

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 Differenzgleichungen
 - 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

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

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

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Es gibt keine zufriedenstellende Definition der Bauart „eine DG heißt steif, wenn ...“.

Wir beschreiben nun verschiedene Aspekte des Phänomens „Steifheit einer DG“ an Beispielen.

Beispiel 1. Die beiden AWP_e

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \mathbf{y} + \begin{bmatrix} 2 \sin t \\ 2(\cos t - \sin t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad (\text{AWP}_1)$$

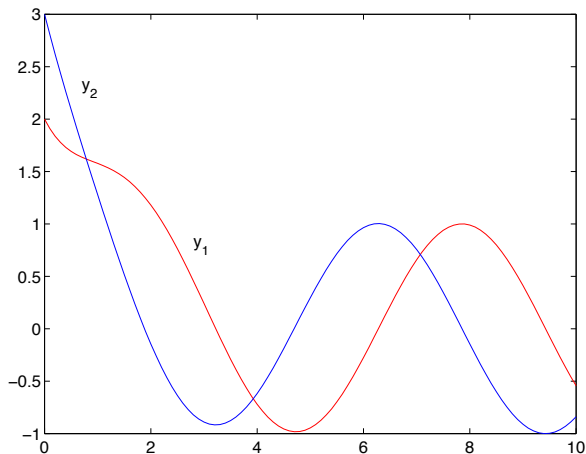
$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 998 & -999 \end{bmatrix} \mathbf{y} + \begin{bmatrix} 2 \sin t \\ 999(\cos t - \sin t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad (\text{AWP}_2)$$

besitzen dieselbe Lösung.

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

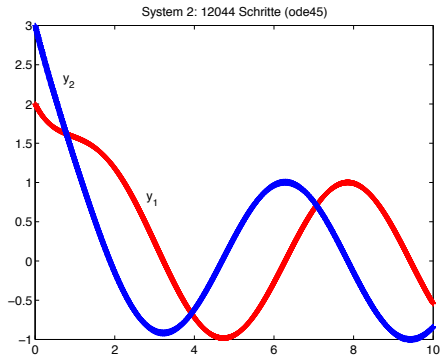
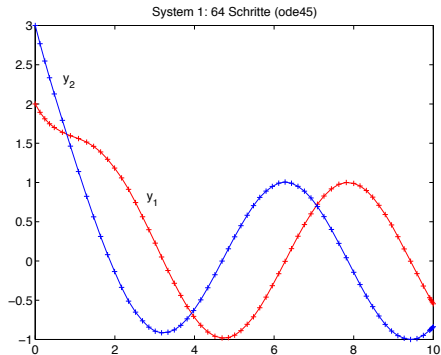
$$\mathbf{y}(t) = \exp(-t) \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sin t \\ \cos t \end{bmatrix}.$$



Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Wir lösen beide Probleme für $t \in [0, 10]$ mit der Matlab-Routine `ode45` (die ein eingebettetes RKV, das Verfahren von Dormand-Prince, verwendet, bei dem zwei RKV der Ordnungen 4 bzw. 5 kombiniert werden), wobei wir eine relative Toleranz von 0.01 vorgeben.



Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Obwohl die exakte Lösung in beiden Fällen dieselbe ist, erfordert die Lösung von (AWP_2) etwa 200-mal mehr Aufwand als die von (AWP_1) :

AWP	h_{\min}	h_{\max}	h_{\emptyset}	Schritte
(AWP_1)	2.27e-2	2.03e-1	1.56e-1	64
(AWP_2)	5.98e-4	2.88e-3	8.30e-3	12044

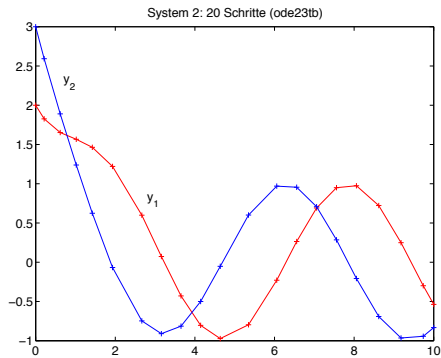
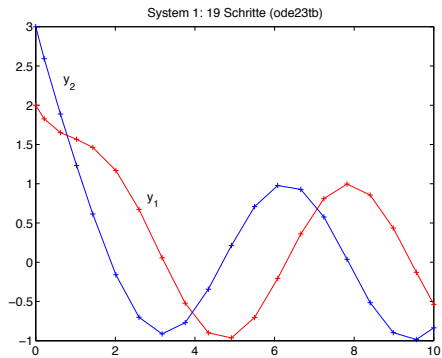
Lösen wir die beiden Probleme mit der Matlab-Routine `ode23tb` (die die Trapezregel mit der Gear-Formel der Ordnung 2 kombiniert), so ergibt sich (relative Toleranz wie oben = 0.01):

AWP	h_{\min}	h_{\max}	h_{\emptyset}	Schritte
(AWP_1)	2.13e-1	5.81e-1	5.26e-1	19
(AWP_2)	2.13e-1	7.36e-1	5.00e-1	20

Beide Probleme werden ohne Schwierigkeiten gelöst.

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?



Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Die Unterschiede zwischen den beiden AWPen werden sichtbar, wenn wir alle Lösungen der zugehörigen Systeme betrachten. Im ersten Fall ergibt sich

$$\mathbf{y} = \kappa_1 \exp(-t) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \kappa_2 \exp(-3t) \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sin t \\ \cos t \end{bmatrix},$$

während im zweiten Fall

$$\mathbf{y} = \kappa_1 \exp(-t) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \kappa_2 \exp(-1000t) \begin{bmatrix} 1 \\ -998 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sin t \\ \cos t \end{bmatrix}$$

die allgemeine Lösung ist. (Beide Systeme sind inhomogene lineare Systeme mit konstanten Koeffizienten, wobei die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix im ersten Fall $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -3$ und im zweiten Fall $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -1000$ sind.) Die Lösungen der konkreten AWPen sind jeweils durch $\kappa_1 = 2$ und $\kappa_2 = 0$ (!) gegeben.

