

Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

Oliver Ernst

Professur Numerische Mathematik

Wintersemester 2014/15



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

① Einleitung

- 1.1 Volterras Prinzip
- 1.2 Begriffe und theoretische Resultate
- 1.3 Lineare Differenzengleichungen
- 1.4 Matrixfunktionen
- 1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung
- 1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren
- 1.7 Weitere Beispiele

② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

- 2.1 Das Euler-Verfahren
- 2.2 Eine Sammlung von Beispielverfahren
- 2.3 Konvergenz, Konsistenz und Stabilität
- 2.4 Der Hauptsatz
- 2.5 Einschrittverfahren
- 2.6 Numerische Experimente

③ Lineare Mehrschrittverfahren

- 3.1 Begriffe
- 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere

- 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
- 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
- 3.5 Absolute Stabilität
- 3.6 BDF-Verfahren

④ Runge-Kutta-Verfahren

- 4.1 Konstruktion
- 4.2 Konsistenzordnung
- 4.3 Absolute Stabilität
- 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
- 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
- 4.6 Kollokationsmethoden

⑤ Steife Differentialgleichungen

- 5.1 Was sind steife Differentialgleichungen?
- 5.2 Stabilitätsbegriffe
- 5.3 Ordnungssterne
- 5.4 Lineare MSV für steife Probleme
- 5.5 RKV für steife Probleme

5.6 Nichtlineare Stabilitätstheorie

Inhalt

- ① Einleitung
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
- ⑤ Steife Differentialgleichungen

Inhalt

- ① Einleitung
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
 - 3.1 Begriffe
 - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere
 - 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
 - 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
 - 3.5 Absolute Stabilität
 - 3.6 BDF-Verfahren
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
- ⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

Begriffe

Verfahren der Bauart

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j \mathbf{f}_{n+j}, \quad \text{wobei } \mathbf{f}_{n+j} := \mathbf{f}(t_{n+j}, \mathbf{y}_{n+j}), \quad (\text{LMV})$$

heißen **lineare Mehrschrittverfahren**, genauer **lineare k -Schritt-Verfahren**.

- O.B.d.A. sei $\alpha_k = 1$ und $(\alpha_0, \beta_0) \neq (0, 0)$.
- Falls $\beta_k = 0$, ist **(LMV)** explizit, sonst implizit.
- Bei impliziten Verfahren muss in jedem Zeitschritt ein (i.Allg. nichtlineares) Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{y}_{n+k} = h\beta_k \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}) + \sum_{j=0}^{k-1} (h\beta_j \mathbf{f}_{n+j} - \alpha_j \mathbf{y}_{n+j}) = \mathbf{g}(\mathbf{y}_{n+k}) + \mathbf{c}$$

gelöst werden. Wegen

$$\|\mathbf{g}(\mathbf{v}) - \mathbf{g}(\mathbf{w})\| = h|\beta_k| \|\mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{v}) - \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{w})\| \leq h |\beta_k| L \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|$$

besitzt dies eine eindeutige Lösung, wenn $h |\beta_k| L < 1$, die mit **Fixpunktiteration** bestimmt werden kann.

Lineare Mehrschrittverfahren

Begriffe

Das Polynom

$$\sigma(\zeta) := \beta_0 + \beta_1 \zeta + \cdots + \beta_k \zeta^k \in \mathcal{P}_k$$

heißt **zweites charakteristisches Polynom** von **(LMV)** und

$$\mathcal{L}(z(t); h) := \sum_{j=0}^k [\alpha_j z(t + jh) - h\beta_j z'(t + jh)], \quad z \in C^1(I)$$

der mit **(LMV)** assoziierte **Differenzenoperator**.

Lineare Mehrschrittverfahren

Begriffe

Lemma 3.1

Ist \mathbf{z} genügend oft differenzierbar, so gilt

$$\mathcal{L}(\mathbf{z}(t); h) = C_0 \mathbf{z}(t) + C_1 \mathbf{z}'(t)h + \cdots + C_q \mathbf{z}^{(q)}(t)h^q + \cdots$$

mit $C_0 = \sum_{j=0}^k \alpha_j = \rho(1)$, $C_1 = \sum_{j=0}^k [j\alpha_j - \beta_j] = \rho'(1) - \sigma(1)$

und $C_q = \sum_{j=0}^k \left[\frac{j^q}{q!} \alpha_j - \frac{j^{q-1}}{(q-1)!} \beta_j \right] \quad (q = 2, 3, \dots)$.

Für die Koeffizienten der analogen Entwicklung

$$\mathcal{L}(\mathbf{z}(t + \tau h); h) = \sum_{j=0}^{\infty} D_j \mathbf{z}^{(j)}(t + \tau h) h^j$$

gelten $C_q = \sum_{j=0}^q \frac{\tau^j}{j!} D_{q-j}$ ($q = 0, 1, \dots$).

Lineare Mehrschrittverfahren

Begriffe

- Der lineare Differenzenoperator \mathcal{L} entspricht im Wesentlichen dem bekannten Residuum: $R_{n+k} = \mathcal{L}(y(t_n); h)$.
- Das lineare Mehrschrittverfahren (**LMV**) besitzt die genaue **Konsistenzordnung** p , wenn

$$C_0 = C_1 = \dots = C_p = 0 \quad \text{und} \quad C_{p+1} \neq 0$$

gelten. Mit den Bezeichnungen von Lemma 3.1 ist das äquivalent zu

$$D_0 = D_1 = \dots = D_p = 0 \quad \text{und} \quad D_{p+1} \neq 0.$$

C_{p+1} ($= D_{p+1}$) heißt dann die **Fehlerkonstante** des Verfahrens.

- Beachte, dass (**LMV**) genau dann konsistent ist (mit anderen Worten: seine Konsistenzordnung beträgt mindestens $p = 1$), wenn $\rho(1) = 0$ und $\rho'(1) = \sigma(1)$ erfüllt sind.
- (**LMV**) ist damit genau dann konvergent, wenn ρ die Wurzelbedingung erfüllt und $\rho(1) = 0$ sowie $\rho'(1) = \sigma(1)$ gelten (was insbesondere $\rho'(1) = \sigma(1) \neq 0$ impliziert).

Lineare Mehrschrittverfahren

Konsistenzordnung

Satz 3.2

Für jedes lineare k -Schritt-Verfahren sind die folgenden fünf Aussagen äquivalent:

- (a) Das k -Schritt-Verfahren besitzt (mindestens) die Konsistenzordnung p .
- (b) $q! C_q = \sum_{j=0}^k [j^q \alpha_j - q j^{q-1} \beta_j] = 0 \quad (q = 0, 1, \dots, p)$.
- (c) Das k -Schritt-Verfahren ist konsistent mit $y' = y$, $y(0) = 1$, von (mindestens) der Ordnung p .
- (d) Die Funktion

$$\frac{\rho(\zeta)}{\log(\zeta)} - \sigma(\zeta)$$

hat in $\zeta = 1$ eine (mindestens) p -fache Nullstelle.

