

NUMERIK DER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

FABIAN LUKAS MÜLLER

INHALTSVERZEICHNIS

| | |
|---|----|
| 1. Einschrittverfahren für Anfangsprobleme | 1 |
| 1.1. Beispiele und Problemstellung | 1 |
| 1.2. Ein Existenz- und Eindeutigkeitssatz | 2 |
| 1.3. Einschrittverfahren | 2 |
| 1.4. Explizite Runge-Kutta Verfahren | 3 |
| 1.5. Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung | 4 |
| 1.6. Adaptive Steuerung von Einschrittverfahren | 5 |
| 2. Mehrschrittverfahren für Anfangswertprobleme | 7 |
| 2.1. Explizite Adams-Verfahren | 7 |
| 2.2. Implizite Adams-Verfahren | 8 |
| 2.3. Die Prädiktor-Korrektor-Verfahren | 8 |
| 2.4. Die BDF-Verfahren (Backwards-Differentiation-Formulas) | 9 |
| 2.5. Ordnung eines Mehrschrittverfahrens | 9 |
| 2.6. Null-Stabilität | 11 |
| 2.7. Konvergenz der Mehrschrittverfahren | 13 |
| 3. Steife Differentialgleichungen | 15 |
| 3.1. Definition und Motivation | 15 |
| 3.2. Stabilität gewöhnlicher Differentialgleichungen | 15 |
| 3.3. Stabilitätsgebiete für explizite Runge-Kutta-Verfahren | 16 |
| 3.4. Stabilitätsgebiet für lineare Mehrschrittverfahren | 17 |
| 3.5. Stabilitätsgebiet für implizite Runge-Kutta-Verfahren | 19 |
| 4. Geometrische numerische Integration: Eine Einführung | 21 |
| 4.1. Erste Beispiele | 21 |
| 4.2. Symplektische Abbildungen | 21 |
| 4.3. Symplektische Integratoren | 22 |
| Anhang A. Liste wichtiger Verfahren | 23 |

1. EINSCHRITTVERFAHREN FÜR ANFANGSPROBLEME

1.1. Beispiele und Problemstellung.

Mathematisches Pendel. $\vartheta(t)$ sei der Auslenkungswinkel, die Länge, die Masse und die Gravitation seien 1. Newton sagt: *Masse* \times *Beschleunigung* = *Kraft* oder $1 \cdot \ddot{\vartheta} = -\sin(\vartheta)$.

Setze: $y_1 := \vartheta(t)$ und $y_2 := \dot{\vartheta}(t)$. Dann gilt:
$$\begin{pmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -\sin(y_1) \end{pmatrix}$$

Allgemeine Problemstellung. Wir betrachten ein Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \text{(AWP)} \quad & \dot{y}(t) = f(t, y(t)) \\ & y(t_0) = y_0 \end{aligned}$$

mit $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$; $U \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ offen; $y_0 \in \mathbb{R}^n$ und $t_0 \in \mathbb{R}$ gegeben.
gesucht: $y : [t_0, t_{\text{end}}] \rightarrow \mathbb{R}^n$ so, dass AWP erfüllt ist.

Andere Notation:

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) \\ y(x_0) &= y_0. \end{aligned}$$

1.2. Ein Existenz- und Eindeigkeitsatz.

Satz (Peano 1890). Sei $D := \{(x, y) \mid |x - x_0| \leq a, \|y - y_0\| \leq b\}$, $f|_D$ stetig,

$M := \max_D(\|f\|)$ und $\alpha := \min\{a, \frac{b}{M}\}$.

Dann existiert mindestens eine Lösung y des Anfangswertproblems AWP, die erfüllt:

$y \in \mathcal{C}^1(x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$ mit $y(x_0) = y_0$.

Satz (Cauchy, 1824). Seien D, M, L wie oben. Sei weiter $f|_D$ stetig und lipschitzstetig in $y(t)$.

Dann existiert eine eindeutige Lösung $y \in \mathcal{C}^1(x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$ mit $y(x_0) = y_0$

Bemerkungen.

- Die Beweise der Sätze sind gängigen Lehrbüchern zu entnehmen.
- Auch wenn f nicht lipschitz ist, kann die Lösung existieren.
- Falls $f|_D \in \mathcal{C}^1$, dann ist $f|_D$ lipschitz.
- Falls $f|_D \in \mathcal{C}^k$, dann ist $y|_D \in \mathcal{C}^{k+1}$.

1.3. Einschrittverfahren.

Vorgehensweise. Sei $N \in \mathbb{N}$. Wir setzen $h := \frac{x_{\text{End}} - x_0}{N}$, also ist $x_k := x_0 + kh$, $k = 0, 1, \dots, N$.

Wir suchen nun eine Approximation der Lösung von (AWP) an den Punkten $(x_k)_{k=0}^N$.

Allgemeines explizites Einschrittverfahren. Wir verwenden für die Approximation eine Iteration der Form

$$(ESV) \quad y_{k+1} = y_k + h\Phi(x_k, y_k, h) \quad k = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Der lokale Fehler des Verfahrens ESV ist definiert als $|y(x_0 + h) - y_1|$.

Bsp. Explizites Eulerverfahren. Beim expliziten Eulerverfahren gilt $\Phi(x_k, y_k, h) = f(x_k, y_k)$.

Def. Konsistenz, Fehlerordnung. Das Verfahren ESV heisst konsistent, falls

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x_0 + h) - y_1}{h} = 0 \quad \forall \text{ Anfangswertaufgaben AWP.}$$

Das Verfahren hat Ordnung $p \in \mathbb{N}$, falls $y(x_0 + h) - y_1 = \mathcal{O}(h^{p+1})$ für $h \rightarrow 0$ und alle Anfangswertaufgaben AWP.

Satz (Konvergenz). Sei $y(x)$ die Lösung des AWP auf $[x_0, x_n]$. Falls

- Der lokale Fehler erfüllt $\forall x \in [x_0, x_n]$ und $\forall h \leq h_{\max}$

$$\|y(x + h) - y(x) - h\Phi(x, y, h)\| \leq Ch^{p+1}.$$

- Φ ist Lipschitzstetig bezüglich y für alle $(x, y), (x, z)$ in einer Umgebung der exakten Lösung y und für eine Lipschitzkonstante $\Lambda > 0$.

Dann erfüllt der globale Fehler für alle $h \leq h_{\max}$:

$$\|y(x_n) - y_n\| \leq Ch^p \frac{e^{\Lambda(x_n - x_0)} - 1}{\Lambda}.$$

Beweisskizze.

(1) Zeige dass für zwei Approximationen gilt $\|y_n - z_n\| \leq e^{(n-i)h\Lambda} \|y_i - z_i\|$.

(2) Schätze die Fehler $\|y_n - z_n\| \leq Ch^{p+1} e^{(x_n - x_i)\Lambda}$.

(3) $\|y(x_n) - x_n\| \leq Ch^{p+1} \left(\sum_{i=1}^n h e^{(x_n - x_i)\Lambda} \right)$ und die Klammer approximiert ein Integral, das man exakt rechnen kann, also: $\leq \frac{Ch^p}{\Lambda} (e^{(x_n - x_0)\Lambda} - 1)$.

(4) Pass auf, dass beim Verwenden der Lipschitzstetigkeit alle Approximationen in der Umgebung liegen. Nehme also ein $h \leq h_{\max}$.

1.4. Explizite Runge-Kutta Verfahren.

Verfahren von Runge/Mittelpunktregel. Euler benutzt eine Approximation eines Integrals mit $\int_0^1 f \simeq f(0)$. Besser die Mittelpunktregel: $\int_0^1 f \simeq f(\frac{1}{2})$. Um nun $y(x + 0.5h)$ zu approximieren, benutzen wir Euler. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} k_1 &:= f(x_n, y_n) \\ k_2 &:= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right) \\ y_{n+1} &= y_n + hk_2 \end{aligned}$$

das Rungeverfahren mit Ordnung 2.

Verfahren von Heun.

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2). \end{aligned}$$

Hat nach Serie 2 die Ordnung 2. Für AWP entspricht Heun der Trapezregel.

Runge-Kutta-Verfahren. Seien: $s \in \mathbb{N}$, $(b_i)_{i=1}^s$, $(a_{ij})_{i=1, \dots, s; j=1, \dots, i-1}$

$$c_1 := 0, c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \text{ für } i = 2, \dots, s$$

$$\begin{aligned} k_1 &:= f(x_0, y_0) \\ k_2 &:= f(x_0 + c_2h, y_0 + ha_{21}k_1) \\ k_i &:= f\left(x_0 + c_ih, y_0 + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j\right) \\ k_s &:= f\left(x_0 + c_sh, y_0 + h \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}k_j\right) \end{aligned}$$

$$y_{k+1} = y_k + h \sum_{i=1}^s b_i k_i$$

ist ein s -stufiges explizites Runge-Kutta-Verfahren.

Es ist ein Einschrittverfahren mit $\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^s b_i k_i$.

Man kann ein Runge-Kutta-Verfahren als Tableau schreiben, wobei man die a_{ij} in c_i gegen die b_i aufträgt:

$$\begin{array}{c|c} c & a \\ \hline & b \end{array}$$

Lemma. Wir betrachten ein s -stufiges Runge-Kutta-Verfahren (c_i, a_{ij}, b_i) . Falls $f(x, y)$ lipschitzstetig ist in y mit Konstante L , dann ist auch das oben definierte

$\Phi(x, y, h) := \sum_{i=1}^s b_i k_i(x, y, h)$ auch lipschitzstetig mit Konstante

$$\Lambda := L \left(\sum_{i=1}^s |b_i| + hL \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^{i-1} |b_i a_{ij}| + O(h^2) \right).$$

Konvergenz der Runge-Kutta-Verfahren. Sei $y(x)$ die Lösung von AWP mit $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^p(U, \mathbb{R})$ und so, dass $\{(x, y) \mid x_0 \leq x \leq x_{\text{end}}\} \subset U$. Dann erfüllt ein s -stufiges explizites Runge-Kutta-Verfahren mit lokaler Ordnung p :

$$|y(x_n) - y_n| \leq Ch^p \quad \forall x_0 \leq x \leq x_{\text{end}}.$$

Beweis. mit obigem Lemma.

1.5. Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung.

Problem. Um lokale Fehlerordnung p zu zeigen, muss man Taylorentwickeln, was mühsam wird für $s \geq 4$. Weil es dann sowieso schon mühsam ist, machen wir noch etwas „viel“ Mühsameres (Idee von Butcher 1963, Hairer 1972 und Wanner 1973).

Definition: Bäume. Die Menge der Bäume T ist definiert durch zwei Eigenschaften

- (1) Die Wurzel $\cdot \in T$
- (2) $t_1, \dots, t_n \in T \Rightarrow [t_1, t_2, \dots, t_n] \in T$, das ist der Baum, an dem t_1 bis t_n an einer Wurzel hängt.