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

- In beiden Fällen ist die Lösung aus einem Gleichgewichtsanteil, nämlich $[\sin t, \cos t]^T$, und einem transienten Anteil der Form $\exp(\lambda_1 t) \mathbf{a}_1 + \exp(\lambda_2 t) \mathbf{a}_2$ zusammengesetzt. Die Unterschiede liegen in der Geschwindigkeit, mit der der transiente Teil (für $t \rightarrow \infty$) verschwindet.
- Obwohl in der exakten Lösung der AWP_e gar nicht erkennbar ist, wie schnell der abklingende Anteil verschwindet ($\kappa_2 = 0$), bestimmt er die erforderliche Schrittweite.
- Würde man in (AWP₂) die AB in $\mathbf{y}(0) = [0, 1]^T$ ändern, so würde $\kappa_1 = \kappa_2 = 0$ folgen, d.h. der transiente Teil ist in der Lösung $\mathbf{y}(t) = [\sin t, \cos t]^T$ vollständig unsichtbar. Selbst dann wäre ode45 nur mit extrem kleiner Schrittweite in der Lage, die Aufgabe zu lösen.
- Wir betrachten die Stabilitätsbereiche \mathcal{R}_A : Für ode45 kann man zeigen, dass $\mathcal{R}_A \cap \mathbb{R} \sim [-3, 0]$ (**Stabilitätsintervall**). Will man für (AWP₁) also $\lambda h \in \mathcal{R}_A$ (für alle Eigenwerte λ) garantieren, genügt es, $h < 1$ zu fordern (die durchschnittliche Schrittweite von $h_\emptyset \sim 0.156$ resultiert aus der geforderten Genauigkeit!).

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Dagegen muss für (AWP_2) $h < 0.003$ gefordert werden, damit $\lambda h \in \mathcal{R}_A$ für alle λ folgt und es sind Stabilitätsprobleme, die zu der kleinen durchschnittlichen Schrittweite von $h_{\emptyset} \sim 0.008$ führen.

Das Verfahren ode23tb ist absolut stabil, so dass hier λh für alle $h > 0$ (in jedem der beiden Fälle (AWP_1) und (AWP_2)) im Stabilitätsbereich liegt.

Für $\mathbf{y}' = A\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$ heißt

$$\frac{\max_{\lambda \in \Lambda(A)} |\operatorname{Re} \lambda|}{\min_{\lambda \in \Lambda(A)} |\operatorname{Re} \lambda|}$$

Steifigkeitsquotient des linearen DG-Systems.

Ein lineares DG-System mit konstanten Koeffizienten heißt steif, wenn seine Eigenwerte alle negativen Realteil besitzen und sein Steifigkeitsquotient groß ist.

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Um die Problematik dieser gebräuchlichen „Definition“ zu erläutern, betrachten wir ein weiteres AWP (mit derselben Lösung):

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ -1.999 & 0.999 \end{bmatrix} \mathbf{y} + \begin{bmatrix} 2 \sin t \\ -0.999(\cos t - \sin t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}. \quad (\text{AWP}_3)$$

Die Matrix dieses Systems besitzt die Eigenwerte $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -0.001$ und sein Steifigkeitsquotient beträgt 1000 (wie bei (AWP₂)).

Trotzdem hat ode45 keine ernsten Probleme:

AWP	h_{\min}	h_{\max}	h_{\emptyset}	Schritte
(AWP ₃)	1.19e-1	2.50e-1	2.27e-1	44 (ode45)
(AWP ₃)	1.25e-1	4.92e-1	4.55e-1	22 (ode23tb)

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Ob ein System steif ist oder nicht kann also nicht immer aus dem Steifigkeitsquotienten abgelesen werden.

Auch „Definitionen“ wie

„ein System ist steif, wenn $\max |\operatorname{Re} \lambda|$ groß ist (etwa $\max |\operatorname{Re} \lambda| \gg 1$)“

sind natürlich wenig hilfreich (die Variablentransformation $t \mapsto 0.001t$ macht aus (AWP₂) ein Problem, das dieselbe Steifigkeit besitzt, bei dem aber $\max |\operatorname{Re} \lambda| = 1$ gilt).

Pragmatische „Definitionen“ für Steifigkeit sind:

Ein System ist steif, wenn Stabilitätsanforderungen — und nicht Genauigkeitsanforderungen — die Größe der Schrittweite bestimmen.

Ein System heißt steif, wenn gewisse Komponenten der Lösung sehr viel schneller abklingen als andere.

Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Beispiel 2. Die Differentialgleichung

$$y'(t) = \lambda(y(t) - g(t)) + g'(t) \quad (*)$$

besitzt die allgemeine Lösung $y(t) = \gamma \exp(\lambda t) + g(t)$ ($\gamma \in \mathbb{R}$).

Wir wählen g als glatte Funktion, z.B. $g(t) = \arctan t$ und $\lambda = -10$. Auch hier setzt sich die Lösung aus einem glatten ($g(t) =$ Gleichgewichtsanteil) und einem schnell abklingenden Teil ($\gamma \exp(\lambda t) =$ transienter Anteil) zusammen.

