

NUMERIK VON DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Prof. Dr. Bastian von Harrach

Goethe-Universität Frankfurt am Main
Institut für Mathematik

Sommersemester 2020

<http://numerical.solutions>

Inhaltsverzeichnis

1	Gewöhnliche Differentialgleichungen	1
1.1	Einführung und Beispiele	1
1.1.1	Einfache Beispiele und elementare Begriffe	1
1.1.2	Anwendungsbeispiele und Anfangswertprobleme	3
1.1.3	Elementare Lösungsmethoden	7
1.2	Theorie gewöhnlicher DGL	10
1.2.1	Eine allgemeine Form für Anfangswertprobleme	10
1.2.2	Formulierung eines AWP als Fixpunktaufgabe	11
1.2.3	Der Satz von Picard-Lindelöf	13
1.2.4	Differenzierbarkeit und Lipschitz-Stetigkeit	15
1.2.5	Erweiterung auf den Fall lokaler Lipschitz-Stetigkeit	16
1.2.6	Stabilität der Lösung von Anfangswertproblemen	20
1.3	Erste Lösungsmethoden	21
1.3.1	Das Richtungsfeld	21
1.3.2	Explizites Euler-Verfahren	22
1.3.3	Implizites Euler-Verfahren	24
1.3.4	Weitere explizite und implizite Methoden	26
1.3.5	Einschritt- und Mehrschrittverfahren	29
1.4	Runge-Kutta-Verfahren	30
1.4.1	Eine unrealistische Generalvoraussetzung	30
1.4.2	Konsistenz und Konvergenz	32
1.4.3	Runge-Kutta-Verfahren	37

INHALTSVERZEICHNIS

1.4.4	Wohldefiniiertheit impliziter Methoden	40
1.4.5	Runge-Kutta-Ordnungsbedingungen	41
1.4.6	Erweiterung auf den Fall ohne Generalvoraussetzung	45
1.5	Numerik steifer Differentialgleichungen	47
1.5.1	Steife Differentialgleichungen	47
1.5.2	Die Testgleichung	49
1.5.3	Die Stabilitätsfunktion	50
1.5.4	Stabilität	52
1.5.5	Nachteile expliziter Verfahren	56
1.6	Linear implizite Methoden	57
1.7	Mehrschrittverfahren	63
1.7.1	Adams-Bashforth Methoden	64
1.7.2	Weitere auf Integration basierende Methoden	65
1.7.3	Auf Differentiation basierende Methoden	66
1.7.4	Konvergenz linearer Mehrschrittverfahren	68
1.8	Eindimensionale Randwertprobleme	70
1.8.1	Motivation: Diffusionsprozesse	70
1.8.2	Differenzenverfahren	72
1.8.3	Konsistenz, Stabilität und Konvergenz	76
2	Partielle Differentialgleichungen	81
2.1	Motivation und Klassifikation	81
2.1.1	Mehrdimensionale Diffusion	81
2.1.2	Klassifikation partieller Differentialgleichungen	82
2.2	Finite Differenzen für elliptische DGL	84
2.2.1	Das Maximumsprinzip	85
2.2.2	Finite Differenzen für elliptische PDGL	89
2.2.3	Allgemeinere Fälle und ein diskretes Maximumsprinzip	92
2.2.4	Konsistenz, Stabilität und Konvergenz	96

Kapitel 1

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Eine Differentialgleichung ist eine Gleichung, die eine unbekannte Funktion zusammen mit ihren Ableitungen enthält. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der Lösung sogenannter *gewöhnlicher* Differentialgleichungen (engl.: ordinary differential equations, ODE), bei denen die gesuchte Funktion nur von einer reellwertigen Variablen abhängt, sodass sich alle in der Differentialgleichung vorkommenden Ableitungen auf dieselbe Variable beziehen.

1.1 Einführung und Beispiele

Wir beginnen mit einigen einführenden Beispielen und Anwendungen von Differentialgleichungen.

1.1.1 Einfache Beispiele und elementare Begriffe

Beispiel 1.1

(a) Betrachte die Differentialgleichung

$$y'(x) = 0 \quad (\text{kurz: } y' = 0),$$

d.h. gesucht ist eine differenzierbare Funktion

$$y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, y: x \mapsto y(x) \quad \text{mit} \quad y'(x) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

- Spezielle *Lösungen* sind z.B.:

$$y(x) = 0, \quad y(x) = 1, \quad y(x) = -37, \quad \dots$$

- Die allgemeine Lösung ist $y(x) = C$, $C \in \mathbb{R}$, d.h. man kann zeigen, dass jede solche Funktion die DGL löst und jede Lösung in dieser Form geschrieben werden kann.

(b) Betrachte die Differentialgleichung

$$y'(x) = ry(x), \quad r \in \mathbb{R} \quad (\text{kurz: } y' = ry).$$

- Spezielle *Lösungen* sind z.B.:

$$y(x) = 0, \quad y(x) = e^{rx}, \quad y(x) = -37e^{rx}, \quad \dots$$

- Man kann zeigen, dass $y(x) = Ce^{rx}$, $C \in \mathbb{R}$, die allgemeine Lösung dieser DGL ist.

(c) Die höchste vorkommende Ableitung bezeichnet man auch als Ordnung der Differentialgleichung. Die Beispiele in (a) und (b) waren von erster Ordnung. Ein Beispiel für eine Differentialgleichung höherer Ordnung ist

$$y''(x) = -y(x) \quad (\text{kurz: } y'' = -y).$$

- Spezielle *Lösungen* sind z.B.:

$$y(x) = 0, \quad y(x) = \sin(x), \quad y(x) = 37 \cos(x), \quad \dots$$

- Man kann zeigen, dass $y(x) = C_1 \sin(x) + C_2 \cos(x)$, $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$, die allgemeine Lösung dieser DGL ist.

(d) Betrachte das Differentialgleichungssystem

$$y_1''(x) = -y_1(x),$$

$$y_2'(x) = y_3(x),$$

$$y_3'(x) = y_3(x).$$

- Eine spezielle Lösung ist z.B.:

$$y_1(x) = \sin(x),$$

$$y_2(x) = 37,$$

$$y_3(x) = 0.$$

- Man kann zeigen, dass

$$\begin{aligned}y_1(x) &= C_1 \sin(x) + C_2 \cos(x), \\y_2(x) &= C_3 e^x + C_4, \\y_3(x) &= C_3 e^x,\end{aligned}$$

$C_1, \dots, C_4 \in \mathbb{R}$, die allgemeine Lösung ist.

(e) Betrachte die Differentialgleichung für eine vektorwertige Funktion:

Gesucht ist (eine differenzierbare Funktion)

$$y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad y: x \mapsto y(x) := \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{pmatrix}$$

mit $y' = y$, also

$$y'(x) = y(x) \iff \begin{pmatrix} y_1'(x) \\ y_2'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \end{pmatrix} \iff \begin{cases} y_1'(x) = y_1(x) \\ y_2'(x) = y_2(x) \end{cases}.$$

Beispiel 1.2

Betrachte $y: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $(x_1, x_2) \mapsto y(x) = y(x_1, x_2)$.

Ein Beispiel für eine nicht gewöhnliche, sondern sogenannte partielle Differentialgleichung (engl.: Partial Differential Equation, PDE) ist

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2} = 0.$$

Spezielle Lösungen sind z.B.: $y(x) = 0$, $y(x) = x_1 + x_2, \dots$

1.1.2 Anwendungsbeispiele und Anfangswertprobleme

In praktischen Anwendungen werden mit Differentialgleichungen oft die Änderungen einer messbaren Größe im Laufe der Zeit beschrieben. Je nachdem, um welche messbare Größe es geht, verwenden wir daher in diesem Abschnitt unterschiedliche Bezeichner für die Funktion, und bezeichnen die Zeitvariable mit t . Für Ableitungen bezüglich der Zeit schreiben wir auch $\dot{y}(t)$ statt $y'(x)$.

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Stetige Verzinsung Es sei $y(t)$ das Guthaben auf einem Sparkonto zum Zeitpunkt t (gemessen in Jahren). Eine Bank zahle p Zinsen für ein Jahr (z.B. den Zinssatz $p = 1\% = 0.01$), also

$$y(t+1) = y(t)(1+p).$$

Wir betrachten die Frage, wie sich bei jederzeitiger Verfügbarkeit der faire Wert $y(t)$ des Guthabens entwickelt. Wird das Guthaben nach einem halben Jahr abgehoben, so wäre es nicht fair, dem Kunden dafür $p/2$ Zinsen zu zahlen. Denn dann würde ein Kunde, der nach einem halben Jahr sein Geld abhebt, und es sofort wieder für ein weiteres halbes Jahr anlegt, aufgrund der Zinseszinsen mehr erhalten als ein Kunde, der das Geld nicht zwischendurch abhebt:

$$y(t) \left(1 + \frac{p}{2}\right) \left(1 + \frac{p}{2}\right) = y(t) \left(1 + p + \frac{p^2}{4}\right) > y(t)(1+p).$$

Der faire Zinssatz für ein halbes Jahr wäre q mit $(1+q)^2 = (1+p)$, also

$$y(t+1/2) = y(t) + y(t)q \quad \text{mit } q = \sqrt{1+p} - 1.$$

Entsprechend ist der faire Zinssatz für das Zeitintervall $\Delta t = \frac{1}{n}$ die Lösung $q > 0$ von

$$(1+q)^n = 1+p.$$

Mit $r := \ln(1+p)$ ist $\ln(1+q) = \frac{1}{n} \ln(1+p) = r\Delta t$ und damit

$$y(t+\Delta t) = y(t)(1+q) = y(t)e^{\log(1+q)} = y(t)e^{r\Delta t}.$$

Ist der faire Wert $y(t)$ des Guthabens stetig differenzierbar so folgt mit

$$e^{r\Delta t} = 1 + r\Delta t + O((\Delta t)^2),$$

dass $y(t)$ die folgende Differentialgleichung erfüllt:

$$\dot{y}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t} = ry(t).$$

Die gewöhnliche DGL $\dot{y} = ry$ beschreibt also eine stetige Verzinsung. Mit der gleichen Begründung lässt sich damit auch exponentielles Wachstum in der Populationsdynamik (z.B. einer Bakterienkultur bei unbegrenztem Zugang zu Ressourcen) oder (für $r < 0$) exponentieller Zerfall modellieren.

Epidemiologische Modelle Ein einfaches Modell der Ausbreitung von ansteckenden Krankheiten ist das *SI-Modell*, bei dem nur zwei Größen betrachtet werden. $S(t)$ bezeichne die Anzahl der gesunden (und damit potentiell ansteckbaren) Individuen (engl.: *susceptible individuals*). $I(t)$ bezeichne die Anzahl der infektiösen Individuen (engl.: *infectious individuals*). Im SI-Modell wird angenommen, dass die Änderungsrate der Infizierten sowohl von der Anzahl der bereits Infizierten als auch von der Anzahl der noch Infizierbaren linear abhängt, d.h. es gilt

$$\dot{I}(t) = cS(t)I(t)$$

mit einem von der Ansteckungsrate abhängigen Parameter $c > 0$. Entsprechend ergibt sich für die Änderung der gesunden Individuenanzahl

$$\dot{S}(t) = -cS(t)I(t).$$

Damit ist offenbar wegen $\dot{I}(t) + \dot{S}(t) = 0$ auch sichergestellt, dass die Gesamtgröße der Population konstant bleibt.

Im *SIR-Modell* wird dieser Zusammenhang noch um die Gruppe der immunen und verstorbenen Individuen ergänzt. Es bezeichne $R(t)$ die Anzahl der (z.B. wegen Tod oder Immunität) nicht mehr ansteckbaren Individuen (engl.: *removed individuals*). Für die Änderung der infizierbaren Individuen nehmen wir weiterhin an, dass

$$\dot{S}(t) = -cS(t)I(t).$$

Die Änderungsrate der Infizierten wird im SIR-Modell dadurch modifiziert, dass ein gewisser Anteil die Infektion überwindet (und damit immun ist) oder stirbt. Analog zur Modellierung stetiger Verzinsung (mit negativem Zinssatz) bzw. exponentiellem Zerfalls ergibt sich:

$$\dot{I}(t) = cS(t)I(t) - \gamma I(t).$$

Entsprechend verändert sich die Anzahl der immunen und verstorbenen Individuen gemäß

$$\dot{R}(t) = \gamma I(t).$$

Auch in diesem Modell gilt offenbar, dass die Gesamtzahl $S(t) + I(t) + R(t)$ stets konstant bleibt.

Chemische Reaktionen $A(t), B(t), C(t)$, usw. bezeichne die Konzentration von Molekülen A, B, C . Wir nehmen an, dass sich (in einem kurzen Zeitintervall Δt) $kA(t)\Delta t$ Moleküle von A in B umwandeln und schreiben dafür $A \xrightarrow{k} B$. Dann erfüllen die Konzentrationen die DGL

$$\dot{A}(t) = -kA(t), \quad \dot{B}(t) = kA(t).$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Betrachten wir noch die Reaktionsvorschrift $A + B \xrightarrow{k} C + 2D$, also dass eine chemische Reaktion mit Rate k jeweils ein Molekül A mit einem Molekül B zu einem Molekül C sowie zwei Molekülen D umwandelt. Dann erfüllen die Konzentrationen die DGL

$$\dot{A} = -kAB, \quad \dot{B} = -kAB, \quad \dot{C} = kAB, \quad \dot{D} = 2kAB.$$

Newtonsche Mechanik Es bezeichne

$x(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))^T$ die Position eines Körpers zum Zeitpunkt t ,

$v(t) = \dot{x}(t) = (\dot{x}_1(t), \dot{x}_2(t), \dot{x}_3(t))^T$ seine Geschwindigkeit und

$a(t) = \dot{v}(t) = \ddot{x}(t) = (\ddot{x}_1(t), \ddot{x}_2(t), \ddot{x}_3(t))^T$ seine Beschleunigung.

Das *Newtonsche Gesetz* besagt, dass die Wirkung einer Kraft $F(t)$ auf einen Körper der Masse m zu einer Beschleunigung führt gemäß

$$F(t) = ma(t) = m\ddot{x}(t).$$

Anfangswertprobleme Die Lösung einer gewöhnlichen DGL ist üblicherweise nicht eindeutig. Die allgemeine Lösung von $\dot{y}(t) = ry(t)$ ist $y(t) = Ce^{rt}$ mit einem Parameter $C \in \mathbb{R}$. In vielen Anwendungen sind die Parameter eindeutig bestimmt durch die Anfangswerte von y . Bei der stetigen Verzinsung ist z.B. $C = y(0)$ das anfängliche Sparguthaben.

Intuitiv erwarten wir in den anderen Beispielen, dass die Lösung durch folgende Informationen eindeutig bestimmt wird:

- Epidemiologische Modelle: anfängliche Individuenanzahl $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$.
- Chemische Reaktionen: anfängliche Konzentrationen $A(0)$, $B(0)$, ...
- Newtonsche Gesetze: Startposition $x_1(0)$, $x_2(0)$, $x_3(0)$ und -geschwindigkeit $v_1(0)$, $v_2(0)$, $v_3(0)$.

Eine gewöhnliche DGL zusammen mit Anfangsbedingungen heißt auch *Anfangswertproblem* (AWP).

1.1.3 Elementare Lösungsmethoden

Ähnlich wie Integrale lassen sich manche (aber nicht alle) gewöhnliche Differentialgleichungen analytisch, d.h. in geschlossener Form lösen. Wir geben hier nur Beispiele besonders einfacher Lösungsmethoden an. Es existieren noch einige weitere wichtige analytische Lösungsmethoden, aber im Allgemeinen lassen sich gewöhnliche Differentialgleichungen nur numerisch lösen.

Raten/Wissen der Lösung Für einfache Beispiele kann man die Lösung raten, siehe Beispiel 1.1. Ein so gefundener Lösungskandidat kann durch Einsetzen überprüft werden, womit rigoros bewiesen ist, dass dies tatsächlich eine Lösung ist. Damit ist jedoch noch unklar, ob es noch andere Lösungen gibt.

Für eine große Klasse von Anfangswertproblemen kann die Eindeutigkeit einer Lösung gezeigt werden (siehe Satz 1.8 und 1.12). In dem Fall ist die geratene Lösung die einzige und das Problem durch Raten (genauer: durch das Einsetzen der geratenen Lösung in das AWP) vollständig gelöst.

Separation der Variablen Gewöhnliche DGL der Form

$$y'(x) = g(x)h(y(x))$$

lassen sich formal(!) schreiben als

$$\frac{dy}{h(y)} = g(x) dx \quad (1.1)$$

und durch Integration lösen

$$\int \frac{1}{h(y)} dy = \int g(x) dx. \quad (1.2)$$

Formal bedeutet dabei, dass dies keine mathematisch rigorosen Umformulierungen sind. Die Ausdrücke dx und dy sind nicht definiert!

Man kann dieses Vorgehen mathematisch sauber formulieren und rigoros beweisen (siehe z.B. [Heuser, Satz 8.1]). Aber auch ohne rigorose Rechtfertigung haben formale Methoden einen großen Nutzen (nicht nur im Bereich gewöhnlicher DGL). Oft lässt sich nämlich durch formales Vorgehen ein Lösungskandidat bestimmen und für diesen dann (wie bei einer geratenen Lösung) rigoros überprüfen, ob er tatsächlich eine Lösung ist.

Beispiel 1.3

Betrachte das epidemiologische SI-Modell mit $c = 1$:

$$\begin{aligned}\dot{S}(t) &= -S(t)I(t) \\ \dot{I}(t) &= S(t)I(t),\end{aligned}$$

und Anfangswerten $S(0) = S_0$, $I(0) = I_0$ und der Normierung $S_0 + I_0 = 1$.

Jede Lösung erfüllt $\dot{S}(t) + \dot{I}(t) = 0$ und damit $S(t) + I(t) = S_0 + I_0 = 1$ für alle t .
Es folgt also aus der ersten Gleichung

$$\dot{S} = -S(1 - S).$$

Durch formale Separation der Variablen wie oben beschrieben ergibt sich:

$$\int \frac{1}{S(1-S)} dS = - \int 1 dt.$$

Wir erwarten anschaulich, dass für die Lösung $S(t) \in [0, 1]$ gilt, und lösen daher die Integrale auf beiden Seiten unter dieser Vermutung:

$$\begin{aligned}- \int 1 dt &= -t + const. \\ \int \frac{1}{S(1-S)} dS &= \int \frac{1}{1-S} dS + \int \frac{1}{S} dS \\ &= -\ln(1-S) + \ln(S) + const. = \ln\left(\frac{S}{1-S}\right) + const.\end{aligned}$$

Damit erhalten wir mit einer Konstante $C > 0$

$$\ln\left(\frac{S}{1-S}\right) = -t + const. \implies \frac{S}{1-S} = Ce^{-t} \implies S = \frac{Ce^{-t}}{1+Ce^{-t}}.$$

C kann aus dem Anfangswert $S(0) = S_0$ bestimmt werden:

$$S_0 = \frac{C}{1+C} \implies C = \frac{S_0}{1-S_0}.$$

Insgesamt ergibt sich also

$$S(t) = \frac{\frac{S_0}{1-S_0}e^{-t}}{1 + \frac{S_0}{1-S_0}e^{-t}} = \frac{S_0e^{-t}}{1 - S_0 + S_0e^{-t}} \quad \text{und} \quad I(t) = 1 - S(t).$$

Wir betonen an dieser Stelle nochmal, dass diese Herleitung von $S(t)$ keinerlei rigorose mathematische Beweiskraft besitzt. (Wir haben sowohl die hier nur formal eingeführte Separation der Variablen als auch unbewiesene Vermutungen verwendet!) Aus dieser Herleitung folgt weder, dass unser Lösungskandidat $S(t)$ die Gleichungen des SI-Modells löst, noch ob es die einzige mögliche Lösung ist. Es lässt sich aber durch Einsetzen unseres Kandidaten leicht nachrechnen, dass es tatsächlich die SI-Gleichungen löst (damit ist das dann mathematisch rigoros bewiesen) und mit der im nächsten Abschnitt eingeführten Theorie kann man zeigen, dass es tatsächlich die einzige Lösung ist.

Bereits für das leicht erweiterte SIR-Modell sind dem Dozenten keine einfachen analytischen Lösungsmöglichkeiten bekannt. Es lässt sich jedoch sehr einfach mit den in den ersten Vorlesungswochen eingeführten numerischen Verfahren lösen.

Variation der Konstanten Wir betrachten die inhomogene lineare Differentialgleichung

$$y'(x) = ry(x) + z(x). \quad (1.3)$$

Die allgemeine Lösung der zugehörigen *homogenen* Gleichung $y'(x) = ry(x)$ ist $y(x) = Ce^{rx}$ mit einer Konstante $C \in \mathbb{R}$.

Wir machen nun den *Ansatz*, zur Lösung der inhomogenen Gleichung, die Konstante durch eine Funktion $C(x)$ zu ersetzen. Falls eine Funktion der Form

$$y(x) = C(x)e^{rx}$$

die inhomogene Gleichung (1.3) erfüllt, so muss gelten:

$$\begin{aligned} C'(x)e^{rx} + C(x)re^{rx} &= y'(x) = ry(x) + z(x) = rC(x)e^{rx} + z(x) \\ \iff C'(x) &= z(x)e^{-rx}. \end{aligned}$$

Durch Integration erhalten wir $C(x)$ und damit die Lösung $y(x) = C(x)e^{rx}$.

Findet man eine Lösungskandidaten durch einen solchen Ansatz, so lässt sich durch Einsetzen in die ursprüngliche DGL beweisen, dass dies tatsächlich eine Lösung ist. Wenn ab dem Ansatz nur mathematisch rigoros argumentiert wurde, so kann durch dieses Vorgehen auch bewiesen werden, dass es keine andere Lösung in der angesetzten Form geben kann. Im Allgemeinen ist damit aber nicht geklärt, ob es noch andere Lösungen gibt, die nicht dem Ansatz entsprechen. Auch dies lässt sich aber häufig mit der im nächsten Abschnitt eingeführten Theorie zeigen.

1.2 Theorie gewöhnlicher DGL

1.2.1 Eine allgemeine Form für Anfangswertprobleme

Von nun an betrachten wir stets Anfangswertprobleme in der folgenden allgemeinen Form

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad y(a) = y_0,$$

wobei $x \in [a, b] \subset \mathbb{R}$, $b > a$, $y(x) = (y_1(x), \dots, y_d(x))^T \in \mathbb{R}^d$ vektorwertig ist, $d \in \mathbb{N}$, und

$$f: \mathbb{R}^{d+1} \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f(x, y) = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \dots, y_d) \\ \vdots \\ f_d(x, y_1, \dots, y_d) \end{pmatrix}.$$

Die vektorwertige Differentialgleichung $y' = f(x, y(x))$ ist äquivalent zum System gekoppelter skalarer Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= f_1(x, y_1(x), \dots, y_d(x)), \\ &\vdots \\ y_d'(x) &= f_d(x, y_1(x), \dots, y_d(x)). \end{aligned}$$

Gleichungen höherer Ordnung (d.h. solche, die höhere Ableitungen von y enthalten) können oft in diese Form transformiert werden, indem y und seine Ableitungen (bis zur zweithöchsten) in einer vektorwertigen Hilfsfunktion $u = (u_1, u_2, \dots)$ zusammengefasst werden

$$u_1(x) := y(x), \quad u_2(x) := y'(x), \quad u_3(x) := y''(x), \dots$$

Beispiel 1.4

$y'' = -y$ kann in obige Form transformiert werden durch

$$u = \begin{pmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} y(x) \\ y'(x) \end{pmatrix}.$$

Damit ist $y'' = -y$ äquivalent zu

$$u' = \begin{pmatrix} u_1'(x) \\ u_2'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y'(x) \\ y''(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y'(x) \\ -y(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_2(x) \\ -u_1(x) \end{pmatrix} =: f(x, u(x)).$$

Das Ziel dieses Abschnittes ist es zu zeigen, dass Anfangswertprobleme *wohlgestellt* sind. Dabei heißt ein Problem *wohlgestellt* (nach Hadamard) wenn

- (a) eine Lösung existiert (*Existenz*),
- (b) die Lösung eindeutig ist (*Eindeutigkeit*),
- (c) die Lösung stetig von den Eingabeparametern abhängt (*Stabilität*).

