gelöst mit modifiziertem Patankar-RK-Verfahren:



Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

Lemma 5.22: Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ durch (5.18) und (5.19) im Kontext eines positiven, absolut konservativen Differentialgleichungssystem festgelegt, dann gilt für die Koeffizienten der Matrix $\mathbf{A}^{-1} = (\tilde{a}_{ij}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ die Abschätzung

$$0 \leq \tilde{a}_{ij} \leq 1, \quad i, j = 1, \dots, N$$

für alle $\Delta t > 0$.

Positivitätserhaltende, konservative Einschrittverfahren

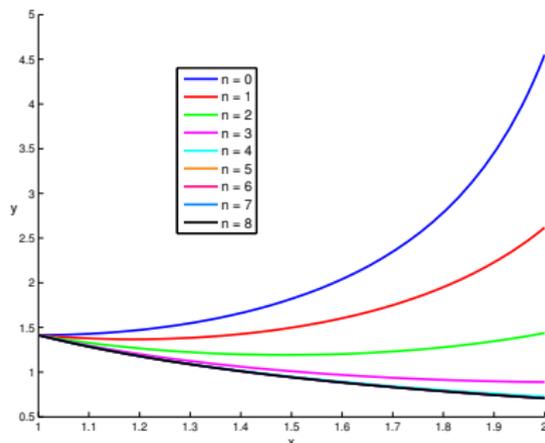
Satz 5.23: Das MPE-Verfahren laut (5.14) ist konsistent von der Ordnung $p = 1$.

Satz 5.24: Das MPRK-Verfahren laut (5.15) ist konsistent von der Ordnung $p = 2$.

Schießverfahren bei Randwertproblemen

Beispiel 7.1: Sekanten-Verfahren

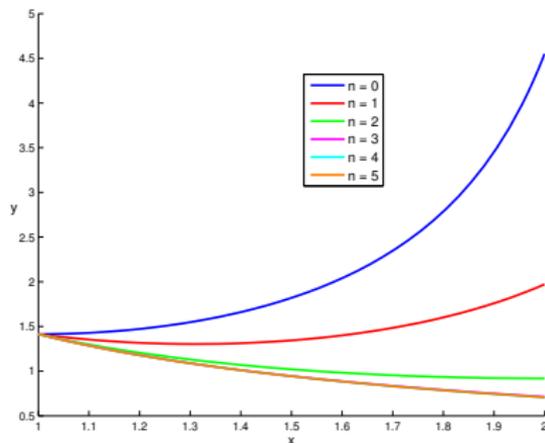
n	s_n	F_n
0	0.000000	3.844027e+00
1	-0.500000	1.910485e+00
2	-0.994038	7.309179e-01
3	-1.300168	1.818285e-01
4	-1.401542	1.970061e-02
5	-1.413860	5.478706e-04
6	-1.414212	1.656956e-06
7	-1.414213	1.393801e-10
8	-1.414213	3.330669e-16



Schießverfahren bei Randwertproblemen

Beispiel 7.1b: Newton-Verfahren

n	s_n	F_n
0	0.000000	3.844027e+00
1	-0.745842	1.265380e+00
2	-1.281807	2.121064e-01
3	-1.409805	6.840290e-03
4	-1.414209	7.182839e-06
5	-1.414213	7.920664e-12



Mehrfachschießverfahren bei Randwertproblemen

- ▶ Zerlege $[a, b]$ in m Teilintervalle $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$.
- ▶ Betrachte für $k = 0, \dots, m-1$ die AWP

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x)), \quad x \in [x_k, x_{k+1}]$$
$$y(x_k) = u_k, \quad y'(x_k) = s_k$$

mit $u_0 = \alpha$ und zu bestimmenden $\mathbf{z} = (u_1, \dots, u_{m-1}, s_0, \dots, s_{m-1})$.

- ▶ Löse

$$\mathbf{F}(\mathbf{z}) = \begin{pmatrix} y_{u_0, s_0}(x_1) - u_1 \\ \vdots \\ y_{u_{m-2}, s_{m-2}}(x_{m-1}) - u_{m-1} \\ y'_{u_0, s_0}(x_1) - s_1 \\ \vdots \\ y'_{u_{m-2}, s_{m-2}}(x_{m-1}) - s_{m-1} \\ y_{u_{m-1}, s_{m-1}}(x_m) - \beta \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Satz 7.3: Seien $q, r \in C[a, b]$ mit $q(x) \geq 0$ und $x \in [a, b]$. Dann besitzt das RWP

$$-y''(x) + q(x)y(x) = r(x), \quad x \in [a, b] \quad (7.5)$$

$$y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \quad (7.6)$$

genau eine Lösung $y \in C^2[a, b]$.

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Satz 7.4: Das Differenzenverfahren

$$-\frac{1}{\Delta x^2} (y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}) + q_j y_j = r_j, \quad j = 1, \dots, n$$

mit $y_0 = \alpha, y_{n+1} = \beta$ für die Randwertaufgabe gemäß Satz 7.3 besitzt genau eine Lösung.

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Lemma 7.5: Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Matrix (7.8) zum Differenzenverfahren für $q \geq 0$ und \mathbf{A}_0 die entsprechende Matrix für $q = 0$. Dann gilt $0 \leq \mathbf{A}^{-1} \leq \mathbf{A}_0^{-1}$.

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Lemma 7.6: Sei $y \in C^4[a, b]$, dann existiert für jedes $j \in \{1, \dots, n\}$ ein $\theta_j \in]-1, 1[$ so, dass

$$y''(x_j) - \frac{1}{\Delta x^2} (y(x_{j-1}) - 2y(x_j) + y(x_{j+1})) = -\frac{\Delta x^2}{12} y^{(4)}(x_j + \theta_j \Delta x)$$

gilt.

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Satz 7.7: Für die Lösung der Randwertaufgabe laut Satz 7.3 gelte $y \in C^4[a, b]$ und $(y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ sei die Lösung des zugehörigen Differenzenverfahrens (7.7), dann gilt für den Fehler

$$|y(x_j) - y_j| \leq \frac{\Delta x^2}{24} (x_j - a)(b - x_j).$$

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

- ▶ Erweiterung auf

$$-y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$$

mittels

$$y'(x_j) \approx \frac{1}{2\Delta x} (y(x_{j+1}) - y(x_{j-1})).$$

- ▶ Höhere Ordnung kann durch bessere Approximationen des Differentialquotienten erzielt werden, z. B.

$$y''(x) = \frac{1}{12\Delta x^2} (-y(x - 2\Delta x) + 16y(x - \Delta x) - 30y(x) + 16y(x + \Delta x) - y(x + 2\Delta x)) + \mathcal{O}(\Delta x^4).$$

- ▶ Nichtlineare Differentialgleichungen führen auf nichtlineare Differenzgleichungen

$$\frac{1}{\Delta x^2} (y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}) = f(x_j, y_j, \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2\Delta x}), \quad j = 1, \dots, n.$$

Differenzenverfahren bei Randwertproblemen

Beispiel 7.8: $n = 1000$

k	$\ F(\mathbf{y}^{(k)})\ _2$
0	1.584303e+06
1	4.760320e+01
2	9.056298e-01
3	5.328024e-04
4	5.664736e-09