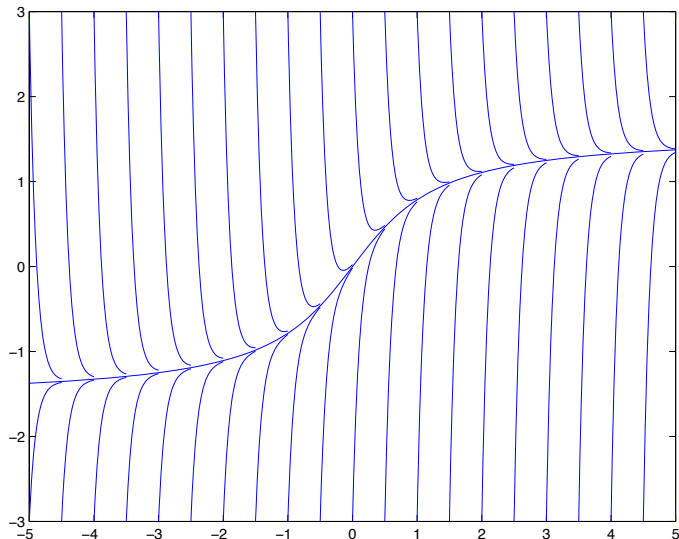
Wir wählen die AB $y(0) = 0$ und approximieren die exakte Lösung

$$y(t) = \arctan t \quad \text{für} \quad t \in [0, 5]$$

mit dem expliziten Euler-Verfahren ($\mathcal{R}_A = \{\hat{h} : |\hat{h} + 1| < 1\}$) und dem impliziten Euler-Verfahren ($\mathcal{R}_A = \mathbb{C} \setminus \{\hat{h} : |\hat{h} - 1| \leq 1\}$).

Steife Differentialgleichungen

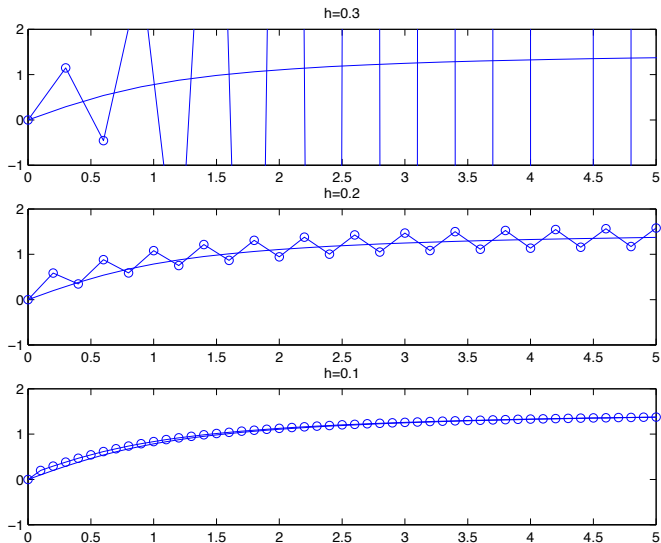
Was sind steife Differentialgleichungen?



Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

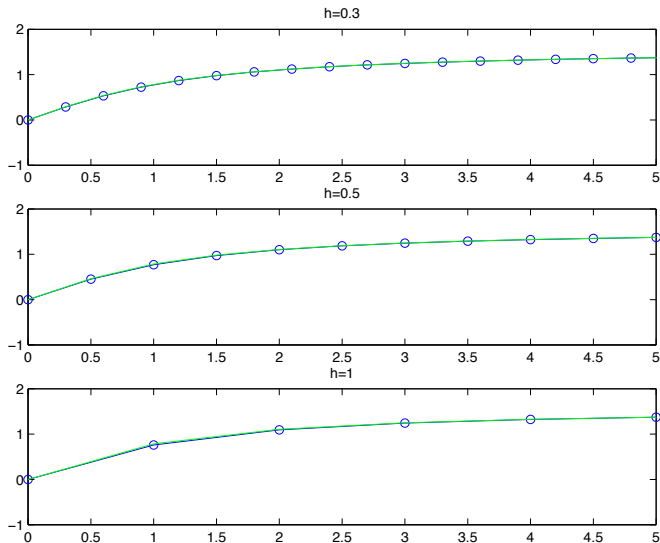
Explizit:



Steife Differentialgleichungen

Was sind steife Differentialgleichungen?

Implizit:



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

Erinnerung. Ein numerisches Verfahren zur Lösung von

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0,$$

heißt A -stabil, wenn folgendes gilt:

Wendet man das Verfahren auf ein lineares Problem $\mathbf{y}' = A\mathbf{y}$ ($t \in [0, \infty)$) an und liegen die Eigenwerte von A alle in der linken Halbebene $\{\zeta : \operatorname{Re} \zeta < 0\}$, dann soll für die Näherungslösung stets $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{y}_n\| = 0$ gelten (die exakte Lösung erfüllt $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\mathbf{y}(t)\| = 0$).

In konkreten Fällen wird die äquivalente Bedingung

$$\mathcal{R}_A \supseteq \{\hat{h} : \operatorname{Re} \hat{h} < 0\}$$

überprüft. Zur Definition des Stabilitätsbereichs \mathcal{R}_A vergleiche Abschnitt 5 für lineare Mehrschrittverfahren und Abschnitt 3 für RKV (oder allgemeine Einschrittverfahren).