Für das Anfangswertproblem

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad y(a) = y_0$$

bedeutet Wohlgestelltheit, dass genau eine Lösung $y(x)$ existiert und diese Lösung stetig von den Anfangswerten y_0 (und ggf. weiteren in f vorhandenen Parametern) abhängt.

1.2.2 Formulierung eines AWP als Fixpunktaufgabe

Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung eines Anfangswertproblems werden wir mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes beweisen. Hier und in der gesamten Vorlesung bezeichne dabei $\|\cdot\|$ im Raum \mathbb{R}^d stets die Euklidnorm. Andere Normen werden wir durch Index kennzeichnen.

Satz 1.5 (Banachscher Fixpunktsatz)

Sei $(X, \|\cdot\|_*)$ ein Banachraum (d.h. ein vollständiger normierter Vektorraum) und Φ eine kontrahierende Selbstabbildung auf X , d.h. es existiere ein $q < 1$ mit

$$\Phi : X \rightarrow X \quad \text{und} \quad \|\Phi(x) - \Phi(y)\|_* \leq q \|x - y\|_* \quad \forall x, y \in X.$$

Dann besitzt Φ genau einen Fixpunkt \hat{x} , d.h. genau ein $\hat{x} \in X$ mit $\Phi(\hat{x}) = \hat{x}$.

Für jeden Startwert $x^{(0)} \in X$ konvergiert die durch Fixpunktiteration definierte Folge

$$(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}_0}, \quad x^{(k+1)} := \Phi(x^{(k)}) \quad \forall k \in \mathbb{N}_0$$

(bzgl. der Norm $\|\cdot\|_*$) gegen \hat{x} , d.h.

$$\|x^{(k)} - \hat{x}\|_* \rightarrow 0.$$

Beweis: Dies folgt aus [NumerikWS1920, Satz 3.1 und Bem. 3.2]. □

Wir werden den Banachschen Fixpunktsatz anwenden, indem wir das Anfangswertproblem in eine Fixpunktgleichung im Raum der stetigen Funktionen auf $[a, b]$,

$$C([a, b])^d := \{y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d \text{ stetig}\},$$

umschreiben.

Lemma 1.6

Seien $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, $y_0 \in \mathbb{R}^d$ und

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f : (x, y) \mapsto f(x, y)$$

sei stetig. Eine Funktion

$$y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$$

ist genau dann differenzierbar und erfüllt das AWP

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0,$$

wenn y stetig ist und die folgende Fixpunktgleichung löst:

$$y(x) = y_0 + \int_a^x f(t, y(t)) dt \quad \forall x \in [a, b]. \tag{1.4}$$

y ist dann auch stetig differenzierbar.¹

Beweis: Ist y differenzierbar und erfüllt das AWP, so ist y' auch stetig und nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung gilt

$$y(x) = y(a) + \int_a^x y'(t) dt = y_0 + \int_a^x f(t, y(t)) dt \quad \forall x \in [a, b].$$

Ist umgekehrt $y \in C([a, b])^d$ und erfüllt (1.4), so ist auch $t \mapsto f(t, y(t))$ stetig und

$$y(x) = y_0 + \int_a^x f(t, y(t)) dt$$

ist differenzierbar, $y'(x) = f(x, y(x))$ und $y(a) = y_0$. □

Das AWP ist also äquivalent zur Fixpunktgleichung $y = \Phi(y)$, wobei

$$\Phi : C([a, b])^d \rightarrow C([a, b])^d$$

die komplette Funktion $x \mapsto y(x)$ auf die Funktion $x \mapsto y_0 + \int_a^x f(t, y(t)) dt$ abbildet. Wir zeigen noch, dass $C([a, b])^d$ tatsächlich ein Banachraum ist.

Lemma 1.7

$C([a, b])^d$ ist bezüglich der Supremumsnorm (auch: Maximumsnorm)

$$\|y\|_\infty := \max_{x \in [a, b]} \|y(x)\|$$

ein Banachraum.

Beweis: Übungsaufgabe 1.2. □

¹Dabei heißt im Allgemeinen eine Funktion auf einer abgeschlossenen Menge des \mathbb{R}^n differenzierbar (bzw. stetig differenzierbar), falls sie die Einschränkung einer auf ganz \mathbb{R}^n differenzierbaren (bzw. stetig differenzierbaren) Funktion ist. In diesem Fall ist dies offensichtlich äquivalent dazu, dass die einseitigen Grenzwerte in den Randpunkten a und b existieren, bzw. dazu, dass die Ableitung auf ganz $[a, b]$ stetig ist.

1.2.3 Der Satz von Picard-Lindelöf

In diesem Abschnitt beweisen wir zunächst den Existenz- und Eindeigkeitssatz von Picard-Lindelöf in seiner einfachsten globalen Form (vgl. Satz 1.12 und Bemerkung 1.13 für eine Abschwächung der Voraussetzungen).

Satz 1.8 (Picard-Lindelöf)

Seien $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, $y_0 \in \mathbb{R}^d$. Für

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f : (x, y) \mapsto f(x, y)$$

gelte

(a) f ist stetig,

(b) f ist (global und bzgl. x gleichmäßig) Lipschitz-stetig in y , d.h.

$$\exists L > 0 : \quad \|f(x, y) - f(x, z)\| \leq L \|y - z\| \quad \forall x \in [a, b], y, z \in \mathbb{R}^d.$$

Dann existiert genau eine differenzierbare Funktion $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0 \quad (1.5)$$

und diese ist stetig differenzierbar.

Beweis: Wir haben (in Lemma 1.6 und 1.7) bereits gezeigt, dass das AWP (1.5) äquivalent ist zur Fixpunktaufgabe $y = \Phi(y)$ im Banachraum $C([a, b]^d)$, wobei

$$\Phi : C([a, b]^d) \rightarrow C([a, b]^d)$$

die Funktion $x \mapsto y(x)$ auf die Funktion $x \mapsto y_0 + \int_a^x f(t, y(t)) dt$ abbildet.

Zur Anwendung des Banachschen Fixpunktsatzes 1.5 prüfen wir nach, ob Φ eine Kontraktion ist. Für zwei Funktionen $y^{(1)}, y^{(2)} \in C([a, b]^d)$ und $x \in [a, b]$ gilt

$$\begin{aligned} & \left\| \Phi(y^{(1)})(x) - \Phi(y^{(2)})(x) \right\| \\ &= \left\| \int_a^x \left(f(t, y^{(1)}(t)) - f(t, y^{(2)}(t)) \right) dt \right\| \\ &\leq \int_a^x \left\| f(t, y^{(1)}(t)) - f(t, y^{(2)}(t)) \right\| dt \leq \int_a^x L \left\| y^{(1)}(t) - y^{(2)}(t) \right\| dt \end{aligned}$$

und damit

$$\left\| \Phi(y^{(1)}) - \Phi(y^{(2)}) \right\|_{\infty} \leq L(b-a) \left\| y^{(1)} - y^{(2)} \right\|_{\infty}.$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Für hinreichend kleine Intervalle $[a, b]$ mit $b - a < \frac{1}{L}$ ist Φ also eine Kontraktion, so dass die Fixpunktaufgabe und damit das AWP eindeutig lösbar sind. Da wir ein großes Intervall $[a, b]$ aufspalten können in endlich viele Teilintervalle mit Höchstlänge $\frac{1}{2L}$ und das AWP auf $[a, b]$ offensichtlich äquivalent dazu ist, das AWP sukzessive auf den kleinen Teilintervallen zu lösen (und jeweils den Endwert auf einem Teilintervall als Anfangswert für das nächste zu nehmen), ist damit Satz 1.8 bewiesen. \square

Beispiel 1.9

Auf die Voraussetzung der Lipschitz-Stetigkeit kann nicht verzichtet werden, wie das folgende Beispiel zeigt. Betrachte das AWP

$$y' = \sqrt{y}, \quad y(0) = 0.$$

Die rechte Seite $f(x, y) := \sqrt{y}$ ist nicht Lipschitz-stetig. Tatsächlich ist die Lösung des AWP nicht eindeutig. Zwei Lösungen sind z.B.

$$y(x) = 0 \quad \text{und} \quad y(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq 1, \\ \frac{1}{4}(x-1)^2 & \text{für } x > 1. \end{cases}$$

Bemerkung 1.10

Wir zeigen noch eine etwas technischere aber lehrreiche alternative Variante des Beweisendes von Satz 1.8. Φ lässt sich durch geschickte Wahl der Norm auch für beliebig große Intervalle $[a, b]$ zur Kontraktion machen. Für eine Funktion $w \in C([a, b])$ gelte

$$\exists c, C > 0 : c \leq w(x) \leq C \quad \forall x \in [a, b].$$

Dann ist die gewichtete Supremumsnorm

$$\|y\|_w := \max_{x \in [a, b]} (w(x) \|y(x)\|)$$

offensichtlich tatsächlich eine Norm und zur Supremumsnorm äquivalent:

$$c \|y\|_\infty \leq \|y\|_w \leq C \|y\|_\infty \quad \forall y \in C([a, b])^d.$$

Insbesondere ist jede Cauchy-Folge bzgl. $\|\cdot\|_w$ auch eine bzgl. $\|\cdot\|_\infty$ und der Grenzwert bzgl. $\|\cdot\|_\infty$ ist auch der Grenzwert bzgl. $\|\cdot\|_w$. Daher ist $C([a, b])^d$ auch bzgl. $\|\cdot\|_w$ ein Banachraum.

Wie im Beweis von Satz 1.8 erhalten wir durch Einfügen einer solchen Gewichtsfunktion $w(x)$

$$\begin{aligned} w(x) \left\| \Phi(y^{(1)})(x) - \Phi(y^{(2)})(x) \right\| &\leq w(x) \int_a^x L \frac{1}{w(t)} w(t) \left\| y^{(1)}(t) - y^{(2)}(t) \right\| dt \\ &\leq w(x) L \left\| y^{(1)} - y^{(2)} \right\|_w \int_a^x \frac{1}{w(t)} dt \end{aligned}$$

und damit

$$\left\| \Phi(y^{(1)}) - \Phi(y^{(2)}) \right\|_w \leq \left\| y^{(1)} - y^{(2)} \right\|_w L \max_{x \in [a, b]} \left(w(x) \int_a^x \frac{1}{w(t)} dt \right).$$

Φ ist also eine Kontraktion bzgl. $\|\cdot\|_w$ wenn wir eine Gewichtsfunktion w finden mit

$$L \left(w(x) \int_a^x \frac{1}{w(t)} dt \right) < 1 \quad \forall x \in [a, b].$$

Offenbar gilt für jedes $r > 0$ und $x \in [a, b]$, dass

$$e^{-r(x-a)} \int_a^x \frac{1}{e^{-r(t-a)}} dt = e^{-r(x-a)} \frac{1}{r} e^{r(t-a)} \Big|_{t=a}^{t=x} = \frac{1}{r} - e^{-r(x-a)} \frac{1}{r} \leq \frac{1}{r}.$$

Mit $r := 2L$, also $w(x) := e^{-2L(x-a)}$ ist Φ daher eine Kontraktion (mit Kontraktionskonstante $1/2$) bzgl. $\|\cdot\|_w$, womit die eindeutige Lösbarkeit der Fixpunktgleichung $y = \Phi(y)$ und damit des AWP (1.5) gezeigt ist.

Eine Konsequenz dieses alternativen Beweises ist, dass die zugehörige Fixpunktiteration (Picard-Lindelöf-Iteration)

$$y^{(k+1)} := \Phi(y^{(k)}), \quad \text{d.h.} \quad y^{(k+1)}(x) := y_0 + \int_a^x f(t, y^{(k)}(t)) dt$$

für jede Startfunktion $y^{(0)} \in C([a, b])$ bzgl. der gewichteten Norm $\|\cdot\|_w$ gegen die Lösung des AWP (1.5) konvergiert. Da $\|\cdot\|_w$ zur Supremumsnorm äquivalent ist, gilt die Konvergenz auch bzgl. dieser, die Funktionen $y^{(k+1)}$ konvergieren also gleichmäßig gegen die Lösung von (1.5). Ein Beispiel dazu sehen wir in Übungsaufgabe 2.3.

1.2.4 Differenzierbarkeit und Lipschitz-Stetigkeit

Die Annahme globaler Lipschitz-Stetigkeit ist im Allgemein zu restriktiv. Selbst sehr einfache Modelle (wie die in Beispiel 1.3 aus dem SI-Modell erhaltene DGL $\dot{S} = -S(1 - S)$) erfüllen diese Annahme nicht. Eine sehr viel realistischere Annahme ist es, nur stetige Differenzierbarkeit der rechten Seite der Differentialgleichung zu fordern, womit zumindest noch lokale Lipschitz-Stetigkeit der Lösung folgt, wie das folgende Lemma zeigt.

Lemma 1.11

Seien $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$. Ist

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f : (x, y) \mapsto f(x, y)$$

stetig differenzierbar, so ist

$$f(x, y) - f(x, z) = \int_0^1 f_y(x, y + t(z - y))(z - y) dt \quad \text{für alle } y, z \in \mathbb{R}^d,$$

wobei $f_y(x, y) \in \mathbb{R}^{d \times d}$ die bezüglich der y -Variablen gebildete Jacobi-Matrix, also die hinteren d Spalten der Jacobi-Matrix $f'(x, y) \in \mathbb{R}^{d \times (d+1)}$ bezeichnet.

Außerdem ist f dann lokal und bzgl. x gleichmäßig Lipschitz-stetig in y , d.h. für jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^d$ existiert ein $L > 0$ mit

$$\|f(x, y) - f(x, z)\| \leq L \|y - z\| \quad \forall x \in [a, b], y, z \in K.$$

Beweis: Aus dem mehrdimensionalen Mittelwertsatz der Differentialrechnung (siehe z.B. [NumerikWS1920, Lemma 4.1]) folgt, dass

$$f(\eta) - f(\zeta) = \int_0^1 f'(\eta + t(\zeta - \eta))(\zeta - \eta) dt \quad \text{für alle } \eta, \zeta \in [a, b] \times \mathbb{R}^d,$$

wobei $f'(\eta) \in \mathbb{R}^{d \times (d+1)}$ die bezüglich aller $d + 1$ Variablen gebildete Jacobi-Matrix bezeichnet. Für $\eta = (x, y)$ und $\zeta = (x, z)$ folgt damit

$$f(x, y) - f(x, z) = \int_0^1 f_y(x, y + t(z - y))(z - y) dt \quad \text{für alle } y, z \in \mathbb{R}^d.$$

Jede kompakte Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^d$ ist beschränkt und daher in einer hinreichend großen Kugel $B_R(0) \subset \mathbb{R}^d$ enthalten. Aufgrund der stetigen Differenzierbarkeit von f existiert ein $L > 0$ mit

$$\|f_y(x, y)\|_F \leq L \quad \text{für alle } x \in [a, b], y \in \overline{B_R(0)}.$$

Da für alle $y, z \in K$ die Verbindungslinie von y nach z in $B_R(0)$ verläuft, also $y + t(z - y) \in B_R(0)$ für alle $t \in [0, 1]$ gilt, und die Frobenius-Norm $\|\cdot\|_F$ mit der Euklid-Norm $\|\cdot\|$ verträglich ist, folgt damit

$$\|f(x, y) - f(x, z)\| \leq \int_0^1 \|f_y(x, y + t(z - y))(z - y)\| dt \leq L \|z - y\|$$

für alle $y, z \in K$. □

1.2.5 Erweiterung auf den Fall lokaler Lipschitz-Stetigkeit

Wir übertragen nun die Aussagen des Satzes von Picard-Lindelöf (Satz 1.8) auf die realistischere Annahme lokaler Lipschitz-Stetigkeit. Wir werden zeigen, dass

auch unter dieser realistischeren Annahme die Eindeutigkeit der Lösung garantiert ist und eine Lösung zumindest auf einem Teilintervall existiert. Dabei nutzen wir das wichtige Prinzip aus, dass die rechte Seite einer Differentialgleichungen außerhalb einer großen beschränkten Menge typischerweise keine Rolle mehr spielt, da die Lösung innerhalb gewisser Grenzen bleibt oder das durch die DGL beschriebene Modell außerhalb gewisser Grenzen sowieso seine Gültigkeit verliert. Mathematisch können wir dies insofern ausnutzen, dass eine beschränkte Lösung der ursprünglichen DGL auch noch Lösung jeder abgeänderten DGL ist, bei der die rechte Seite nur in solchen Werten abgeändert wurde, die von der Lösung gar nicht erreicht werden. Mit dem gleichen Argument werden wir in späteren Kapiteln numerische Verfahren zunächst unter einer unrealistisch restriktiven Generalvoraussetzung untersuchen und diese Ergebnisse dann auch auf realistische Situationen übertragen können.

Satz 1.12

Seien $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, $y_0 \in \mathbb{R}^d$ und

$$f: [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f: (x, y) \mapsto f(x, y)$$

sei stetig in (x, y) und (wie in Lemma 1.11 definiert) lokal und bzgl. x gleichmäßig Lipschitz-stetig in y .

Dann gilt:

(a) Für jedes nicht-leere Teilintervall $[a, \beta] \subseteq [a, b]$ existiert höchstens eine differenzierbare Funktion $y: [a, \beta] \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0$$

und diese ist stetig differenzierbar.

(b) Es existiert ein nicht-leeres Teilintervall $[a, \beta] \subseteq [a, b]$ und eine stetig differenzierbare Funktion $y: [a, \beta] \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0.$$

Beweis: (a) Angenommen $y, z: [a, \beta] \rightarrow \mathbb{R}^d$ sind zwei Lösungen des AWP, also

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0, \\ z'(x) &= f(x, z(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad z(a) = y_0. \end{aligned}$$

Da beide Funktionen stetig sind, existiert ein $C > 0$ mit

$$\|y(x)\|^2 \leq C \quad \text{und} \quad \|z(x)\|^2 \leq C \quad \text{für alle } x \in [a, \beta].$$

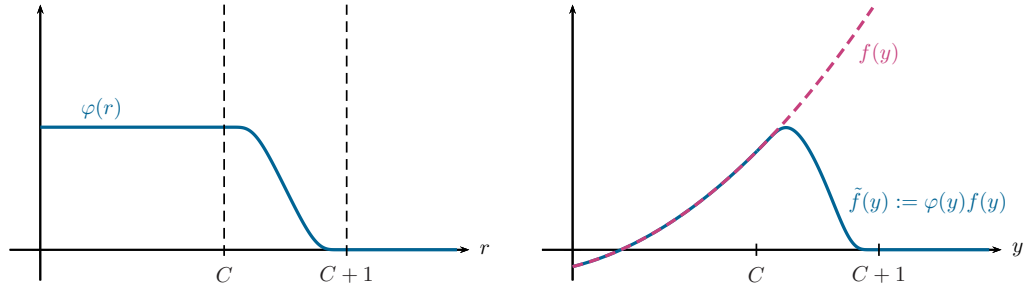


Abbildung 1.1: Unendlich oft differenzierbare Abschneidefunktion

Wir ersetzen die rechte Seite f des AWP durch eine abgeänderte rechte Seite $\tilde{f}(x, y) = f(x, y)\varphi(\|y\|^2)$, wobei φ eine beliebig oft stetig differenzierbare Funktion ist mit

$$\varphi(r) = \begin{cases} 1 & \text{für } r < C. \\ 0 & \text{für } r > C + 1. \end{cases}$$

Die Existenz einer solchen *Abschneidefunktion* (engl.: *cutoff function*, siehe Abbildung 1.1) wird in Übungsaufgabe 2.2 gezeigt. Dort zeigen wir auch, dass die abgeänderte rechte Seite $\tilde{f}(x, y)$ global und bzgl. x gleichmäßig Lipschitzstetig ist.

Sowohl y als auch z lösen nun das abgeänderte Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) = \tilde{f}(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0, \\ z'(x) &= f(x, z(x)) = \tilde{f}(x, z(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad z(a) = y_0. \end{aligned}$$

Da das abgeänderte AWP die Voraussetzungen von Satz 1.8 erfüllt, kann jedoch nur eine Lösung existieren, so dass $y(x) = z(x)$ für alle $x \in [a, \beta]$ gelten muss.

- (b) Mit einem beliebigen $C > \|y_0\|^2$ definieren wir wie in (a) die abgeänderte rechte Seite $\tilde{f}(x, y)$. Dann existiert nach Satz 1.8 eine stetig differenzierbare Funktion $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$, die das abgeänderte AWP

$$y'(x) = \tilde{f}(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0$$

löst. Da y stetig ist und $\|y(a)\|^2 = \|y_0\|^2 < C$ gilt, existiert ein nicht-leeres Intervall $[a, \beta] \subseteq [a, b]$ mit

$$\|y(x)\|^2 \leq C \quad \text{für alle } x \in [a, \beta].$$

Damit gilt

$$y'(x) = \tilde{f}(x, y(x)) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, \beta] \quad \text{und} \quad y(a) = y_0,$$

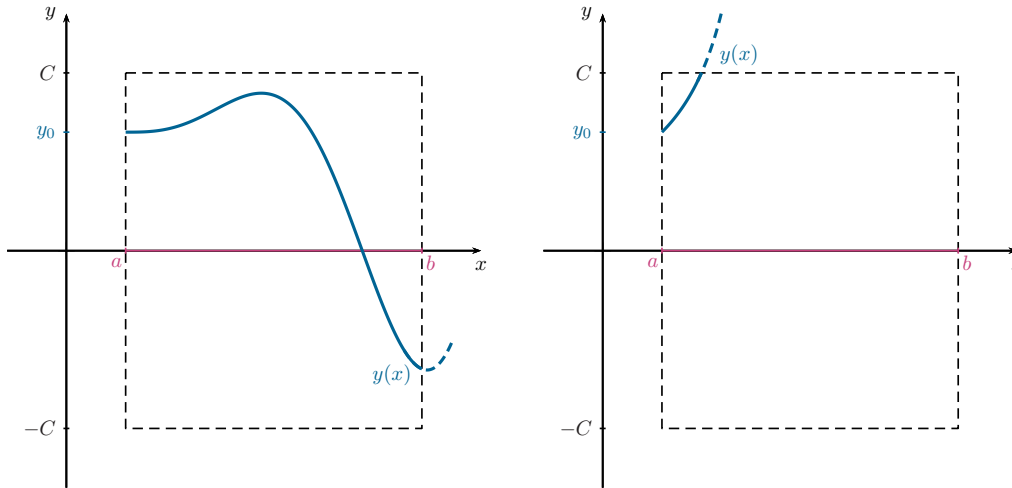


Abbildung 1.2: AWP-Lösung existiert bis zum Rand des Rechtecks $[a, b] \times [-C, C]^d$

so dass y auch das ursprüngliche AWP auf $[a, \beta]$ löst. □

Bemerkung 1.13

Man kann zeigen, dass für jedes $C > \|y_0\|_\infty$ das Intervall in Satz 1.12 (b) so groß gewählt werden kann, dass entweder $[a, \beta] = [a, b]$ oder $\|y(\beta)\|_\infty = C$. Es existiert also solange eine Lösung, bis der Lösungsgraph den Rand des Rechtecks $[a, b] \times [-C, C]^d$ erreicht, entweder bzgl. der x oder der y -Komponente, vgl. Abbildung 1.2.

Es kann dabei jedoch sein (wie im folgenden Beispiel gezeigt), dass die Lösung eine Singularität besitzt, und daher in der x -Komponente nie über ein gewisses Teilintervall hinauskommt sondern das Gebiet immer in der y -Richtung verlässt.