Definition: Elementares Differential. Für $t \in T$ definieren wir das elementare Differential $(F(t))(y)$ durch

- $F(\cdot)(y) := f(y)$
- $F([t_1, \dots, t_n])(y) := f^{(n)}(y) \cdot \prod_{k=1}^n F(t_k)(y)$.

Definition: Ordnung eines Baumes. Die Ordnung eines Baumes $t \in T$ ist die Anzahl von Knoten: $\varrho([\cdot]) = 1$, etc...

Definition: Koeffizienten von Bäumen. Wir definieren die Koeffizienten $\alpha(t)$ für $t \in T$ durch:

- $\alpha(\cdot) = 1$
- $\alpha(t) = \binom{\varrho(t)-1}{\varrho(t_1), \varrho(t_2), \dots, \varrho(t_n)} \cdot \alpha(t_1) \dots \alpha(t_n) \cdot \frac{1}{\mu_1! \mu_2! \dots \mu_n!}$
für $t = [t_1, \dots, t_n] \in T$ und wobei $\binom{\varrho(t)-1}{\varrho(t_1), \varrho(t_2), \dots, \varrho(t_n)} := \frac{(\varrho(t)-1!}{\varrho(t_1)! \dots \varrho(t_n)!}$ und μ_i ist die Anzahl gleicher Bäume t_i in $t = [t_1, \dots, t_n]$.

Definition: B-Reihe. Sei $a : T \cup \{\emptyset\} \rightarrow \mathbb{R}$. Eine B -Reihe ist eine formelle Reihe

$$B(a, y_0) := a(\emptyset)y_0 + \sum_{t \in T} \frac{h^{\varrho(t)}}{\varrho(t)!} a(t) \alpha(t) F(t)(y).$$

Gestalt der B-Reihe für die exakte Lösung. Die exakte Lösung von AWP hat die B -Reihe $B(e, y_0)$ mit Koeffizienten $e(\emptyset) = 1$, $e(t) = 1 \forall t \in T$.

Gestalt der B-Reihe für ein Runge-Kutta-Verfahren. Die numerische Lösung y_1 gegeben durch ein Runge-Kutta-Verfahren ist eine B -Reihe $y_1 = B(a, y_0)$ mit Koeffizienten

$$\begin{aligned} a(\emptyset) &= 1, & a(t) &= \gamma(t) \cdot \sum_{i=1}^s b_i \Phi_i(t), \text{ wobei:} \\ \gamma(\cdot) &= 1, & \gamma(t) &= \varrho(t) \prod_{k=1}^n \gamma(t_k) \\ \Phi_i(\cdot) &= 1, & \Phi_i(t) &= \sum_{j_1, \dots, j_n} a_{ij_1} \dots a_{ij_n} \cdot \Phi_{j_1}(t) \dots \Phi_{j_n}(t). \end{aligned}$$

Kriterium für Ordnung.

$$\text{Ein Runge-Kutta Verfahren hat Ordnung } p \geq 1 \iff \frac{1}{\gamma(t)} = \sum_{i=1}^s b_i \Phi_i(t) \quad \forall \text{ Bäume } t, \varrho(t) \leq p.$$

Beweis.

- Ordnung p : $\iff \|y(x_0 + h) - y_1\| = O(h^{p+1})$.
- Vergleich mit B -Reihe: $\iff 1 - \gamma(t) \sum b_i \Phi_i(t) = 0 \quad \forall t$ mit $\varrho(t) \leq p$, woraus die Behauptung folgt.

Regeln für die Baumeigenschaften.

- Regel für γ : Zähle n_1 Knoten ab Wurzel. Gehe eine Stufe nach oben und zähle n_2 , weiter nach oben bis $n_{\varrho(t)}$. Dann gilt: $\gamma(t) = \prod_{k=1}^{\varrho(t)} n_k$.
- Regel für $\sum b_i \Phi_i$: Im Ausdruck für Φ_i steht jeweils a_{ij} , wenn die Verbindung der Punkte i und j nicht ein Ende des Baumes sind. Wenn vom Punkt Nummer i l Äste anfangen, die Ende des Baumes sind, steht im Ausdruck c_i^l .

Satz. Sei ein s -stufiges Runge-Kutta-Verfahren mit Ordnung p gegeben. Dann gilt:

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q} \quad \text{für } q = 1, 2, \dots, p.$$

Beweis.

- Betrachte $f(x, y) = x^{q-1}$, $y(0) = 0$ mit exakter Lösung $y(x) = \frac{x^q}{q}$.
- Runge-Kutta: $y_1 = h \sum b_i (c_i h)^{q-1}$ und es gilt $|y_1 - y(x_1)| = \mathcal{O}(h^{p+1})$.
- $\left| \frac{h^q}{q} - h^q \sum b_i c_i^{q-1} \right| = \mathcal{O}(h^{p+1}) = h^q \left| \frac{1}{q} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} \right| = \mathcal{O}(h^{p+1})$
- Es folgt: $\frac{1}{q} - \sum b_i c_i^{q-1} = 0 \quad q = 1, \dots, p$.

1.6. Adaptive Steuerung von Einschrittverfahren. Ziel: h an die Abbildung anzupassen, um optimale Fehlerkontrolle zu kriegen.

Alles in kurz.

- (1) Gegeben: Toleranz Tol, um den lokalen Fehler abzuschätzen.
- (2) Man betrachtet eine numerische Approximation y_1 .
- (3) Falls der Fehler kleiner als Tol: OK. Sonst: integriere weiter.

Satz: Richardson-Extrapolation. Um den lokalen Fehler abzuschätzen, benutzt man: eine numerische Lösung mit Schrittweite $2h$:

$$y_2 = y_1 + h\Phi(x_1, y_1, h) = y_0 + h(\Phi(x_0, y_0, h) + \Phi(x_1, y_0 + h\Phi(x_0, y_0, h), h))$$

eine numerische Lösung mit zwei Schritten der Schrittweite h :

$$\hat{y} = y_0 + 2h\Phi(x_0, y_0, 2h).$$

Seien $y(x)$ die \mathcal{C}^2 -Lösung von AWP und $y_1 = y_0 + h\Phi(x_0, y_0, h)$ ein Einschrittverfahren der Ordnung p . Für $y_2 = y_1 + h\Phi(x_1, y_1, h)$ und \hat{y} gilt: $y(x_0 + 2h) - y_2 = \frac{y_2 - \hat{y}}{2^p - 1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$.

Zusätzlich ist $\hat{y}_2 := y_2 + \frac{y_2 - \hat{y}}{2^p - 1}$ eine Approximation von $y(x_0 + 2h)$ der Ordnung $p + 1$.

Beweis.

- Sei $z(x)$ die exakte Lösung durch (x_1, y_1) . Es gilt weiter: $y(x_0 + h) - y_1 = C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$.
- $z(x_0 + 2h) - y_2 = C(x_1, y_1)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$
Taylor: $C(x_1, y_1)h^{p+1} = C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$
Das heisst: $z(x_0 + 2h) - y_2 = C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$.
- z.z.: $(*) := y(x_0 + 2h) - z(x_0 + 2h) = C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$
 $(*) = y(x_1) - z(x_1) + h(f(x_0 + h, y(x_0 + h)) - f(x_1, z(x_1))) + \frac{h^2}{2}(\dots)$
 $\Rightarrow y(x_0 + 2h) - z(x_0 + 2h) = y(x_1) - y_1 + h(f(x_1, y(x_1)) - f(x_1, y_1)) + \frac{h^2}{2}(\dots) =$
 $C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}) + h(f(x_1, y(x_1)) - f(x_1, y_1)) + \frac{h^2}{2}(\dots)$
 $f(x_1, y(x_1)) - f(x_1, y_1 - y(x_1) + y(x_1)) = -\frac{\partial f}{\partial y}(x_1, y(x_1)) \cdot (y_1 - y(x_1)) + \mathcal{O}(h^{p+1})$
lokalen Fehler einsetzen: $= -\frac{\partial f}{\partial y}(x_1, y(x_1)) \cdot (C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+1}))$
das z.z. folgt direkt.
- Nun: $y(x_0 + 2h) - y_2 = y(x_0 + 2h) - z(x_0 + 2h) + z(x_0 + 2h) - y_2$
 $= 2(C(x_0, y_0)h^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2}))$ folgt mit den obigen beiden.
Also: $y(x_0 + 2h) - \hat{y} = C(x_0, y_0)(2h)^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$ und
 $y(x_0 + 2h) - y_2 = 2Ch^{p+1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$
Wir nehmen die Differenz: $y_2 - \hat{y} = 2Ch^{p+1}(2^p - 1) + \mathcal{O}(h^{p+2})$

$$\text{oder } 2Ch^{p+1} \approx \frac{y_2 - \hat{y}}{2^p - 1}$$

- Das heisst: $y(x_0 + 2h) - y_2 = \frac{y_2 - \hat{y}}{2^p - 1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$
 oder $y(x_0 + 2h) = y_2 + \frac{y_2 - \hat{y}}{2^p - 1} + \mathcal{O}(h^{p+2})$ und $y(x_0 + 2h) =: \hat{y}_2 + \mathcal{O}(h^{p+2})$.

Richardson-Extrapolation: Algorithmus. Gegeben seien $\eta_{\min}, \eta_{\max}, \text{Tol}, x_0, y_0, h$.

(1) Berechne $y_2, \hat{y}, \text{err} = \frac{\|y_2 - \hat{y}\|}{2^p - 1}, h_{\text{opt}}$ (siehe unten)

(2) Falls: $\text{err} < \text{Tol}$:

$$x_0 = x_0 + h$$

$$y_0 = \hat{y}_2$$

$$h = h_{\text{opt}}$$

(3) Falls: $\text{err} \geq \text{Tol}$:

$h := h_{\text{opt}}$ und gehe damit zu Punkt (1).

Richardson-Extrapolation: Wahl von h_{opt} . Wir verlangen, dass $\text{err}(h_{\text{opt}}) = \text{Tol}$.

Bekannt ist:

$$\begin{aligned} Ch^{p+1} &= \text{err} \\ Ch_{\text{opt}}^{p+1} &= \text{Tol} \\ \frac{h_{\text{opt}}^{p+1}}{h^{p+1}} &= \frac{\text{Tol}}{\text{err}} \end{aligned}$$

Daraus folgt: $h_{\text{opt}} := h \cdot \sqrt[p+1]{\frac{\text{Tol}}{\text{err}}}$ ist die optimale Schrittweite.

Für die Steuerung in einem bestimmten Intervall $h_{\text{opt}} \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]$ definiere mit vorgegebenem Sicherheitsfaktor ϱ :

In den Übungen: $\varrho = 0.9, \eta_{\max} = 5, \eta_{\min} = 0.2$.

2. MEHRSCHRITTVERFAHREN FÜR ANFANGSWERTPROBLEME

Motivation. Ein Runge-Kutta-Verfahren braucht viele Auswertungen von f . Wir wollen Verfahren mit höherer Ordnung bei wenigsten Auswertungen von f .