- (e) $\mathcal{L}(z(t); h) = \mathbf{0}$ für alle Polynome $z \in \mathcal{P}_p$.

Satz 3.3

Das lineare k -Schritt-Verfahren ([LMV](#)) zur Lösung von ([AWP](#)) besitze die Konsistenzordnung p . Dann lässt sich der zugehörige Differenzenoperator in der **Peano-Form**

$$\mathcal{L}(\mathbf{y}(t); h) = \int_t^{t+kh} G(t, s) \mathbf{y}^{(p+1)}(s) ds = h^{p+1} \int_0^k \tilde{G}(\tau) \mathbf{y}^{(p+1)}(t + \tau h) d\tau$$

schreiben, falls $\mathbf{y} \in C^{(p+1)}(I)$. Die Kerne G bzw. \tilde{G} haben die Form

$$G(t, s) = \mathcal{L}\left(\frac{(t-s)_+^p}{p!}; h\right) = \sum_{j=0}^k \left[\alpha_j \frac{(t+jh-s)_+^p}{p!} - h\beta_j \frac{(t+jh-s)_+^{p-1}}{(p-1)!} \right],$$

$$\tilde{G}(\tau) = \sum_{j=0}^k \left[\alpha_j \frac{(j-\tau)_+^p}{p!} - \beta_j \frac{(j-\tau)_+^{p-1}}{(p-1)!} \right].$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Peano-Kern, Beispiel

Satz 3.3 erlaubt Abschätzungen des lokalen Diskretisierungsfehlers:

Beispiel: Für das stabile Zweischrittverfahren

$$\mathbf{y}_{n+2} - \mathbf{y}_{n+1} = \frac{h}{12} (5\mathbf{f}_{n+2} + 8\mathbf{f}_{n+1} - \mathbf{f}_n)$$

der Konsistenzordnung 3 ($C_0 = C_1 = C_2 = C_3 = 0$, $C_4 = -1/24$) erhalten wir

$$\begin{aligned} G(t, s) &= \frac{(t+2h-s)_+^3}{6} - \frac{(t+h-s)_+^3}{6} - h \frac{5(t+2h-s)_+^2}{24} - h \frac{(t+h-s)_+^2}{3} + h \frac{(t-s)_+^2}{24} \\ &= \begin{cases} \frac{(t+2h-s)^2}{6}(t + \frac{3}{4}h - s), & t + h \leq s \leq t + 2h, \\ -\frac{1}{24}(t - s)^2 h, & t \leq s \leq t + h. \end{cases} \end{aligned}$$

Ist $\mathbf{y} \in C^{(4)}(I)$, so gilt

$$\left| \frac{1}{h} R_{n+2} \right| = \left| \frac{1}{h} \mathcal{L}(\mathbf{y}(t_n); h) \right| = \frac{1}{h} \left| \int_{t_n}^{t_n+2h} G(t_n, s) \mathbf{y}^{(4)}(s) ds \right|,$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Peano-Kern, Beispiel

und mit der Hölder-Ungleichung folgt

$$\left| \frac{1}{h} R_{n+2} \right| \leqslant \frac{1}{h} \left[\int_{t_n}^{t_n+2h} |G(t_n, s)|^\mu ds \right]^{1/\mu} \left[\int_{t_n}^{t_n+2h} |y^{(4)}(s)|^\nu ds \right]^{1/\nu},$$

falls $1/\mu + 1/\nu = 1$. Für $\mu = 1, \nu = \infty$ ergibt sich

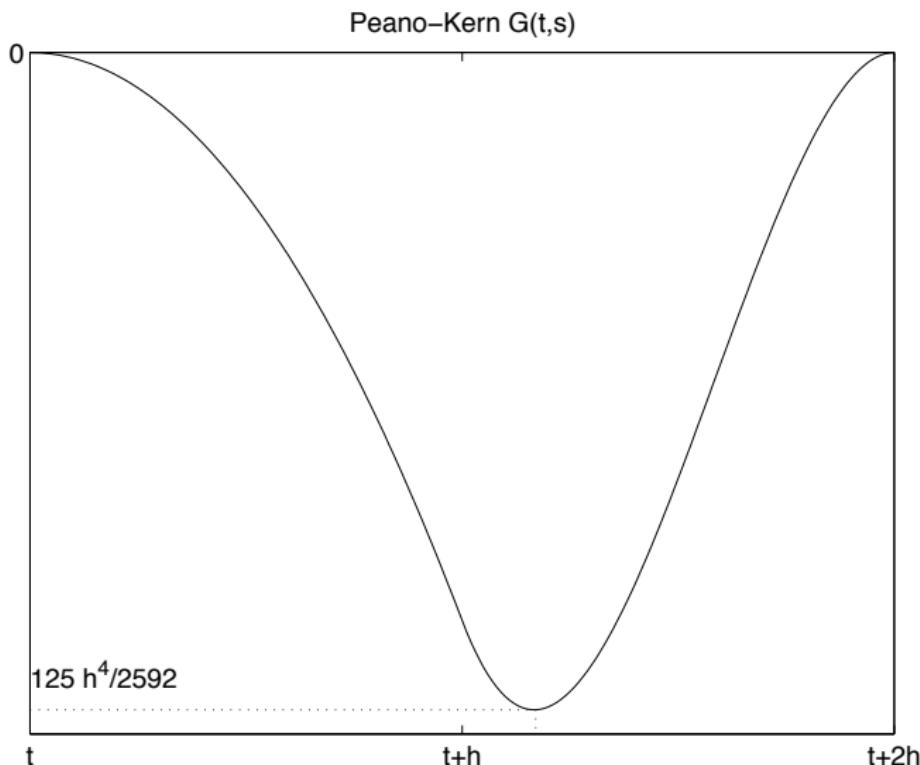
$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{h} R_{n+2} \right| &\leqslant -\frac{1}{h} \left[\int_{t_n}^{t_n+2h} G(t_n, s) ds \right] \max_{t_n \leqslant s \leqslant t_n+2h} |y^{(4)}(s)| \\ &= \frac{1}{24} h^3 \max_{t_n \leqslant s \leqslant t_n+2h} |y^{(4)}(s)|. \end{aligned}$$

Und für $\mu = \infty, \nu = 1$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{h} R_{n+2} \right| &\leqslant \frac{1}{h} \max_{t_n \leqslant s \leqslant t_n+2h} |G(t_n, s)| \left[\int_{t_n}^{t_n+2h} |y^{(4)}(s)| ds \right] \\ &= \frac{125}{2592} h^3 \left[\int_0^2 |y^{(4)}(t_n + \tau h)| d\tau \right]. \end{aligned}$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Peano-Kern, Beispiel