Beispiel 1.14

Betrachte das AWP

$$y' = y^2, \quad y(0) = 1.$$

Die rechte Seite $f(x, y) = y^2$ ist nur lokal aber nicht global Lipschitz-stetig. Offenbar löst

$$y(x) = \frac{1}{1-x}$$

das AWP auf jedem Intervall $[0, b]$ mit $b < 1$. Nach Satz 1.12 kann es daher auf $[0, 1)$ keine weitere Lösung geben, und damit auch keine Lösung auf Intervallen $[0, b]$ mit $b \geq 1$.

1.2.6 Stabilität der Lösung von Anfangswertproblemen

Nun untersuchen wir wie sich eine Störung der Anfangswerte auf die Lösung auswirkt. Dazu ist folgende Bemerkung nützlich.

Bemerkung 1.15

Ein Endwertproblem

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b] \quad \text{und} \quad y(b) = y_{\text{end}}$$

ist offenbar mit der Transformation $z(x) := y(a + b - x)$ äquivalent zu dem Anfangswertproblem

$$z'(x) = \tilde{f}(x, z(x)) \quad \forall x \in [a, b] \quad \text{und} \quad z(a) = y_{\text{end}}$$

mit $\tilde{f}(x, z(x)) := -f(a + b - x, z(x))$. Die transformierte rechte Seite \tilde{f} erfüllt die Voraussetzungen von Satz 1.8 bzw. Satz 1.12 genau dann, wenn die ursprüngliche rechte Seite f dies tut. Satz 1.8 und Satz 1.12 gelten also analog auch für Endwertprobleme.

Unter den Voraussetzungen von Satz 1.12 folgt damit insbesondere auch, dass zwei Lösungen einer Differentialgleichung $y, z : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$,

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \text{und} \quad z'(x) = f(x, z(x)) \quad \forall x \in [a, b],$$

die in einem einzelnen Punkt $x_0 \in [a, b]$ übereinstimmen, $y(x_0) = z(x_0)$, dann sogar in allen Punkten $x \in [a, b]$ übereinstimmen müssen.

Satz 1.16

Es gelten die Voraussetzungen von Satz 1.12. y und z seien zwei Lösungen der gleichen DGL, aber mit verschiedenen Anfangswerten, also

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) \quad \text{für alle } x \in [a, b], & y(a) &= y_0, \\ z'(x) &= f(x, z(x)) \quad \text{für alle } x \in [a, b], & z(a) &= z_0. \end{aligned}$$

$L > 0$ sei die Lipschitz-Konstante aus den Voraussetzungen von Satz 1.12 für eine kompakte Menge, die $y(x)$ und $z(x)$ für alle $x \in [a, b]$ enthält.

Dann gilt

$$\|y(x) - z(x)\| \leq e^{L(x-a)} \|y_0 - z_0\| \quad \forall x \in [a, b].$$

Beweis: Betrachte die Differenz

$$s(x) := \|y(x) - z(x)\|^2 = (y(x) - z(x))^T (y(x) - z(x)).$$

Es ist

$$\begin{aligned} s'(x) &= 2(y'(x) - z'(x))^T (y(x) - z(x)) \\ &= 2(f(x, y(x)) - f(x, z(x)))^T (y(x) - z(x)) \\ &\leq 2 \|f(x, y(x)) - f(x, z(x))\| \|y(x) - z(x)\| \\ &\leq 2L \|y(x) - z(x)\|^2 = 2Ls(x). \end{aligned}$$

Im Fall $y_0 = z_0$ gilt nach Satz 1.8 $y(x) = z(x)$ für alle $x \geq a$ und die Behauptung ist bewiesen. Anderenfalls muss nach Bemerkung 1.15 $y(x) \neq z(x)$ für alle $x \in [a, b]$ gelten. Für alle $x \in [a, b]$ gilt dann

$$\frac{d}{dx} \ln s(x) = \frac{s'(x)}{s(x)} \leq 2L,$$

also

$$\ln s(x) = \int_a^x \frac{d}{dt} \ln s(t) dt + \ln s(a) \leq 2L(x-a) + \ln s(a),$$

d.h.

$$\|y(x) - z(x)\|^2 = s(x) \leq e^{2L(x-a)} s(a) = e^{2L(x-a)} \|y_0 - z_0\|^2,$$

womit die Behauptung gezeigt ist. □

1.3 Erste Lösungsmethoden

In diesem Abschnitt entwickeln wir erste einfache Methoden zur Lösung von Anfangswertproblemen.

1.3.1 Das Richtungsfeld

Wir betrachten zunächst ein skalares AWP, in dem wir die Lösung $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ von

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}$$

suchen.

Wir können uns die DGL $y'(x) = f(x, y(x))$ durch das dazugehörige Richtungsfeld veranschaulichen: Zu jedem Punkt $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ zeichnen wir dabei einen Richtungspfeil mit Steigung $f(x, y)$, z.B. den Vektor $(1, f(x, y))^T$ (vgl. Abbildung 1.3). Eine Funktion löst die DGL genau dann, wenn an jedem Punkt durch den die Funktion geht, die Steigung der Funktion und die Steigung des Richtungspfeils übereinstimmen. Wir können die DGL zeichnerisch lösen, indem wir ausgehend vom Startwert (a, y_0) die Funktion passend zu den Richtungspfeilen zeichnen.

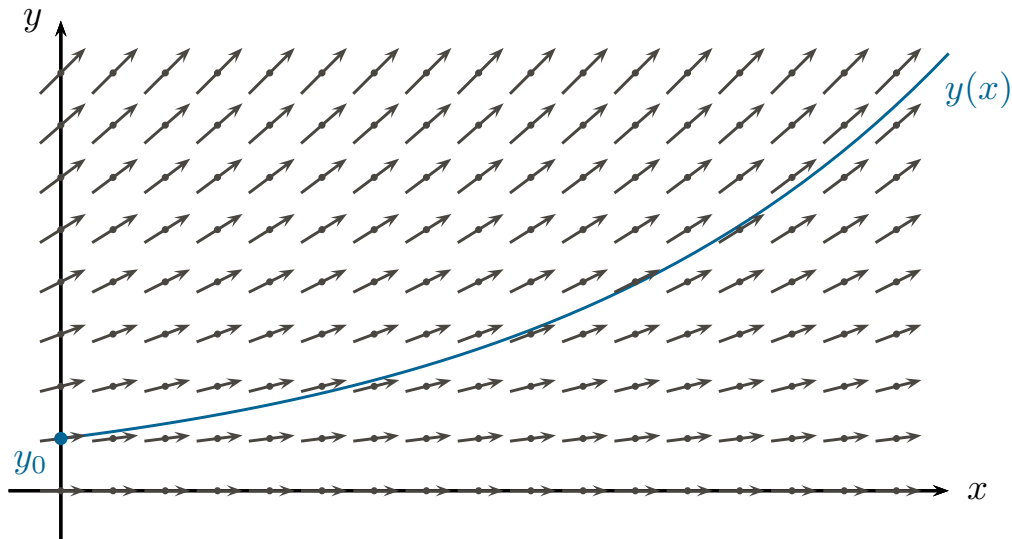


Abbildung 1.3: Richtungsfeld einer DGL und Lösung zu Anfangswert y_0

1.3.2 Explizites Euler-Verfahren

Basierend auf dieser zeichnerischen Idee gehen wir nun systematischer vor und entwickeln ein erstes numerisches Lösungsverfahren. Wir betrachten dabei gleich das allgemeine (vektorwertige) AWP, eine Funktion $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ zu finden mit

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d. \quad (1.6)$$

Zur numerischen Lösung diskretisieren wir das Intervall durch $n + 1$ Punkte

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b,$$

also unter Verwendung der *Schrittweite* $h_i := x_{i+1} - x_i$, $i = 0, \dots, n - 1$. Beginnend mit x_0 (wo wir die Lösung kennen, $y(x_0) = y_0$) berechnen wir nun sukzessiv Approximationen

$$y_i \approx y(x_i) \in \mathbb{R}^d.$$

Dabei bezeichnen wir hier und im Folgenden mit $y_0, y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}^d$ d -dimensionale Vektoren und nicht die Einträge eines Vektors.

Die einfachste Möglichkeit ist die *explizite Euler-Methode*, bei der wir (in jeder Komponente) die Steigung im aktuellen Punkt verwenden, um die Approximation

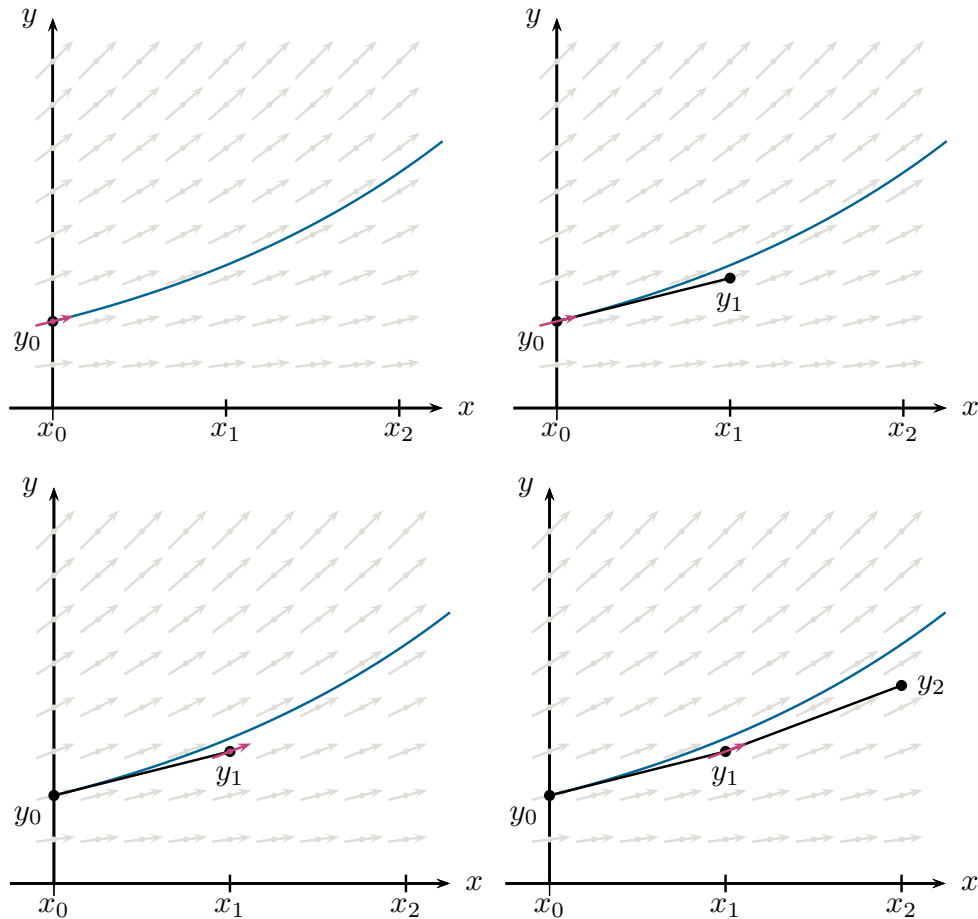


Abbildung 1.4: Beim expliziten Euler-Verfahren stimmt im linken Randpunkt jedes Schritts die Steigung mit dem Richtungsfeld überein.

im nächsten Punkt zu berechnen:

$$\begin{aligned}
 y_1 &:= y_0 + h_0 f(x_0, y_0) \\
 y_2 &:= y_1 + h_1 f(x_1, y_1) \\
 &\vdots \\
 y_{i+1} &:= y_i + h_i f(x_i, y_i), \\
 &\vdots \\
 y_n &:= y_{n-1} + h_{n-1} f(x_{n-1}, y_{n-1}).
 \end{aligned}$$

Dies entspricht im skalaren Fall dem zeichnerischen Lösen der DGL im Richtungsfeld durch eine stückweise lineare Funktion, bei der die Steigung der Lini-

ensegmente im *linken Punkt* mit dem Richtungsfeld übereinstimmt, vgl. Abbildung 1.4.

Das Verfahren entspricht auch gerade der Verwendung der Taylor-Näherung

$$y(x_{i+1}) \approx y(x_i) + h_i y'(x_i) = y(x_i) + h_i f(x_i, y(x_i)) \approx y_i + h_i f(x_i, y_i) = y_{i+1}$$

und wir erhalten dieses Verfahren auch durch Diskretisierung der DGL mit finiten Differenzen (Vorwärtsdifferenzenquotient):

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \approx y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)) \approx f(x_i, y_i).$$

Das explizite Euler-Verfahren wird deshalb auch Vorwärts-Euler-Verfahren genannt (engl.: *forward Euler*).

1.3.3 Implizites Euler-Verfahren

Bei der zeichnerischen Lösung der DGL im Richtungsfeld durch eine stückweise lineare Funktion, könnten wir auch versuchen die Liniensegmente so zu wählen, dass ihre Steigung im *rechten Punkt* mit dem Richtungsfeld übereinstimmt, vgl. Abbildung 1.5.

Dazu müsste y_{i+1} erfüllen, dass

$$y_{i+1} = y_i + h_i f(x_{i+1}, y_{i+1}). \quad (1.7)$$

Wir haben also keine explizite Formel zur Berechnung von y_{i+1} , sondern y_{i+1} ist nur implizit als Lösung von (1.7) definiert. Bei diesem *impliziten Euler-Verfahren* ist also beginnend mit y_0 in jedem Schritt zur Berechnung von $y_{i+1} \in \mathbb{R}^d$ aus $y_i \in \mathbb{R}^d$, ein (üblicherweise nicht-lineares) d -dimensionales Gleichungssystem zu lösen.

Wieder erhalten wir das Verfahren auch durch Diskretisierung der DGL mit finiten Differenzen, diesmal mit dem Rückwärtsdifferenzenquotienten:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \approx y'(x_{i+1}) = f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \approx f(x_{i+1}, y_{i+1}).$$

Entsprechend heißt das implizite Euler-Verfahren auch Rückwärts-Euler-Verfahren (engl.: *backward Euler*).

Bemerkung 1.17

Das Vorgehen beim impliziten Euler-Verfahren erscheint auf den ersten Blick völlig widersinnig. Es ist nicht gesichert, ob eine Lösung der impliziten Gleichung

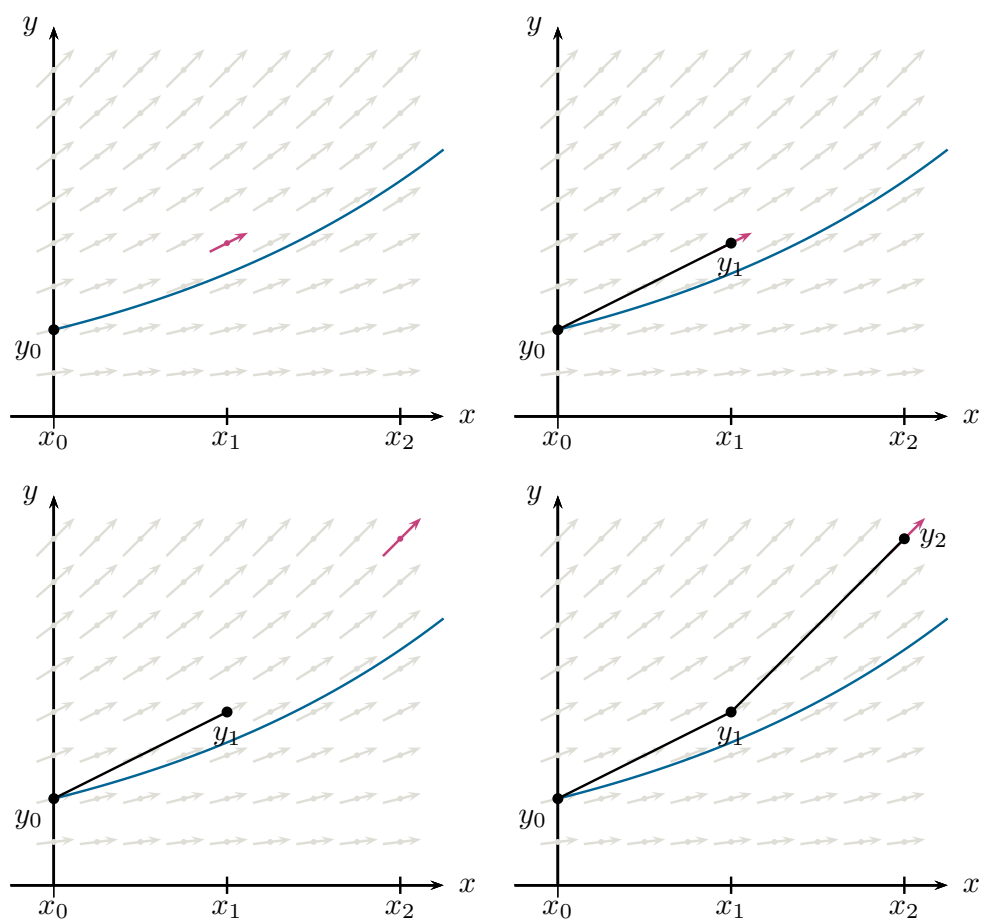


Abbildung 1.5: Beim impliziten Euler-Verfahren stimmt im rechten Randpunkt jedes Schritts die Steigung mit dem Richtungsfeld überein.

überhaupt existiert, und ob diese eindeutig ist. Tatsächlich führt z.B. ein Schritt des impliziten Euler-Verfahrens von $x_0 = 0$ auf $x_1 = 1$ für das skalare AWP $y' = y$ mit $y(0) = y_0 = 1$ auf die unlösbare Gleichung

$$y_1 = y_0 + y_1 = 1 + y_1$$

und für das skalare AWP $y' = y^2$ mit $y(0) = y_0 = 0$ auf die Gleichung

$$y_1 = hy_1^2,$$

die offenbar zwei Lösungen $y_1 = 0$ und $y_1 = \frac{1}{h}$ besitzt. Selbst wenn die eindeutige Lösbarkeit sichergestellt ist, bleibt die Schwierigkeit, dass im Allgemeinen zur Lösung nicht-linearer Gleichungssysteme keine global konvergenten numerischen Verfahren bekannt sind. Und selbst wenn auch diese globale Konvergenz sichergestellt werden könnte, bliebe der hohe Rechenaufwand des numerischen Verfahrens. Z.B. müsste für die Anwendung des im Allgemeinen nur lokal konvergenten Newton-Verfahrens in jedem Schritt des impliziten Eulerverfahrens eine Newton-Iteration durchgeführt werden, bei der wiederum jeder Iterationsschritt die Lösung eines $d \times d$ -dimensionalen linearen Gleichungssystems erfordert.

Wir werden jedoch sehen, dass wir all diese Probleme tatsächlich in den Griff bekommen, und dass implizite Verfahren für manche (die sogenannten steifen) Differentialgleichungen so große Vorteile besitzen, dass sie den erhöhten Aufwand wert sind.

1.3.4 Weitere explizite und implizite Methoden

Die anschauliche Idee, stückweise lineare Funktionen ins Richtungsfeld zu zeichnen, führt auf viele weitere explizite und implizite Methoden:

Implizite Mittelpunktsregel Anstatt die Liniensegmente so zu zeichnen, dass ihre Steigung im linken (expliziten Euler) oder rechten (implizites Euler) Randpunkt mit dem Richtungsfeld übereinstimmt, können wir auch fordern, dass die Steigung im *Mittelpunkt* der Segmente mit dem Richtungsfeld übereinstimmen soll.

Dazu bestimmen wir also erst $y_{i+1/2}$ durch Lösung der Gleichung

$$y_{i+1/2} = y_i + \frac{h_i}{2} f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, y_{i+1/2}\right)$$

und setzen dann

$$y_{i+1} := y_i + h_i f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, y_{i+1/2}\right),$$

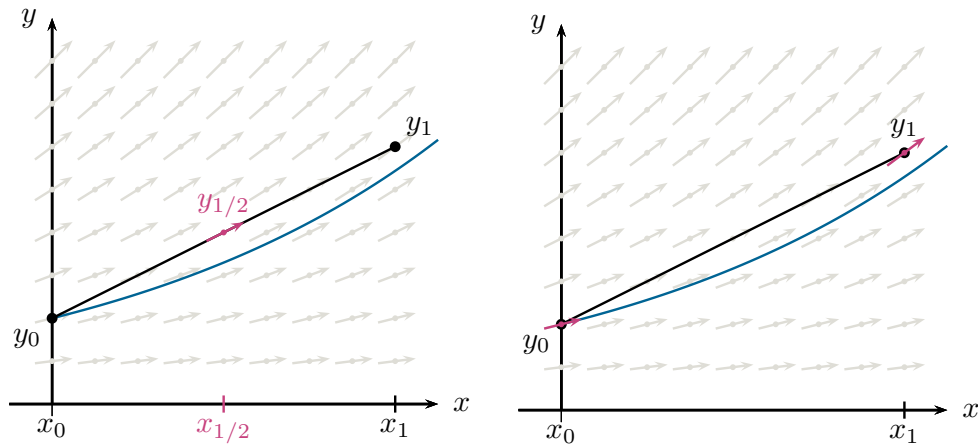


Abbildung 1.6: Bei der impliziten Mittelpunktsformel (links) stimmt im Mittelpunkt des Schritts die Steigung mit dem Richtungsfeld überein. Beim Crank-Nicolson-Verfahren (rechts) stimmt sie mit dem Mittelwert des linken und rechten Randpunkts überein. In diesem einfachen Beispiel (aber natürlich nicht im Allgemeinen) stimmt das Ergebnis beider Verfahren überein.

vgl. die linke Seite von Abbildung 1.6.

Dies ist die sogenannte *implizite Mittelpunktsregel*, die auch als Kombination eines halben impliziten Eulerschritts mit einem halben expliziten Eulerschritt interpretiert (und implementiert) werden kann.

Crank-Nicolson-Methode Eine weitere Methode erhalten wir durch die Forderung, dass die Steigung der Liniensegmente mit dem Mittelwert der Steigungen im Richtungsfeld im linken und rechten Randpunkt des Segments übereinstimmen soll:

$$y_{i+1} = y_i + h_i \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})}{2},$$

vgl. die rechte Seite von Abbildung 1.6. Dies ist die *Crank-Nicolson-Methode*.

Verfahren von Runge Wir können aus der Idee der implizite Mittelpunktsregel und des Crank-Nicolson-Verfahren auch expliziten Methoden entwickeln. Um wie bei der impliziten Mittelpunktsregel vorzugehen, können wir versuchen, eine explizite Formel für $y_{i+1/2}$ zu finden. Dafür setzen wir

$$y_{i+1/2} := y_i + \frac{h_i}{2} f(x_i, y_i)$$

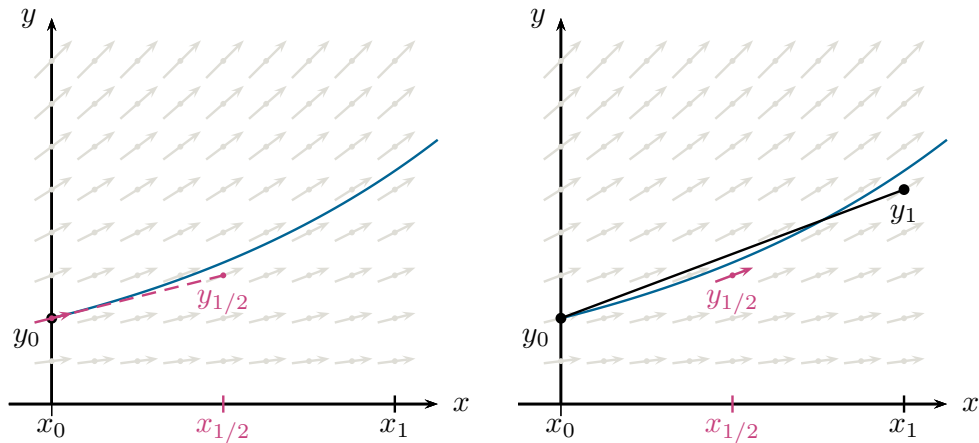


Abbildung 1.7: Beim Verfahren von Runge wird zuerst ein approximativer Mittelpunkt berechnet, und dessen Richtungsfeldsteigung als Steigung des Liniensegments verwendet.

und wählen dann

$$y_{i+1} := y_i + h_i f\left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, y_{i+1/2}\right),$$

vgl. Abbildung 1.7.