Idee (Adams 1855). Verwende die Information von früheren Zeitschritten.

Definition: lineares k - stufiges Mehrschrittverfahren. Ein lineares k -stufiges Mehrschrittverfahren ist gegeben durch die Formel

$$(LMV) \quad \sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^k \beta_i f_{n+i}$$

mit $h = \frac{x_{\text{end}} - x_0}{N}$ und $(x_j)_{j=0}^N = (x_0 + jh)_{j=0}^N$, $f_{n+i} = f(x_{n+i}, y_{n+i})$ und $\alpha_i, \beta_i \in \mathbb{R}$ Koeffizienten mit $\alpha_k \neq 0$ und $|\alpha_0| + |\beta_0| > 0$.

Bemerkungen.

- "linear": linear in f (nicht wie Runge-Kutta.)
- $\beta_k = 0$: Verfahren ist explizit.
- $\beta_k \neq 0$: Verfahren ist implizit: $y_{n+k} = \eta_{n+k-1} + h \frac{\beta_k}{\alpha_k} \cdot f_{n+k}$ ist durch eine Fixpunktiteration zu lösen.
- $\alpha_k \neq 0$: Um y_{n+k} zu berechnen nehme $y_{n+k} = \frac{1}{\alpha_k}(\dots)$.
- $|\alpha_0| + |\beta_0| > 0$: sonst ist $\alpha_k = \beta_k = 0$ und ein k -Schrittverfahren kann ein Einschrittverfahren sein.

Definition: Rückwärtsdifferenzen. Die Rückwärtsdifferenzen $\nabla^m f_n$ sind definiert als

$$\begin{cases} \nabla^0 f_n = f_n \\ \nabla^m f_n := \nabla^{m-1} f_n - \nabla^{m-1} f_{n-1} \end{cases} .$$

Es ist leicht zu zeigen, dass $\delta^j f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-j}] = \frac{\nabla^j f_n}{j! h^j}$.

2.1. Explizite Adams-Verfahren.

Herleitung des expliziten Adams-Verfahren.

Sei $x_0 < x_1 < \dots < x_\ell < x_{\ell+1} < \dots$ eine Zerlegung des Intervalls $[x_0, x_{\text{end}}]$ mit $x_j = x_0 + jh$.

Nehme an, dass wir k konsekutive Approximationen kennen: $(y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k+1})$ mit

$$y_j \approx y(x_j).$$

Wir integrieren das Anfangswertproblem: $y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t)) dt$.

Ersetze $f(t, y(t))$ im Integranden durch das Interpolationspolynom p durch die Punkte f_{n-k+1}, \dots, f_n vom Grad $k - 1$ und integriere es exakt.

Wende dazu die Newtonformel an: $p(t) = \sum_{j=0}^{k-1} \prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n-i}) \cdot \delta^j f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-j}]$.

Definiere $\gamma_j := \frac{1}{j!} \int_0^1 \prod_{i=0}^{j-1} (s + i) ds = \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds$ (Übungen)

Unser Verfahren lautet nun mit $t = x_n + sh$:

$$y_{n+1} = y_n + h \int_0^1 p(x_n + sh) ds = y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j h^j \frac{\nabla^j f_n}{h^j}.$$

Zusammenfassend erhalten wir:

Das (explizite) Verfahren von Adams-Bashforth:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n$$

$$\gamma_j = \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds.$$

2.2. Implizite Adams-Verfahren.

Herleitung des impliziten Adams-Verfahren.

Wir betrachten das Polynom p^* vom Grad k so, dass

$p^*(x_j) = f_j$ für $j = n+1, n, \dots, n-k+1$, aber f_{n+1} ist unbekannt.

Das Verfahren lautet $y_{n+1} = y_n + h \int_{x_n}^{x_{n+1}} p^*(t) dt$.

Newton sagt: $y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^k \left(\int_{x_n}^{x_{n+1}} \prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n+1-k+i}) dt \cdot \delta^j f[x_{n+1}, \dots, x_{n+1-j}] \right)$.

Es gilt: $\gamma_j := \int_0^1 \prod_{i=0}^{j-1} (i-1+s) ds = \int_0^1 \binom{s+j-2}{j} ds$.

Zusammenfassend erhalten wir:

Das (implizite) Verfahren von Adams-Moulton:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^k \gamma_j^* \nabla^j f_{n+1}$$

$$\gamma_j^* = \int_0^1 \binom{s+j-2}{j} ds.$$

Bemerkungen zu den Adams-Verfahren.

- Um das Adams-Bashforth-Verfahren zu benutzen brauchen wir die k Werte y_{n-k+1}, \dots, y_n , welche man mit einem Einschrittverfahren berechnet.
- Für die Adams-Bashforth-Verfahren, benutzt man das Interpolationspolynom auch ausserhalb des Intervalls $[x_{n-k+1}, x_n]$. Nicht gut!
- Das Adams-Moulton-Verfahren ist implizit, also löse eine nichtlineare Gleichung des Typs $y_{n+1} = \eta_n + h\beta f_{n+1}$.

2.3. Die Prädiktor-Korrektor-Verfahren.

Problem. Um ein Adams-Moulton-Verfahren zu benutzen, muss man eine nichtlineare Gleichung lösen:

$$\text{(FPI)} \quad y_{n+1} = \eta_n + h\beta f_{n+1}.$$

Beispiel $k=2$.

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

$\eta_n = y_n + \frac{h}{12}(8f_n - f_{n-1})$ (Alles Bekannte).

$\beta := \frac{5}{12}$ Koeffizient vor dem Unbekannten.

Idee. Man berechnet eine erste Approximation mit einem expliziten Verfahren und man korrigiert diese Werte mithilfe von FPI. Hierbei muss man FPI nicht optimal lösen, da y_{n+1} schon eine Approximation ist für $y(x_{n+1})$.

Algorithmus.

P: Prädiktor: $\hat{y}_{n+1} := y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n$ (Adams-Bashforth).

E: Evaluation: $\hat{f}_{n+1} := f(x_{n+1}, \hat{y}_{n+1})$

C: Corrector: $y_{n+1} = \eta_n + h\beta \hat{f}_{n+1}$

E: Evaluation: $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$

C: Corrector: $y_{n+1} = \eta_n + h\beta \hat{f}_{n+1}$

⋮

Man bekommt die so genannten PEC-Verfahren, falls wir mit \hat{f}_{n+1} stoppen oder die P(EC)^m-Verfahren (in der Praxis $m = 1$ oder $m = 2$), falls man m -mal korrigiert.

2.4. Die BDF-Verfahren (Backwards-Differentiation-Formulas).

Konstruktion.

- Statt die f_j zu interpolieren, benützen wir die Werte y_j .
- Man sucht $q(t)$ ein Polynom vom Grad k so, dass $q(x_j) = y_j, j = n + 1, \dots, n + 1 - k$.
- Da y_{n+1} noch nicht bekannt, verlange, dass $q'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, q(x_{n+1}))$, d.h. dass $q(t)$ die DGL löst an der Stelle $t = x_{n+1}$.
- Wie für Moulton, Newton liefert:

$$q(t) = \sum_{j=0}^k \left(\prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n+1-i}) \right) \cdot \delta^j y[x_{n+1}, x_n, \dots, x_{n+1-j}].$$

- Jeder Term in der Summe enthält den Faktor $(t - x_{n+1})$ so, dass man die Ableitung von q an der Stelle x_{n+1} berechnen kann:

$$q'(x_{n+1}) = \sum_{j=1}^k \prod_{i=1}^{j-1} (x_{n+1} - x_{n+1-i}) \cdot \delta^j y[x_{n+1}, \dots, x_{n+1-j}] =: f_{n+1}.$$

- Das ist mit obiger Formel für die dividierten Differenzen das Selbe wie:

$$\sum_{j=1}^k \frac{1}{j} \nabla^j y_{n+1} = h f_{n+1}.$$

Beispiele.

- k=1:** $y_{n+1} - y_n = h f_{n+1}$ implizites Eulerverfahren.
- k=2:** $\frac{2}{3} y_{n+1} - 2 y_n + \frac{1}{3} y_{n-1} = h f_{n+1}$.
- k=3:** $\frac{11}{6} y_{n+1} - 3 y_n + \frac{3}{2} y_{n-1} - \frac{1}{3} y_{n-2} = h f_{n+1}$.

Bemerkungen.

- Wie man sieht, sind diese Verfahren implizit.
- Diese Verfahren werden oft für steife Differentialgleichungen benutzt.

2.5. Ordnung eines Mehrschrittverfahrens.

Definition.

Lokaler Fehler: Sei $y(x)$ die exakte Lösung von AWP. Wir setzen:

$y_i := y(x_i)$ für $i = n, n + 1, \dots, n + k - 1$ und definieren den lokalen Fehler als $y(x_{n+k}) - y_{n+k}$.

Ordnung: Ein Mehrschrittverfahren LMV hat Ordnung p , falls

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k} = \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Lemma. Sei I die $N \times N$ -Identitätsmatrix. Sei $y = f(x, y)$ mit f stetig differenzierbar mit invertierbarer Jacobimatrix $\frac{\partial f}{\partial y}(x, y)$. Der lokale Fehler erfüllt:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k} = \left(\alpha_k I - h \beta_k \frac{\partial f}{\partial y}(x_{n+k}, \eta) \right)^{-1} \cdot L(y(x), x_n, h).$$

Mit $L(y, x, h) := \sum_{i=0}^k \alpha_i y(x + ih) - h \sum_{i=0}^k \beta_i y'(x + ih)$.

Beweis.

- Mit k exakten Startwerten lautet das Verfahren LMV:

$$\sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y(x_{n+i}) + \alpha_k y_{n+k} = h \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{n+i}, y(x_{n+i})) + h \beta_k f_{n+k}.$$

- Es folgt: $L(y(x), x_n, h) = \alpha_k (y(x_{n+k}) - y_{n+k}) - h \beta_k (y'(x_{n+k}) - f_{n+k})$.
- Mit dem Mittelwertsatz DR folgt:

$$L(y(x), x_n, h) = \alpha_k (y(x_{n+k}) - y_{n+k}) - h \beta_k \left(\frac{\partial f}{\partial y}(x_{n+k}, \eta) \right) \cdot (y(x_{n+k}) - y_{n+k}).$$
- Schliesslich folgt: $L(y(x), x_n, h) = \left(\alpha_k I - h \beta_k \frac{\partial f}{\partial y}(x_{n+k}, \eta) \right) \cdot (y(x_{n+k}) - y_{n+k})$, woraus die Behauptung folgt.

Bemerkungen.

- Im Wesentlichen entspricht $\alpha_k^{-1} \cdot L(y(x), x_k, h)$ dem lokalen Fehler.
- Ordnung $p \iff \alpha_k^{-1} L(y(x), x_n, h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$.