Abgeschwächte Stabilitätsbegriffe sind

- **$A(\alpha)$ -stabil** für $\alpha \in (0, \pi/2)$ $\Leftrightarrow \mathcal{R}_A \supseteq \{\hat{h} : -\alpha < \pi - \arg \hat{h} < \alpha\}$,
- **A_0 -stabil** $\Leftrightarrow \mathcal{R}_A \supseteq (-\infty, 0)$,
- **steif-stabil** $\Leftrightarrow \mathcal{R}_A \supseteq \mathcal{R}_1(\beta) \cup \mathcal{R}_2(\beta, \gamma)$ für positive β und γ , wobei

$$\mathcal{R}_1(\beta) := \{\hat{h} : \operatorname{Re} \hat{h} < -\beta\} \text{ und}$$

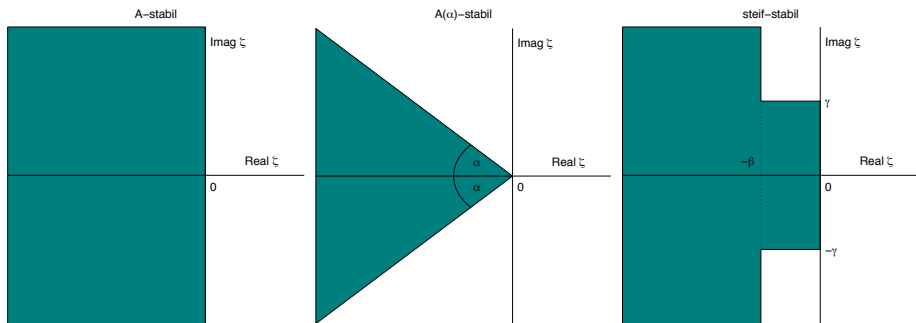
$$\mathcal{R}_2(\beta, \gamma) := \{\hat{h} : -\beta \leq \operatorname{Re} \hat{h} < 0, |\operatorname{Im} \hat{h}| \leq \gamma\}.$$

Außerdem heißt ein Einschrittverfahren

- **L -stabil**, wenn es A -stabil ist und zusätzlich gilt: Bei Anwendung auf die Testgleichung $y' = \lambda y$, $\operatorname{Re} \lambda < 0$, resultiert eine Näherung $y_{n+1} = R(h\lambda)y_n$ mit $\lim_{h\lambda \rightarrow -\infty} |R(h\lambda)| = 0$.

Steife Differentialgleichungen

Stabilitätsbegriffe



Offensichtlich gilt $(0 < \alpha \leq \arg(\beta + i\gamma))$

$$L\text{-stabil} \Rightarrow A\text{-stabil} \Rightarrow \text{steif-stabil} \Rightarrow A(\alpha)\text{-stabil} \Rightarrow A_0\text{-stabil}.$$

- Die Trapezregel $y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f_{n+1} + f_n)$, d.h. $R(\hat{h}) = (1 + \hat{h}/2)/(1 - \hat{h}/2)$, ist A -stabil, aber nicht L -stabil.
- Das implizite Euler-Verfahren $y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$, d.h. $R(\hat{h}) = 1/(1 - \hat{h})$, ist dagegen L -stabil.

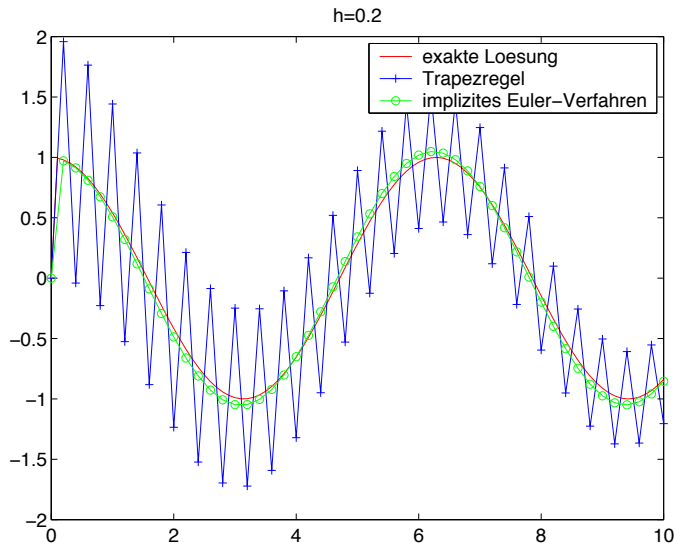
Wir illustrieren den Unterschied, indem wir mit beiden Verfahren die Lösung von (AWP₂) aus Abschnitt 1 approximieren. Um den transienten Anteil der Lösung besser sichtbar zu machen, werden die ABen $\mathbf{y}(0) = [0, 0]^T$ vorgeschrieben. Die exakte Lösung ist dann

$$\mathbf{y}(t) = \frac{-1}{999} \exp(-t) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{999} \exp(-1000t) \begin{bmatrix} 1 \\ -998 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sin t \\ \cos t \end{bmatrix}.$$

Die folgende Abbildung zeigt die zweite Komponente der (Näherungs)lösung für $h = 0.2$.

Steife Differentialgleichungen

Stabilitätsbegriffe



Das Beispiel

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} 42.2 & 50.1 & -42.1 \\ -66.1 & -58.0 & 58.1 \\ 26.1 & 42.1 & -34.0 \end{bmatrix} \mathbf{y}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix},$$

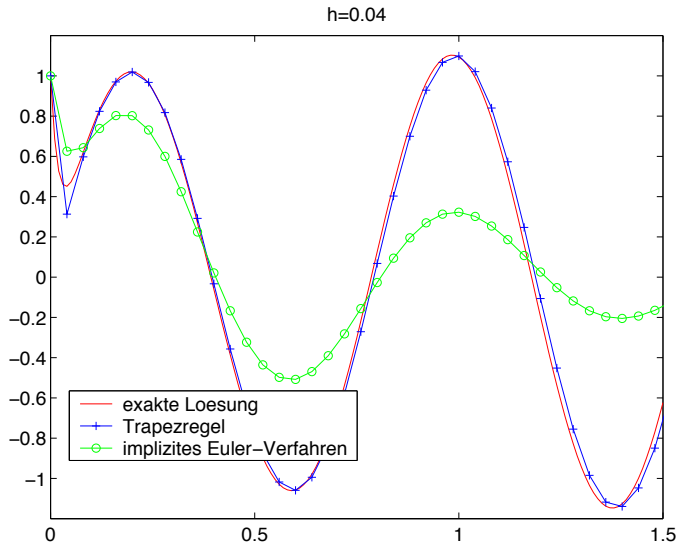
mit der exakten Lösung

$$\mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} \exp(0.8t) \sin(8t) + \exp(-50t) \\ \exp(0.1t) \cos(8t) - \exp(-50t) \\ \exp(0.1t) (\sin(8t) + \cos(8t)) + \exp(-50t) \end{bmatrix}$$