Dies ist das *Verfahren von Runge*. Man beachte, dass dies nicht nur die Kombination zweier Halbschritte des expliziten Euler-Verfahrens ist.

Verfahren von Heun Eine explizite Alternative zur Crank-Nicolson Methode erhalten wir, indem wir y_{i+1} auf der rechten Seite der Crank-Nicolson-Formel durch einen Schritt mit dem expliziten Euler-Verfahren approximieren:

$$\begin{aligned} \eta &:= y_i + h_i f(x_i, y_i) \\ y_{i+1} &:= y_i + h_i \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \eta)}{2}, \end{aligned}$$

vgl. Abbildung 1.8.

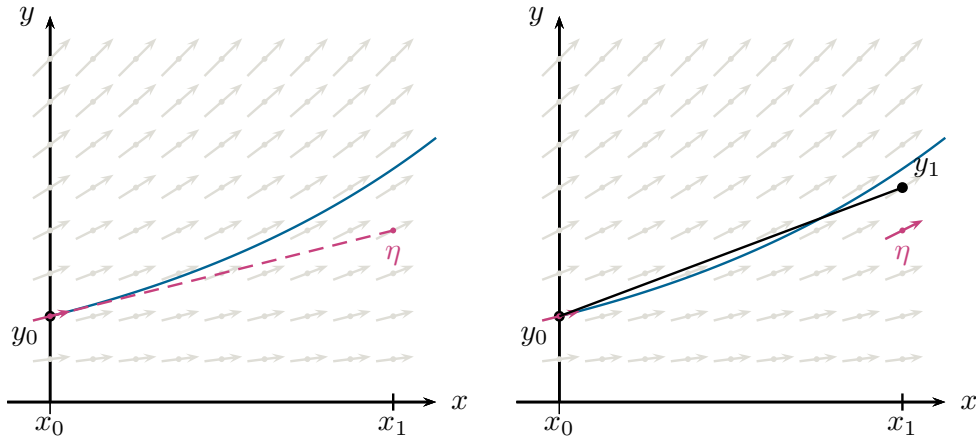


Abbildung 1.8: Beim Verfahren von Heun wird zuerst ein approximativer rechter Randpunkt berechnet, und dann der Mittelwert der Richtungsfeldsteigungen im linken und approximativen rechten Randpunkt als Steigung des Liniensegments verwendet. In diesem einfachen Beispiel (aber natürlich nicht im Allgemeinen) stimmt das Ergebnis mit dem Verfahren von Runge überein.

1.3.5 Einschritt- und Mehrschrittverfahren

Wir betrachten auch in den folgenden Abschnitten Verfahren, die ein AWP der Form

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \text{für } x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d,$$

lösen, indem beginnend mit $a = x_0$ (wo wir die Lösung $y(x_0) = y_0$ kennen), sukzessive Approximationen $y_i \approx y(x_i) \in \mathbb{R}^d$ auf einem Gitter

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

bestimmt werden. Dabei werden wir nur unendlich oft differenzierbare rechte Seiten $f \in C^\infty := C^\infty([a, b] \times \mathbb{R}^d)^d$ betrachten.

Wir unterscheiden dabei die folgenden Begriffe.

- **Einschrittverfahren** (ESV): Nur der vorherige Punkt y_i (sowie x_i, x_{i+1} und die rechte Seite der DGL f) wird zur Berechnung von y_{i+1} verwendet. Ein ESV ist also mathematisch eine Iterationsvorschrift

$$(x_i, y_i, x_{i+1}, f) \mapsto y_{i+1} := \Psi(x_i, y_i, x_{i+1}, f)$$

mit einer Funktion

$$\Psi : [a, b] \times \mathbb{R}^d \times [a, b] \times C^\infty \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad \text{wobei } C^\infty := C^\infty([a, b] \times \mathbb{R}^d)^d.$$

- **Mehrschrittverfahren** (MSV): Mehrere vorherige Punkte $y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-m}$ (sowie $x_{i+1}, x_i, \dots, x_{i-m}$ und die rechte Seite der DGL f) werden zur Berechnung von y_{i+1} verwendet. Ein $m + 1$ -schrittiges MSV ist also mathematisch eine Iterationsvorschrift

$$(x_{i-m}, y_{i-m}, \dots, x_i, y_i, x_{i+1}, f) \mapsto y_{i+1} := \Psi(x_{i-m}, y_{i-m}, \dots, x_i, y_i, x_{i+1}, f)$$

mit einer Funktion

$$\Psi: [a, b] \times \mathbb{R}^d \times \dots \times [a, b] \times \mathbb{R}^d \times [a, b] \times C^\infty \rightarrow \mathbb{R}^d.$$

Ein $m + 1$ -schrittiges Verfahren benötigt zusätzlich noch eine **Startprozedur** zur Berechnung der ersten m Werte y_1, \dots, y_m (z.B. Anwendungen eines ESV oder MSV mit weniger Schritten).

Die Methoden in Abschnitt 1.3 sind allesamt Einschrittverfahren. Mehrschrittverfahren werden wir erst in Abschnitt 1.7 behandeln.

1.4 Runge-Kutta-Verfahren

1.4.1 Eine unrealistische Generalvoraussetzung

In diesem Abschnitt sei $[a, b] \subset \mathbb{R}$, $b > a$ stets ein festes Intervall. Wir werden in dieser Vorlesung nur Anfangswertprobleme

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \text{für } x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d, \quad (1.8)$$

mit unendlich oft differenzierbarer rechter Seite $f \in C^\infty$ betrachten. Insbesondere ist f also nach Lemma 1.11 lokal Lipschitz-stetig.

Zur Motivation des weiteren Vorgehens erinnern wir daran, dass wir die theoretischen Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen in Satz 1.8 zunächst für globale Lipschitz-stetige f bewiesen hatten (was bereits einfachste Beispiele nicht erfüllen). Hieraus folgten dann aber auch Ergebnisse für den praxisrelevante Fall lokaler Lipschitz-Stetigkeit. Die Kernidee dazu war, dass wir eine nur lokal Lipschitz-stetige rechte Seite f (außerhalb des für eine gegebene Lösung relevanten Bereichs) glatt abschneiden und somit (ohne Auswirkungen auf die Lösung) zu einer global Lipschitz-stetigen rechten Seite \tilde{f} transformieren konnten. Zur Untersuchung numerischer Lösungsmethoden gehen wir ähnlich vor und werden *zunächst* eine sehr unrealistisch restriktive Generalvoraussetzung annehmen, und *danach* mit einem Abschneideargument die erhaltenen Ergebnisse auch auf den praxisrelevanten allgemeinen Fall übertragen.

Definition 1.18

Wir sagen, dass eine Funktion

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad f : (x, y) \mapsto f(x, y)$$

die **Generalvoraussetzung** erfüllt (und schreiben $f \in GV$), falls f unendlich oft differenzierbar ist und f sowie alle partiellen Ableitungen (beliebiger Ordnung und beliebiger Kombination von x - und y_i -Ableitungen) beschränkt sind, d.h. für jeden Multiindex $\alpha = (\alpha_x, \alpha_{y_1}, \dots, \alpha_{y_d}) \in \mathbb{N}_0^{d+1}$ existiert eine Konstante $C_\alpha > 0$, so dass

$$\|\partial^\alpha f(x, y)\| \leq C_\alpha \quad \text{für alle } (x, y) \in [a, b] \times \mathbb{R}^d.$$

Lemma 1.19

Erfüllt f die Generalvoraussetzung so gilt:

- (a) Für jedes $y_0 \in \mathbb{R}^d$ existiert genau eine differenzierbare Lösung des AWP (1.8). Zwei Lösungen y, z zu verschiedenen Anfangswerten $y(a)$ und $z(a)$ erfüllen

$$\|y(x) - z(x)\| \leq e^{L(x-a)} \|y(a) - z(a)\| \quad \forall x \in [a, b],$$

wobei $L := \max_{x \in [a, b], y \in \mathbb{R}^d} \|f_y(x, y)\|_F$.

- (b) Jede Lösung von $y'(x) = f(x, y(x))$ ist unendlich oft differenzierbar auf $[a, b]$. Alle Ableitungen der Lösung sind beschränkt, wobei die Schranken nur von f abhängen, d.h. für alle $f \in GV$ und $k \in \mathbb{N}$

$$\exists C_k > 0 : \max_{x \in [a, b]} \|\partial^k y(x)\| \leq C_k \quad \forall y \in C^\infty([a, b]) \quad \text{mit } y'(x) = f(x, y(x)).$$

Beweis: (a) Für $f \in GV$ gilt insbesondere, dass alle Einträge in $f_y(x, y) \in \mathbb{R}^{d \times d}$ beschränkte Funktionen von (x, y) sind, so dass das Maximum in der Definition von L existiert. Mit Lemma 1.11 folgt daraus, dass für alle $x \in [a, b]$ und $y, z \in \mathbb{R}^d$

$$\|f(x, z) - f(x, y)\| = \left\| \int_0^1 f_y(x, y + t(z-y))(z-y) dt \right\| \leq L \|z-y\|.$$

Die Generalvoraussetzung impliziert also globale Lipschitz-Stetigkeit, so dass (a) aus Satz 1.8 und Satz 1.16 folgt.

- (b) Sei $f \in GV$. Erfüllt eine differenzierbare Funktion $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ die DGL $y'(x) = f(x, y(x))$, so ist y' stetig und

$$\max_{x \in [a, b]} \|y'(x)\| \leq \max_{(x, \eta) \in [a, b] \times \mathbb{R}^{d+1}} \|f(x, \eta)\| =: C_1.$$

Da y und f stetig differenzierbar sind, ist dies auch y' als Hintereinanderausführung von f mit der Funktion $x \mapsto g(x) := (x, y(x))$, also $y \in C^2([a, b])$. Aus $y'' = f'(g(x))g'(x)$ folgt außerdem die Beschränktheit von y'' mit einer nur von f abhängigen Schranke. Durch Induktion folgt, dass $\partial^k y(x)$ eine endliche Summe von endlichen Produkten von partiellen Ableitungen $\partial^\alpha f(x, y(x))$ und $\partial^l y(x)$ mit $1 \leq l < k$ ist. $\partial^k y(x)$ ist daher mit einer nur von f abhängigen Schranke beschränkt und wiederum stetig differenzierbar. \square

Wir betonen noch einmal, dass die Generalvoraussetzung in der Praxis üblicherweise nicht erfüllt ist und bereits von einfachsten Beispielen (wie $y' = ry$) verletzt wird. Es ist jedoch einfacher, die Konvergenzanalyse der betrachteten Verfahren *zunächst* unter der Annahme $f \in GV$ zu führen und erst danach auf den praxisrelevanten allgemeinen Fall ohne Generalvoraussetzung zu erweitern. In Abschnitt 1.4.6 werden wir zeigen, dass die im Folgenden erhaltenen Ergebnisse auch für unendlich oft differenzierbare rechte Seiten gelten (ohne weitere Beschränktheitsbedingungen), falls eine Lösung auf dem betrachteten Intervall existiert.

1.4.2 Konsistenz und Konvergenz

Konsistenz von Einschrittverfahren Ein ESV beginnt im ersten Schritt mit dem korrekten Startwert $y_0 = y(x_0)$ und berechnet daraus $y_1 \approx y(x_1)$. Ab dem zweiten Schritt verwendet das Verfahren daher im Allgemeinen fehlerbehaftete Approximationen $y_i \approx y(x_i)$ als Ausgangswert zur Berechnung von y_{i+1} . Die Güte der nächsten Näherung $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$ wird davon abhängen, wie gut der Schritt mit korrekten Ausgangswerten gewesen wäre und wie groß der Effekt des falschen Ausgangswerts ist, vgl. Abbildung 1.9. Ersteres messen wir mit dem im Folgenden definierten Begriff der Konsistenz, zweiteres werden wir mit dem Stabilitätsresultat Satz 1.16 abschätzen.

Definition 1.20

Ein Einschrittverfahren Ψ heißt **konsistent mit Konsistenzordnung** $p \in \mathbb{N}$, falls für jedes $f \in GV$ Konstanten $C > 0$, $\hat{h} > 0$ existieren, sodass

$$\sup_{x_i \in [a, b-h], y_i \in \mathbb{R}^d} \|y_{i+1} - y(x_i + h)\| \leq Ch^{p+1} \quad \forall 0 < h < \hat{h},$$

wobei y die Lösung des AWP

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b], \quad y(x_i) = y_i$$

ist und y_{i+1} sich durch Anwendung des ESV auf den korrekten Wert $y_i = y(x_i)$ ergibt, d.h. $y_{i+1} := \Psi(x_i, y(x_i), x_i + h, f)$.

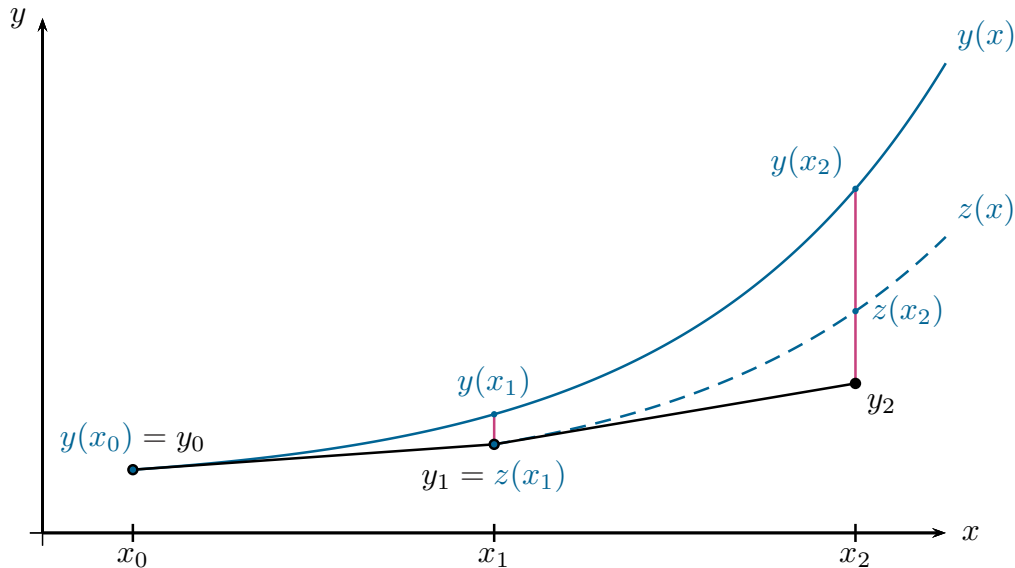


Abbildung 1.9: Fehlerfortpflanzung eines Einschrittverfahrens

Wir können dies auch äquivalent schreiben als

$$\limsup_{h \rightarrow 0} \sup_{x_i \in [a, b-h], y_i \in \mathbb{R}^d} \frac{\|y_{i+1} - y(x_i + h)\|}{h^{p+1}} < \infty.$$

In der Literatur ist es auch üblich, ein ESV bereits dann *konsistent* zu nennen, falls es

$$\lim_{h \rightarrow 0} \sup_{x_i \in [a, b-h], y_i \in \mathbb{R}^d} \frac{\|y_{i+1} - y(x_i + h)\|}{h} = 0$$

erfüllt. Wir werden in dieser Vorlesung jedoch nur ESV mit mindestens Konsistenzordnung 1 betrachten.

Konvergenz von Einschrittverfahren Wir betonen noch einmal, dass in Definition 1.20 $y(x_i) = y_i$ vorausgesetzt wird. Die Konsistenz misst also den *lokalen* Fehler eines einzelnen Schrittes des ESV, wenn die letzte Iterierte noch fehlerfrei war. Ein ESV mit Konsistenzordnung p macht in jedem Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ einen lokalen Fehler der Größenordnung h^{p+1} , der dann den Startwert des nächsten Schrittes verfälscht. Wir erwarten daher, dass sich die lokalen Fehler über alle $n = \frac{b-a}{h}$ Intervalle mindestens aufaddieren werden, so dass der *globale Fehler* in der Größenordnung h^p liegen wird. Der folgende Satz zeigt, dass dies tatsächlich der Fall ist.

Satz 1.21

Sei $f \in GV$, $y_0 \in \mathbb{R}^d$ und $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ die Lösung des AWP

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \forall x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d.$$

Wir betrachten die Anwendung eines ESV mit Höchstschrittweite $h > 0$,

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b, \quad h_i := x_i - x_{i-1} \leq h \quad (i = 1, \dots, n).$$

Besitzt das ESV Konsistenzordnung p , so gilt

$$\max_{i=0, \dots, n} \|y_i - y(x_i)\| \leq \frac{e^{L(b-a)} - 1}{L} Ch^p \quad \forall 0 < h < \hat{h}, \quad (1.9)$$

wobei $C, \hat{h} > 0$ die Konstanten aus der Definition der Konsistenzordnung und L die Lipschitz-Konstante aus der Generalvoraussetzung ist.

Beweis: Für die Höchstschrittweite gelte $h < h_0$. Da wir mit dem korrekten Startwert $y_0 = y(x_0)$ beginnen, gilt für den Fehler nach dem ersten Schritt

$$\delta_1 := \|y_1 - y(x_1)\| \leq Ch_0^{p+1}.$$

Im allen weiteren Schritten, bei denen wir y_{i+1} aus y_i für $i \geq 1$ berechnen, gibt es zwei Fehlerquellen:

- (i) Die Berechnung von y_{i+1} aus y_i mit dem Einschrittverfahren entspricht der Anwendung des Verfahrens auf das (wegen $f \in GV$ eindeutig lösbare) AWP

$$z'(x) = f(x, z(x)), \quad z(x_i) = y_i \in \mathbb{R}^d, \quad (1.10)$$

vgl. noch einmal Abbildung 1.9. Dabei macht das Verfahren den Fehler

$$\|z(x_{i+1}) - y_{i+1}\| \leq Ch_i^{p+1}.$$

- (ii) Aus den letzten Schritten resultiert ein Fehler $\delta_i := \|y(x_i) - y_i\|$, so dass die Lösung $z(x)$ von (1.10) nicht mit $y(x)$ übereinstimmt. Nach Satz 1.16 gilt aber

$$\|y(x_{i+1}) - z(x_{i+1})\| \leq e^{L(x_{i+1}-x_i)} \|y(x_i) - y_i\| = e^{Lh_i} \delta_i.$$

Insgesamt erhalten wir also für alle $i \geq 1$

$$\begin{aligned} \delta_{i+1} = \|y_{i+1} - y(x_{i+1})\| &\leq \|y_{i+1} - z(x_{i+1})\| + \|z(x_{i+1}) - y(x_{i+1})\| \\ &\leq Ch_i^{p+1} + e^{Lh_i} \delta_i \end{aligned}$$

und mit $\delta_0 := 0$ gilt dies auch für $i = 0$.

Wir zeigen nun durch vollständige Induktion²

$$\delta_i \leq \frac{e^{L(x_i-a)} - 1}{L} Ch^p \quad (1.11)$$

Der Induktionsanfang $i = 0$ ist trivial. Im Induktionsschritt verwenden wir (1.11) für ein $i \geq 0$ und erhalten

$$\begin{aligned} \delta_{i+1} &\leq Ch_i^{p+1} + e^{Lh_i} \delta_i \leq Ch_i h^p + e^{Lh_i} \frac{e^{L(x_i-a)} - 1}{L} Ch^p \\ &\leq \frac{e^{L(x_{i+1}-a)} - e^{Lh_i} + Lh_i}{L} Ch^p \leq \frac{e^{L(x_{i+1}-a)} - 1}{L} Ch^p, \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt $e^{Lh_i} \geq 1 + Lh_i$ verwenden. Damit ist per Induktion (1.11) für alle $i \geq 0$ und somit die Behauptung (1.9) bewiesen. \square

Bemerkungen und Beispiele zur Konsistenz von Einzschrittverfahren

Bemerkung 1.22

Im Folgenden verwenden wir im Zusammenhang mit Einzelschrittverfahren die Landau-Notation $O(h^p)$, $o(h)$, etc., mit der Konvention, dass die darin vorkommenden Konstanten von der rechten Seite $f \in GV$, nicht jedoch vom Ausgangspunkt $x_i \in [a, b]$, $y_i \in \mathbb{R}^d$ abhängen dürfen.

Mit dieser Konvention ist also ein Einzschrittverfahren konsistent mit Ordnung p , falls aus $y_i = y(x_i)$ folgt, dass

$$y(x_{i+1}) - y_{i+1} = O(h^{p+1}).$$

Beispiel 1.23

(a) **Explizites Euler-Verfahren:** Für $y(x_i) = y_i$ erhalten wir durch Taylorentwicklung

$$\|y(x_{i+1}) - y(x_i) - hy'(x_i)\| \leq \frac{h^2}{2} \max_{\xi \in [x_i, x_{i+1}]} \|y''(\xi)\| \leq \frac{h^2}{2} C_2$$

²Zur Motivation dieser Induktionsbehauptung beachte, dass sich für äquidistante Schrittweiten $h_i = h$ durch Anwendung der geometrischen Summenformel und $e^{Lh} \geq 1 + Lh$ ergibt:

$$\begin{aligned} \delta_i &\leq Ch^{p+1} + e^{Lh} \delta_{i-1} \leq Ch^{p+1} + e^{Lh} (Ch^{p+1} + e^{Lh} \delta_{i-2}) \\ &\leq \dots \leq (1 + e^{Lh} + e^{2Lh} + \dots + e^{(i-1)Lh}) Ch^{p+1} = \frac{(e^{Lh})^i - 1}{e^{Lh} - 1} Ch^{p+1} \leq \frac{e^{L(x_i-a)} - 1}{L} Ch^p. \end{aligned}$$

mit einer (aufgrund unserer Generalvoraussetzung nur von der rechten Seite f abhängigen) Konstante C_2 . Es ist also mit obiger Konvention

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + O(h^2) \\ &= y(x_i) + hf(x_i, y_i) + O(h^2) = y_{i+1} + O(h^2) \end{aligned}$$

und das explizite Euler-Verfahren besitzt somit Konsistenzordnung 1.

(b) **Implizites Euler-Verfahren:** Für $y(x_i) = y_i$ erhalten wir wiederum durch Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} y(x_i) &= y(x_{i+1}) - hy'(x_{i+1}) + O(h^2) \\ &= y(x_{i+1}) - hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + O(h^2). \end{aligned}$$

Zusammen mit $y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1})$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \|y_{i+1} - y(x_{i+1})\| &= \|y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}) - y(x_{i+1})\| \\ &= h \|f(x_{i+1}, y_{i+1}) - f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))\| + O(h^2) \\ &\leq hL \|y_{i+1} - y(x_{i+1})\| + O(h^2). \end{aligned}$$

Für hinreichend kleine h gilt also

$$\|y_{i+1} - y(x_{i+1})\| = \frac{1}{1 - hL} O(h^2) = O(h^2).$$

Das implizite Euler-Verfahren besitzt also Konsistenzordnung 1.