Definition: Erzeugende Polynome. Für das Verfahren LMV definieren wir zwei Polynome, die erzeugenden Polynome:

$$\varrho(\zeta) := \sum_{i=0}^k \alpha_i \zeta^i,$$

$$\sigma(\zeta) := \sum_{i=1}^k \beta_i \zeta^i.$$

Satz. Folgende Bedingungen sind äquivalent:

- (1) Das lineare Mehrschrittverfahren LMV hat Ordnung p
- (2) $\sum_{i=0}^k \alpha_i = 0$ und $\sum_{i=0}^k \alpha_i i^q = q \sum_{i=0}^k \beta_i i^{q-1} \quad \forall q = 1, \dots, p$.
- (3) $\varrho(e^h) - h\sigma(e^h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ für $h \rightarrow 0$.
- (4) $\frac{\varrho(\zeta)}{\log(\zeta)} - \sigma(\zeta) = \mathcal{O}((\zeta - 1)^p)$ für $\zeta \rightarrow 1$.

Beweis.

- $1 \iff 2$ Serie 6, Aufgabe 1.
- $2 \iff 3$
- Einerseits, per Definitionem von L hat man:

$$L(e^x, 0, h) = \sum_{i=0}^k \alpha_i e^{ih} - h \sum_{i=0}^k \beta_i e^{ih} = \varrho(e^h) - h\sigma(e^h) \quad (1)$$

- Andererseits kriegt man durch Taylorentwicklung von $y(x + ih) = y(x) + ih y'(x) + \dots$:

$$L(y(x), x, h) = \sum_{i=0}^k \alpha_i y(x) + \sum_{q \geq 1} \frac{h^q}{q!} y^{(q)}(x) \left(\sum_{i=0}^k \alpha_i i^q - q \sum_{i=0}^k \beta_i i^{q-1} \right)$$

woraus folgt:

$$L(e^x, 0, h) = \sum_{i=0}^k \alpha_i + \sum_{q \geq 1} \frac{h^q}{q!} \left(\sum_{i=0}^k \alpha_i i^q - q \sum_{i=0}^k \beta_i i^{q-1} \right) \quad (2)$$

- $3. \Rightarrow 2.:$ $\varrho(e^h) - h\sigma(e^h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$
 Mit (1): $L(e^x, 0, y) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ und mit (2): $\sum \alpha_i = 0$ und $\sum \alpha_i i^q = q \sum \beta_i i^{q-1}$, woraus 2. folgt.
- $2 \Rightarrow 3.:$ Mit (2): $L(e^x, 0, h) = \mathcal{O}(h^{p+1}) \Rightarrow_{(1)} \varrho(e^h) - h\sigma(e^h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$.

- 3 \iff 4: Setze $\zeta := e^h$ oder $\log(\zeta) = h$. Approximativ: $\log(t) \approx t - 1$, wenn t klein.
 - 3. $\iff \varrho(\zeta) - \log(\zeta)\sigma(\zeta) = \mathcal{O}(\log(\zeta)^{p+1})$
 - $\iff \frac{\varrho(\zeta)}{\log(\zeta)} - \sigma(\zeta) = \mathcal{O}(\log(\zeta)^{p+1})$
 - $\iff \frac{\varrho(\zeta)}{\log(\zeta)} - \sigma(\zeta) = \mathcal{O}((\varrho - 1)^p)$ für $\zeta \rightarrow 1$.

Definition: Konsistenz eines Verfahrens. LMV hat Ordnung $p = 1 \iff \sum_{i=0}^k \alpha_i = 0$ und $\sum_{i=0}^k \alpha_i \cdot i = \sum_{i=0}^k \beta_i \iff \varrho(1) = 0$ und $\varrho'(1) = \sigma(1)$.

2.6. Null-Stabilität.

Motivation (Dahlquist 1956). Man sucht ein k -Schrittverfahren mit maximaler Ordnung. Sind diese Methoden brauchbar?

Beispiel $k = 2$. Wir suchen ein explizites Verfahren LMV mit $\alpha_2 := 1$ (normiert) mit maximaler Ordnung:

$$y_{n+2} + \alpha_1 y_{n+1} + \alpha_0 y_n = h\beta_0 f_n + h\beta_1 f_{n+1}.$$

Nach dem obigen Satz hat man Ordnung p wenn $p + 1$ Gleichungen zutreffen.

Da wir 4 Parameter haben ist $p \leq 3$.

Übungen: Das Verfahren mit Ordnung $p = 3$ lautet

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = h(4f_{n+1} + 2f_n).$$

Man wendet es auf das Problem $y' = y, \quad y(0) = 1$ an und bekommt:

$y_{n+2} + 4(1 - h)y_{n+1} - (5 + 2h)y_n = 0$, was man eine Differenzgleichung nennt.

Man möchte jetzt $y : n \in \mathbb{N} \mapsto y_n$ finden, das sie erfüllt ist für alle n .

Ansatz: $y_n = \zeta^n$ für ein $\zeta \in \mathbb{R}$.

Man setzt den Ansatz oben ein und bekommt:

$(\zeta^2 + 4(1 + h)\zeta - (5 + 2h))\zeta^n = 0$, also $\zeta = 0$ oder $\zeta^2 + 4(1 + h)\zeta - (5 + 2h) = 0$.

Die Wurzeln dieses anderen Polynoms sind $\zeta_1 = 1 + h + \mathcal{O}(h^2)$ und $\zeta_2 = -5 + \mathcal{O}(h)$, i.e. ζ_1^n und ζ_2^n lösen für alle erlaubten n die Differenzgleichung.

Die allgemeine Lösung ist dann $y_n = c_1 \zeta_1^n + c_2 \zeta_2^n$ für durch Anfangswerte

$y_0 = \exp(0), y_1 = \exp(h)$ bestimmte Konstanten c_1, c_2 .

Für grosse n ist $c_2(-5)^n$ dominant und die Lösung explodiert.

Allgemeiner. Wir haben Interesse am Verhalten der numerischen Approximation der exakten Lösung für $n \rightarrow \infty, h \rightarrow 0$ für ein konstantes hn .

- Aus LMV bekommen wir für $h \rightarrow 0$ die Differenzgleichung:

$$(DG) \quad \sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n+i} = 0.$$

- Um diese Gleichung zu lösen, mache Ansatz $y_n = \zeta^n$ für ein $\zeta \in \mathbb{R}$ und wir bekommen:

$$\zeta^n \sum_{i=0}^k \alpha_i \zeta^i = 0.$$

Also suchen wir die Wurzeln des erzeugenden Polynoms $\varrho(\zeta)$.

Bemerkungen.

- Der Lösungsraum ist linear, i.e. falls η_1, η_2 Wurzeln von ϱ sind, dann ist $y_n = c_1 \eta_1^n + c_2 \eta_2^n$ eine Lösung von DG für alle $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$.
- Falls die Wurzel η doppelt ist, dann sind η^n und $n\eta^n$ zwei linear unabhängige Lösungen von DG.

Satz. Seien $(\eta_i)_{i=1}^m$ Wurzeln aus ϱ mit Multiplizitäten (l_i) . Dann ist die allgemeine Lösung von DG

$$y_n := \sum_{j=1}^m p_j(n) \eta_j^n$$

wobei p_i ein Polynom vom Grad $l_i - 1$.

Beweis.

- normiere das Verfahren auf $\alpha_k = 1$.
- Zuerst: $k = 1$. Dann ist DG $y_{n+1} + \alpha_0 y_n = 0$.
- Wir suchen die allgemeine Lösung: $y_{n+1} = -\alpha_0 y_n \Rightarrow y_n = (-\alpha_0)^n y_0$.
- Untersuche $\varrho(\zeta) = \zeta + \alpha_0 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \zeta = -\alpha_0$ ist Nullstelle.
- $y_n = y_0 (-\alpha_0)^n = p(n) \zeta^n$ mit $p(n) = y_0$ Polynom vom Grad 0.
- Nun: $k = 2$. $y_{n+2} + \alpha_1 y_{n+1} + \alpha_0 y_n = 0$.
- Allg. Lösung: setze $z_{n+1} = [y_{n+2} \ y_{n+1}]^T$ und wir haben

$$z_{n+1} = \begin{pmatrix} -\alpha_1 & -\alpha_0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =: A z_n.$$
- Wir iterieren: $z_n = A^n z_0$.
- Berechne die Jordanzerlegung von $A = V J V^{-1}$. Damit folgt: $z_n = V J^n V^{-1}$.
 Falls A zwei Eigenwerte: J ist diagonal und $z_n = [c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n \ D_1 \lambda_1^n + D_2 \lambda_2^n]$ und es folgt:
 $y_n = D_1 \lambda_1^n + D_2 \lambda_2^n$.
- Falls λ EW von A mit Vielfachheit 2 ist, dann ist $J = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$ und

$$z_n = V \begin{pmatrix} \lambda^n & n \lambda^{n-1} \\ 0 & \lambda^n \end{pmatrix} V^{-1} z_0 = [c_1 \lambda^n + c_2 n \lambda^{n-1} \ D_1 \lambda^n + D_2 n \lambda^{n-1}]$$
 man erhält dann mit $\bar{D}_2 := \lambda^{-1} D_2$: $y_n = (D_1 + \bar{D}_2 n) \lambda^n$
- Man zeigt jetzt, dass die Wurzeln von ϱ die EW von A sind:
 $0 = \det(\lambda I - A) = \det(A - \lambda I) = \lambda^2 + \alpha_1 \lambda + \alpha_0 = \varrho(\lambda)$.
- Schlussendlich: $y_n = p_1(n) \eta_1^n + p_2(n) \eta_2^n$ oder $y_n = p(n) \eta^n$.
- $k \geq 3$: Übungen.

Definition: Stabilität. Das lineare Mehrschrittverfahren LMV heisst stabil, falls die Wurzeln von ϱ folgende Bedingungen erfüllen:

- Falls $\varrho(\hat{\zeta}) = 0$ hat man $|\hat{\zeta}| \leq 1$.
- Falls in diesem Falle $|\hat{\zeta}| = 1$, so ist $\frac{\partial \varrho}{\partial \hat{\zeta}}(\hat{\zeta}) \neq 0$, also ist die Wurzel einfach.

Bemerkungen.

- Wenn LMV stabil ist, bleibt die Approximation der Lösung beschränkt für $h \rightarrow 0$.
- Man sagt auch Null-stabil oder D-stabil (D wie Dahlquist).
- Erfüllt ein Verfahren diese Bedingungen nicht, dann ist es instabil.

Beispiel. Für ein Adams-Verfahren haben wir $\varrho(\zeta) = \zeta^{k-1}(\zeta - 1)$, also sind die Wurzeln 0 und 1 und 1 ist einfache Wurzel.

Satz. Das k -Schritt-BDF-Verfahren ist stabil für $k = 0, 1, \dots, 6$ aber instabil für $k > 6$.

Beweis. Ansatzweise in den Übungen.