zeigt, dass L -stabile Verfahren nicht immer besser sind als A -stabile (die folgende Abbildung zeigt die erste Komponente der (Näherungs)lösung für $h = 0.04$ und $t \in [0, 1.5]$). Beim impliziten Euler-Verfahren müsste man $h < 0.0031 \dots$ wählen, um eine akzeptable Näherung zu erhalten (warum?).

Steife Differentialgleichungen

Stabilitätsbegriffe



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

Steife Differentialgleichungen

Ordnungssterne

Wendet man ein Einschrittverfahren (ESV) auf die Testgleichung $y' = \lambda y$ an, so gilt $y_{n+1} = R(\lambda h)y_n$. Dabei ist R ein Polynom (bei expliziten Verfahren) oder eine (gebrochen) rationale Funktion in $\hat{h} = \lambda h$.

Besitzt das ESV die Konsistenzordnung p , so ist

$$R(\hat{h}) - \exp(\hat{h}) = O(\hat{h}^{p+1}) \quad (\hat{h} \rightarrow 0).$$

Natürlicher Ansatz: Bestimme eine rationale Funktion R vom Typ (k, ℓ) ($k = \text{Zählergrad}$, $\ell = \text{Nennergrad}$), so dass der Exponent μ in

$$R(\hat{h}) - \exp(\hat{h}) = O(\hat{h}^\mu)$$

maximal wird. Es zeigt sich, dass das Maximum $\mu = k + \ell + 1$ durch die in Abschnitt 4 eingeführten Padé-Approximationen $(k, \ell)_{\text{exp}}$ realisiert wird.

Steife Differentialgleichungen

Ordnungssterne

$(k, \ell)_{\text{exp}}(\zeta)$ für $0 \leq k, \ell \leq 3$:

k, ℓ	0	1	2	3
0	1	$\frac{1}{1-\zeta}$	$\frac{1}{1-\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2}$	$\frac{1}{1-\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2-\frac{1}{6}\zeta^3}$
1	$1+\zeta$	$\frac{1+\frac{1}{2}\zeta}{1-\frac{1}{2}\zeta}$	$\frac{1+\frac{1}{3}\zeta}{1-\frac{2}{3}\zeta+\frac{1}{6}\zeta^2}$	$\frac{1+\frac{1}{4}\zeta}{1-\frac{3}{4}\zeta+\frac{1}{4}\zeta^2-\frac{1}{24}\zeta^3}$
2	$1+\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2$	$\frac{1+\frac{2}{3}\zeta+\frac{1}{6}\zeta^2}{1-\frac{1}{3}\zeta}$	$\frac{1+\frac{1}{2}\zeta+\frac{1}{12}\zeta^2}{1-\frac{1}{2}\zeta+\frac{1}{12}\zeta^2}$	$\frac{1+\frac{2}{5}\zeta+\frac{1}{20}\zeta^2}{1-\frac{3}{5}\zeta+\frac{3}{20}\zeta^2-\frac{1}{60}\zeta^3}$
3	$1+\zeta+\frac{1}{2}\zeta^2+\frac{1}{6}\zeta^3$	$\frac{1+\frac{3}{4}\zeta+\frac{1}{4}\zeta^2+\frac{1}{24}\zeta^3}{1-\frac{1}{4}\zeta}$	$\frac{1+\frac{3}{5}\zeta+\frac{3}{20}\zeta^2+\frac{1}{60}\zeta^3}{1-\frac{2}{5}\zeta+\frac{1}{20}\zeta^2}$	$\frac{1+\frac{1}{2}\zeta+\frac{1}{10}\zeta^2+\frac{1}{120}\zeta^3}{1-\frac{1}{2}\zeta+\frac{1}{10}\zeta^2-\frac{1}{120}\zeta^3}$

Eine rationale Approximation $R(\zeta)$ an $\exp(\zeta)$ heißt

- **A-akzeptabel**, wenn $|R(\zeta)| < 1$ für alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re} \zeta < 0$,
- **A₀-akzeptabel**, wenn $|R(\zeta)| < 1$ für alle $\zeta \in \mathbb{R}$ mit $\zeta < 0$,
- **L-akzeptabel**, wenn R A-akzeptabel ist und $R(\zeta) \rightarrow 0$ für $\zeta \rightarrow -\infty$ gilt.

Satz 5.1

Es gilt

1. $(k, k)_{\text{exp}}$ ist A-akzeptabel (G. Birkhoff, R.S. Varga 1962).
2. $(k, \ell)_{\text{exp}}$ ist A₀-akzeptabel für $k \leq \ell$ (R.S. Varga 1961).
3. $(k, \ell)_{\text{exp}}$ ist L-akzeptabel für $k \in \{\ell - 1, \ell - 2\}$ (B.L. Ehle, 1969).
4. $(k, \ell)_{\text{exp}}$ ist genau dann A-akzeptabel, wenn $k \in \{\ell, \ell - 1, \ell - 2\}$
(Ehle-Vermutung; G. Wanner, E. Hairer, S.P. Nørsett 1978).