Bemerkung 1.24

In vielen Bereichen der Numerik ersetzt man ein kompliziertes Problem durch ein leichter zu lösendes approximatives Problem und hofft, dass die Lösung des approximativen Problems eine gute Näherung für die Lösung des komplizierten Problems ist. Dies lässt sich oft sicherzustellen, indem man zeigt dass sich das Problem beliebig genau approximieren lässt (Konsistenz) und dass ein vorhandener Restfehler durch die Problemlösung nicht übermäßig verstärkt wird (Stabilität). Plakatativ lässt sich das schreiben als

$$\text{Konsistenz} + \text{Stabilität} = \text{Konvergenz}.$$

Konsistenz wird dabei oft darüber definiert, wie gut eine Lösung des wahren Problems das approximierende Problem erfüllt. Auch Definition 1.20 kann in diesem Sinne verstanden werden, denn wir messen damit, wie gut eine wahre Lösung y der DGL $y'(x) = f(x, y(x))$ die Iterationsvorschrift des ESV erfüllt

$$y(x_{i+1}) \approx \Phi(x_i, y(x_i), x_{i+1}, f).$$

1.4.3 Runge-Kutta-Verfahren

Wir betrachten nun einen allgemeinen Ansatz um Einschrittverfahren hoher Konsistenzordnung zu konstruieren. Im ersten Schritt (mit $y_0 = y(x_0)$ und Schrittweite $h := x_1 - x_0$) soll gelten

$$y_1 \approx y(x_1) = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} y'(t) dt = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(t, y(t)) dt.$$

Durch Approximation des Integrals auf der rechten Seite durch eine Quadraturformel erhalten wir

$$\int_{x_0}^{x_1} f(t, y(t)) dt \approx h \sum_{j=1}^s b_j f(x_0 + c_j h, \eta_j).$$

Die Quadraturformel sollte zumindest konstante Funktionen exakt integrieren, deshalb fordern wir

$$\sum_{j=1}^s b_j = 1. \quad (1.12)$$

Die c_j heißen *Knoten*, b_j *Gewichte* und s heißt *Stufenzahl* des Verfahrens.

Dieser Ansatz verallgemeinert die Ideen aus Abschnitt 1.3.4, indem nun ein gewichtetes Mittel aus s unterschiedlichen Steigungen im Richtungsfeld an den Punkten $(x_0 + c_j h, \eta_j)$, $j = 1, \dots, s$ verwendet wird. Für das explizite Euler-Verfahren ist $s = 1$, $c_1 = 0$ und $\eta_1 = y_0$.

b_j und c_j sollten aus den Knoten und Gewichten eines möglichst guten Quadraturverfahrens bestimmt werden. Zur Wahl der η_j fordern wir, dass

$$\eta_j \approx y(x_0 + c_j h) = y_0 + \int_{x_0}^{x_0 + c_j h} y'(t) dt = y_0 + \int_{x_0}^{x_0 + c_j h} f(t, y(t)) dt.$$

Wir wenden wiederum ein Quadraturverfahren für die Integrale auf der rechten Seite an und verwenden dabei die gleichen Quadraturpunkte wie für das erste Integral, d.h. für $j = 1, \dots, s$ verwenden wir

$$\int_{x_0}^{x_0 + c_j h} f(t, y(t)) dt \approx h \sum_{l=1}^s a_{jl} f(x_0 + c_l h, \eta_l).$$

Wiederum sollten die Quadraturformeln zumindest konstante Funktionen exakt integrieren, deshalb fordern wir (für alle $j = 1, \dots, s$)

$$\sum_{l=1}^s a_{jl} = c_j. \quad (1.13)$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Wenden wir dieses Verfahren in jedem Schritt an, so erhalten wir das in Algorithmus 1 zusammengefasste allgemeine *Runge-Kutta-Verfahren*. In dieser Vorlesung folgen wir dabei der auch in der Literatur üblichen Konvention, den Begriff Runge-Kutta-Verfahren nur zu verwenden, wenn die natürlichen Minimalforderungen (1.12) und (1.13) erfüllt sind. Wir werden in Satz 1.28 zeigen, dass dadurch mindestens Konsistenzordnung 1 (und damit nach Satz 1.21 Konvergenz gegen die wahre AWP-Lösung) sichergestellt ist.

Algorithm 1 Runge-Kutta Verfahren (η -Formulierung)

Gegeben $a_{jl}, b_j, c_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, s, l = 1, \dots, s$ mit

$$\sum_{j=1}^s b_j = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{l=1}^s a_{jl} = c_j \quad \text{für alle } j = 1, \dots, s.$$

function $y_{i+1} = \Psi(x_i, y_i, x_{i+1}, f)$

Setze $h_i := x_{i+1} - x_i$ und bestimme $\eta_j \in \mathbb{R}^d, j = 1, \dots, s$ aus

$$\eta_j = y_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} f(x_i + c_l h_i, \eta_l), \quad j = 1, \dots, s. \quad (1.14)$$

Setze $y_{i+1} := y_i + h_i \sum_{j=1}^s b_j f(x_i + c_j h_i, \eta_j)$.

return $y_{i+1} \in \mathbb{R}^d$.

end function

Runge-Kutta-Verfahren können explizit oder implizit sein. Besitzt A strikte untere Dreiecksgestalt, d.h.

$$a_{jl} = 0 \quad \text{für } l \geq j,$$

dann ist $\eta_1 = y_i$, η_2 kann aus η_1 berechnet werden, usw. (explizite Runge-Kutta-Verfahren). Ansonsten ist (1.14) ein System aus sd Gleichungen für die sd unbekannt Einträge der d -dimensionalen Vektoren $\eta_j \in \mathbb{R}^d, j = 1, \dots, s$ (implizite Runge-Kutta-Verfahren).

Die Koeffizienten $A = (a_{jl}) \in \mathbb{R}^{s \times s}, b = (b_j) \in \mathbb{R}^s$ und $c = (c_j) \in \mathbb{R}^s$ eines Runge-Kutta-Verfahren lassen sich im sogenannten *Butcher Tableau* zusammenfassen:

$$\begin{array}{c|ccc} c & A & & \\ \hline & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \dots & b_s \end{array}$$

Die im RKV verwendeten Steigungen

$$k_j := f(x_i + c_j h, \eta_j),$$

erfüllen das nichtlineare Gleichungssystem

$$k_j = f(x_i + c_j h, y_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l), \quad j = 1, \dots, s. \quad (1.15)$$

Die daraus resultierende RKV-Formulierung fassen wir in Algorithmus 2 zusammen. Für explizite Verfahren oder wenn im impliziten Fall die eindeutige Lösbarkeit der Gleichungssysteme (1.14) und (1.15) sichergestellt ist, sind die beiden Formulierungen offenbar äquivalent.

Algorithm 2 Runge-Kutta Verfahren (k -Formulierung)

Gegeben $a_{jl}, b_j, c_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, s, l = 1, \dots, s$ mit

$$\sum_{j=1}^s b_j = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{l=1}^s a_{jl} = c_j \quad \text{für alle } j = 1, \dots, s.$$

function $y_{i+1} = \Psi(x_i, y_i, x_{i+1}, f)$

Setze $h_i := x_{i+1} - x_i$ und bestimme $k_j \in \mathbb{R}^d, j = 1, \dots, s$ aus

$$k_j = f(x_i + c_j h, y_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l), \quad j = 1, \dots, s. \quad (1.16)$$

Setze $y_{i+1} := y_i + h_i \sum_{j=1}^s b_j k_j$.

return $y_{i+1} \in \mathbb{R}^d$.

end function

Beispiel 1.25

Für das explizite Euler-Verfahren

$$y_{i+1} = y_i + h_i f(x_i, y_i)$$

ist $b_1 = 1, c_1 = 0$ und $\eta_1 = y_i$, also $a_{11} = 0$.

Für das implizite Euler-Verfahren

$$y_{i+1} = y_i + h_i f(x_{i+1}, y_{i+1})$$

ist $b_1 = 1, c_1 = 1$, und $\eta_1 = y_{i+1}$ erfüllt $\eta_1 = y_i + h_i f(x_{i+1}, \eta_1)$, also ist $a_{11} = 1$.

Wir erhalten also die folgenden Butcher Tableaus:

$$\text{explizites Euler-Verfahren: } \begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array} \quad \text{implizite Euler-Verfahren: } \begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Die Butcher Tableaus der anderen Verfahren aus Abschnitt 1.3 leiten wir in den Übungen her.

1.4.4 Wohldefiniertheit impliziter Methoden

Die Vorteile impliziter Runge-Kutta-Verfahren werden wir erst in Abschnitt 1.5 kennenlernen. Wir zeigen aber an dieser Stelle schon, dass das nicht-lineare Gleichungssystem (1.14) für hinreichend kleine Schrittweiten eindeutig lösbar ist.

Satz 1.26

Zu jeder rechten Seite f (die die Generalvoraussetzung erfüllt) und jeder Runge-Kutta-Methode (A, b, c) existiert eine Schrittweite $h_0 > 0$, sodass für jedes $x \in [a, b]$, $y \in \mathbb{R}^d$ und $0 < h \leq h_0$ das Gleichungssystem für die η_j

$$\eta_j = y + h \sum_{l=1}^s a_{jl} f(x + c_l h, \eta_l), \quad j = 1, \dots, s, \quad (1.17)$$

eindeutig lösbar ist.

Beweis: Wir schreiben das Gleichungssystem (1.17) als Fixpunktgleichung

$$\eta = \Phi(\eta)$$

mit

$$\eta := \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_s \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{ds}, \quad \Phi(\eta) := \begin{pmatrix} \Phi_1(\eta) \\ \vdots \\ \Phi_s(\eta) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{ds}$$

und

$$\Phi_j(\eta) := y + h \sum_{l=1}^s a_{jl} f(x + c_l h, \eta_l) \in \mathbb{R}^d.$$

Es ist

$$\begin{aligned} \Phi'(\eta) &= \begin{pmatrix} \Phi'_1(\eta) \\ \vdots \\ \Phi'_s(\eta) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{ds \times ds}, \\ \Phi'_j(\eta) &= \left(\frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta_1}(\eta) \quad \dots \quad \frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta_s}(\eta) \right) \in \mathbb{R}^{d \times ds}, \\ \frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta_l}(\eta) &= h a_{jl} f_y(x + c_l h, \eta_l) \in \mathbb{R}^{d \times d}. \end{aligned}$$

Aufgrund unserer Generalvoraussetzung und der Äquivalenz aller Normen auf dem $\mathbb{R}^{d \times d}$ existiert ein $C > 0$, so dass für alle $j, l = 1, \dots, d$ und $\eta \in \mathbb{R}^{ds}$ jeder Eintrag der Matrix $\frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta_l}(\eta)$ durch Ch beschränkt ist. Damit ist jeder Eintrag von $\Phi'(\eta) \in \mathbb{R}^{ds \times ds}$ durch Ch beschränkt und damit

$$\|\Phi'(\eta)\|_F \leq dsCh \quad \text{für alle } h > 0, \eta \in \mathbb{R}^{ds}.$$

Für hinreichend kleines h_0 gilt daher

$$\|\Phi'(\eta)\|_F \leq \frac{1}{2} \quad \text{für alle } 0 < h \leq h_0, \eta \in \mathbb{R}^{ds}$$

und Φ ist eine Kontraktion, da

$$\begin{aligned} \|\Phi(\eta^{(2)}) - \Phi(\eta^{(1)})\| &= \left\| \int_0^1 \Phi'(\eta^{(1)} + t(\eta^{(2)} - \eta^{(1)}))(\eta^{(2)} - \eta^{(1)}) dt \right\| \\ &\leq \frac{1}{2} \|\eta^{(2)} - \eta^{(1)}\|. \end{aligned}$$

Aus dem Banachschen Fixpunktsatzes (Satz 1.5) folgt daher für $0 < h \leq h_0$ die eindeutige Lösbarkeit der Fixpunktgleichung $\Phi(\eta) = \eta$ und damit die eindeutige Lösbarkeit des Gleichungssystems (1.17). \square

Bemerkung 1.27

Die eindeutige Lösbarkeit des nicht-linearen Gleichungssystems (1.16) in der k -Formulierung eines RKV in Algorithmus 2 folgt für hinreichend kleine Schrittweiten $h_i > 0$ analog.

1.4.5 Runge-Kutta-Ordnungsbedingungen

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass jede Wahl der Runge-Kutta-Koeffizienten (A, b, c) für hinreichend kleine Schrittweiten auf lösbare implizite (oder sogar explizite) Gleichungssysteme führt, das Verfahren also für jede Wahl der Koeffizienten durchführbar ist. Jetzt wenden wir uns der Frage zu, wie die Koeffizienten gewählt werden müssen, um ein Verfahren möglichst hoher Ordnung zu erhalten.

Satz 1.28

Seien $A = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,s}$, $b = (b_i)_{i=1,\dots,s}$ und $c = (c_i)_{i=1,\dots,s}$ die Koeffizienten eines Runge-Kutta-Verfahrens.

(a) Aus

$$\sum_{j=1}^s b_j = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{k=1}^s a_{jk} = c_j \quad (j = 1, \dots, s)$$

folgt, dass das Verfahren (mindestens) Konsistenzordnung 1 besitzt.

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

(b) Das Verfahren hat genau dann mindestens Konsistenzordnung 2, wenn zusätzlich gilt, dass

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j = \frac{1}{2}.$$

(c) Das Verfahren hat genau dann mindestens Konsistenzordnung 3, wenn zusätzlich gilt, dass

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j^2 = \frac{1}{3} \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^s b_j \sum_{k=1}^s a_{jk} c_k = \frac{1}{6}.$$

Beweis: Wegen Übungsaufgabe 4.2 genügt es, die Behauptung für *autonome* Differentialgleichungen

$$y' = f(y), \quad f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (1.18)$$

zu beweisen. Sei also y eine Lösung der DGL (1.18) mit $f \in GV$, $x_i \in [a, b]$, $y_i = y(x_i)$, $h = x_{i+1} - x_i$ und y_{i+1} die durch das Runge-Kutta-Verfahren erzielte Näherung.

Zur Vereinfachung der Schreibweise lassen wir im Folgenden bei der Funktion f und ihren Ableitungen das Argument weg, wenn es „ (y_i) “ lautet, d.h. wir schreiben $f := f(y_i) \in \mathbb{R}^d$,

$$f' := f'(y_i) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d) = \mathbb{R}^{d \times d} \quad \text{und} \quad f'' := f''(y_i) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^d, \mathcal{L}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)).$$

Außerdem schreiben wir die Anwendung von $f'' = f''(y_i)$ auf zwei Vektoren $v, w \in \mathbb{R}^d$ als $v^T f'' w$.

Nach Übungsaufgabe 3.2 gilt mit dieser Schreibweise

$$y(x_{i+1}) = y_i + hf + 1/2h^2 f' f + 1/6h^3 (f^T f'' f + (f')^2 f) + O(h^4).$$

Wir entwickeln nun die Näherung y_{i+1} ebenfalls bis $O(h^4)$. Zunächst erhalten wir aus der RKV-Vorschrift und $f \in GV$

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h \sum_{j=1}^s b_j f(\eta_j) \\ &= y_i + h \sum_{j=1}^s b_j \left(f + f'(\eta_j - y_i) + \frac{1}{2}(\eta_j - y_i)^T f''(\eta_j - y_i) + O(\|\eta_j - y_i\|^3) \right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Wir benötigen also eine Entwicklung der η_j bis auf $O(h^3)$. Dazu verwenden wir immer wieder

$$\eta_j = y_i + h \sum_{k=1}^s a_{jk} f(\eta_k), \quad \sum_{k=1}^s a_{jk} = c_j. \quad (1.20)$$

Zuerst erhalten wir damit (wegen $f \in GV$)

$$\eta_j = y_i + O(h), \quad \forall j = 1, \dots, s,$$

und daher

$$f(\eta_j) = f + O(\|\eta_j - y_i\|) = f + O(h) \quad \forall j = 1, \dots, s. \quad (1.21)$$

Einsetzen von (1.21) in (1.20) führt nun für alle $j = 1, \dots, s$ zu

$$\eta_j - y_i = h \sum_{k=1}^s a_{jk} f(\eta_k) = h \sum_{k=1}^s a_{jk} f + O(h^2) = hc_j f + O(h^2).$$

Ein weiteres Mal verwenden wir (1.20) und kombinieren es mit

$$f(\eta_k) = f + f'(\eta_k - y_i) + O(\|\eta_k - y_i\|^2) = f + f'(\eta_k - y_i) + O(h^2).$$

So erhalten wir (für alle $j = 1, \dots, s$)

$$\begin{aligned} \eta_j &= y_i + h \sum_{k=1}^s a_{jk} f(\eta_k) = y_i + h \sum_{k=1}^s a_{jk} (f + f'(\eta_k - y_i) + O(h^2)) \\ &= y_i + h \sum_{k=1}^s a_{jk} (f + f'(hc_k f + O(h^2)) + O(h^2)) \\ &= y_i + hc_j f + h^2 f' f \sum_{k=1}^s a_{jk} c_k + O(h^3). \end{aligned}$$

Dies können wir nun in (1.19) einsetzen und es folgt (mit $\sum_{j=1}^s b_j = 1$)

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h \sum_{j=1}^s b_j \left(f + f'(\eta_j - y_i) + \frac{1}{2}(\eta_j - y_i)^T f''(\eta_j - y_i) + O(h^3) \right) \\ &= y_i + hf + hf' \sum_{j=1}^s b_j (\eta_j - y_i) + \frac{1}{2} h \sum_{j=1}^s b_j (\eta_j - y_i)^T f''(\eta_j - y_i) + O(h^4) \\ &= y_i + hf + hf' \sum_{j=1}^s b_j \left(hc_j f + h^2 f' f \sum_{k=1}^s a_{jk} c_k + O(h^3) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} h \sum_{j=1}^s b_j (hc_j f + O(h^2))^T f''(hc_j f + O(h^2)) + O(h^4) \\ &= y_i + hf + h^2 f' f \sum_{j=1}^s b_j c_j + h^3 (f')^2 f \sum_{j=1}^s b_j \sum_{k=1}^s a_{jk} c_k \\ &\quad + \frac{1}{2} h^3 f^T f'' f \sum_{j=1}^s b_j c_j^2 + O(h^4). \end{aligned}$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Die Behauptung folgt nun aus dem Vergleich der Entwicklungen von $y(x_{i+1})$ und y_{i+1} . \square

Bemerkung 1.29

- (a) Mit Satz 1.28 lässt sich die Ordnung der Verfahren in 1.3.4 bestimmen (vgl. Übungsaufgabe 6.1).
- (b) Mit einem systematischeren Vorgehen (oder symbolischen Berechnungen eines Computeralgebrasystems) können Ordnungsbedingungen für beliebig hohe Ordnungen bestimmt werden. Man kann außerdem zeigen, dass Methoden beliebig hoher Ordnung konstruiert werden können.
- (c) Aus Übungsaufgabe 4.3 folgt, dass die Ordnung eines s -stufigen Runge-Kutta-Verfahrens höchstens $2s$ ist. In Abschnitt 1.5.5 zeigen wir, dass explizite Runge-Kutta-Verfahren höchstens Ordnung s haben.
- (d) Die in der Praxis wohl am häufigsten verwendete explizite Runge-Kutta-Methode ist eine 6-stufige Methode 5. Ordnung von Dormand und Prince, die durch folgendes Tableau gegeben ist:

0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$					
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$				
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$			
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$		
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	
	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$

Das Verfahren wird typischerweise zur adaptiven Schrittweitensteuerung (wie in Übungsaufgabe 5.4) mit der folgenden 7-stufigen Methode 4. Ordnung kombiniert. Dabei verwendet die 7-stufige Methode als Stufen die 6 Stufen sowie das Ergebnis des obigen Verfahrens, so dass zur Stufenberechnung kein zusätzlicher Rechenaufwand anfällt und keine zusätzlichen Auswertungen von f benötigt werden (FSAL, First Same As Last). Diese Kombination ist unter dem Namen `dopri5` oder `ode45` in vielen Programmpaketen der Standard-

löser für Anfangswertprobleme.

0									
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$								
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$							
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$						
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$					
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$				
1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$			
	$\frac{5179}{57600}$	0	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{393}{640}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{187}{2100}$	$\frac{1}{40}$		

1.4.6 Erweiterung auf den Fall ohne Generalvoraussetzung

Wir haben in den letzten Abschnitten die Wohldefiniiertheit und Konvergenz von Einschrittverfahren nur unter der für praktische Anwendungen viel zu restriktiven Generalvoraussetzung untersucht, dass die rechte Seite des Anfangswertproblems und ihre partiellen Ableitungen jeder Ordnung beschränkt sind. In Beispiel 1.9 und Bemerkung 1.13 haben wir gesehen, dass es für rechte Seiten mit unbeschränkter Ableitung vorkommen kann, dass das Problem nur auf einem Teil des betrachteten Intervalls lösbar ist. Wir können aber die Konvergenzresultate aus den letzten Abschnitten übertragen, falls die Lösbarkeit auf dem gesamten Intervall sichergestellt ist, also insbesondere dann, wenn gemäß Satz 1.8 f global und bzgl. x gleichmäßig Lipschitz-stetig ist oder wenn gemäß Satz 1.12 das Intervall $[a, b]$ hinreichend klein ist.

Satz 1.30

Seien $a, b \in \mathbb{R}$, $b > a$ und $y_0 \in \mathbb{R}^d$. Auf das Anfangswertproblem

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \text{für } x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d,$$

mit beliebig oft stetig differenzierbarer rechter Seite

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$$

werde ein Runge-Kutta-Verfahren auf dem Gitter

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

mit Höchstschriftweite $h = \max_{i=1, \dots, n} (x_i - x_{i-1})$ angewandt.

Falls eine Lösung $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ dieses AWP existiert, so gilt:

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

(a) Ist das RKV explizit und besitzt Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$, so erfüllen die Iterierten

$$\max_{i=0,\dots,n} \|y_i - y(x_i)\| = O(h^p).$$

(b) Ist das RKV implizit und besitzt Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$, so existiert für hinreichend kleine $h > 0$ eine Lösung der impliziten Gleichungen (1.14), sodass für die zugehörigen Iterierten gilt:

$$\max_{i=0,\dots,n} \|y_i - y(x_i)\| = O(h^p).$$

Beweis: Wir gehen wie im Beweis von Satz 1.12 vor. Sei $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^d$ die Lösung des Anfangswertproblems. Sei

$$C := 1 + \max_{x \in [a, b]} \|y(x)\|^2.$$

Wir ersetzen die rechte Seite f des AWP durch eine abgeänderte rechte Seite $\tilde{f}(x, \eta) = f(x, \eta)\varphi(\|\eta\|^2)$ mit der Abschneidefunktion φ aus Übungsaufgabe 2.2. Dann ist \tilde{f} weiterhin beliebig oft stetig differenzierbar, und wegen

$$\tilde{f}(x, \eta) = \begin{cases} f(x, \eta) & \text{für } \|\eta\|^2 \leq C, \\ 0 & \text{für } \|\eta\|^2 > C + 1, \end{cases}$$

erfüllt \tilde{f} die Generalvoraussetzung.

Dann ist y auch die (nach Satz 1.8 eindeutige) Lösung des Anfangswertproblems

$$y'(x) = \tilde{f}(x, y(x)) \quad \text{für } x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d. \quad (1.22)$$

Bei Anwendung des RKV auf (1.22) sind für hinreichend kleine Schrittweiten die Iterierten $\tilde{y}_0, \dots, \tilde{y}_n$ wohldefiniert und

$$\max_{i=0,\dots,n} \|\tilde{y}_i - y(x_i)\| = O(h^p).$$

Insbesondere ist, für hinreichend kleine $h > 0$, $\|\tilde{y}_i\|^2 \leq C$. Außerdem folgt wie im Beginn vom Beweis von Satz 1.28 aus der Beschränktheit von \tilde{f} , dass für alle Zwischenwerte $\tilde{\eta}_j$ ($j = 1, \dots, s$) des i -ten Schrittes des auf das abgeänderte AWP angewandten Verfahrens gilt:

$$\tilde{\eta}_j = \tilde{y}_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} \tilde{f}(x + c_l h_i, \tilde{\eta}_l) = \tilde{y}_i + O(h).$$

1.5. NUMERIK STEIFER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Für hinreichend kleine $h > 0$ gilt daher auch $\|\tilde{\eta}_j\|^2 \leq C$ in jedem Schritt des Verfahrens und es folgt, dass

$$\begin{aligned}\tilde{\eta}_j &= \tilde{y}_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} \tilde{f}(x + c_l h_i, \tilde{\eta}_l) = \tilde{y}_i + h_i \sum_{l=1}^s a_{jl} f(x + c_l h_i, \tilde{\eta}_l), \\ \tilde{y}_{i+1} &= \tilde{y}_i + h_i \sum_{j=1}^s b_j \tilde{f}(x_i + c_j h_i, \tilde{\eta}_j) = \tilde{y}_i + h_i \sum_{j=1}^s b_j f(x_i + c_j h_i, \tilde{\eta}_j).\end{aligned}$$

Die $\tilde{\eta}_j$ lösen also auch das Gleichungssystem zum nicht abgeänderten AWP und die damit bestimmten Iterierten y_i zum nicht abgeänderten AWP stimmen mit den Iterierten \tilde{y}_i zum abgeänderten AWP überein. \square

Bemerkung 1.31

Durch Satz 1.30 ist für implizite Verfahren nur garantiert, dass eine Lösung der impliziten Gleichungen zu konvergenten Iterierten führt. Die Lösung ist jedoch im Allgemeinen nicht eindeutig, wie das folgende (schon in Bemerkung 1.17 verwendete) Beispiel zeigt.