Satz: Erste Dahlquist-Schranke, 1956. Die Ordnung p eines stabilen k -Schrittverfahrens LMV erfüllt:

- $p \leq k + 2$ k gerade
- $p \leq k + 1$ k ungerade (ohne Beweis).
- $p \leq k$ falls $\frac{\beta_k}{\alpha_k} \leq 0$

2.7. Konvergenz der Mehrschrittverfahren. Annahme für das Kapitel: Das Problem AWP hat eine eindeutige Lösung auf einem Intervall $[x_0, x_N]$, i.e. f ist stetig auf $D := \{(x, y) \mid x \in [x_0, x_N], \|y - y(x)\| \leq b\}$ für ein $b \in \mathbb{R}$ und f ist lipschitzstetig: $\|f(x, y) - f(x, z)\| \leq L\|y - z\|$ für alle $(x, y) \in D$ und mit $L \in \mathbb{R}_{>0}$.

Wir betrachten ein LMV $\sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^k \beta_i f_{n+i}$.

Für $x_n = x_0 + n \cdot h$ notieren wir $y_h(x_n) := y_n$.

Definition: Konvergenz.

- (1) Das LMV konvergiert, falls für alle AWP mit unserer Annahme gilt

$$y(x) - y_h(x) \rightarrow 0 \text{ für } h \rightarrow 0 \text{ und für alle } x \in [x_0, x_N]$$

wenn die Startwerte erfüllen $y(x_0 + ih) - y_h(x_0 + ih) \rightarrow 0$ für $i = 0, \dots, k - 1$.

- (2) Das LMV konvergiert mit Ordnung $p \in \mathbb{N}$, falls für alle Anfangswertprobleme AWP ein $C \in \mathbb{R}_{>0}$ und ein $h_0 \in \mathbb{R}_{>0}$ existiert mit:

$$\|y(x) - y_h(x)\| \leq C \cdot h^p \quad \forall h \leq h_0 \forall x \in [x_0, x_N]$$

wenn die Startwerte erfüllen $\|y(x_0 + ih) - y_h(x_0 + ih)\| \leq \tilde{C}h^p$ für h klein genug und $i = 0, \dots, k - 1$.

Satz: konvergent ist stabil und konsistent. Wenn ein lineares Mehrschrittverfahren konvergiert, dann gilt:

- (1) Das LMV ist 0-stabil.
 (2) Das LMV ist konsistent.

Beweis. Betrachte $y' = 0, y(0) = 0$, exakte Lösung ist 0-Abbildung.

- (1) Durch Kontraposition: Nehme an, dass unser Verfahren instabil ist, i.e. das Polynom $\varrho(\zeta)$ hat eine Nullstelle ζ_1 mit $|\zeta_1| > 0$ oder $|\zeta_2| = 1$ mit Vielfachheit von $\zeta_2 > 1$.

- Man weiss, dass $y_j = \sqrt{h}\zeta_1^j$ und $y_j = \sqrt{h}j\zeta_2^{j-1}$ die Differenzengleichung $\sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n+i} = 0$ lösen für $j = 0, 1, \dots$.
- Die Startwerte konvergieren gegen die exakte Lösung 0, also:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left| \sqrt{h}\zeta_1^j \right| = 0 \quad \forall j = 0, 1, \dots, k - 1$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left| \sqrt{h}j\zeta_2^j \right| = 0 \quad \forall j = 0, 1, \dots, k - 1.$$

- Aber die numerische Approximationen $y_h^1(x) = \sqrt{h}\zeta_1^{\frac{x}{h}}$ und $y_h^2 = \frac{x}{\sqrt{h}}\zeta_2^{\frac{x}{h}}$ divergieren für fixes $x \in \mathbb{R}$:

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_h^1(x) = \infty, \text{ da } |\zeta_1| > 1.$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} y_h^2(x) = \infty, \text{ da } |\zeta_2| = 1.$$

- Instabile Verfahren sind nicht konvergent, also sind konvergente Verfahren stabil.

- (2) Betrachte $y' = 0, y(0) = 1$, exakte Lösung $y \equiv 1$. Nehme an, unser Verfahren sei konvergent.

- Die Differenzengleichung lautet dann:

$$\alpha_k y_h(x + kh) + \alpha_{k-1} y_h(x + (k - 1)h) + \dots + \alpha_0 y_h(x) = 0.$$

- Nehme in dieser Gleichung $h \rightarrow 0$ und erhalte wegen Konvergenz

$$\alpha_k + \alpha_{k-1} + \dots + \alpha_0 = 1 = \varrho(1), \text{ also ist die erste Vss. für Konsistenz erfüllt.}$$

- Betrachte $y' = 1, y(0) = 0$, exakte Lösung $y(x) = x$ und wende unser Verfahren darauf an.

- $\sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^k \beta_i f_{n+i} = h \sum \beta_i = h\sigma(1)$.

- Behauptung: $y_j = jh\tilde{\kappa}$ oder $y_h = x\tilde{\kappa}$ erfüllt obige Gleichung

$$\iff \tilde{\kappa} = \frac{\sigma(1)}{\varrho'(1)}.$$

- Beweis:

$$\sum_i \alpha_i (n + i)h\tilde{\kappa} = h\sigma(1) \iff n\tilde{\kappa} \sum \alpha_i + \tilde{\kappa} \sum \alpha_i i 1^{i-1} = \sigma(1) \iff n\tilde{\kappa}\varrho(1) + \tilde{\kappa}\varrho'(1) = \sigma(1)$$

$$\iff \tilde{\kappa}\varrho'(1) = \sigma(1).$$

- Und mit Konvergenz folgt: $x = y(x) = \lim_{h \rightarrow 0} y_h(x) = x\tilde{\kappa} \iff \tilde{\kappa} = 1 \iff \sigma(1) = \rho'(1)$.

Formulierung eines LMV als Einschrittverfahren. oBdA: $y \in \mathbb{R}, f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, \alpha_k = 1$ (Normierung).

Idee: Wir definieren implizit ein Vektorfeld

$$\psi : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k (x_n, y_n, y_{n+1}, \dots, y_{n+k-1}) \mapsto \psi(x_n, y_n, \dots, y_{n+k-1})$$

durch

$$\psi := \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}) + \beta_k \cdot f \left(x_{n+k}, h \cdot \psi - \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i} \right).$$

Nun lautet unser LMV $y_{n+k} = - \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i} + h\psi$.

Definiere noch den Vektor $Y_n := (y_{n+k-1} \cdots y_{n+1} y_n)^T$, womit folgt:

$$Y_{n+1} = (y_{n+k} \cdots y_{n+2} y_{n+1})^T = \begin{pmatrix} -\alpha_{k-1} & -\alpha_{k-2} & \cdots & -\alpha_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{n+k-1} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \psi(x_n, Y_n) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$=: AY_n + h\Phi(x_n, Y_n, h)$ und dies ist fast ein Einschrittverfahren.

Lemma 1. Sei $y(x)$ die exakte Lösung unseres Problems AWP. Definiere den Vektor \hat{Y}_n als $\hat{Y}_n := AY(x_n) + h\Phi(x_n, Y(x_n), h)$ mit $Y(x_n) := (y(x_{n+k-1}) \cdots y(x_n))^T$ auf der exakten Lösung. Wenn das LMV Ordnung p hat, dann folgt:

$$\|Y(x_{n+1}) - \hat{Y}_{n+1}\| \leq Ch^{p+1}$$

oder: das Einschrittverfahren hat Ordnung p .

Beweis.

- $Y(x_{n+1}) - \hat{Y}_{n+1} = (y(x_{n+k}) + \alpha_{k-1}y(x_{n+k-1}) + \cdots + \alpha_0y(x_n) - h\psi(x_n, Y(x_n), h) \ 0 \cdots 0)^T$
 $= \left(\sum_{i=0}^k \alpha_i y(x_{n+i}) - h \sum_{i=0}^k \beta_i f(x_{n+i}, y(x_{n+i})) \ 0 \cdots 0 \right)^T = (L(x_n), Y(x_n), h) \ 0 \cdots 0)^T =$
 $(\mathcal{O}(h^{p+1}) \ 0 \cdots 0)^T$, da das LMV Ordnung p hat.

Lemma 2. Wenn das LMV konvergiert so gibt es eine Norm $\| \cdot \|$ so dass $\|A\| \leq 1$.

(Beweis Ü)

Theorem. Das LMV ist stabil und konsistent \iff Das LMV konvergiert.

Beweis.

" \Leftarrow " siehe obiger Satz. " \Rightarrow " Adaption des Konvergenzbeweises von Kapitel 1.

Korollar. Falls das LMV Ordnung p hat und falls die Startwerte gegen die exakte Lösung konvergieren mit $\mathcal{O}(h^q)$, dann hat man:

$$\|y(x_n) - y_n\| \leq C \cdot h^{\min(p,q)} \quad \forall h \leq h_0, x_n \in [x_0, x_N]$$

Beweis. Ü.

3. STEIFE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

3.1. Definition und Motivation.

Beispiel 1. Das AWP $\dot{y} = \lambda y - (1 + \lambda)e^{-t}, y(0) = y_0$ besitzt die Lösung $y(t) = e^{-t} + (y_0 - 1)e^{\lambda t}$.

Für $\lambda \ll 0$ ist $y(t) \simeq e^{-t}$.

Für $\lambda = -1000, y_0 = 1$ wenden wir explizites und implizites Euler mit Schrittweite $h = 2^{-k}, k = 2j, j = 2, 3, 4, 5, 6$.

Das explizite Eulerverfahren oszilliert stark und ist nicht brauchbar. Im Gegenteil, funktioniert das implizite Eulerverfahren sehr gut!

Definitionen: Steife Differentialgleichung nach Curtis/Hirschfelder 1952. Eine steife Differentialgleichung ist eine Gleichung, wo bestimmte implizite Verfahren viel besser funktionieren als explizite Verfahren.

3.2. Stabilität gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Definition: Lyapunov-Stabil. Die Lösung $y(t, t_0, y_0)$ der Gleichung AWP ist Lyapunov-stabil : \iff

- Die Lösung existiert für alle $t \geq t_0$.
- $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0$ so, dass man $\forall \Delta y_0$ mit $\|\Delta y_0\| < \delta$ hat $\forall t \geq t_0$:

$$\|y(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) - y(t, t_0, y_0)\| < \varepsilon.$$

Definition: Asymptotisch stabil. Die Lösung von AWP heisst asymptotisch stabil : \iff

- Die Lösung ist Lyapunov-stabil.
- Es existiert ein $\delta_0 > 0$ so, dass für alle $\|\Delta y_0\| < \delta_0$ gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|y(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) - y(t, t_0, y_0)\| = 0.$$

Beispiel. $\dot{y} = \lambda y$.

Für $\lambda < 0$ ist $y \equiv 0$ asymptotisch stabil.

Für $\lambda = 0$ ist $y \equiv 0$ stabil.

Für $\lambda > 0$ ist $y \equiv 0$ instabil.

Lemma. Eine Lösung $y(t)$ von $\dot{y} = Ay + g$ ist stabil \iff die Lösung $z \equiv 0$ von $\dot{z} = Az$ ist stabil.