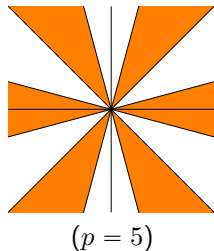
Der Beweis der vierten Aussage basiert auf der Theorie der Ordnungssterne. Ist $R(\zeta)$ eine rationale Funktion, so heißt

$$\mathcal{S}_R := \{\zeta \in \mathbb{C} : |R(\zeta)| > |\exp(\zeta)|\}$$

der zugehörige **Ordnungsstern**. Sei $\mathcal{I}_R := \mathbb{C} \setminus \mathcal{S}_R$ sein Komplement.

Vier Eigenschaften.

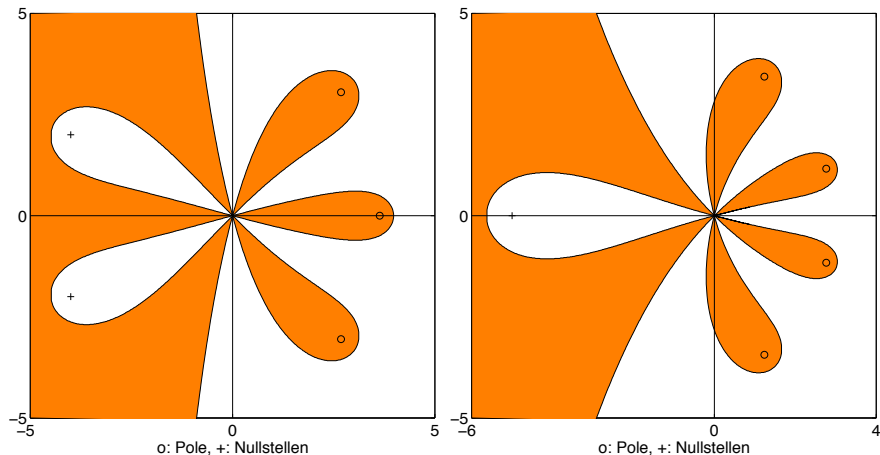
- (1) R ist genau dann eine Approximation der Ordnung p an die Exponentialfunktion (d.h. $R(\zeta) - \exp(\zeta) = O(\zeta^{p+1})$ für $\zeta \rightarrow 0$), wenn Folgendes gilt: Für $\zeta \rightarrow 0$ besteht sowohl \mathcal{S}_R als auch \mathcal{I}_R aus genau $p+1$ Sektoren mit Winkel jeweils $\pi/(p+1)$. Die Sektoren von \mathcal{S}_R und \mathcal{I}_R trennen sich.



- (2) Der Rand von \mathcal{S}_R enthält genau zwei unbeschränkte Zweige.
- (3) Komponenten von \mathcal{S}_R , die k Sektoren enthalten, nennt man **Finger der Ordnung k** . Komponenten von \mathcal{I}_R , die k Sektoren enthalten, heißen **duale Finger der Ordnung k** .
Es gilt: Jeder beschränkte Finger der Ordnung k enthält mindestens k Pole von R (Vielfachheiten mitzählen). Jeder beschränkte duale Finger der Ordnung k enthält mindestens k Nullstellen von R (Vielfachheiten mitzählen).
- (4) R ist genau dann A -akzeptabel, wenn \mathcal{S}_R keine Punkte der imaginären Achse enthält und R keine Pole in der linken Halbebene $\operatorname{Re} \zeta < 0$ besitzt.

Steife Differentialgleichungen

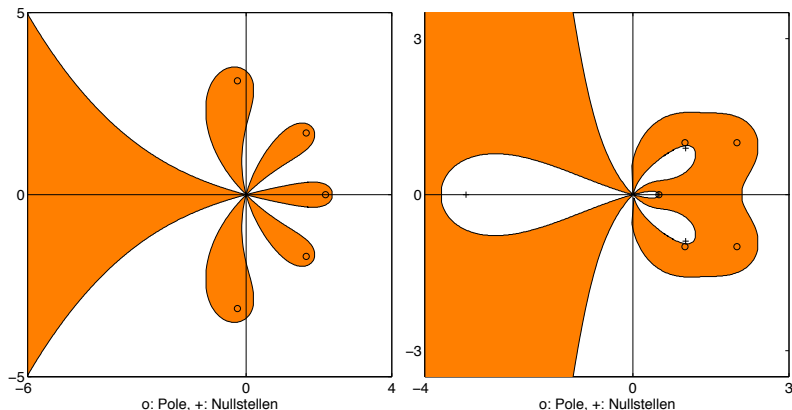
Ordnungssterne



Ordnungssterne der Padé-Approximationen $(2, 3)_{\text{exp}}$ (links) und $(1, 4)_{\text{exp}}$ (rechts).

Steife Differentialgleichungen

Ordnungssterne



Ordnungssterne der Padé-Approximation $(0, 5)_{\text{exp}}$ (links) und einer (nicht A -akzeptablen) $(4, 5)$ -Approximation R der Ordnung 5 (rechts) ($R(\zeta) = [\frac{41}{24}\zeta^4 + \frac{7}{6}\zeta^3 - 9\zeta^2 + 14\zeta - 5]/[\zeta^5 + \frac{13}{2}\zeta^4 + 18\zeta^3 - \frac{51}{2}\zeta^2 + 19\zeta - 5]$).

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

Satz 5.2 (Zweite Dahlquist-Barriere)

Es gilt:

- Kein explizites lineares MSV ist A -stabil.
- Ein A -stabiles lineares MSV besitzt höchstens die Ordnung 2.
- Das A -stabile lineare MSV mit Konsistenzordnung 2 und kleinster Fehlerkonstante ist die Trapezregel.

Satz 5.3 (C.W. Cryer, 1973)

Es gilt:

- Kein explizites lineares MSV ist A_0 -stabil.
- Es gibt A_0 -stabile lineare MSV beliebig hoher Konsistenzordnung.

Beispielsweise sind die Gear-Verfahren aus Abschnitt 6 alle A_0 -stabil.