Das skalare AWP

$$y'(x) = y^2(x), \quad y(0) = 0,$$

besitzt offenbar die (nach Satz 1.12 eindeutige) Lösung $y(x) = 0$. Bei Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens ergibt sich im ersten Schritt mit Schrittweite $h > 0$

$$y_1 = h y_1^2,$$

was für jedes $h > 0$ die zwei Lösungen $y_1 = 0$ und $y_1 = 1/h$ besitzt. Die impliziten Gleichungen sind also nicht eindeutig lösbar und es existieren Lösungen der impliziten Gleichung, für die die zugehörigen Iterierten nicht gegen die Lösung des AWP konvergieren. Wie in Satz 1.30 kann man jedoch zeigen, dass sich bei Lösung der impliziten Gleichungen mit einer Fixpunktiteration wie im Beweis vom Satz 1.26 mit Startwerten $(\eta_1, \dots, \eta_s) = (y_i, \dots, y_i)$ eine zu einem konvergenten Verfahren führende Lösung ergibt, da sich die selben Fixpunktiterierten wie bei Anwendung auf ein modifiziertes AWP ergeben.

1.5 Numerik steifer Differentialgleichungen

1.5.1 Steife Differentialgleichungen

Bei dem Pendel aus Übungsaufgabe 3.4 waren implizite Verfahren (trotz gleicher Konsistenzordnung) den expliziten weit überlegen. Differentialgleichungen,

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

in denen dieser Effekt auftritt, werden *steif* genannt. Steif ist dabei kein mathematisch präzise definierter Begriff, sondern wird anschaulich für solche Differentialgleichungen verwendet, bei denen naheliegende Standardverfahren (z.B. explizite Runge-Kutta-Verfahren) keine (oder nur für extrem kleine Schrittweiten) zufriedenstellenden Ergebnisse liefern. Betrachten wir das einfache Beispiel

$$y'(x) = \lambda y, \quad y(0) = 1, \quad \lambda < 0.$$

Offenbar ist die Lösung $y(x) = e^{\lambda x}$. Aufgrund der Annahme $\lambda < 0$ konvergiert die Lösung mit exponentieller Geschwindigkeit gegen Null.

Durch Anwendung des expliziten Euler-Verfahrens mit Schrittweite h auf dieses AWP erhalten wir

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h\lambda y_0 = (1 + h\lambda), \\ y_2 &= y_1 + h\lambda y_1 = (1 + h\lambda)y_1 = (1 + h\lambda)^2, \\ &\vdots \\ y_n &= (1 + h\lambda)^n. \end{aligned}$$

Wegen $\lambda < 0$ hat die so erzeugte Folge $(y_n)_{n \in \mathbb{N}}$ die folgenden Eigenschaften:

$$\left\{ \begin{array}{ll} y_n > 0 \text{ und } y_n \rightarrow 0 & \text{für } 1 + h\lambda \geq 0, \\ y_n \text{ alterniert im Vorzeichen, } y_n \rightarrow 0 & \text{für } 0 > 1 + h\lambda > -1, \\ y_n \text{ alterniert zwischen } +1 \text{ und } -1 & \text{für } 1 + h\lambda = -1, \\ y_n \text{ alterniert im Vorzeichen, } |y_n| \rightarrow \infty & \text{für } 1 + h\lambda < -1. \end{array} \right.$$

Nur für $1 + h\lambda > -1$ (d.h. $h < -2/\lambda$) zeigen die Approximationen also das korrekte Langzeitverhalten und konvergieren gegen Null, und für $h > -1/\lambda$ oszillieren die Approximationen. Für dieses AWP mit negativem λ liefert die explizite Euler Methode also nur für kleine Schrittweiten brauchbare Ergebnisse. Ist λ sehr negativ, so sind die Ergebnisse nur für extrem kleine Schrittweiten brauchbar.

Betrachten wir zum Vergleich das implizite Euler-Verfahren:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h\lambda y_1 \implies y_1 = (1 - h\lambda)^{-1}, \\ y_2 &= y_1 + h\lambda y_2 \implies y_2 = (1 - h\lambda)^{-1}y_1 = (1 - h\lambda)^{-2}, \\ &\vdots \\ y_n &= (1 - h\lambda)^{-n}. \end{aligned}$$

Für jede Schrittweite h ist $1 - h\lambda > 1$. y_n bleibt also stets positiv und konvergiert gegen Null für $n \rightarrow \infty$.

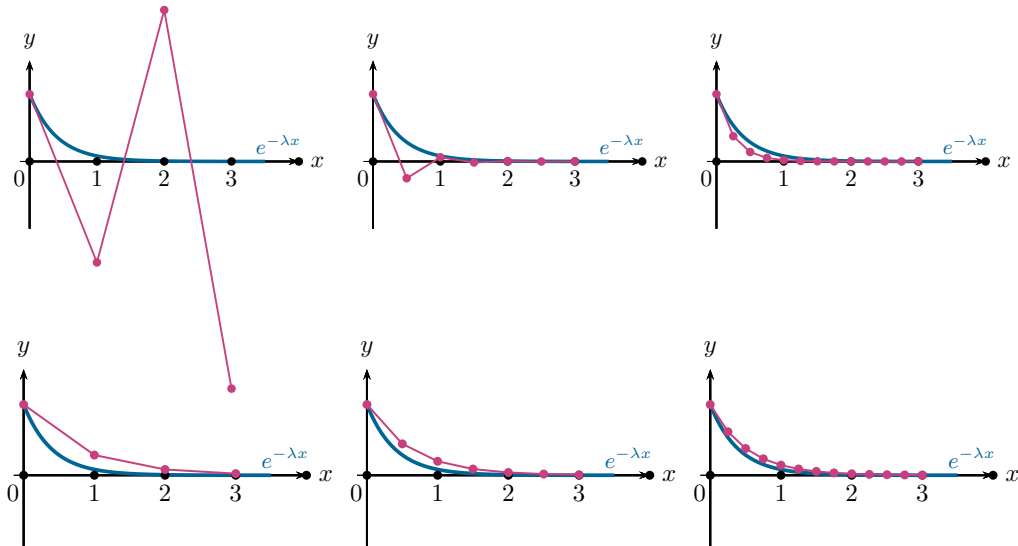


Abbildung 1.10: Explizites (obere Reihe) und implizites Euler (untere Reihe) angewendet auf die Testgleichung $y' = \lambda y$ mit $\lambda = -2,5$ und $h = 1, h = \frac{1}{2}$ und $h = \frac{1}{4}$.

Implizites und explizites Euler-Verfahren besitzen die gleiche Konsistenzordnung. Für $h \rightarrow 0$ konvergieren sie asymptotisch gleich schnell gegen die wahre Lösung. Jedoch gibt es zwei Eigenschaften der wahren Lösung, Positivität und Abfallverhalten, die nur die Iterierten des impliziten Euler-Verfahrens für alle Schrittweiten zeigen. Die Iterierten des expliziten Euler-Verfahrens haben diese Eigenschaften erst für hinreichend kleine Schrittweiten und für sehr negative λ ist dies erst für extrem kleine Schrittweiten erfüllt. Abbildung 1.10 zeigt dieses Verhalten für ein moderat negatives $\lambda = -2,5$.

Das betrachtete AWP ist also *steif* in dem Sinne, dass die wahre Lösung gewisse Eigenschaften besitzt (Abfallverhalten und Positivität), die so wichtig sind, dass man nur solche numerischen Approximationen akzeptieren wird, die diese Eigenschaften auch besitzen.

1.5.2 Die Testgleichung

Wir motivieren nun heuristisch, dass sich das im letzten Abschnitt beobachtete Verhalten auch in allgemeinen Anfangswertproblemen wiederfinden lässt.

Betrachten wir das allgemeine AWP

$$y'(x) = f(x, y) \quad \forall x \in [a, b], \quad y(a) = y_0 \in \mathbb{R}^d.$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Gemäß Übungsaufgabe 4.2 können wir es in eine autonome Gleichung umformen. Außerdem können wir durch Verschiebung annehmen, dass $x_0 = 0$.

$$y'(x) = f(y), \quad y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^d$$

Für kleine Änderungen in x wird sich die Lösung nur wenig verändern. Wir erwarten also, dass sich y lokal wie die Lösung der linearisierten Gleichung

$$y'(x) = f(y) \approx f(y_0) + f'(y_0)(y - y_0), \quad y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^d,$$

verhält.

Wir nehmen noch an, dass sich die Shifts $f(y_0)$ und y_0 durch geeignete Transformationen eliminieren lassen. Lokal lässt sich das AWP dann durch die Lösung der Gleichung

$$y'(x) = My$$

mit einer Matrix $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$ approximieren. Ist M diagonalisierbar mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_d$, dann ist dies äquivalent zu d skalaren Testgleichungen

$$y'_j = \lambda_j y_j, \quad j = 1, \dots, d.$$

Die Eigenwerte λ_j werden im Allgemeinen komplex sein. Offenbar gelten aber alle Ergebnisse dieses Kapitels auch genauso für komplexwertige Gleichungen.

Insgesamt scheint es also erstrebenswert, Methoden zu konstruieren, die nicht nur möglichst schnell konvergieren, sondern auch qualitativ richtiges Verhalten zeigen für die komplexe skalare Testgleichung

$$y' = \lambda y, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Aufgrund der Linearität der Gleichung können wir dabei den Anfangswert auf $y(0) = 1$ setzen.

1.5.3 Die Stabilitätsfunktion

Nach Abschnitt 1.5.1 gilt für die Iterierten des expliziten und impliziten Euler-Verfahrens bei Anwendung auf die Testgleichung (mit $\lambda < 0$)

$$\begin{aligned} y_i^{(\text{expl})} &= (1 + h\lambda)^i y_0 = (R^{(\text{expl})}(h\lambda))^i y_0, \\ y_i^{(\text{impl})} &= (1 - h\lambda)^{-i} y_0 = (R^{(\text{impl})}(h\lambda))^i y_0, \end{aligned}$$

wobei

$$R^{(\text{expl})}(\zeta) := (1 + \zeta) \quad \text{und} \quad R^{(\text{impl})}(\zeta) = (1 - \zeta)^{-1}.$$

Offenbar gilt das auch für $\lambda \in \mathbb{C}$. Wie gut die Verfahren für die Testgleichung funktionieren, lässt sich also vollständig mit der Funktion $R(\zeta)$ beschreiben. Gleiches gilt für allgemeine Runge-Kutta-Verfahren.

Definition 1.32

Seien

$$A = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,s} \in \mathbb{R}^{s \times s}, \quad b = (b_i)_{i=1,\dots,s} \in \mathbb{R}^s, \quad \text{und } c = (c_i)_{i=1,\dots,s} \in \mathbb{R}^s$$

die Koeffizienten eines Runge-Kutta-Verfahrens. Sei $\mathbb{1} := (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$ und wir bezeichnen mit $I \in \mathbb{R}^{s \times s}$ die Einheitsmatrix.

Für $\zeta \in \mathbb{C}$ definieren wir die **Stabilitätsfunktion**

$$R(\zeta) := 1 + \zeta b^T (I - \zeta A)^{-1} \mathbb{1} \in \mathbb{C}$$

falls $I - \zeta A$ invertierbar ist. Ansonsten schreiben wir formal $R(\zeta) = \infty$. (Offenbar ist dies genau dann der Fall, wenn $\frac{1}{\zeta}$ ein Eigenwert von A ist, also für höchstens s komplexe Zahlen).

Satz 1.33

Wir betrachten die Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens mit Koeffizienten $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $b, c \in \mathbb{R}^s$ auf die Testgleichung

$$y'(x) = \lambda y(x), \quad y_0 = 1,$$

mit $\lambda \in \mathbb{C}$ und Schrittweite $h > 0$.

Ist die Matrix $I - h\lambda A \in \mathbb{C}^{s \times s}$ invertierbar, so ist das Runge-Kutta-Verfahren anwendbar (d.h. die möglicherweise impliziten Gleichungen lösbar) und ihre Iterierten sind gegeben durch

$$y_i = (R(h\lambda))^i.$$

Beweis: Die Anwendung des RKV auf $y' = \lambda y$ führt im i -ten Schritt auf das (möglicherweise implizite) Gleichungssystem

$$\eta_j = y_i + h \sum_{l=1}^s a_{jl} \lambda \eta_l, \quad j = 1, \dots, s.$$

Mit $\eta := (\eta_1, \dots, \eta_s)^T \in \mathbb{C}^s$ ist das äquivalent zu

$$\eta = y_i \mathbb{1} + h\lambda A \eta \iff (I - h\lambda A) \eta = y_i \mathbb{1}.$$

Ist $I - h\lambda A$ invertierbar, so existiert eine eindeutige Lösung η und wir erhalten

$$\begin{aligned} y_i &:= y_{i-1} + h \sum_{j=1}^s b_j \lambda \eta_j = y_{i-1} + h\lambda b^T \eta \\ &= y_{i-1} + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} y_{i-1} \mathbb{1} = (1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} \mathbb{1}) y_{i-1} \\ &= (1 + \zeta b^T (I - \zeta A)^{-1} \mathbb{1})^i y_0 = (R(\zeta))^i, \quad \zeta := h\lambda. \quad \square \end{aligned}$$

Beispiel 1.34

(a) Die Stabilitätsfunktion des expliziten Euler-Verfahrens ist $R(\zeta) := 1 + \zeta$.

(b) Die Stabilitätsfunktion des impliziten Euler-Verfahrens ist $R(\zeta) = (1 - \zeta)^{-1}$.

(c) Das Butcher Tableau für die implizite Mittelpunktsformel aus Abschnitt 1.3.4 ist (vgl. Übungsaufgabe 5.2):

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Die Stabilitätsfunktion ist also

$$R(\zeta) = 1 + \zeta b^T (I - \zeta A)^{-1} \mathbb{1} = 1 + \zeta \mathbb{1} (1 - \zeta \mathbb{1}/2)^{-1} \mathbb{1} = \frac{1 + \zeta/2}{1 - \zeta/2}.$$

1.5.4 Stabilität

Die exakte Lösung der Testgleichung $y' = \lambda y, y(0) = 1$, ist

$$y(x) = e^{\lambda x}.$$

Es gilt also

$$|y(x)| \begin{cases} \rightarrow \infty & \text{für } x \rightarrow \infty, & \text{wenn } \operatorname{Re}(\lambda) > 0, \\ \rightarrow 0 & \text{für } x \rightarrow \infty, & \text{wenn } \operatorname{Re}(\lambda) < 0, \\ = 1 & \text{für alle } x \geq 0, & \text{wenn } \operatorname{Re}(\lambda) = 0, \end{cases}$$

und außerdem ist, für alle $x > 0$,

$$|y(x)| \rightarrow 0, \quad \text{wenn } \operatorname{Re}(\lambda) \rightarrow -\infty.$$

Dies motiviert die folgende Definition.

Definition und Satz 1.35

$y_i \approx y(hi)$ seien die Approximationen eines Einschrittverfahren auf die Testgleichung $y' = \lambda y, y(0) = 1$, mit äquidistanten Gitterpunkten $x_i = hi$. Die Methode heißt

- **A-stabil**, falls für $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ stets gilt, dass

$$|y_{i+1}| \leq |y_i| \quad \text{für alle } i \text{ und alle Schrittweiten } h,$$

- **Isometrie-erhaltend**, wenn für $\operatorname{Re}(\lambda) = 0$ stets gilt, dass

$$|y_{i+1}| = |y_i| \quad \text{für alle } i \text{ und alle Schrittweiten } h,$$

- **L-stabil**, wenn sie A-stabil ist und (für alle $h > 0$)

$$|y_1| \rightarrow 0 \quad \text{für } |\lambda| \rightarrow \infty.$$

Ein Runge-Kutta-Verfahren ist genau dann

- A-stabil, wenn $|R(\zeta)| \leq 1$ für alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(\zeta) \leq 0$,
- Isometrie-erhaltend, wenn $|R(\zeta)| = 1$ für alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(\zeta) = 0$,
- L-stabil, wenn A-stabil und $|R(\zeta)| \rightarrow 0$ für $|\zeta| \rightarrow \infty$.

Beweis: Die Äquivalenzen folgen aus $y_i = (R(h\lambda))^i$. □

Aus der Cramerschen Regel folgt, dass die Stabilitätsfunktion eines Runge-Kutta-Verfahrens stets eine rationale Funktion ist, so dass bei der Definition der L-Stabilität das Verhalten für $|\zeta| \rightarrow \infty$ mit dem für $\operatorname{Re}(\zeta) \rightarrow -\infty$ übereinstimmt.

Beispiel 1.36

(a) Explizites Euler-Verfahren:

$$|R(i)| = |1 + i| = \sqrt{2} > 1.$$

Das explizite Euler-Verfahren ist also weder A-stabil noch Isometrie-erhaltend.

(b) Implizites Euler-Verfahren:

Für alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(\zeta) \leq 0$ ist

$$\begin{aligned} |R(\zeta)| &= \frac{1}{|1 - \zeta|} = \frac{1}{\sqrt{\operatorname{Re}(1 - \zeta)^2 + \operatorname{Im}(1 - \zeta)^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(1 - \operatorname{Re}(\zeta))^2 + \operatorname{Im}(\zeta)^2}} \leq 1. \end{aligned}$$

Das implizite Euler-Verfahren ist also A-stabil. Außerdem ist $|R(\zeta)| \rightarrow 0$ für $|\zeta| \rightarrow \infty$, das Verfahren ist also auch L-stabil.

Es ist jedoch

$$R(i) = 1/|1 - i| = 1/\sqrt{2} < 1,$$

das Verfahren ist also nicht Isometrie-erhaltend.

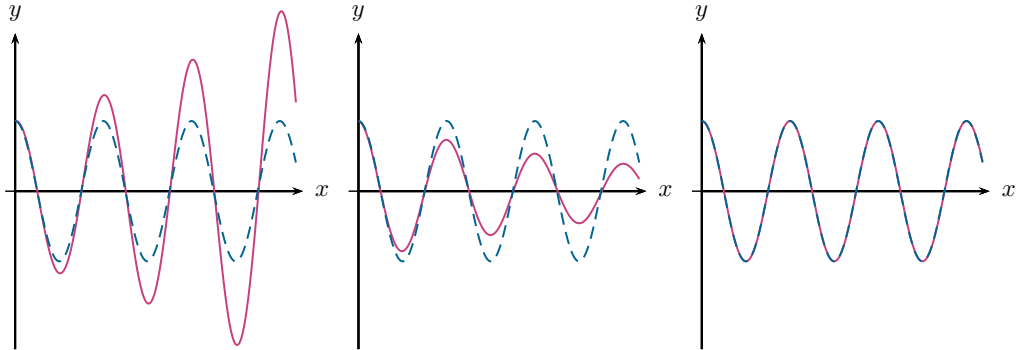


Abbildung 1.11: Anwendung explizites Euler (links), implizites Euler (mitte) und implizites Mittelpunktsverfahrens (rechts) auf Pendelgleichung $y'' = -y$.

(c) Die implizite Mittelpunktsformel ist A-stabil (jedoch nicht L-stabil) und Isometrie-erhaltend (siehe Übungsaufgabe 7.2).

Beispiel 1.37

Die eindimensionale Pendelgleichung zweiter Ordnung $y'' = -y$ lässt sich entsprechend Beispiel 1.4 durch $u_1 := y$ und $u_2 := y'$ umformen in die vektorwertige Gleichung erster Ordnung

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_2 \\ -u_1 \end{pmatrix}.$$

Fassen wir die beiden reellen Funktionen u_1 und u_2 in eine komplexwertige Funktion $u := u_1 + iu_2$ zusammen, so ergibt sich die Testgleichung mit $\lambda = -i$:

$$u' = u_1' + iu_2' = u_2 - iu_1 = -iu,$$

Für $u(0) = 1$ (d.h. $y(0) = 1, y'(0) = 0$) ist die exakte Lösung $u(x) = e^{-ix}$ und

$$|u(x)| = 1 \quad \text{für alle } x \in (0, \infty),$$

d.h. $(y(x))^2 + (y'(x))^2 = 1$. (Offenbar ist $y(x) = \cos(x)$ und $y'(x) = \sin(x)$.)

Für die Iterierten des expliziten und impliziten Euler-Verfahrens sowie des impliziten Mittelpunktsverfahrens gilt (vgl. Abbildung 1.11):

- Explizites Euler-Verfahren (nicht A-stabil):

Iterierte $u^{(j)} = R(h\lambda)^j = (1 - hi)^j$ erfüllen $u^{(j)} \rightarrow \infty$ (in diesem Fall sogar für alle Schrittweiten $h > 0$)

1.5. NUMERIK STEIFER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

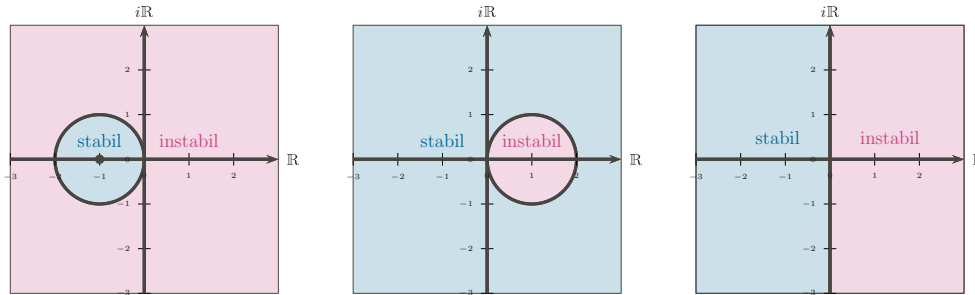


Abbildung 1.12: Stabilitätsgebiet des expliziten Euler (links), impliziten Euler (mitte) und des impliziten Mittelpunktsverfahrens (rechts).

- Implizites Euler-Verfahren (A-stabil):

$$u^{(j)} = R(h\lambda)^j = (1 + h\lambda)^{-j} \text{ erfüllen } |u^{(j+1)}| \leq |u^{(j)}| \text{ (für alle } h > 0 \text{).}$$

- Implizites Mittelpunktsverfahren (A-stabil und Isometrie-erhaltend):

$$u^{(j)} = R(h\lambda)^j = \left(\frac{1+h\lambda/2}{1-h\lambda/2} \right)^j \text{ erfüllen } |u^{(j+1)}| = |u^{(j)}| \text{ (für alle } h > 0 \text{).}$$

Ist eine Methode nicht A-stabil, so besitzen die Approximationen $y_i = (R(h\lambda))^i$ nicht für jedes $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ und jede Schrittweite $h > 0$ die korrekte qualitative Eigenschaft $|y_{i+1}| \leq |y_i|$. Dabei kann es sein, dass dies für keine Schrittweite $h > 0$ erfüllt wird (Beispiel 1.37), oder dass dies erst für hinreichend kleine $h > 0$ erfüllt ist (Abschnitt 1.5.1). Dies motiviert die folgende Definition.