Beweis.

- Setze $z(t) := y(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) - y(t, t_0, y_0)$.
- $z(t)$ erfüllt $\dot{z} = Az$:

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= Ay(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) + g(t) - Ay(t, t_0, y_0) - g(t) \\ &= A(y(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) - y(t, t_0, y_0)) = Az(t). \end{aligned}$$
- Jetzt: $y(t, t_0, y_0)$ ist stabil : $\iff \forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0$ mit: $\forall \Delta y_0$ mit $\|\Delta y_0\| < \delta$ gilt: $\|y(t, t_0, y_0 + \Delta y_0) - y(t, t_0, y_0)\| < \varepsilon$
- $\iff \forall \varepsilon \exists \dots$ so, dass $\|z(t)\| < \varepsilon \iff$: Die Lösung $z \equiv 0$ ist stabil.

Bemerkungen.

- Dasselbe für asymptotisch stabil und instabil.
- Man redet, da es nur auf die Stabilität der 0-Abbildung ankommt, von Stabilität einer Gleichung.

Theorem. Wir betrachten $\dot{y} = Ay$ mit $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit Eigenwerten $(\lambda_i)_{i=1}^n$.

- (1) $\dot{y}(t) = Ay(t)$ ist stabil \iff
 - $\Re(\lambda_i) \leq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$
 - $\Re(\lambda_i) < 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$ mit $\dim(\text{Jordanblock zu } \lambda_i) > 1$.
- (2) $\dot{y} = Ay$ asymptotisch stabil $\iff \Re(\lambda_i) < 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}$.

Beweis. Serie 9.

Definition: Kritischer Punkt. Betrachte $\dot{y}(t) = f(t, y(t))$. Man nennt $y \equiv \hat{y}_0$ einen Gleichgewichtszustand oder kritischen Punkt von f , wenn $f(t, \hat{y}_0) = 0 \quad \forall t \in [\hat{t}_0, T]$.

Theorem. Seien $f \in C^1$ und \hat{y}_0 Gleichgewichtszustand von f .

- Falls die Eigenwerte λ von $(Df)_{\hat{y}_0}$ die Bedingung $\Re(\lambda) < 0$ erfüllen, dann ist $y \equiv \hat{y}_0$ asymptotisch stabil.
- Falls die Eigenwerte λ von $(Df)_{\hat{y}_0}$ die Bedingung $\Re(\lambda) > 0$ erfüllt, dann ist $y \equiv \hat{y}_0$ instabil.

(ohne Beweis).

Bemerkung. Achtung: Man kann nichts aussagen, falls $\Re(\lambda) = 0$. Beispiel:

$\dot{y} = y^2$ hat kritischen Punkt 0 aber $y \equiv 0$ ist instabil.

$\dot{y} = y^3$ hat kritischen Punkt 0 aber $y \equiv 0$ ist asymptotisch stabil.

3.3. Stabilitätsgebiete für explizite Runge-Kutta-Verfahren.

Motivation. Sei $\psi(x)$ eine glatte Lösung von AWP.

- Wir linearisieren f durch Taylor:

$$y' = f(x, y - \psi + \psi) = f(x, \psi(x)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x, \psi(x))(y - \psi(x)) + \dots$$

- Wir setzen $\tilde{y}(x) := y(x) - \psi(x)$. Dann:

$$\begin{aligned} \tilde{y}'(x) &= f(x, \psi(x)) + \frac{\partial f}{\partial y}(x, \psi(x)) \cdot \tilde{y}(x) + \dots - f(x, \psi(x)) \\ &= \frac{\partial f}{\partial y}(x, \psi(x)) \cdot \tilde{y}(x) + \dots \end{aligned}$$

- Betrachte das approximierte Problem $\tilde{y}' = \frac{\partial f}{\partial y}(x, \psi(x))\tilde{y}(x)$

mit $\frac{\partial f}{\partial y}(x, \psi) =: J(x)$ die Jacobimatrix von $(D_y f)_{x, \psi(x)}$

- Wir setzen $J(x)$ auf eine Konstante J und nehmen an, dass J diagonalisierbar ist, also:

$$\dot{y}(t) = J \cdot y(t).$$

- Mit $y := Tz$ bekommen wir:

$$z' = T^{-1}y' = T^{-1}Jy = T^{-1}JTz \text{ oder besser}$$

$$\dot{z}(t) = \Lambda z(t) \quad \text{mit } \Lambda = T^{-1}JT \text{ Diagonalform von } J.$$

- So kommen wir auf ...

Definition: Dahlquist-Testgleichung. Die Dahlquist-Testgleichung ist das Anfangswertproblem $y' = \lambda y$, $y(0) = 1$ und $\lambda \in \mathbb{C}$.

Beispiel: Expl. Euler.

- Was geschieht mit dem expliziten Eulerverfahren?
- $y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n = (1 + h\lambda)y_n = \dots = (1 + h\lambda)^n y_0 =: R(h\lambda)^n y_0$.
- Setze $z := h\lambda$ und bekomme:

$$y_n = R(z)^n y_0 \quad \text{mit} \quad R(z) = 1 + z.$$

- Die numerische Lösung explodiert nicht $\iff |R(z)| \leq 1$.

Lemma: Stabilitätsfunktion von expliziten RK-Verfahren. Für ein explizites RK-Verfahren (b, A, c) ist die Stabilitätsfunktion $R(z)$ gegeben durch das Polynom

$$R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbf{1}$$

wobei $b := (b_1, b_2, \dots, b_s)^T$

$A := (a_{ij})_{i,j=1,\dots,s}$

$\mathbf{1} := (1, 1, \dots, 1)^T$

Beweis.

- RK-Verfahren: $Y_i := y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j)$ und $y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(Y_i)$.
- Wir setzen $Y := (Y_1 \dots Y_s)^T$ und $z := h\lambda$.
- Erhalte $Y = \mathbf{1}y_0 + zAY$ und $y_1 = y_0 + zb^T Y$
- Aus der ersten Gleichung: $(I - zA)Y = \mathbf{1}y_0$ und dann $y_1 = y_0 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbf{1}y_0 = (1 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbf{1}) y_0 = R(z)y_0$.

Bemerkung. Die numerische Approximation eines expliziten Runge-Kutta-Verfahrens bleibt beschränkt, falls $|R(z)| \leq 1$.

Definition: Stabilitätsgebiet. $S := \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$ heisst Stabilitätsgebiet eines Runge-Kutta-Verfahrens.

Definition: A-Stabilität. Wir sagen, dass ein Verfahren A-stabil ist, falls

$$\{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) \leq 0\} =: \mathbb{C}^- \subseteq S$$

das heisst, dass $|R(z)| \leq 1$ für z mit $\Re(z) \leq 0$.

Bemerkungen.

- Die exakte Lösung von $y' = \lambda y$, $y(0) = 1$ ist $y(t) = \exp(\lambda t)$. Sie ist beschränkt für $\lambda \in \mathbb{C}^-$ mit $\Re(\lambda) \leq 0$.
Man will nun eben auch, dass die num. Approximation diese Eigenschaft hat.
- Beispiel Euler: $R(z) = 1 + z$ und $S := \{z \in \mathbb{C} \mid |1 + z| \leq 1\}$ ist ein Kreis um -1 mit Radius 1.
- Ein explizites Runge-Kutta-Verfahren kann nicht A-stabil sein, weil S beschränkt ist.
- Das heisst man muss aufpassen, dass die Schrittweite h so gewählt ist, dass $h\lambda = z \in S$ und für solche Werte ist die Approximation beschränkt.

3.4. Stabilitätsgebiet für lineare Mehrschrittverfahren.

Motivation: ϑ -Methode. Die ϑ -Methode lautet für $\vartheta \in [0, 1]$

$$y_{n+1} = y_n + h((1 - \vartheta)f(y_n) + \vartheta f(y_{n+1}))$$

zum Beispiel: $\vartheta = 0$: expl. Euler

$\vartheta = 1$: implizites Euler = AM 0 = BDF 1

$\vartheta = \frac{1}{2}$: Trapezregel=AM 1.

Die Stabilitätsfunktion ist gegeben durch $R(z) = \frac{1 - (1 - \vartheta)z}{1 - \vartheta z}$.

Um S zu zeichnen, betrachten wir ∂S :

$$|R(z)| = 1 \iff 1 + (1 - \vartheta)z = \pm 1 \mp \vartheta z, \text{ also } z = 0 \text{ oder } z = \frac{2}{2\vartheta - 1}.$$

Wir sehen, dass für $\vartheta < \frac{1}{2}$ ein kleines Stabilitätsgebiet resultiert,

für $\vartheta = \frac{1}{2}$ ist $S = \mathbb{C}^-$ (also A-stabil)

für $\vartheta > \frac{1}{2}$ ist $\mathbb{C} \setminus S$ ein Kreisgebilde in \mathbb{C}^+ , also A-stabil.

Definition: Stabilitätsgebiet. Wir definieren für ein LMV das Stabilitätsgebiet als

$$S := \{\mu \in \mathbb{C} \mid \varrho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) = 0 \Rightarrow |\zeta| \leq 1 \text{ für Multipl.}(\zeta) = 1, |\zeta| < 1 \text{ sonst}\}.$$

Bemerkungen.

- Für $\mu = 0$: Nullstellen von $\varrho(\zeta) = 0$, also ist Stabilität im Sinne von Kapitel 2 äquivalent zur Bedingung $0 \in S$. Deshalb heisst diese Art von Stabilität auch 0-Stabilität.
- Falls $\mu = h\lambda \in S$, dann ist $\{y_n\}_{n=1}^N$ beschränkt.

Theorem. Falls das LMV explizit ist, dann ist S beschränkt und das Verfahren kann nicht A-stabil sein.

Beweis.

- Seien $\zeta_1(\mu), \dots, \zeta_k(\mu)$ die Nullstellen von $\varrho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta)$.
- Wir haben $(\alpha_k - \mu\beta_k)(\zeta - \zeta_1(\mu)) \cdots (\zeta - \zeta_k(\mu)) = \varrho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta)$
oder $(\zeta - \zeta_1(\mu)) \cdots (\zeta - \zeta_k(\mu)) = \frac{\varrho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta)}{\alpha_k}$.
- Wir nehmen $\xi \in \mathbb{C}$ fest mit $\sigma(\xi) \neq 0$.
- Falls $|\zeta_j(\mu)| \leq 1$ für $j = 1, \dots, k$, dann hat man $|(\xi - \zeta_1(\mu)) \cdots (\xi - \zeta_k(\mu))| \leq c$ für ein von μ unabhängiges $c \in \mathbb{R}$.
- Aber $\left| \frac{\varrho(\zeta) - \mu\sigma(\xi)}{\alpha_k} \right| > c$ für μ gross genug, also S ist beschränkt.

Bemerkungen.

- Die Adams-Bashforth-Verfahren sind nicht A-stabil.