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

Entscheidend (vgl. Abschnitt 3)

$$R(\hat{h}) = 1 + \hat{h}\mathbf{b}^\top (I - \hat{h}A)^{-1} \mathbf{e} = \frac{\det(I - \hat{h}(A - \mathbf{e}\mathbf{b}^\top))}{\det(I - \hat{h}A)}.$$

	Ordnung	Typ von R	Stabilität
Gauß	$2m$	(m, m)	A -stabil
Gauß-Radau	$2m - 1$	$(m - 1, m)$	L -stabil
Gauß-Lobatto	$2m - 2$	$(m - 1, m - 1)$	A -stabil

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

Steife Differentialgleichungen

Nichtlineare Stabilitätstheorie

Alle bisher getroffenen Stabilitätsaussagen basieren auf der Untersuchung linearer Systeme mit konstanten Koeffizienten (**lineare Stabilitätstheorie**). Oft wird versucht, diese Aussagen mit folgender Argumentation zu verallgemeinern:

Die Lösung \mathbf{y}^* des AWP's $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$, $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ kann durch die Lösung der linearen **Variationsgleichung**

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}^*(t)) + \mathbf{f}_y(t, \mathbf{y}^*(t))[\mathbf{y} - \mathbf{y}^*(t)] \quad (*)$$

approximiert werden. Lokal ist $\mathbf{f}_y(t, \mathbf{y}^*)$ nahezu zeitunabhängig, so dass (*) näherungsweise die Form $\mathbf{y}' = A\mathbf{y} + \mathbf{g}(t)$ besitzt.

Zwei Beispiele sollen zeigen, dass Skepsis gegenüber diesem "frozen Jacobian argument" angebracht ist.

Beispiel 1.

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} -1 - 9 \cos^2(6t) + 6 \sin(12t) & 12 \cos^2(6t) + 4.5 \sin(12t) \\ -12 \sin^2(6t) + 4.5 \sin(12t) & -1 - 9 \sin^2(6t) - 6 \sin(12t) \end{bmatrix} \mathbf{y}.$$

Die Systemmatrix $A(t)$ besitzt die (t -unabhängigen!) Eigenwerte

$$\lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = -10.$$

Obwohl die Eigenwerte negativ sind, ist die allgemeine Lösung

$$\mathbf{y}(t) = \kappa_1 \exp(2t) \begin{bmatrix} \cos(6t) + 2 \sin(6t) \\ 2 \cos(6t) - \sin(6t) \end{bmatrix} + \kappa_2 \exp(-13t) \begin{bmatrix} \sin(6t) - 2 \cos(6t) \\ 2 \sin(6t) + \cos(6t) \end{bmatrix}$$

sicher nicht monoton fallend für $t \geq 0$.

Beispiel 2.

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2t} & \frac{2}{t^3} \\ \frac{-t}{2} & \frac{-1}{2t} \end{bmatrix} \mathbf{y}, \quad t \geq 1. \quad (\diamond)$$

Die Systemmatrix $A(t)$ besitzt die Eigenwerte $\lambda_{1,2} = (-1 \pm 2i)/(2t)$, die für $t \geq 1$ negativen Realteil besitzen. Die allgemeine Lösung ist

$$\mathbf{y}(t) = \kappa_1 \begin{bmatrix} t^{-3/2} \\ -\frac{1}{2}t^{1/2} \end{bmatrix} + \kappa_2 \begin{bmatrix} 2t^{-3/2} \log t \\ t^{1/2}(1 - \log t) \end{bmatrix}.$$

Für $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 0$ ist

$$\|\mathbf{y}\|_2^2 = t^{-3} + \frac{1}{4}t$$

streng monoton wachsend (für $t \geq 12^{1/4} = 1.86\dots$).

Definition 5.4

Das System $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ heißt **dissipativ** in $[t_0, t_{\text{end}}]$, wenn

$$\langle \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(t, \tilde{\mathbf{y}}), \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}} \rangle \leq 0$$

für alle $t \in [t_0, t_{\text{end}}]$ und alle $\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}}$ aus dem Definitionsbereich von \mathbf{f} gilt.

$\langle \cdot, \cdot \rangle$ bezeichnet ein (z.B. das Euklidische) Innenprodukt im \mathbb{R}^n .

Satz 5.5

Ist das System $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ dissipativ in $[t_0, t_{\text{end}}]$, dann ist es auch **kontraktiv** in $[t_0, t_{\text{end}}]$. Bedeutet: Für je zwei Lösungen $\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}}$ von $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ mit Anfangsbedingungen $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \tilde{\mathbf{y}}(t_0) = \tilde{\mathbf{y}}_0, \mathbf{y}_0 \neq \tilde{\mathbf{y}}_0$, gilt

$$\|\mathbf{y}(t_2) - \tilde{\mathbf{y}}(t_2)\| \leq \|\mathbf{y}(t_1) - \tilde{\mathbf{y}}(t_1)\|$$

für alle t_1, t_2 mit $t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_{\text{end}}$. ($\|\cdot\| := \langle \cdot, \cdot \rangle^{1/2}$)

Ob ein System dissipativ (kontraktiv) ist, kann mit Hilfe **logarithmischer Normen** entschieden werden: Sei $\|\cdot\|$ eine (von einer Vektornorm induzierte) Matrixnorm im $\mathbb{R}^{n \times n}$. Dann heißt

$$\mu(A) = \mu_{\|\cdot\|}(A) := \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\|I_n + hA\| - 1}{h} \quad (A \in \mathbb{R}^{n \times n})$$

die zu $\|\cdot\|$ gehörige **logarithmische Norm**. Ist $\|\cdot\| = \|\cdot\|_p$, so schreibt man $\mu_p(\cdot)$ für die zugehörige logarithmische Norm.