Definition 1.38

Zu einem Runge-Kutta-Verfahren mit Stabilitätsfunktion $R(\zeta)$ definieren wir das **Stabilitätsgebiet** durch

$$\mathcal{S} := \{\zeta \in \mathbb{C} : |R(\zeta)| \leq 1\} \subseteq \mathbb{C}.$$

Beispiel 1.39

Das Stabilitätsgebiet des expliziten Euler-Verfahrens besteht aus allen $\zeta \in \mathbb{C}$ mit

$$1 \geq |R(\zeta)|^2 = |1 + \zeta|^2 = (1 + \operatorname{Re}(\zeta))^2 + \operatorname{Im}(\zeta)^2,$$

d.h. dem abgeschlossenen Kreis mit Radius 1 um $z = -1$ in der komplexen Ebene.

Für das implizite Euler-Verfahren enthält das Stabilitätsgebiet alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit

$$1 \geq |R(\zeta)|^2 = \frac{1}{|1 - \zeta|^2} = \frac{1}{(1 - \operatorname{Re}(\zeta))^2 + \operatorname{Im}(\zeta)^2},$$

also alle $\zeta \in \mathbb{C}$ mit $(\operatorname{Re}(\zeta) - 1)^2 + \operatorname{Im}(\zeta)^2 \geq 1$ und damit die gesamte komplexe Ebene außerhalb des offenen Kreis mit Radius 1 um $z = 1$.

Die Stabilitätsgebiete des expliziten und impliziten Euler sowie das in Übungsaufgabe 7.1 berechnete Stabilitätsgebiet des impliziten Mittelpunkverfahrens zeigt Abbildung 1.12.

1.5.5 Nachteile expliziter Verfahren

In unseren Beispielen waren nur implizite Verfahren A-stabil oder Isometrie-erhaltend. Tatsächlich können explizite Verfahren diese Eigenschaften nicht besitzen, wie wir in diesem Abschnitt zeigen.

Satz 1.40

Die Stabilitätsfunktion eines expliziten Runge-Kutta-Verfahren mit s Stufen ist ein reelles Polynom der Ordnung s .

Beweis: Seien $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $b \in \mathbb{R}^s$, $c \in \mathbb{R}^s$ die Koeffizienten der Methode. Da die Methode explizit ist, ist A eine strikte untere Dreiecksmatrix. Man zeigt leicht, dass in höheren Potenzen von A immer mehr Diagonalen durch Nullen aufgefüllt werden, und schließlich $A^s = 0$ gilt:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & * & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & * & * & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & * & * & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & * & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & * & * & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

$$A^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & * & * & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad A^s = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Aus $A^s = 0$ folgt dass

$$(I - \zeta A)(I + \zeta A + \dots + \zeta^{s-1} A^{s-1}) = I$$

also $(I - \zeta A)^{-1} = I + \zeta A + \dots + \zeta^{s-1} A^{s-1}$.

$R(\zeta) := 1 + \zeta b^T (I - \zeta A)^{-1} \mathbb{1}$ ist also ein reelles Polynom der Ordnung s . □

Satz 1.41

Explizite Runge-Kutta-Verfahren sind weder A-stabil noch Isometrie-erhaltend.

Beweis: Für jedes Polynom $R(\zeta)$ gilt $|R(\zeta)| \rightarrow \infty$ für $|\zeta| \rightarrow \infty$. □

Außerdem erhalten wir noch die schon in Bemerkung 1.29 angesprochene Höchstgrenze in der Ordnung expliziter Verfahren:

Satz 1.42

Die Konsistenzordnung eines expliziten Runge-Kutta-Verfahren mit s Stufen ist höchstens s .

Beweis: Nach Satz 1.40 ist die Stabilitätsfunktion ein Polynom der Ordnung s , also

$$R(\zeta) = r_0 + r_1 \zeta + \dots + r_s \zeta^s, \quad r_0, \dots, r_s \in \mathbb{R}.$$

Betrachte die Anwendung der Methode auf die Testgleichung mit $\lambda = 1$, also $y' = y, y(0) = 1$:

$$y_1 = R(h) = r_0 + r_1 h + \dots + r_s h^s, \\ y(x_1) = e^h = 1 + h + \frac{1}{2}h^2 + \dots + \frac{1}{s!}h^s + \frac{1}{(s+1)!}h^{s+1} + O(h^{s+2}).$$

Höchstens die ersten s Terme der Entwicklungen können übereinstimmen, sodass der lokale Fehler einer expliziten Methode höchstens $O(h^{s+1})$, also die Ordnung höchstens s sein kann.³ □

1.6 Linear implizite Methoden

Motivation Wir haben gesehen, dass steife Differentialgleichungen implizite Methoden erfordern. Im Allgemeinen erfordert die Anwendung eines impliziten Runge-Kutta-Verfahren aber die Lösung von s gekoppelten d -dimensionalen nicht-linearen Gleichungen

$$k_j = f(x_i + c_j h, y_i + h \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l), \quad j = 1, \dots, s,$$

³Streng genommen haben wir in dieser Vorlesung nur für AWP, die die Generalvoraussetzung erfüllen, die Konsistenzordnung über den lokalen Fehler definiert, und die Testgleichung erfüllt die Beschränktheitsbedingung aus der Generalvoraussetzung nicht. Da die Testgleichung aber offensichtlich lösbar ist, gilt mit dem Abschneideargument aus Satz 1.30 der Zusammenhang zwischen Konsistenzordnung und lokalem Fehler auch für die Testgleichung.

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

nach den insgesamt sd unbekanntem Einträgen der $k_j \in \mathbb{R}^d$, $j = 1, \dots, s$. Ziel dieses Abschnitts ist die Herleitung von einfacheren und weniger Rechenaufwand erfordernden, aber dennoch stabilen Methoden.

Wir beschränken uns dabei auf autonome AWP

$$y' = f(y), \quad y(x_0) = y_0 \in \mathbb{R}^d$$

(nach Übungsaufgabe 4.2 kann jedes AWP in diese Form gebracht werden).

Die erste Vereinfachung ist, dass wir ein Runge-Kutta-Verfahren verwenden, für die A eine linke untere Dreiecksmatrix ist, also $a_{jl} = 0$ für $l > j$. Dann können die Gleichungen für die k_j ,

$$k_j = f\left(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl} k_l + a_{jj} h k_j\right), \quad j = 1, \dots, s,$$

beginnend mit k_1 eine nach der anderen gelöst werden. Statt eines sd -dimensionalen nicht-linearen Gleichungssystems müssen wir so nur s mal ein d -dimensionales nicht-lineares Gleichungssystem lösen. Diese bringen wir auf Nullstellenform, d.h. gegeben $k_1, \dots, k_{j-1} \in \mathbb{R}^d$ bestimmen wir $k_j \in \mathbb{R}^d$ so, dass

$$0 = k_j - f\left(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl} k_l + a_{jj} h k_j\right) =: F_j(k_j).$$

Anwendung des Newton-Verfahrens ergibt ausgehend von einer Startnäherung $k_j^{(0)}$ die Iterationen

$$k_j^{(n+1)} := k_j^{(n)} - F_j'(k_j^{(n)})^{-1} F_j(k_j^{(n)}),$$

wobei

$$F_j'(k_j) = I - f'\left(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl} k_l + a_{jj} h k_j\right) a_{jj} h.$$

Als weitere Vereinfachung ersetzen wir für alle j die wahre Jacobi-Matrix $F_j'(k_j)$ durch

$$F_j'(k_j) \approx I - a_{jj} h J, \quad J := f'(y_i).$$

Außerdem führen wir nur einen einzelnen Newton-Schritt durch, d.h. für alle $j = 1, \dots, s$ setzen wir

$$\begin{aligned} k_j &:= k_j^{(0)} - (I - a_{jj} h J)^{-1} F_j(k_j^{(0)}) \\ &= k_j^{(0)} - (I - a_{jj} h J)^{-1} \left(k_j^{(0)} - f\left(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl} k_l + a_{jj} h k_j^{(0)}\right) \right) \\ &= (I - a_{jj} h J)^{-1} \left(f\left(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl} k_l + a_{jj} h k_j^{(0)}\right) - a_{jj} h J k_j^{(0)} \right). \end{aligned}$$

1.6. LINEAR IMPLIZITE METHODEN

Es bleibt noch die Wahl der Startwerte $k_j^{(0)}$ zu klären. Hierzu verwenden wir eine lineare Kombination der bereits berechneten k_l , $l = 1, \dots, j-1$:

$$k_j^{(0)} := \sum_{l=1}^{j-1} d_{jl}/a_{jj}k_l$$

mit noch zu bestimmenden Koeffizienten d_{jl} . Insgesamt erhalten wir so die *linear impliziten* (auch: *Rosenbrock-*) Runge-Kutta-Verfahren, siehe Algorithmus 3.

Algorithm 3 Linear implizite Runge-Kutta Verfahren

Gegeben $a_{jl}, d_{jl}, b_j, c_j \in \mathbb{R}$, $j = 1, \dots, s$, $l = 1, \dots, s$ mit

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^s b_j &= 1, & \sum_{l=1}^s a_{jl} &= c_j \quad \forall j = 1, \dots, s, \\ a_{jl} &= 0 \quad \text{für } l > j, & d_{jl} &= 0 \quad \text{für } l \geq j. \end{aligned}$$

function $y_{i+1} = \Psi(x_i, y_i, x_{i+1}, f)$

Setze $h_i := x_{i+1} - x_i$ und $J := f'(y_i)$.

Bestimme $k_j \in \mathbb{R}^d$, $j = 1, \dots, s$ nacheinander aus

$$k_j := (I - a_{jj}hJ)^{-1} \left(f(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} (a_{jl} + d_{jl})k_l) - hJ \sum_{l=1}^{j-1} d_{jl}k_l \right).$$

Setze $y_{i+1} := y_i + h_i \sum_{j=1}^s b_j k_j$.

return $y_{i+1} \in \mathbb{R}^d$.

end function

Bemerkung 1.43

Für alle $k \in \mathbb{R}^d$ ist

$$\|(I - a_{jj}hJ)k\| \geq \|k\| - \|a_{jj}hJk\| \geq (1 - |a_{jj}|h\|J\|) \|k\|.$$

Für $h < \frac{1}{|a_{jj}|\|J\|}$ ist $1 - |a_{jj}|h\|J\| > 0$, so dass die Matrix

$$I - a_{jj}hJ \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

injektiv und daher auch bijektiv ist. Außerdem gilt in dem Fall für alle $k \in \mathbb{R}^d$, dass

$$(1 - |a_{jj}|h\|J\|) \|(I - a_{jj}hJ)^{-1}k\| \leq \|(I - a_{jj}hJ)(I - a_{jj}hJ)^{-1}k\| = \|k\|$$

und damit $\|(I - a_{jj}hJ)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - |a_{jj}|h\|J\|}$.

Stabilität und Beispiele

Satz 1.44

Seien (A, b, c) die Koeffizienten eines Runge-Kutta-Verfahren, wobei A eine linke untere Dreiecksmatrix und $a_{jj} \neq 0$ sei. Dann hat das dazugehörige linear implizite Runge-Kutta-Verfahren im folgenden Sinne die gleichen Stabilitätseigenschaften wie die ursprüngliche Methode:

Ist $R(\zeta)$ die Stabilitätsfunktion der ursprünglichen Methode, dann ergeben sich für jede Wahl der d_{jl} bei Anwendung der linear impliziten Methode auf die Testgleichung

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = 1$$

die Approximationen

$$y_i = (R(h\lambda))^i,$$

wenn $I - h\lambda A$ invertierbar ist (also $\frac{1}{h\lambda} \neq a_{jj}$ für alle j).

Beweis: Wir wenden die linear implizite Methode auf die Testgleichung an

$$y' = \lambda y =: f(y), \quad y(0) = 1.$$

Für alle y ist $J = f'(y) = \lambda$ und damit

$$\begin{aligned} k_j &:= (1 - a_{jj}h\lambda)^{-1} \left(\lambda(y_i + h \sum_{l=1}^{j-1} (a_{jl} + d_{jl})k_l) - h\lambda \sum_{l=1}^{j-1} d_{jl}k_l \right) \\ &= (1 - a_{jj}h\lambda)^{-1} \left(\lambda y_i + h\lambda \sum_{l=1}^{j-1} a_{jl}k_l \right). \end{aligned}$$

Mit $k := (k_1, \dots, k_s)^T$ ist das äquivalent zu

$$\begin{pmatrix} 1 - a_{11}h\lambda & 0 & \dots & 0 \\ -a_{21}h\lambda & 1 - a_{22}h\lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ -a_{s1}h\lambda & -a_{s2}h\lambda & \dots & 1 - a_{ss}h\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ \vdots \\ k_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda y_i \\ \lambda y_i \\ \vdots \\ \lambda y_i \end{pmatrix}.$$

Wenn $I - h\lambda A$ invertierbar ist, dann ist also

$$k = \lambda y_i (I - h\lambda A)^{-1} \mathbb{1}$$

und damit

$$y_{i+1} = y_i + hb^T k = (1 + h\lambda b^T (I - h\lambda A)^{-1} \mathbb{1}) y_i = R(h\lambda) y_i. \quad \square$$

Beispiel 1.45**(a) Linear-implizites Euler-Verfahren**

Für das implizite Euler-Verfahren

$$\frac{1}{1} \mid \frac{1}{1}$$

ist A eine linke untere Dreiecksmatrix und keine d -Koeffizienten nötig. Das dazugehörige linear-implizite Euler-Verfahren lautet

$$y_{i+1} := y_i + hk, \quad \text{mit} \quad k := (I - hf'(y_i))^{-1} f(y_i).$$

(b) Linear-implizites Mittelpunktsverfahren

Genauso erhalten wir das linear-implizite Mittelpunktsverfahren:

$$y_{i+1} := y_i + hk, \quad \text{mit} \quad k := (I - h/2f'(y_i))^{-1} f(y_i).$$

(c) ode23s

Das wohl am häufigsten verwendete linear-implizite Verfahren besteht aus der folgenden Kombination einer zweistufigen (y) und einer dreistufigen (\hat{y}) Methode:

$$k_1 := (I - ahJ)^{-1} f(y_i)$$

$$k_2 := (I - ahJ)^{-1} (f(y_i + h/2k_1) - ahJk_1)$$

$$k_3 := (I - ahJ)^{-1} (f(y_i + hk_2) - d_{31}hJk_1 - d_{32}hJk_2)$$

$$y_{i+1} := y_i + hk_2$$

$$\hat{y}_{i+1} := y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3),$$

mit

$$J := f'(y_i), \quad a := \frac{1}{2 + \sqrt{2}}, \quad d_{31} := -\frac{4 + \sqrt{2}}{2 + \sqrt{2}}, \quad d_{32} := \frac{6 + \sqrt{2}}{2 + \sqrt{2}}.$$

y und \hat{y} werden analog Übungsaufgabe 5.4 zur adaptiven Schrittweitensteuerung kombiniert. Das Verfahren ist in Matlab unter dem Namen `ode23s` eines der zur Lösung steifer DGL empfohlenen Verfahren.

Für die Implementierung von `ode23s` ist zu beachten, dass zur Berechnung von k_3 die Funktion f nur an der Stelle $y_{i+1} = y_i + hk_2$ ausgewertet wird, und diese Auswertung ohnehin zur Berechnung von k_1 im nächsten Schritt nötig ist (der schon von `dopri5` in Bemerkung 1.29 bekannte FSAL-Trick). Für das dreistufige Kontrollverfahren werden daher (wenn der Schritt nicht verworfen wird) keine zusätzlichen Auswertungen von f benötigt.

Lemma 1.46

Das linear implizite Euler-Verfahren ist L-stabil, das linear implizite Mittelpunktsverfahren ist A-stabil und Isometrie-erhaltend.

Beweis: Dies folgt aus Satz 1.44 und den Stabilitätseigenschaften des impliziten Euler-Verfahrens und des impliziten Mittelpunktsverfahrens. \square

Konsistenzordnung von ode23s Eine linear implizite Methode besitzt nach Satz 1.44 die gleichen Stabilitätseigenschaften wie die ursprüngliche Methode, aber (je nach Wahl der d_{jl}) kann sich die Konsistenzordnung unterscheiden. Wie in Satz 1.28, lassen sich Ordnungsbedingungen für die Koeffizienten von linear impliziten Verfahren herleiten. Wir zeigen nur exemplarisch am Beispiel ode23s die Berechnung der Ordnung eines linear impliziten Verfahrens unter der Generalvoraussetzung aus Abschnitt 1.4.1. Analog zu Abschnitt 1.4.6 folgt daraus auch die Konvergenz auch für den allgemeinen Fall einer unendlich oft differenzierbaren rechten Seite f , falls die Lösbarkeit auf dem kompletten betrachteten Intervall sichergestellt ist.

Satz 1.47

Die in Beispiel 1.45 beschriebene zweistufige Methode zur Berechnung von y in ode23s besitzt Konsistenzordnung 2.

Beweis: Nach Bemerkung 1.43 ist die Matrix $I - ahJ$ für hinreichend kleine $h > 0$ invertierbar und es gilt

$$\|(I - ahJ)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - ah\|J\|} = \frac{1}{1 + O(h)} = O(1),$$

mit unserer Konvention bzgl. der Landau-Notation aus Abschnitt 1.4.2, da die Jacobi-Matrix $J = f'(y_i)$ aufgrund unserer Generalvoraussetzung unabhängig vom Anfangswert x_i, y_i beschränkt ist.

Wir gehen nun wie im Beweis von Satz 1.28 vor. Nach Übungsaufgabe 3.3 gilt für die Lösung von $y' = f(y), y(x_i) = y_i$

$$y(x_{i+1}) = y_i + hf + 1/2h^2 f' f + O(h^3)$$

wobei wir wieder das Argument (y_i) von f und f' weglassen.

Wir wollen dies mit

$$y_{i+1} = y_i + hk_2,$$

vergleichen und müssen dazu also k_2 bis zur Ordnung $O(h^2)$ entwickeln. Dazu benötigen wir die Entwicklung von k_1 . Aus

$$k_1 = (I - ahJ)^{-1} f \quad \text{und} \quad \|(I - ahJ)^{-1}\| = O(1)$$

folgt $k_1 = O(h)$. Wir verwenden die Definition von k_1 noch einmal und erhalten

$$k_1 = f + ahJk_1 = f + O(h).$$

Für k_2 folgt zuerst

$$k_2 = (I - ahJ)^{-1} (f(y_i + h/2k_1) - ahJk_1) = O(1)$$

und dann durch nochmalige Anwendung der Definition von k_2

$$\begin{aligned} k_2 &= f(y_i + h/2k_1) - ahJk_1 + ahJk_2 \\ &= f + h/2f'k_1 + O(h^2) - ahJk_1 + ahJk_2 = f + O(h). \end{aligned}$$

Noch ein weiteres Mal verwenden wir die Definition von k_2 und erhalten zusammen mit $k_1 = f + O(h)$, dass

$$\begin{aligned} k_2 &= f + h/2f'k_1 + O(h^2) - ahJk_1 + ahJk_2 \\ &= f + h/2f'f - ahJf + ahJf + O(h^2) = f + h/2f'f + O(h^2). \end{aligned}$$

Insgesamt ist also

$$y_{i+1} = y_i + hk_2 = y_i + hf + h^2/2f'f + O(h^3) = y(x_{i+1}) + O(h^3),$$

die Methode besitzt also Konsistenzordnung 2. □

Bemerkung 1.48

In Übungsaufgabe 8.3 zeigen wir, dass das zur Schrittweitenkontrolle verwendete dreistufige Verfahren zur Berechnung von \hat{y} in ode23s Konsistenzordnung 3 besitzt. Man kann außerdem zeigen, dass das zweistufige Verfahren zur Berechnung von y L-stabil ist, siehe z.B. [Hanke, Satz 80.5].

1.7 Mehrschrittverfahren

Wir beschreiben nun noch kurz die wesentliche Idee der Mehrschrittverfahren. Dabei beschränken wir uns in diesem Abschnitt auf äquidistant gewählte Gitterpunkte

$$x_i = x_0 + ih, \quad h > 0.$$

In einem m -Schritt Verfahren verwenden wir die letzten m Approximationen

$$y_{i-m+1} \approx y(x_{i-m+1}), \dots, y_i \approx y(x_i)$$

zur Bestimmung der nächsten Approximation $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$. Für die Bestimmung der dafür nötigen ersten Werte y_1, \dots, y_{m-1} können dabei Einschrittverfahren oder Mehrschrittverfahren mit weniger Schritten verwendet werden.

1.7.1 Adams-Bashforth Methoden

Zur Bestimmung von $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$ aus y_{i-m+1}, \dots, y_i verwenden wir zuerst wie bei der Herleitung der Runge Kutta Methoden

$$y_{i+1} - y_i \approx y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx.$$

Die Funktion

$$x \mapsto f(x, y(x))$$

ist (zumindest näherungsweise) an den Stellen

$$f_j := f(x_j, y_j) \approx f(x_j, y(x_j)), \quad j = i - m + 1, \dots, i$$

bekannt. Es liegt daher nahe, die unbekannte Funktion $x \mapsto f(x, y(x))$ durch ihr Interpolationspolynom $f(x, y(x)) \approx p(x)$, $p \in \Pi_{m-1}$ durch die Stützstellen (x_j, f_j) , $j = i - m + 1, \dots, i$ zu ersetzen. Mit Hilfe der (aus der Numerik I bekannten) Lagrange-Grundpolynome

$$l_k(x) = \prod_{\substack{l=i-m+1, \dots, i \\ l \neq k}} \frac{x - x_l}{x_k - x_l}, \quad k = i - m + 1, \dots, i$$

können wir das Interpolationspolynom schreiben als

$$p(x) = \sum_{k=i-m+1}^i f_k l_k(x).$$

So erhalten wir

$$\begin{aligned} y_{i+1} - y_i &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} p(x) dx = \sum_{k=i-m+1}^i f_k \int_{x_i}^{x_{i+1}} l_k(x) dx \\ &= h \sum_{k=i-m+1}^i f_k \int_0^1 l_k(x_i + th) dt \\ &= h \sum_{k=i-m+1}^i f_k \int_0^1 \prod_{\substack{l=i-m+1, \dots, i \\ l \neq k}} \frac{x_i + th - x_l}{x_k - x_l} dt \\ &= h \sum_{k=i-m+1}^i f_k \int_0^1 \prod_{\substack{l=i-m+1, \dots, i \\ l \neq k}} \frac{i - l + t}{k - l} dt. \end{aligned}$$

Mit der Umnummerierung

$$k = i - m + j, \quad j = 1, \dots, m \quad \text{und} \quad l = i - m + j', \quad j' = 1, \dots, m$$

können wir das schreiben als

$$y_{i+1} - y_i = h \sum_{j=1}^m f_{i-m+j} \int_0^1 \prod_{\substack{j'=1, \dots, m \\ j' \neq j}} \frac{m-j'+t}{j-j'} dt = h \sum_{j=1}^m \beta_j f_{i-m+j},$$

mit (von h und i unabhängigen!) Konstanten

$$\beta_j := \int_0^1 \prod_{\substack{j'=1, \dots, m \\ j' \neq j}} \frac{m-j'+t}{j-j'} dt \in \mathbb{R}.$$

Die so erhaltenen Methoden heißen *explizite Adams Methoden* oder auch *Adams-Bashforth Methoden*.

Beispiel 1.49

Für den Spezialfall $m = 1$ ergibt sich das *explizite Euler-Verfahren*. Für $m = 2$ ist

$$\begin{aligned} \beta_1 &:= \int_0^1 \frac{2-2+t}{1-2} dt = - \int_0^1 t dt = -\frac{1}{2}, \\ \beta_2 &:= \int_0^1 \frac{2-1+t}{-1+2} dt = \int_0^1 (t+1) dt = \frac{3}{2}, \end{aligned}$$

also $y_{i+1} := y_i + h(\frac{3}{2}f_i - \frac{1}{2}f_{i-1})$.