Lemma: Rand von S . ∂S erfüllt $\partial S \subset \Gamma$ mit $\Gamma : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C} \quad \vartheta \mapsto \frac{\varrho(e^{i\vartheta})}{\sigma(e^{i\vartheta})}$ eine geschlossene Kurve in \mathbb{C} .

Beweis.

- Betrachte ∂S . Falls $\mu \in \partial S \Rightarrow \exists \zeta \in \mathbb{C}, |\zeta| = 1$ so, dass $\varrho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) = 0$.
 - Also: $\exists \vartheta \in [0, 2\pi)$ mit $\exp(i\vartheta) = \zeta$ und $\varrho(e^{i\vartheta}) - \mu\sigma(e^{i\vartheta}) = 0$.
- Es folgt:

$$\partial S \subset \left\{ \mu \in \mathbb{C} \mid \mu = \frac{\varrho(e^{i\vartheta})}{\sigma(e^{i\vartheta})} \right\}.$$

- Überprüfe noch, ob innen oder aussen.

Bemerkungen.

- Γ nennt man root locus curve.
- Die Nullstellen hängen stetig von μ ab.
- Was geschieht mit den Adams-Moulton-Verfahren?

$$y_{n+1} - y_n = h \sum_{j=0}^k \gamma_j^* \nabla^j f_{n+i}$$

$$\varrho(x) = x^2 - x \text{ und } \sigma(x) = \sum_{j=0}^k \gamma_j^* x^{k-j} (x-1)^j.$$

- $k = 0$: Implizites Euler, A-stabil.
- $k = 1$: Trapezregel, A-stabil.
- $k \geq 2$?

Lemma: Stabilität Adams-Moulton-Verfahren. Für $k \geq 2$ hat das Polynom $\sigma(x)$ eine Nullstelle x mit Betrag $|x| > 1$.

S ist dann beschränkt und die AM-Verfahren sind nicht mehr A-stabil.

Für den Beweis nützliche Tatsachen.

- (1) $\gamma_j^* < 0$ für $j \geq 1$
- (2) $\sum_{j=0}^k \gamma_j^* > 0$ für $k \geq 2$
- (3) $\sum_{i=0}^k \gamma_j^* 2^j < 0$ für $k \geq 2$.

Beweis. Wir zeigen zuerst, dass ζ Nullstelle von σ existiert für AM-Verfahren mit $|\zeta| > 1$, dann dass ein solches Verfahren nicht A-stabil sein kann.

- Man hat $(-1)^k \sigma(-\infty) > 0$ und wir haben $(-1)^k \sigma(-1) = (-1)^k \sum_{j=0}^k \gamma_j^* (-1)^{k-j} (-2)^j = \sum_{j=0}^k \gamma_j^* 2^j < 0$ nach (1).
- Es folgt: $\exists \zeta \in (-\infty, -1)$ mit $(-1)^k \sigma(\zeta) = 0$.
- Also ist ζ Nullstelle von σ mit $|\sigma| > 1$.
- Für μ gross genug sind die Nullstellen von $\varrho - \mu \cdot \sigma$ ungefähr gleich der Nullstellen von σ .
- Aus obiger Überlegung hat man eine Nullstelle x mit $|x| > 1$ gefunden und das Verfahren kann nicht A-stabil sein, weil S beschränkt.

Stabilität der BDF-Verfahren. Das BDF-Verfahren der Stufe k ist

$$\sum_{j=0}^k \frac{1}{j} \nabla^j y_{k+1} = h f_{k+1}$$

$k = 1$: Implizites Euler, A-stabil.

$k = 2$: Auch A-stabil:

- $\frac{3}{2}y_n - 2y_{n-1} + \frac{1}{2} = h f_n$.
- Wir haben $\varrho(x) = \frac{3}{2}x^2 - 2x + \frac{1}{2}$ und $\sigma(x) = x^2$.
- Also: $\Gamma(\vartheta) = \frac{3}{2} - 2e^{-i\vartheta} + \frac{1}{2}e^{-2i\vartheta}$
- Wir zeigen jetzt, dass $\Re(\Gamma(\vartheta)) \geq 0 \quad \forall \vartheta \in [0, 2\pi]$:

$$\Re(\Gamma(\vartheta)) = \frac{3}{2} - 2\cos(\vartheta) + \frac{1}{2}\cos(2\vartheta)$$

$$= \frac{3}{2} - 2\cos(\vartheta) + \cos^2(\vartheta) - \frac{1}{2} = (\cos(\vartheta) - 1)^2 \geq 0 \quad \forall \vartheta \in [0, 2\pi]$$
- Also: $\mathbb{C}^- \subset S$ (und S unbeschränkt) also A-stabil.

Theorem: Zweite Dahlquist-Schranke (1963). Für ein konvergentes LMV gilt:

- (1) A-stabil \Rightarrow Ordnung $p \leq 2$
- (2) Falls A-stabil und Ordnung 2: Fehlerkonstante $c \leq -\frac{1}{12}$
- (3) Das einzige A-stabile lineare Mehrschrittverfahren mit $p = 2$ und $c = -\frac{1}{12}$ ist die Trapezregel.

Definition: A(α)-Stabilität. Ein LMV heisst A(α)-stabil für $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$, falls

$$S_\alpha := \{\mu \in \mathbb{C} \mid |\arg(-\mu)| \leq \alpha\} \subset S.$$

Beispiel: A(α)-Stabilität der BDF-Verfahren.

| | | | | |
|----------|-----------------|-----------------|----------------|----------------|
| k | 1 | 2 | 3 | 4 |
| α | $\frac{\pi}{2}$ | $\frac{\pi}{2}$ | $86^\circ 03'$ | $73^\circ 35'$ |

Bemerkung. Für $\dot{y} = \lambda y$ mit $\lambda \in \mathbb{R}_-$ ist BDF A-stabil.

3.5. Stabilitätsgebiet für implizite Runge-Kutta-Verfahren.

Ziel: Suche A-stabile Verfahren mit Ordnung $p \geq 3$.

Definition. Für $s \geq 1$, $a_{ij}, c_j, b_j \in \mathbb{R}$ ist

$$k_i := f\left(x_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j\right), \quad i = 1, \dots, s.$$

$$y_1 := y_0 + h \sum_{j=1}^s b_j k_j$$

ein s -stufiges Runge-Kutta Verfahren.

Bemerkungen.

- Falls $a_{ij} = 0 \quad \forall \quad j \geq i$: explizit.
- Falls $a_{ij} \neq 0$ für ein $j \geq i$: implizites Verfahren und in jedem Schritt muss man eine nichtlineare Gleichung lösen (Teuer!).

Beispiel: $s = 2$. Das Verfahren sei gegeben durch das Tableau

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad k_1 = f(x_0, y_0) \text{ und } k_2 = f\left(x_0 + h, y_0 + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)\right) = f(x_1, y_1)$$

Also: $y_1 = y_0 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$ und wir erhalten die Trapezregel (A-stabil).

Nun konstruieren wir Verfahren höherer Ordnung.

Definition: Kollokationspolynom. Das Kollokationspolynom $u(x)$ vom Grad s zu den Stützstellen $0 \leq c_1 \leq c_2 \leq \dots \leq c_s \leq 1$ ist gegeben durch die Bedingungen

$$\begin{cases} u(x_0) = y_0 \\ u'(x_0 + c_i h) = f(x_0 + c_i h, u(x_0 + c_i h)) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \end{cases}$$

D.h. u löst die Gleichung $y' = f(x, y)$ exakt an den Punkten $(x_0 + c_i h)_{i=0, \dots, s}$.

Definition: Kollokationsverfahren. Sei u das Kollokationspolynom zu Stützstellen $(c_i)_{i=1}^s$. Das Kollokationsverfahren zur Lösung eines Anfangswertproblems AWP ist gegeben durch die Vorschrift

$$y_1 = u(x_0 + h).$$

Satz. Ein Kollokationsverfahren mit Stützstellen $(c_i)_{i=1}^s$ ist ein s -stufiges Runge-Kutta-Verfahren mit:

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau \text{ und } b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau$$

für $i, j = 1, \dots, s$ und mit $l_j(\tau) := \prod_{i \neq j} \frac{\tau - c_i}{c_j - c_i}$ (j -tes Lagrangepolynom).

Beweis. Übungen.

Satz. Falls eine Quadraturformel (b_i, c_i) mit $b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau$ für $i = 1, \dots, s$ Ordnung $s + m$ hat, dann hat unser Kollokationsverfahren Ordnung $p = s + m$ ohne Beweis.

Gaussquadratur. Die Gauss-Quadratur ist gegeben durch die Bedingungen: c_i sind Nullstellen des Legendre-Polynoms $P_s(2x - 1)$ und sie hat die Ordnung $2s$. Es folgt, dass unser RK-Verfahren maximale Ordnung $p = 2s$ hat. Beispiel $s = 1$: Mittelpunkregel.

Radau-Verfahren. Wir nehmen die Radau-Quadratur, d.h. c_i sind die Nullstellen des Polynoms $P_s(2x - 1) + aP_{s-1}(2x - 1)$ und a ist so, dass entweder $c_1 = 0$ oder $c_s = 1$. Diese Quadraturen haben Ordnung $2s - 1$, also hat unser Verfahren auch Ordnung $p = 2s - 1$. Beispiel $s = 1$: Implizites Euler.

Lobatto-Verfahren. Wir nehmen die Knoten c_i als Nullstellen von $P_s(2x - 1) - P_{s-2}(2x - 1)$, also ist $c_1 = 0$ und $c_s = 1$. Ordnung ist $2s - 2$. Beispiel $s = 2$: Trapezregel.

Nun wollen wir die Stabilitätsgebiete der Kollokationsverfahren untersuchen.

Lemma: Stabilitätsfunktion der RK-Verfahren. Die Stabilitätsfunktion $R(z)$ eines s -stufigen RK-Verfahrens (c, A, b) ist gegeben durch

$$(1) R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}\underline{1}$$

$$(2) R(z) = \frac{\det(I - zA + z\underline{1}b^T)}{\det(I - zA)} = \frac{P(z)}{Q(z)} \text{ mit Polynomen } P, Q.$$

wobei $z = h\lambda$, $b = (b_1, \dots, b_s)^T$, $A = (a_{ij})$, $\underline{1} = (1, 1, \dots, 1)^T$.

Beweis.

- (1) Gleicher Beweis wie für explizite.
- (2)
 - Wir wenden unser RK auf $\dot{y} = \lambda y$, $y(0) = 1$ an und suchen $R(z)$ mit $y_1 = R(z)y_0 = R(z)$.
 - Wir bekommen $g_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(g_j)$ für $i = 1, \dots, s$ und $y_1 = y_0 + h \sum_{j=1}^s b_j f(g_j)$.
 - Setze $g := (g_1 \dots g_s)^T$ und $z := h\lambda$.
 - $g = y_0 \underline{1} + zAg$ und $y_1 = y_0 + zb^T g$.
 -

$$\begin{pmatrix} I - zA & 0 \\ -zb^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ y_1 \end{pmatrix} = y_0 \begin{pmatrix} \underline{1} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{1} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- (3) Cramer: $R(z) = y_1 = \frac{\det(\dots)}{\det(\dots)}$, mit Zeile 1 := Zeile 1 - Zeile 2.