Lineare Mehrschrittverfahren

Peano-Kern, globaler Fehler

Mit Hilfe von Satz 3.3 kann man auch Abschätzungen für den globalen Diskretisierungsfehler angeben. Sei

$$e_n := \mathbf{y}(t_n) - \tilde{\mathbf{y}}_n(h)$$

mit

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \tilde{\mathbf{y}}_{n+j} = \sum_{j=0}^k \mathbf{f}(t_{n+j}, \tilde{\mathbf{y}}_{n+j}) + \theta_n K h^{p+1}, \quad \|\theta_n\|_\infty \leq 1.$$

Setzt man

$$\begin{aligned} M_1 &:= \sum_{j=0}^k |\alpha_j|, \quad M_2 := \sum_{j=0}^k |\beta_j|, \quad E := \max_{0 \leq j \leq k-1} \|e_j\|, \\ M_3 &:= [\sup_{j=0,1,\dots} |\gamma_j|] / (1 - h|\beta_k|L), \end{aligned}$$

wobei $1/(\zeta^k \rho(\zeta^{-1})) = 1/(\alpha_k + \alpha_{k-1}\zeta + \cdots + \alpha_0\zeta^k) = \sum_{j=0}^\infty \gamma_j \zeta^j$, dann ist

$$\|e_n\| \leq M_3 [kM_1E + (t_n - t_0)(\frac{1}{h}\mathcal{L}(\mathbf{y}(t_n); h) + h^p K)] \exp(M_2 M_3 L(t_n - t_0)).$$

Beachte: $E = O(h^p)$ und Konsistenzordnung p implizieren $\|e_n\| = O(h^p)$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Begriffe

Abschließende Bemerkungen zur erreichbaren Konsistenzordnung bei Mehrschrittverfahren (vgl. Abschnitt 2):

- (1) Zu vorgegebenen $(k, \ell) \in \mathbb{N}_0^2$ ($\ell \leq k$) gibt es eindeutig bestimmte Polynome

$$\rho(\zeta) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \zeta^j \in \mathcal{P}_k, \quad (\alpha_k = 1) \quad \text{und} \quad \sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^{\ell} \beta_j \zeta^j,$$

so dass das zugehörige lineare k -Schritt-Verfahren die Konsistenzordnung $k + \ell$ besitzt.

- (2) Zu vorgegebenem $\rho(\zeta) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \zeta^j$ mit $\rho(1) = 0$ und vorgegebenem $0 \leq \ell \leq k$ gibt es genau ein Polynom $\sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^{\ell} \beta_j \zeta^j$, so dass das zugehörige lineare k -Schritt-Verfahren die Konsistenzordnung $\ell + 1$ besitzt.

Es gibt also stabile lineare k -Schritt-Verfahren der Konsistenzordnung $k + 1$.

Inhalt

- ① Einleitung
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
 - 3.1 Begriffe
 - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere
 - 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
 - 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
 - 3.5 Absolute Stabilität
 - 3.6 BDF-Verfahren
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
- ⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

- Was ist die maximale Ordnung eines konvergenten linearen k -Schritt-Verfahrens?
- $2k + 2$ freie Parameter $\{\alpha_j, \beta_j\}_{j=0}^k$, $2k + 1$ nach Normierung, $2k$ für ein explizites Verfahren.
- Konsistenz der Ordnung p führt auf $p + 1$ homogene lineare Gleichungen für die Koeffizienten. Bis zu welcher Ordnung p liegt auch Stabilität vor? Erste Vermutung: $p = 2k$ [$p = 2k - 1$] im impliziten [expliziten] Fall?
- 1956 beantwortet in

CONVERGENCE AND STABILITY
IN THE NUMERICAL INTEGRATION OF ORDINARY
DIFFERENTIAL EQUATIONS

GERMUND DAHLQUIST

1. Introduction and summary

1.1. Statement of the problem. Consider a class of difference equations

$$(1.1) \quad \alpha_k y_{n+k} + \alpha_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + \alpha_0 y_n = h(\beta_k f_{n+k} + \dots + \beta_0 f_n),$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

Ausgangspunkt der Analyse der maximalen Konsistenzordnung eines stabilen LMV sind wieder dessen charakteristischen Polynome $\rho(\zeta)$ und $\sigma(\zeta)$. Folgende Variablen-substitution ist hierbei hilfreich:

$$\zeta = \frac{z+1}{z-1}, \quad z = \frac{\zeta+1}{\zeta-1},$$

sowie die hierdurch bestimmten Polynome

$$R(z) = \left(\frac{z-1}{2}\right)^k \rho(\zeta) = \sum_{j=0}^k a_j z^j, \quad S(z) = \left(\frac{z-1}{2}\right)^k \sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^k b_j z^j.$$

Lemma 3.4

Für ein stabiles LMV mit mindestens Konsistenzordnung $p = 0$ gilt

- (a) $a_k = 0$ sowie $a_{k-1} = 2^{1-k} \rho'(1) \neq 0$.
- (b) Alle von Null verschiedenen Koeffizienten von $R(z)$ besitzen das gleiche Vorzeichen.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

Lemma 3.5

Ein LMV besitzt genau dann die Konsistenzordnung p , wenn

$$R(z) \left(\log \frac{z+1}{z-1} \right)^{-1} - S(z) = C_{p+1} \left(\frac{2}{z} \right)^{p-k} + O \left(\left(\frac{2}{z} \right)^{p-k+1} \right), \quad z \rightarrow \infty. \quad (3.1)$$

Lemma 3.6

Für die Koeffizienten der Laurent-Reihe

$$\left(\log \frac{z+1}{z-1} \right)^{-1} = \frac{z}{2} - \frac{\mu_1}{z} - \frac{\mu_3}{z^3} - \frac{\mu_5}{z^5} - \dots \quad (3.2)$$

gilt $\mu_{2j+1} > 0$ für alle $j \geq 0$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

Satz 3.7 (Dahlquist-Barriere)

Für die Konsistenzordnung p eines stabilen linearen k -Schritt-Verfahrens gilt

$$p \leq \begin{cases} k+2, & \text{falls } k \text{ gerade,} \\ k+1, & \text{falls } k \text{ ungerade,} \\ k, & \text{falls } \beta_k/\alpha_k \leq 0. \end{cases}$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

Satz 3.8

Stabile LMV mit (maximaler) Konsistenzordnung $k + 2$ sind symmetrisch, d.h.

$$\alpha_j = -\alpha_{k-j} \quad \text{und} \quad \beta_j = \beta_{k-j}, \quad j = 0, \dots, k. \quad (3.3)$$

Korollar 3.9

Ist k gerade, dann ist ein stabiles lineares k -Schritt-Verfahren mit optimaler Konsistenzordnung $k + 2$ nur **schwach stabil**, d.h. alle Nullstellen des ersten charakteristischen Polynoms haben Betrag 1.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

(Jedes) stabile k -Schritt-Verfahren ($k = 2\ell$) mit Konsistenzordnung $k+2$ kann man wie folgt konstruieren:

(1) Setze

$$\rho(\zeta) := (\zeta - 1)(\zeta + 1) \prod_{j=1}^{(k-2)/2} (\zeta - \zeta_j)(\zeta - \bar{\zeta}_j)$$

mit paarweise verschiedenen ζ_j , $|\zeta_j| = 1$, $\operatorname{Im} \zeta_j > 0$.