Eigenschaften.

- (1) Die logarithmische Norm ist — trotz ihres Namens — keine Norm.
- (2) Wird $\|\cdot\|$ von einem Innenprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ induziert, so gilt
$$\mu(A) = \max_{\|x\|=1} \langle Ax, x \rangle.$$
- (3) $\mu_2(A) = \rho(\frac{1}{2}(A + A^T))$ ($\rho =$ Spektralradius).
- (4) Ist $f(t, y) = A(t)y$, so ist

$$\langle f(t, y) - f(t, \tilde{y}), y - \tilde{y} \rangle = \langle A(y - \tilde{y}), y - \tilde{y} \rangle \leq \mu(A) \|y - \tilde{y}\|^2.$$

Satz 5.6

Seien $\|\cdot\|$ eine Norm im \mathbb{R}^n und $\nu(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine stückweise stetige Funktion mit

$$\mu(\mathbf{f}_y(t, \mathbf{y})) \leq \nu(t)$$

für alle $t \in [t_0, t_{\text{end}}]$ und alle \mathbf{y} aus dem Definitionsbereich von \mathbf{f} . Dann gilt für je zwei Lösungen $\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}}$ von $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ mit Anfangsbedingungen $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$, $\tilde{\mathbf{y}}(t_0) = \tilde{\mathbf{y}}_0$, $\mathbf{y}_0 \neq \tilde{\mathbf{y}}_0$,

$$\|\mathbf{y}(t_2) - \tilde{\mathbf{y}}(t_2)\| \leq \exp\left(\int_{t_1}^{t_2} \nu(s) ds\right) \|\mathbf{y}(t_1) - \tilde{\mathbf{y}}(t_1)\|$$

für alle t_1, t_2 mit $t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_{\text{end}}$.

Beispiel.

Für das System (\diamond) von Seite 271 gilt:

$$\mathbf{f}_y(t, \mathbf{y}) = A(t) = \begin{bmatrix} \frac{-1}{2t} & \frac{2}{t^3} \\ \frac{-t}{2} & \frac{-1}{2t} \end{bmatrix}.$$

Es folgt

$$\mu_2(A(t)) = \rho\left(\frac{1}{2}(A(t) + A(t)^\top)\right) = \max\left\{\left|\frac{-1}{2t} \pm \left(\frac{1}{t^3} - \frac{t}{4}\right)\right|\right\}$$

und damit $\mu_2(A(t)) \leq 0$ genau dann, wenn

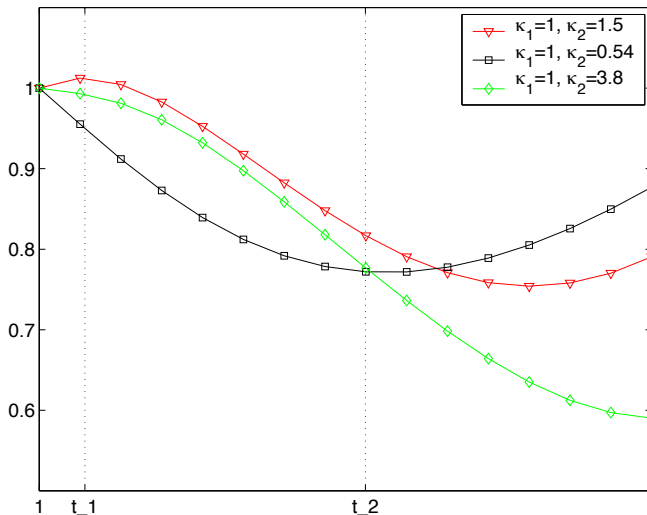
$$t \in [t_1, t_2] \approx [1.1, 1.8] \quad \text{mit} \quad t_{1,2} = (\sqrt{5} \mp 1)^{1/2}.$$

Das System ist daher in $[t_1, t_2]$ dissipativ (und kontraktiv). Folglich ist $\|\mathbf{y}(t)\|_2$ für jede Lösung \mathbf{y} in $[t_1, t_2]$ monoton fallend.

Steife Differentialgleichungen

Nichtlineare Stabilitätstheorie

$\|y(t)\|/\|y(1)\|$ als Funktion von t



Definition 5.7

Ein Runge-Kutta-Verfahren gegeben durch das Butcher-Tableau $\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}$ heißt **algebraisch stabil**, wenn die symmetrischen Matrizen

$$B := \text{diag}(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) \quad \text{und} \quad M := BA + A^\top B - \mathbf{b}\mathbf{b}^\top$$

beide positiv semidefinit sind.

Satz 5.8

Seien $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ ein dissipatives System und $\{\mathbf{y}_n\}$, $\{\tilde{\mathbf{y}}_n\}$, $\mathbf{y}_0 \neq \tilde{\mathbf{y}}_0$, Näherungslösungen, die aus der Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens resultieren. Dann gilt: Ist das Verfahren algebraisch stabil, so sind die Näherungen kontraktiv, d.h.

$$\|\mathbf{y}_{n+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{n+1}\| \leq \|\mathbf{y}_n - \tilde{\mathbf{y}}_n\| \quad (n = 0, 1, \dots).$$

Beispiele.

- Die m -stufigen Gauß-Formeln ($m \in \{1, 2, 3\}$) aus Abschnitt 5 sind alle algebraisch stabil (hier ist M die Nullmatrix!).
- Die Gauß-Radau-Formel

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{3} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array}$$

ist algebraisch stabil, denn:

$$M = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \text{ d.h. } \Lambda(M) = \{0, 1/8\}.$$

- Die Trapez-Regel (aufgefasst als implizites zweistufiges RKV) ist nicht algebraisch stabil ($\Lambda(M) = \{\pm 1/2\}$).