Beispiele. Beispiel 1: Gauss mit $s = 1$ $c = \frac{1}{2} = a$, $b = 1$.

$$P(z) = \det(I - zA + z\underline{1}b^T) = 1 - \frac{z}{2} + z \cdot 1 \cdot 1 = 1 + \frac{z}{2}.$$

$$Q(z) = \det(I - zA) = 1 - \frac{z}{2}$$

$$\text{Mit Lemma: } R(z) = \frac{2+z}{2-z}.$$

Beispiel 2: Trapezregel ($s = 2$). Hier kommt das selbe raus wie bei Gauss $s = 1$.

Theorem. Die Verfahren von Gauss, Radau oder Lobatto sind A-stabil ohne Beweis.

Konsequenz. In der Praxis: Implizites Euler oder Radau IIa: $\frac{1}{3} \left| \begin{array}{cc} \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array} \right.$

$$\frac{1}{3} \left| \begin{array}{cc} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array} \right.$$

Das Beste zur Zeit ist Radau 5 ($s = 3$).

4. GEOMETRISCHE NUMERISCHE INTEGRATION: EINE EINFÜHRUNG

4.1. Erste Beispiele.

Problem für das ganze Kapitel. $D \subset \mathbb{R}^n$ offenes Gebiet, $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Betrachte das AWP $y' = f(y)$, $y(t_0) = y_0$.

Definition: Fluss. Der Fluss $\varphi_t(y_0) = y(t) = y(t, t_0, y_0)$ ist der Wert der Lösungskurve an der Stelle t für jene Lösung y mit $y(t_0) = y_0$.

Ziel: Der Fluss φ_t hat geometrische Eigenschaften. Suche also numerische Verfahren mit denselben Eigenschaften.

Beispiele. Falls die Lösung periodisch, symmetrisch, oder falls es eine Invariante gibt.

Pendel: Sei q der Ausschlagwinkel. Die Hamiltonfunktion ist $H(p, q) = \frac{p^2}{2} - \cos(q)$.

Die Bewegungsgleichung lautet dann $\begin{cases} \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\sin(q) \\ \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \end{cases}$ Es folgt also: $\ddot{q} = -\sin(q)$

(siehe auch Kapitel 1).

Man hat $H(p(t), q(t)) = H(p(0), q(0)) \quad \forall t > t_0$:

$$\frac{d}{dt} H(p(t), q(t)) = \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial H}{\partial q} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \left(-\frac{\partial H}{\partial q}\right) + \frac{\partial H}{\partial q} \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right) = 0.$$

Es folgt: $H(p(t), q(t))$ ist konstant.

Weiter gilt: $\det(\varphi'_t(p, q)) = \det(\varphi'_0(p, q))$ wobei $\varphi'_t(p, q) := \frac{\partial \varphi_t}{\partial (p, q)}(p, q)$.

Physikalisch heisst das, dass die Fläche erhalten bleibt.

Numerische Approximation: Wir wenden das explizite und das symplektische Eulerverfahren auf obiges Problem an, sowie die Mittelpunkregel. Man sieht, dass nur für letztere der beiden Verfahren die Fläche auch erhalten bleibt.

4.2. Symplektische Abbildungen.

Hamilton'sche Differentialgleichung. Für $d \in \mathbb{N}$ und $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ betrachten wir die Hamilton'sche Differentialgleichung

$$(H) \quad \begin{cases} \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}(p, q) \\ \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}(p, q) \end{cases} \quad \forall k = 1, \dots, d.$$

Definition: Symplektisch. Sei V ein endlich dimensionaler Vektorraum. Wir definieren eine Bilinearform ω auf V durch

$$\omega : V^2 \rightarrow V \quad (v, w) \mapsto v^T J w \quad \text{wobei } J := \begin{pmatrix} 0 & \text{Id}_d \\ -\text{Id}_d & 0 \end{pmatrix}$$

- Eine differenzierbare Abbildung $f : V \rightarrow V$ heisst symplektisch, falls

$$\omega((Df)_p(v), (Df)_p(w)) = \omega(v, w) \quad \forall p \in V$$

bzw. falls

$$(Df)_p^T J (Df)_p = J \quad \forall p \in V$$

- Eine lineare Abbildung $A : V \rightarrow V$ heisst symplektisch, falls $\omega(Av, Aw) = \omega(v, w)$ (folgt, da für ein lineares g gilt $Dg \equiv g$).

Bemerkungen. Betrachte \mathbb{R}^{2d} mit Koordinaten $p, q \in \mathbb{R}^d$. Seien $\eta = (\eta_p, \eta_q), \zeta = (\zeta_p, \zeta_q) \in \mathbb{R}^{2d}$ linear unabhängig.

Eindimensionaler Fall: Sei $d = 1$. Betrachte das Parallelogramm $P \in \mathbb{R}^2$ aufgespannt von ζ und η . Die orientierte Fläche des Parallelogramms ist $\omega(\zeta, \eta) = \det(\zeta, \eta) = \zeta_p \eta_q - \zeta_q \eta_p$.

Mehrdimensionaler Fall: Wir betrachten die Summe der orientierten Flächen der Projektionen von P auf Koordinatenebenen:

$$\omega(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^d \det(\zeta_i, \eta_i) = \sum_{i=1}^d (\zeta_i^p \eta_i^q - \zeta_i^q \eta_i^p) = \zeta^T J \eta \quad \text{wobei } J := \begin{pmatrix} 0_d & \text{Id}_d \\ -\text{Id}_d & 0_d \end{pmatrix}.$$

Im Fall $\dim(V) = 1$ gilt für eine lineare Abb. A :

A symplektisch \iff Fläche des Parallelogramms(v, w) = Fläche des Parallelogramms(Av, Aw), also haben wir hier Flächenerhaltung.

Satz von Poincaré. Sei $U \subset \mathbb{R}^{2d}$ offen, $H : U \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gilt:

Für alle $t \in \mathbb{R}$ ist der Fluss $\varphi_t(y_0)$ der Hamilton'schen Differentialgleichung $\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y)$ eine symplektische Abbildung.

Beweis. Um die Behauptung zu zeigen, beweisen wir zuerst, dass $\varphi_t'(y_0)^T J \varphi_t'(y_0)$ konstant ist, dann, dass es J ist.

- Notation: $\varphi_t'(y_0) := (D\varphi_t)_{y_0} =: \frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0}(y_0)$.
- $\frac{d}{dt} \varphi_t'(y_0) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial y_0} \varphi_t(y_0) \right) = \frac{\partial}{\partial y_0} \left(\frac{d}{dt} \varphi_t(y_0) \right) = \frac{\partial}{\partial y_0} (J^{-1} \nabla H(\varphi_t(y_0))) = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi_t(y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} \varphi_t(y_0)$, wobei ∇^2 die Hessematrix ist.
- Es folgt: $\frac{d}{dt} \varphi_t'(y_0) = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi_t(y_0)) \varphi_t'(y_0)$ und damit
- $\frac{d}{dt} (\varphi_t'(y_0)^T J \varphi_t'(y_0)) = \frac{d}{dt} (\varphi_t'(y_0)^T) J \varphi_t'(y_0) + \varphi_t'(y_0)^T J \left(\frac{d}{dt} \varphi_t'(y_0) \right) = \varphi_t'(y_0)^T \cdot \nabla^2 H(\varphi_t(y_0))^T \cdot J^{-T} J \varphi_t'(y_0) + \varphi_t'(y_0)^T \cdot J J^{-1} \cdot \nabla^2 H(\dots) \varphi_t'(y_0) = \varphi_t'(y_0)^T \{ \nabla^2 H(\dots) J^{-T} J + J J^{-1} \nabla^2 H(\dots) \} \varphi_t'(y_0) = 0$
Bemerkung: $J^{-T} J = -\text{Id}$.
- Endlich $\varphi_0'(y_0)^T J \varphi_0'(y_0) = \text{Id}^T J \text{Id} = J$, da $\varphi_0(y_0) = y_0$.

4.3. Symplektische Integratoren.

Definition: Symplektischer Integrator. Ein numerisches Verfahren $y_1 = \Phi_h(y_0)$ heisst symplektisch, falls

$$(D\Phi_h)_{y_0}^T J (D\Phi_h)_{y_0} = J.$$

Beispiele.

- Symplektisches Eulerverfahren
- Mittelpunktregel
- Störmer-Verlet
- Die Gauss-Runge-Kutta-Verfahren.

Satz. Falls man ein symplektisches Verfahren auf eine Hamilton-Gleichung anwendet, dann bleibt die Approximation der Gesamtenergie $H(p, q)$ für sehr sehr lange Zeiten fast erhalten:

$$H(p_n, q_n) = H(p_0, q_0) + \mathcal{O}(h^p),$$

mit p die Ordnung des Verfahrens.
ohne Beweis.

ANHANG A. LISTE WICHTIGER VERFAHREN

Explizites und implizites Eulerverfahren:

explizit: $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$.
 implizit: $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$.

Symplektisches Eulerverfahren: Für ein System $\begin{cases} \dot{u} = f_1(u, v) \\ \dot{v} = f_2(u, v) \end{cases}$ rechnen wir:

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + hf_1(u_n, v_{n+1}) \\ v_{n+1} &= v_n + hf_2(u_n, v_{n+1}). \end{aligned}$$

Störmer-Verlet: Für ein System $\begin{cases} \dot{u} = f(v) \\ \dot{v} = u \end{cases}$ rechnen wir:

$$\begin{aligned} \hat{u} &= u_n + \frac{h}{2}f(v_n) \\ v_{n+1} &= v_n + h\hat{u} \\ u_{n+1} &= \hat{u} + \frac{h}{2}f(v_{n+1}). \end{aligned}$$

Verfahren von Heun: $k_1 = f(x_n, y_n)$, $k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1)$ und

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

oder
$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ \hline & \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \end{array}$$

Verfahren von Runge/Mittelpunktregel: $k_1 := f(x_n, y_n)$, $k_2 := f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1)$ und

$$y_{n+1} = y_n + hk_2$$

oder
$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$$

Klassisches Runge-Kutta 4:
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Adams-Bashforth (LMV): $y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n$, wobei $\gamma_j = \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds$.

Adams-Moulton (LMV): $y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^k \gamma_j^* \nabla^j f_{n+1}$, wobei $\gamma_j^* = \int_0^1 \binom{s+j-2}{j} ds$.

BDF (LMV): $\sum_{j=1}^k \frac{1}{j} \nabla^j y_{n+1} = hf_{n+1}$.

Trapezregel (LMV, $k = 2$): $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$.

Milne/Simpson (LMV, $k = 3$): $y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1})$.