(2) Bestimme die ersten Koeffizienten der Taylor-Entwicklung

$$\frac{\left(\frac{z-1}{2}\right)^k \rho\left(\frac{z+1}{z-1}\right)}{\log \frac{z+1}{z-1}} = \sum_{j=0}^{\infty} b_j z^j \quad \text{und setze} \quad S(z) := \sum_{j=0}^k b_j z^j.$$

(3) Setze

$$\sigma(\zeta) := (\zeta - 1)^k S\left(\frac{\zeta + 1}{\zeta - 1}\right).$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Die erste Dahlquist-Barriere

- Das einzige stabile Zweischrittverfahren der Ordnung 4 ist die **Simpson-Regel**¹⁷

$$y_{n+2} - y_n = \frac{h}{3}(f_{n+2} + 4f_{n+1} + f_n).$$

- Für $k = 4$ ist z.B.

$$y_{n+4} - y_n = \frac{h}{90}(56f_{n+4} - 31f_{n+3} + 96f_{n+2} - 31f_{n+1} + 56f_n)$$

ein stabiles Verfahren der Ordnung 6.

- In der Praxis spielen diese Beispiele (wie alle linearen 2ℓ -Schritt-Verfahren der Ordnung $2\ell + 2$) keine Rolle (vgl. dazu Abschnitt 5).

¹⁷Thomas Simpson (1710–1761)

Inhalt

- ① Einleitung
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
 - 3.1 Begriffe
 - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere
 - 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
 - 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
 - 3.5 Absolute Stabilität
 - 3.6 BDF-Verfahren
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
- ⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

Die Idee der **Adams-Bashforth-Verfahren**¹⁸:

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{y}'(t) dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) dt.$$

Ersetze $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$ durch ein Polynom $\mathbf{q}_{k-1}(t) \in \mathcal{P}_{k-1}$, das die k Datenpaare

$$(t_n, \mathbf{f}_n), (t_{n-1}, \mathbf{f}_{n-1}), \dots, (t_{n-k+1}, \mathbf{f}_{n-k+1})$$

interpoliert. In der Lagrange¹⁹-Darstellung ist dieses durch

$$\mathbf{q}_{k-1}(t) = \sum_{j=0}^{k-1} \mathbf{f}_{n-j} \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq j}}^{k-1} \frac{t - t_{n-\ell}}{t_{n-j} - t_{n-\ell}}$$

gegeben.

¹⁸ John Couch Adams (1819–1892), Francis Bashforth, 1819–1912)

¹⁹ Joseph-Louis Lagrange (1736–1813)

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

k -te Adams-Bashforth-Formel

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{k,j} \mathbf{f}_{n-j} \quad (\text{A-B})$$

$$\text{mit } \beta_{k,j} = \frac{1}{h} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq j}}^{k-1} \frac{t - t_{n-\ell}}{t_{n-j} - t_{n-\ell}} dt = \int_0^1 \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq j}}^{k-1} \frac{s + \ell}{\ell - j} ds.$$

Die **Adams-Moulton-Verfahren**²⁰ konstruiert man fast genauso. Der einzige Unterschied besteht darin, dass ein Interpolationspolynom q_k vom Grad k zu den $(k+1)$ Daten

$$(t_{n+1}, \mathbf{f}_{n+1}), (t_n, \mathbf{f}_n), (t_{n-1}, \mathbf{f}_{n-1}), \dots, (t_{n-k+1}, \mathbf{f}_{n-k+1})$$

als Approximation an $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$ verwendet wird.

²⁰Forest Ray Moulton (1872–1952),

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

k -te Adams-Moulton-Formel:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=0}^k \beta_{k,j}^* \mathbf{f}_{n+1-j} \quad \text{mit } \beta_{k,j}^* = \int_{-1}^0 \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq j}}^k \frac{s+\ell}{\ell-j} \, ds. \quad (\text{A-M})$$

Satz 3.10

Das Adams-Bashforth-Verfahren (A-B) ist ein explizites lineares k -Schritt-Verfahren. Es ist stabil und besitzt die Konsistenzordnung k .

Das Adams-Moulton-Verfahren (A-M) ist ein implizites lineares k -Schritt-Verfahren. Es ist stabil und besitzt die Konsistenzordnung $k + 1$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

Koeffizienten für Adams-Bashforth-Verfahren:

k					
1	1				
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$			
3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{5}{12}$		
4	$\frac{55}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{9}{24}$	
5	$\frac{1901}{720}$	$-\frac{2774}{720}$	$\frac{2616}{720}$	$-\frac{1274}{720}$	$\frac{251}{720}$
6	$\frac{4277}{1440}$	$-\frac{7923}{1440}$	$\frac{9982}{1440}$	$-\frac{7298}{1440}$	$\frac{2877}{1440} - \frac{475}{1440}$

Beispielsweise ist

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$$

das Adams-Bashforth-Verfahren für $k = 2$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

Koeffizienten für Adams-Moulton-Verfahren:

k						
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
2	$\frac{5}{12}$	$\frac{8}{12}$	$-\frac{1}{12}$			
3	$\frac{9}{24}$	$\frac{19}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$		
4	$\frac{251}{720}$	$\frac{646}{720}$	$-\frac{264}{720}$	$\frac{106}{720}$	$-\frac{19}{720}$	
5	$\frac{475}{1440}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{798}{1440}$	$\frac{482}{1440}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{27}{1440}$
6	$\frac{19087}{60480}$	$\frac{65112}{60480}$	$-\frac{46461}{60480}$	$\frac{37504}{60480}$	$-\frac{20211}{60480}$	$\frac{6312}{60480} - \frac{863}{60480}$

Beispielsweise ist

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) \quad (\text{Trapezregel})$$

das Adams-Moulton-Verfahren für $k = 1$ und

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$$

das für $k = 2$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

Natürlich kann man auch in

$$\mathbf{y}(t_{n+k}) - \mathbf{y}(t_{n+k-\ell}) = \int_{t_{n+k-\ell}}^{t_{n+k}} \mathbf{y}'(t) dt = \int_{t_{n+k-\ell}}^{t_{n+k}} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) dt$$

($\ell = 1, 2, \dots$) den Integrand durch ein Interpolationspolynom ersetzen, um lineare Mehrschrittverfahren zu konstruieren. (Für $\ell = 1$ ergeben sich die Adams-Formeln.) Für $\ell = 2$ erhält man so die expliziten **Nyström-Verfahren**, z.B. die **Mittelpunktsregel**

$$\mathbf{y}_{n+2} - \mathbf{y}_n = 2h\mathbf{f}_{n+1},$$

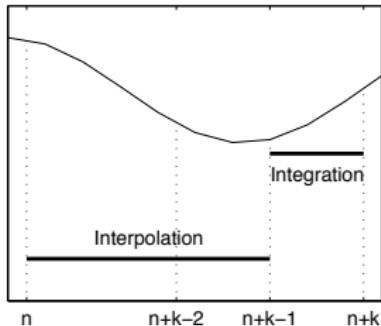
bzw. die impliziten **Milne-Simpson-Verfahren**, wie etwa die **Simpson-Regel**

$$\mathbf{y}_{n+2} - \mathbf{y}_n = \frac{h}{3} (\mathbf{f}_{n+2} + 4\mathbf{f}_{n+1} + \mathbf{f}_n).$$

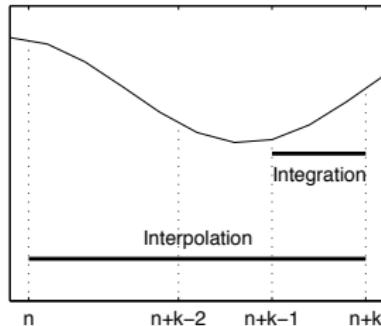
Lineare Mehrschrittverfahren

Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton

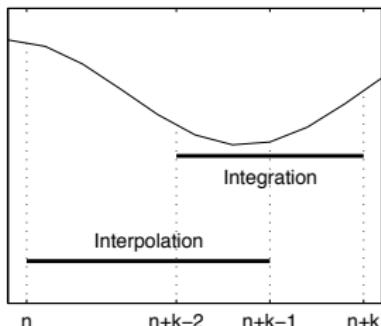
Adams–Bashforth



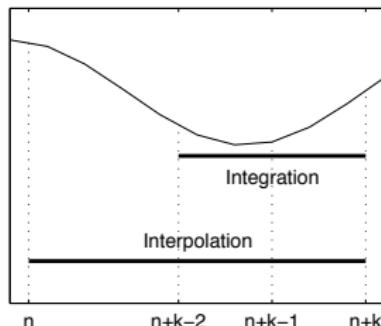
Adams–Moulton



Nystrom



Milne–Simpson



Inhalt

① Einleitung

② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

③ Lineare Mehrschrittverfahren

3.1 Begriffe

3.2 Die erste Dahlquist-Barriere

3.3 Die Verfahren von Adams-Basforth und Adams-Moulton

3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren

3.5 Absolute Stabilität

3.6 BDF-Verfahren

④ Runge-Kutta-Verfahren

⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

Prädiktor-Korrektor-Verfahren

Löst man ein AWP durch ein implizites Mehrschrittverfahren, so muss in jedem Zeitschritt ein Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{y}_{n+k} = h\beta_k \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}) + \mathbf{c}$$

(vgl. Abschnitt 1) gelöst werden. Ist $h|\beta_k|L < 1$, so konvergiert die Fixpunktiteration

$$\mathbf{y}_{n+k}^{(\nu)} = h\beta_k \mathbf{f}(t_{n+k}, \mathbf{y}_{n+k}^{(\nu-1)}) + \mathbf{c} \quad \nu = 1, 2, \dots$$

gegen die (eindeutige) Lösung. Einen Startwert $\mathbf{y}_{n+k}^{(0)}$ kann man mit einem expliziten Verfahren berechnen. Man verwendet dazu ein Verfahren gleicher Ordnung.

Lineare Mehrschrittverfahren

Prädiktor-Korrektor-Verfahren

Kombiniert man etwa die $(k+1)$ -te Adams-Bashforth-Formel (Prädiktor) mit der k -ten Adams-Moulton-Formel (Korrektor), so liest sich ein Zeitschritt des resultierenden **Prädiktor-Korrektor-Verfahrens** wie folgt:

$$(P): \quad \mathbf{y}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=0}^k \beta_{k+1,j} \mathbf{f}_{n-j},$$

For $\nu = 0, 1, 2, \dots$:

$$\mathbf{f}_{n+1}^{(\nu)} = \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}^{(\nu)}),$$

$$(K): \quad \mathbf{y}_{n+1}^{(\nu+1)} = \mathbf{y}_n + h \beta_{k,0}^* \mathbf{f}_{n+1}^{(\nu)} + h \sum_{j=1}^k \beta_{k,j}^* \mathbf{f}_{n+1-j}.$$

Man bricht die Iteration (K) ab, wenn $\|\mathbf{y}_{n+1}^{(\nu+1)} - \mathbf{y}_{n+1}^{(\nu)}\|$ „genügend klein“ ist.

Dann setzt man $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_{n+1}^{(\nu+1)}$ und (für weitere Zeitschritte) $\mathbf{f}_{n+1} = \mathbf{f}_{n+1}^{(\nu)}$ (oder alternativ: $\mathbf{f}_{n+1} = \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}^{(\nu+1)})$).

Lineare Mehrschrittverfahren

Prädiktor-Korrektor-Verfahren

- In der Praxis kann man so nur selten vorgehen, da völlig unklar ist, wie viele Schritte von (K) durchgeführt werden müssen, um das Abbruchkriterium zu erfüllen. Stattdessen wird man nur eine feste (kleine) Zahl μ von diesen Iterationsschritten durchführen.
- Bezeichnen p bzw. p^* die Konsistenzordnungen von Prädiktor und Korrektor (in unserem Beispiel $p = p^* = k$), dann ist die Konsistenzordnung des zusammengesetzten Verfahrens gleich der des Korrektors, wenn $p \geq p^*$ oder $\mu > p^* - p$ gilt.

Inhalt

① Einleitung

② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

③ Lineare Mehrschrittverfahren

3.1 Begriffe

3.2 Die erste Dahlquist-Barriere

3.3 Die Verfahren von Adams-Basforth und Adams-Moulton

3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren

3.5 Absolute Stabilität

3.6 BDF-Verfahren

④ Runge-Kutta-Verfahren

⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität, einführendes Beispiel

Der Begriff **absolute Stabilität** befasst sich nicht mit der Stabilität eines Verfahrens im Grenzwert $h \rightarrow 0$, sondern mit dessen Verhalten für lange Integrationen bei fester Schrittweite $h > 0$.

Qualitativ: wie klein muss man bei gegebenem AWP und gegebenem Verfahren die Schrittweite wählen, damit die numerische Approximation der Lösung sich zumindest qualitativ richtig verhält.

Beispiel 1: Die AWA

$$y'(t) = -\sin t, \quad y(0) = 1 \quad (3.4)$$

besitzt die Lösung $y(t) = \cos t$. Für das Residuum R_{n+1} des expliziten Euler-Verfahrens für dieses AWP beträgt an der Stelle t

$$R_{n+1} = \mathcal{L}(y(t_n); h) = -\frac{h^2}{2} y''(t_n) + O(h^3) = \frac{h^2}{2} \cos t_n + O(h^3),$$

sodass der globale Fehler auf $t \in [t_0, t_{\text{end}}]$ beschränkt ist durch (vgl. Beweis Satz 2.1)

$$\max_{t_0 \leq nh \leq t_{\text{end}}} |e_n| \leq h(t_{\text{end}} - t_0) \max_{t_0 \leq t \leq t_{\text{end}}} |\cos t| = h.$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität, einführendes Beispiel

Für einen Fehler $|e| \leq 10^{-3}$ bei der Integration bis $t_{\text{end}} = 2$ müßte also eine Schrittweite von $h = 10^{-3}$ ausreichen. Man erhält für $N = 2000$

$$y_N = -4.166014e - 01, \quad |y(2) - y_N| = 4.547667e - 04.$$

Beispiel 2: Wir modifizieren obige AWA zu

$$y'(t) = \lambda(y - \cos t) - \sin t, \quad y(0) = 1 \tag{3.5}$$

mit derselben Lösung $y(t) = \cos t$. Man rufe sich in Erinnerung, dass beim expliziten Euler-Verfahren der globale Fehler der Rekursion

$$|e_{n+1}| \leq (1 + hL)|e_n| + O(h^2)$$

genügt, mit L der Lipschitz-Konstanten der rechten Seite. Für $\lambda = -10$ erhalten wir

$$y_N = -4.170721e - 01, \quad |y(2) - y_N| = 1.611611e - 05.$$

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität, einführendes Beispiel

Beispiel 3: Wir betrachten obiges Beispiel für $\lambda = -2100$. In diesem Fall ergibt sich

$$y_N = 1.597768e + 76, \quad |y(2) - y_N| = 1.452516e + 76.$$

Verschiedene Schrittweiten für dieses AWP liefern

h	Fehler bei $t_{\text{end}} = 2$
0.001	$1.7e + 76$
0.000976	$3.1e + 36$
0.00095	$8.6e - 04$
0.0008	$7.3e - 04$
0.0004	$3.6e - 04$

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität

- Bekanntlich streben die Lösungen $\mathbf{y}(t)$ von $\mathbf{y}' = A\mathbf{y}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ (konstant) gegen $\mathbf{0}$ für $t \rightarrow \infty$, wenn $\operatorname{Re} \lambda < 0$ für alle Eigenwerte λ von A gilt.
- Wir suchen Bedingungen an ein numerisches Verfahren (zunächst lineare Mehrschrittverfahren), so dass die Näherungslösungen dasselbe asymptotische Verhalten besitzen.
- Dazu eine Bezeichnung: Seien ρ und σ die charakteristischen Polynome eines linearen Mehrschrittverfahrens; dann heißt

$$\pi(\zeta, \hat{h}) := \rho(\zeta) - \hat{h}\sigma(\zeta), \quad \hat{h} = h\lambda$$

Stabilitätspolynom des Verfahrens.

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität

Lemma 3.11

Es seien $\{\mathbf{y}_n\}$ die Näherungen eines linearen k -Schritt-Verfahrens

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \mathbf{y}_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j \mathbf{f}_{n+j} \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

zur Lösung von $\mathbf{y}' = A\mathbf{y}$ (inkl. Anfangsbedingungen). Bei festem h gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{y}_n\| = 0$$

genau dann, wenn alle Nullstellen von $\pi(\zeta, \hat{h}) = \pi(\zeta, \lambda h)$ (als Polynom in ζ betrachtet) betragsmäßig echt kleiner als 1 sind und zwar für jedes $\lambda \in \Lambda(A)$.

Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität

- Das Verfahren heißt **absolut stabil** für \hat{h} , wenn alle Nullstellen ζ von $\pi(\cdot, \hat{h})$ die Beziehung $|\zeta| < 1$ erfüllen.
- Die Menge

$$\mathcal{R}_A := \{\hat{h} \in \mathbb{C} : \pi(\cdot, \hat{h}) \text{ hat nur Nullstellen in } |\zeta| < 1\}$$

heißt **Stabilitätsgebiet** des Verfahrens.

- Das Verfahren heißt **A-stabil** (absolut stabil), wenn \mathcal{R}_A die linke Halbebene $\{\operatorname{Re} \zeta < 0\}$ enthält.

Bemerkungen.

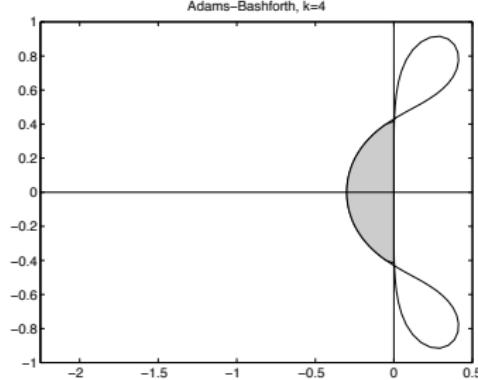
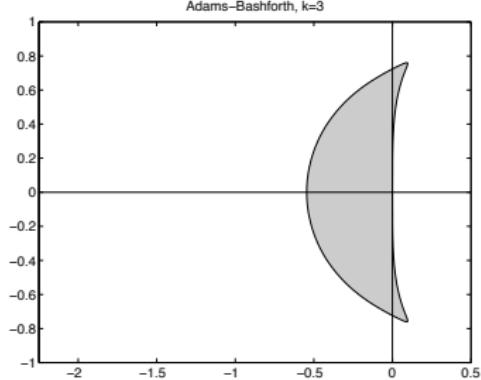
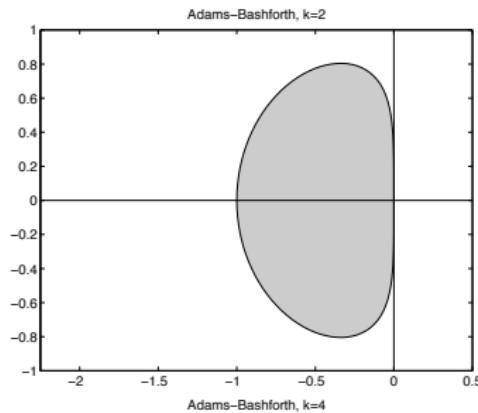
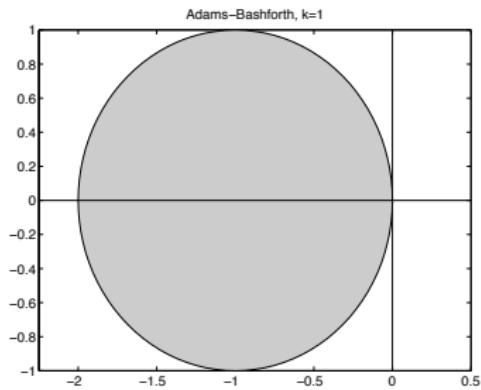
(1) Für jedes konvergente lineare Mehrschrittverfahren gibt es ein $\hat{h}_0 > 0$, so dass $\mathcal{R}_A \cap [0, \hat{h}_0] = \emptyset$.

(2)

$$\partial \mathcal{R}_A \subseteq \partial \left\{ \hat{h} \in \mathbb{C} : \hat{h} = \frac{\rho(\exp(i\phi))}{\sigma(\exp(i\phi))}, 0 \leq \phi \leq 2\pi \right\}.$$

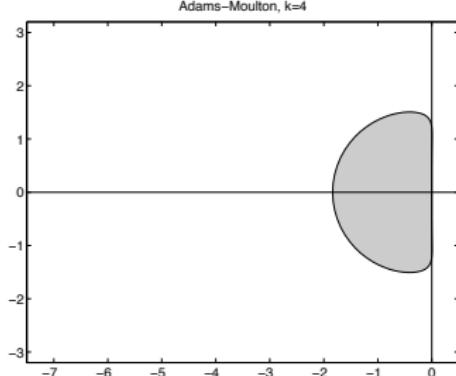
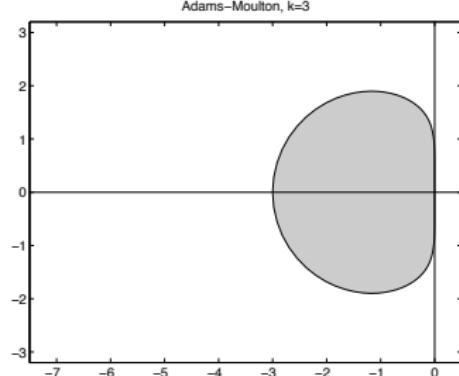
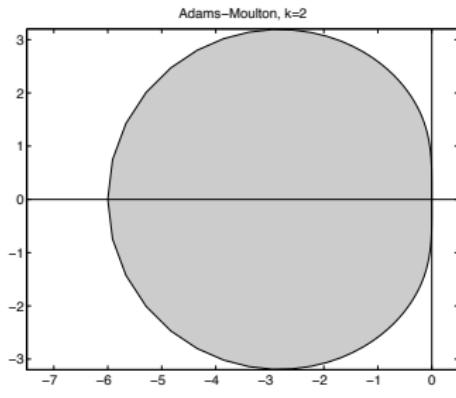
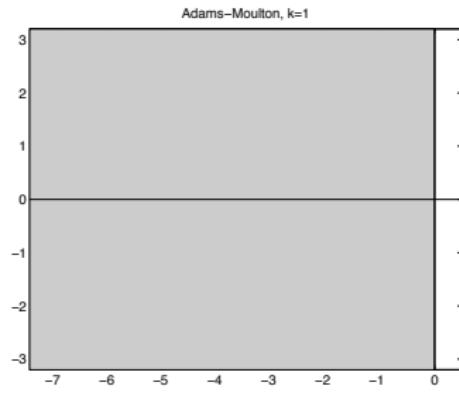
Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität



Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität



Lineare Mehrschrittverfahren

Absolute Stabilität

Ein LMV mit charakteristischen Polynomen $\rho(\zeta)$ und $\sigma(\zeta)$ heißt **irreduzibel**, falls $\rho(\zeta)$ und $\sigma(\zeta)$ keine gemeinsamen Nullstellen besitzen.

Satz 3.12 (Zweite Dahlquist-Barriere)

Ist ein lineares Mehrschrittverfahren A-stabil, so gilt

$$\operatorname{Re} \frac{\rho(\zeta)}{\sigma(\zeta)} \geq 0 \quad \text{für } |\zeta| \geq 1. \quad (3.6)$$

Für irreduzible LMV gilt auch die Umkehrung, d.h. (3.6) impliziert A-Stabilität.

Satz 3.13 (Dahlquist, 1963)

Für die Konsistenzordnung p eines A-stabilen LMV gilt $p \leq 2$. Gilt $p = 2$, so gilt für die Fehlerkonstante des Verfahrens $C \leq -\frac{1}{12}$. Die Trapezregel ist das einzige A-stabile LMV mit Fehlerkonstante $C = -\frac{1}{12}$.

Inhalt

- ① Einleitung
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
 - 3.1 Begriffe
 - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere
 - 3.3 Die Verfahren von Adams-Basforth und Adams-Moulton
 - 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
 - 3.5 Absolute Stabilität
 - 3.6 BDF-Verfahren
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
- ⑤ Steife Differentialgleichungen

Lineare Mehrschrittverfahren

BDF-Verfahren

Die Idee der **BDF-Verfahren** (Backward Differentiation Formulas), oder auch **Gear-Verfahren**²¹:

Um eine Näherung für $\mathbf{y}(t_{n+1})$ zu gewinnen, approximieren wir $f(t, \mathbf{y}(t))$ durch das Interpolationspolynom $P_k \in \mathcal{P}_k$ mit den $k + 1$ Daten

$$(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}), (t_n, \mathbf{y}_n), \dots, (t_{n-k+1}, \mathbf{y}_{n-k+1}).$$

Es ergibt sich

$$P_k(t) = \sum_{j=0}^k \ell_j \left(\frac{t_{n+1} - t}{h} \right) \mathbf{y}_{n+1-j} \quad \text{mit} \quad \ell_j(t) = \prod_{\substack{s=0 \\ s \neq j}}^k \frac{t - s}{j - s}.$$

Jetzt nähern wir $\mathbf{y}'(t_{n+1})$ durch

$$P'_k(t_{n+1}) = \sum_{j=0}^k \left(-\frac{1}{h} \right) \ell'_j(0) \mathbf{y}_{n+1-j}$$

²¹Charles William Gear, (1935–)

Lineare Mehrschrittverfahren

BDF-Verfahren

an und setzen diese Näherung in $\mathbf{y}'(t_{n+1}) = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{f}_{n+1}$ ein:

$$\sum_{j=0}^k (-\ell'_j(0)) \mathbf{y}_{n+1-j} = h \mathbf{f}_{n+1}$$

ist ein lineares k -Schritt-Verfahren (das k -te BDF-Verfahren). Wir schreiben es in der Standardform

$$\mathbf{y}_{n+1} + \sum_{j=1}^k (\ell'_j(0)/\ell'_0(0)) = h/(-\ell'_0(0)) \mathbf{f}_{n+1}.$$

Nach Konstruktion besitzt es die Konsistenzordnung k .

Satz 3.14 (Stabilität von BDF-Verfahren)

Das k -te BDF-Verfahren ist genau dann stabil (und damit konvergent), wenn $k \leq 6$ gilt.

Lineare Mehrschrittverfahren

BDF-Verfahren

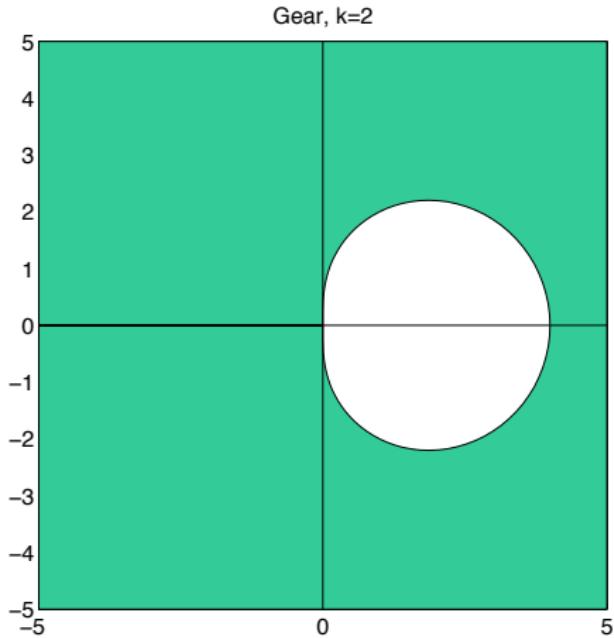
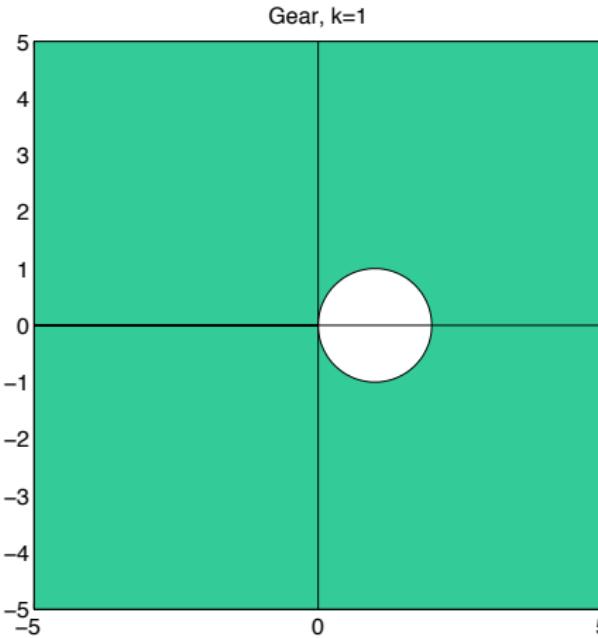
Koeffizienten und Fehlerkonstanten der BDF-Verfahren:

k	α_6	α_5	α_4	α_3	α_2	α_1	α_0	β_k	C_{k+1}
1						1	-1	1	$-\frac{1}{2}$
2					1	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{2}{9}$
3				1	$-\frac{18}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{2}{11}$	$\frac{6}{11}$	$-\frac{3}{22}$
4			1	$-\frac{48}{25}$	$\frac{36}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$\frac{3}{25}$	$\frac{12}{25}$	$-\frac{12}{125}$
5		1	$-\frac{300}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{200}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{12}{137}$	$\frac{60}{137}$	$-\frac{10}{137}$
6	1	$-\frac{360}{147}$	$\frac{450}{147}$	$-\frac{400}{147}$	$\frac{225}{147}$	$-\frac{72}{147}$	$\frac{10}{147}$	$\frac{60}{147}$	$-\frac{20}{343}$

Für $k = 1$ erhält man das **implizite Euler-Verfahren** $y_{n+1} = y_n + h f(t_{n+1}, y_{n+1})$.
BDF-Verfahren zeichnen sich durch „große“ Stabilitätsbereiche aus.

Lineare Mehrschrittverfahren

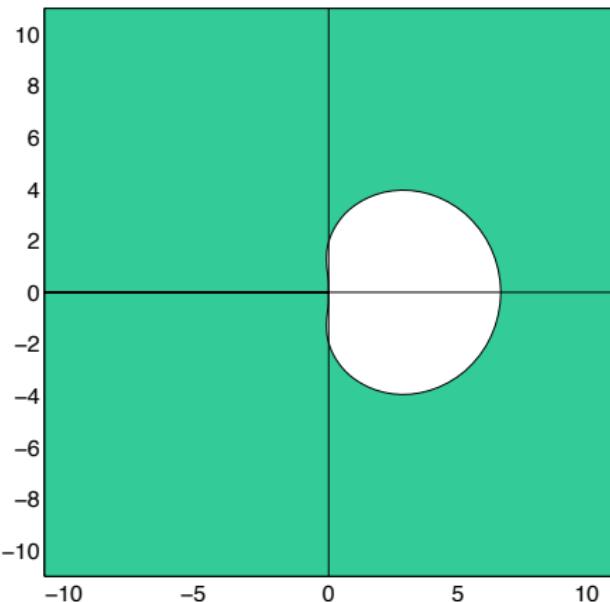
BDF-Verfahren



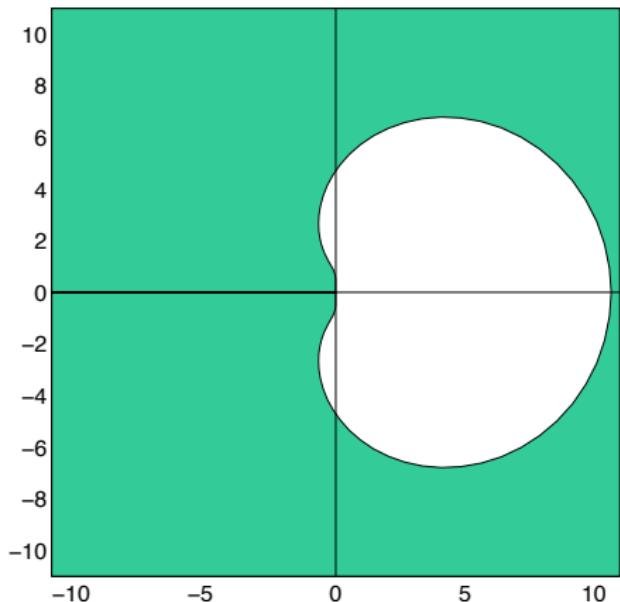
Lineare Mehrschrittverfahren

BDF-Verfahren

Gear, k=3



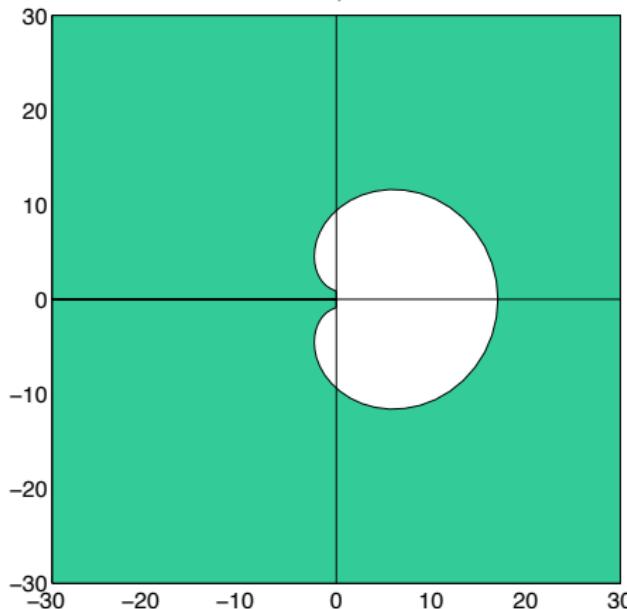
Gear, k=4



Lineare Mehrschrittverfahren

BDF-Verfahren

Gear, k=5



Gear, k=6