1.7.2 Weitere auf Integration basierende Methoden

Analog lassen sich implizite Adams Methoden (*Adams-Moulton-Methoden*) aufstellen, indem das Interpolationspolynom durch die Stützstellen

$$(x_j, f_j) \quad \text{für} \quad j = i - m + 1, \dots, i + 1,$$

also inklusive der noch zu bestimmenden Stützstelle $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$ gewählt wird. Dies führt auf Formeln der Form

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^{m+1} \beta_j f_{i-m+j} = y_i + h \sum_{j=1}^{m+1} \beta_j f(x_{i-m+j}, y_{i-m+j}). \tag{1.23}$$

mit

$$\beta_j := \int_0^1 \prod_{\substack{j'=1, \dots, m+1 \\ j' \neq j}} \frac{m-j'+t}{j-j'} dt \in \mathbb{R}.$$

Eine verbreitete Methode diese impliziten Gleichungen zu lösen, ist es zuerst eine Näherung an y_{i+1} (und damit an f_{i+1}) durch die explizite Adams Methode zu bestimmen. Diese Näherung wird dann als Startwert für eine Fixpunktiteration der Gleichung (1.23) verwendet (üblich sind ein oder zwei Iterationsschritte).

Beispiel 1.50

Für $m = 1$ ergibt sich wegen

$$\beta_1 := \int_0^1 \frac{1-2+t}{1-2} dt = - \int_0^1 (1-t) dt = \frac{1}{2},$$

$$\beta_2 := \int_0^1 \frac{1-1+t}{2-1} dt = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2},$$

das Crank-Nicolson-Verfahren

$$y_{i+1} = y_i + h/2(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})).$$

Das Integrationsintervall bei der Herleitung der Methoden könnte auch vor x_i liegende Bereiche umfassen, z.B.

$$y_{i+1} - y_{i-1} \approx y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx.$$

Analog zum Adams-Verfahren können wir f durch sein Interpolationspolynom (mit oder ohne Verwendung der unbekanntenen Stützstelle x_{i+1}, f_{i+1}) annähern und erhalten (implizite bzw. explizite) Formeln der Form

$$y_{i+1} = y_{i-1} + h \sum_{j=1}^{m+1} \beta_j f_{i-m+j} \quad \text{bzw.} \quad y_{i+1} := y_{i-1} + h \sum_{j=1}^m \beta_j f_{i-m+j}.$$

Diese Formeln heißen *Nyström-Methoden* (die explizite Variante) oder *Milne-Simpson-Methoden* (die implizite Variante).

Beispiel 1.51

Das Milne-Simpson-Verfahren für $m = 2$ lautet

$$y_{i+2} = y_i + h/3(f(x_i, y_i) + 4f(x_{i+1}, y_{i+1}) + f(x_{i+2}, y_{i+2})).$$

Dies zeigen wir in Übungsaufgabe 9.1.

1.7.3 Auf Differentiation basierende Methoden

Die bisher betrachteten Mehrschrittverfahren beruhten auf der Idee die Funktion $x \mapsto f(x, y(x)) = y'(x)$ durch ein Interpolationspolynom zu approximieren und dieses zu integrieren. Stattdessen können wir auch die (Approximationen an die) Funktionswerte $y_{i-m+1}, \dots, y_{i+1}$ durch ein Polynom interpolieren. Wie bei der

1.7. MEHRSCHRITTVERFAHREN

Herleitung der Adams-Bashforth Methode lässt sich das Interpolationspolynom $q \in \Pi_m$ schreiben als

$$q(x) = \sum_{k=i+1-m}^{i+1} y_k l_k(x), \quad l_k(x) = \prod_{\substack{l=i+1-m, \dots, i+1 \\ l \neq k}} \frac{x - x_l}{x_k - x_l}$$

also

$$\begin{aligned} q(x_i + th) &= \sum_{k=i+1-m}^{i+1} y_k \prod_{\substack{l=i+1-m, \dots, i+1 \\ l \neq k}} \frac{x_i + th - x_l}{x_k - x_l} \\ &= \sum_{k=i+1-m}^{i+1} y_k \prod_{\substack{l=i+1-m, \dots, i+1 \\ l \neq k}} \frac{i - l + t}{k - l} \\ &= \sum_{j=1}^{m+1} y_{i-m+j} \prod_{\substack{j'=1, \dots, m+1 \\ j' \neq j}} \frac{m - j' + t}{j - j'}. \end{aligned}$$

Wir können nun versuchen, den unbekanntes Wert y_{i+1} so zu bestimmen, dass das Interpolationspolynom q im aktuellen Gitterpunkt x_i die Differentialgleichung erfüllt, also

$$q'(x_i) = f(x_i, y_i).$$

Wegen

$$\begin{aligned} q'(x_i) &= \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial t} q(x_i + th) \Big|_{t=0} \\ &= \frac{1}{h} \sum_{j=1}^{m+1} y_{i-m+j} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \prod_{\substack{j'=1, \dots, m+1 \\ j' \neq j}} \frac{m - j' + t}{j - j'} \right)}_{=: \alpha_j} \Big|_{t=0} \end{aligned}$$

führt dies auf Formeln der Form

$$\sum_{j=1}^{m+1} \alpha_j y_{i-m+j} = h f(x_i, y_i),$$

die sich (für $\alpha_{m+1} \neq 0$) explizit nach y_{i+1} auflösen lassen.

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Genauso führt die Forderung, dass das Interpolationspolynom q im nächsten Gitterpunkt x_{i+1} die Differentialgleichung erfüllt, mittels

$$\begin{aligned} q'(x_{i+1}) &= \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial t} q(x_{i+1} + th) \Big|_{t=0} \\ &= \frac{1}{h} \sum_{j=1}^{m+1} y_{i-m+j} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} \prod_{\substack{j'=1, \dots, m+1 \\ j' \neq j}} \frac{m+1-j'+t}{j-j'} \right)}_{=: \alpha_j} \Big|_{t=0} \end{aligned}$$

auf implizite Methoden der Form

$$\sum_{j=1}^{m+1} \alpha_j y_{i-m+j} = hf(x_{i+1}, y_{i+1}).$$

Die so entstandenen impliziten Formeln heißen auch *BDF-Methoden* (Backward differentiation formula).

Beispiel 1.52

Für die implizite BDF-Methode mit $m = 1$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{\partial}{\partial t} \frac{1+1-2+t}{1-2} \Big|_{t=0} = -1, \\ \alpha_2 &= \frac{\partial}{\partial t} \frac{1+1-1+t}{2-1} \Big|_{t=0} = 1, \end{aligned}$$

also

$$-1y_i + 1y_{i+1} = hf(x_{i+1}, y_{i+1}),$$

und damit gerade die implizite Euler-Methode.

1.7.4 Konvergenz linearer Mehrschrittverfahren

Alle bisher kennengelernten Mehrschrittverfahren können wir in der allgemeinen linearen Form

$$\sum_{j=1}^{m+1} \alpha_j y_{i-m+j} = h \sum_{j=1}^{m+1} \beta_j f_{i-m+j}$$

mit Konstanten $\alpha_1, \dots, \alpha_{m+1}, \beta_1, \dots, \beta_{m+1} \in \mathbb{R}$ schreiben.

Wir geben in dieser Vorlesung nur eine ganz kurze Zusammenfassung der Theorie dieser Methoden. Eine ausführlichere Darstellung findet sich z.B. im Buch [HairerNorsettWanner].

Analog zu Einschrittverfahren definiert man auch bei Mehrschrittverfahren die *Konsistenzordnung* durch Betrachtung des *lokalen Fehlers*

$$\|y_{i+1} - y(x_{i+1})\|,$$

der sich ergibt, wenn die Methode auf m exakte Werte

$$y_{i-m+1} = y(x_{i-m+1}), \dots, y_i = y(x_i)$$

angewendet wird.

Das Konvergenzresultat für Einschrittverfahren in Satz 1.21 lässt sich jedoch nicht unmittelbar auf Mehrschrittverfahren übertragen. Im Gegensatz zu Einschrittverfahren folgt aus der Konsistenz eines Mehrschrittverfahrens nicht automatisch Konvergenz, sondern dies erfordert eine zusätzliche Stabilitätseigenschaft. Die in Abschnitt 1.7.1 und 1.7.2 vorgestellten Adam-Varianten erfüllen diese zusätzlichen Eigenschaften, die BDF-Formeln jedoch nur bis $m \leq 6$.

Beispiel 1.53 (Instabiles Mehrschrittverfahren)

Wir betrachten das Mehrschrittverfahren

$$y_{i+1} + 4y_i - 5y_{i-1} = h(4f_i + 2f_{i-1}).$$

Für $y_i = y(x_i)$ und $y_{i-1} = y(x_{i-1})$ gilt offenbar

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) - y_{i-1} &= y(x_{i+1}) + 4y_i - 5y_{i-1} - 4hf_i - 2hf_{i-1} \\ &= y(x_{i+1}) + 4y(x_i) - 5y(x_{i-1}) - 4hf(x_i, y_i) - 2hf(x_{i-1}, y_{i-1}) \\ &= y(x_i) + hf(x_i, y_i) + O(h^2) + 4y(x_i) - 5y(x_i) + 5hf(x_i, y_i) \\ &\quad - 4hf(x_i, y_i) - 2hf(x_i, y_i) + O(h^2) = O(h^2), \end{aligned}$$

das Verfahren besitzt also mindestens Konsistenzordnung 1. (Tatsächlich kann man zeigen, dass es sogar Konsistenzordnung 3 besitzt.)

Wenden wir das Verfahren auf das triviale skalare AWP $y' = 0$, $y(0) = 0$ an, so erhalten wir die lineare Rekursionsvorschrift

$$y_{i+1} = 5y_{i-1} - 4y_i,$$

mit der das Verfahren beginnend mit dem Anfangswert $y_0 = 0$ und einer Startnäherungen $y_1 \approx y(x_1)$ die Iterierten $y_i \approx y(x_i)$ berechnet.

Mit der Theorie linearer Rekursionsgleichungen lässt sich herleiten (und auch ohne diese Theorie durch elementares Nachrechnen überprüfen), dass

$$y_i = \frac{y_1}{6} - \frac{y_1}{6}(-5)^i.$$

Selbst kleinste Fehler in $y_1 \approx y(x_1) = 0$ werden also mit zunehmender Schrittzahl immer mehr verstärkt.

Für $t > 0$, $h = t/n$ ergibt sich $y_n = \frac{y_1}{6} - \frac{y_1}{6}(-5)^n$ als Näherung an $y(t) = y(nh)$. Selbst wenn $y_1 \approx y(h)$ bis auf einen Fehler der Ordnung $O(h^k) = O(1/n^k)$ bekannt ist, konvergiert y_n nicht notwendigerweise gegen $y(t)$ (für $n \rightarrow \infty$, $h = t/n \rightarrow 0$). Bei Verwendung exakter Startwerte $y_0 = y(x_0)$ und $y_1 = y(x_1)$ konvergiert das Verfahren für dieses triviale AWP, aber nicht im Allgemeinen, da ab dem zweiten Schritt das fehlerbehaftete $y_2 \approx y(x_2)$ verwendet wird.

1.8 Eindimensionale Randwertprobleme

1.8.1 Motivation: Diffusionsprozesse

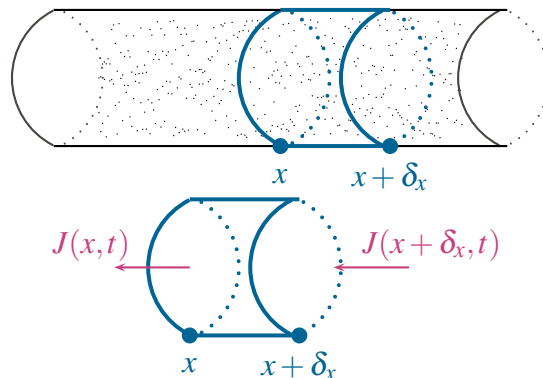


Abbildung 1.13

Neben Anfangswertproblemen treten in der Praxis auch *Randwertprobleme* für gewöhnliche Differentialgleichungen auf. Die Theorie und Numerik dieser Probleme ist eng mit der für partielle Differentialgleichungen verwandt, da (wie in der folgenden Motivation) Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen oft als eindimensionale stationäre Spezialfälle von Randwertproblemen für partielle Differentialgleichungen (PDGL) auftreten. Die folgende Modellierung von Diffusionsprozessen folgt dem sehr lesenswerten Buch [FulfordBroadbridge].

Wir betrachten ein Rohr mit Querschnitt A , das von einer Lösung durchflossen wird. Wir bezeichnen mit

x : die Position innerhalb des Rohres, etwa $x \in [0, 1]$,

$C(x, t)$: die Konzentration des gelösten Stoffes am Ort x zur Zeit t ,

1.8. EINDIMENSIONALE RANDWERTPROBLEME

$J(x, t)$: die Flussdichte der Lösung, d.h. welche Masse des Stoffes einen Einheitsquerschnitt pro Zeiteinheit durchquert.

Wir betrachten den Rohrabschnitt zwischen x und $x + \delta x$. Dabei nehmen wir an, dass δx so klein ist, dass die Konzentration in diesem Abschnitt räumlich konstant ist.

Die Gesamtmasse innerhalb des Abschnitts ist also

$$A\delta x C(x, t).$$

Nun nehmen wir an, dass δt so klein ist, dass der Fluss im Zeitabschnitt zwischen t und $t + \delta t$ zeitlich konstant ist. Aufgrund des Flusses wird sich im betrachteten Abschnitt des Rohres die Gesamtmasse in diesem Zeitabschnitt ändern um

$$J(x, t)A\delta t - J(x + \delta x, t)A\delta t,$$

vgl. Abbildung 1.13.

Wenn es keine anderen die Masse ändernden Phänomene gibt, so gilt also

$$A\delta x C(x, t + \delta t) = A\delta x C(x, t) + J(x, t)A\delta t - J(x + \delta x, t)A\delta t$$

also

$$\frac{C(x, t + \delta t) - C(x, t)}{\delta t} = -\frac{J(x + \delta x, t) - J(x, t)}{\delta x}$$

und mit $\delta x \rightarrow 0$, $\delta t \rightarrow 0$ erhalten wir die *Bilanzgleichung* (auch: *Kontinuitätsgleichung*)

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}.$$

Das einfachste Model für einen auf Diffusion beruhenden Fluss ist *Fick's Gesetz*. Es besagt, dass die Flussdichte proportional ist zum Konzentrationsgefälle

$$J(x, t) = -D(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x}$$

($D(x)$ heißt Diffusionskonstante).

So erhalten wir eine partielle Differentialgleichung, die sogenannte *Diffusionsgleichung* oder auch *Wärmeleitungsgleichung*

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right).$$

Konvektion und Absorption können ähnlich modelliert werden. Wenn die Flüssigkeit sich mit der Geschwindigkeit $v(x,t)$ bewegt, dann muss der Term $v(x,t)C(x,t)$ zum Fluss addiert werden. Wenn pro Zeiteinheit und Raumeinheit die Masse $M(x,t)$ hinzugegeben wird oder $a(x,t)C(x,t)$ z.B. aufgrund einer chemischen Reaktion verbraucht wird, so müssen diese Änderungen in der Massenbilanz berücksichtigt werden. Insgesamt erhalten wir

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} C(x,t) \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v(x,t)C(x,t)) - a(x,t)C(x,t) + M(x,t).$$

Es erscheint natürlich, dass diese partielle Differentialgleichung Anfangsbedingungen $C(x,0)$ für alle $x \in [0,1]$ und Randbedingungen für $x = 0$ und $x = 1$ benötigt. Als Randbedingungen können wir z.B. die Konzentration $C(0,t)$ und $C(1,t)$ für alle $t > 0$ (Dirichlet-Randbedingungen) oder den Fluss $-D(0) \frac{\partial C(0,t)}{\partial x}$ und $-D(1) \frac{\partial C(1,t)}{\partial x}$ (Neumann-Randbedingungen) vorschreiben.

Sind alle Koeffizienten der Gleichung von der Zeit unabhängig, so stellt sich oft mit der Zeit ein Gleichgewichtszustand ein, d.h. die Konzentration ändert sich nicht mehr. Für diesen muss also gelten

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} C(x) \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v(x)C(x)) - a(x)C(x) + M(x) = 0.$$

Dies ist wieder eine *gewöhnliche Differentialgleichung*, für die wir jedoch üblicherweise nicht Anfangswerte (hier z.B. $C(0)$ und $C'(0)$), sondern Randwerte kennen (hier z.B. Dirichlet-Randwerte $u(0)$ und $u(1)$ oder Neumann-Randwerte $C'(0)$ und $C'(1)$).

1.8.2 Differenzenverfahren

Motiviert durch den letzten Abschnitt betrachten wir nun die leicht vereinfachte Diffusionsgleichung

$$L[u] := -u''(x) + b(x)u'(x) + c(x)u(x) = f(x) \quad x \in (0,1)$$

und zwar zuerst mit *homogenen* Dirichlet-Randbedingungen $u(0) = u(1) = 0$.

Es ist naheliegend, dass Randwertproblem zu lösen, indem wir die Funktion u diskretisieren durch ein äquidistantes Gitter $x_i = ih, i = 0, \dots, n+1, h := 1/(n+1)$. Es bezeichne

$$U := (u(x_1), \dots, u(x_n))^T \quad \text{und} \quad F := (f(x_1), \dots, f(x_n))^T$$

die Auswertungen von u und f auf diesem Gitter.

Wir ersetzen die Ableitungen durch *zentrale finite Differenzen*

$$u'(x) \approx D_h[u](x) := \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}$$

$$u''(x) \approx D_h^2[u](x) := \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}$$

(wobei wir am Rand $u(0) = 0 = u(1)$ verwenden).

Aus der Gleichung $L[u] = f$ ergibt sich so das LGS

$$L_h U_h = F$$

mit einer Matrix $L_h \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Durch Lösung des LGS erhalten wir einen Vektor

$$U_h := (u_1, \dots, u_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

von Approximationen an $(u(x_1), \dots, u(x_n))^T$.

Finite Differenzen für ein einfaches Beispiel Mit diesem Ansatz ergibt sich für das einfache Beispiel $-u'' = f$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}}_{=:F} = - \begin{pmatrix} u''(x_1) \\ u''(x_2) \\ \vdots \\ u''(x_n) \end{pmatrix} \approx h^{-2} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{=:L_h} \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{pmatrix}.$$

Wir können daher erwarten, dass wir durch Lösung von $F = L_h U_h$ einen Vektor $U_h = (u_1, \dots, u_n)^T$ aus Approximationen an $(u(x_1), \dots, u(x_n))^T$ erhalten.

Finite Differenzen für die Diffusionsgleichung Genauso diskretisieren wir

$$-u''(x) + b(x)u'(x) + c(x)u(x) = f(x), \quad u(0) = u(1) = 0$$

und erhalten

$$\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \approx h^{-2} \begin{pmatrix} d_1 & s_1 & & 0 \\ r_2 & d_2 & s_2 & \\ & \ddots & \ddots & s_{n-1} \\ 0 & & r_n & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned}d_i &= 2 + h^2 c(x_i), \\r_i &= -1 - hb(x_i)/2, \\s_i &= -1 + hb(x_i)/2.\end{aligned}$$

Wiederum ergibt sich ein LGS $F \approx L_h U$, und wir können erwarten, dass die Lösung $U_h := L_h^{-1} F$ die wahren Lösungswerte in U approximiert.

Inhomogene Dirichlet-Bedingungen Wir betrachten nun den Fall inhomogener Dirichlet-Bedingungen

$$u(0) = \alpha \in \mathbb{R}, \quad u(1) = \beta \in \mathbb{R}.$$

Hierfür ergibt sich

$$\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \approx h^{-2} \begin{pmatrix} d_1 & s_1 & & 0 \\ r_2 & d_2 & s_2 & \\ & \ddots & \ddots & s_{n-1} \\ 0 & & r_n & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{pmatrix} + h^{-2} \begin{pmatrix} r_1 \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ s_n \beta \end{pmatrix}.$$

Wir erhalten das LGS $F \approx L_h U + B_h$ und können erwarten, dass

$$U_h := L_h^{-1}(F - B_h) \approx U.$$

Neumann-Randbedingungen Neumann-Randbedingungen

$$u'(x_0) = \alpha \in \mathbb{R}, \quad u'(x_{n+1}) = \beta \in \mathbb{R}$$

können behandelt werden, indem wir die unbekanntenen Auswertungen von u an den Randwerten x_0 und x_{n+1} zu den Vektoren hinzufügen. So erhalten wir zunächst das unterbestimmte Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \approx h^{-2} \underbrace{\begin{pmatrix} r_1 & d_1 & s_1 & & 0 \\ & r_2 & d_2 & s_2 & \\ & & \ddots & \ddots & s_{n-1} & 0 \\ 0 & & & r_n & d_n & s_n \end{pmatrix}}_{\in \mathbb{R}^{n \times (n+2)}} \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \\ u(x_{n+1}) \end{pmatrix}.$$

1.8. EINDIMENSIONALE RANDWERTPROBLEME

Analog ergeben sich durch Verwendung zentraler Finiter Differenzen in x_0 und x_{n+1} die Gleichungen

$$\begin{aligned} f(x_0) &\approx h^{-2} (r_0 u(x_{-1}) + d_0 u(x_0) + s_0 u(x_1)), \\ f(x_{n+1}) &\approx h^{-2} (r_{n+1} u(x_n) + d_{n+1} u(x_{n+1}) + s_{n+1} u(x_{n+2})), \end{aligned}$$

wobei $x_{-1} := x_0 - h$ und $x_{n+2} := x_{n+1} + h$. Aus den Neumann-Randbedingungen können wir Näherungen an $u(x_{-1})$ und $u(x_{n+2})$ berechnen,

$$\begin{aligned} u(x_{-1}) &\approx u(x_0) - hu'(x_0) = u(x_0) - \alpha h, \\ u(x_{n+2}) &\approx u(x_{n+1}) + hu'(x_{n+1}) = u(x_{n+1}) + \beta h. \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \underbrace{\begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \\ f(x_{n+1}) \end{pmatrix}}_{=:F} &\approx h^{-2} \begin{pmatrix} d_0 & s_0 & & & \\ r_1 & d_1 & s_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r_n & d_n & s_n \\ & & & r_{n+1} & d_{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_n) \\ u(x_{n+1}) \end{pmatrix} \\ &\quad + h^{-2} \begin{pmatrix} r_0(u(x_0) - \alpha h) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ s_{n+1}(u(x_{n+1}) + \beta h) \end{pmatrix} \\ &= h^{-2} \underbrace{\begin{pmatrix} d_0 + r_0 & s_0 & & & \\ r_1 & d_1 & s_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & r_n & d_n & s_n \\ & & & r_{n+1} & d_{n+1} + s_{n+1} \end{pmatrix}}_{=:L_h} \underbrace{\begin{pmatrix} u(x_0) \\ u(x_1) \\ \vdots \\ u(x_n) \\ u(x_{n+1}) \end{pmatrix}}_{=:U} \\ &\quad + h^{-1} \underbrace{\begin{pmatrix} -r_0 \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ s_{n+1} \beta \end{pmatrix}}_{=:B_h}. \end{aligned}$$

Wiederum ergibt sich, dass der Vektor $U \in \mathbb{R}^{n+1}$ der Auswertungen von u in den (um die Randpunkte erweiterten) Gitterpunkten x_0, \dots, x_{n+1} annähernd ein LGS $F \approx L_h U + B_h$ löst und wir erwarten, dass $U_h := L_h^{-1}(F - B_h) \approx U$.

1.8.3 Konsistenz, Stabilität und Konvergenz

Wir betrachten in diesem Abschnitt nur das spezielle Randwertproblem

$$L[u] := -u''(x) + b(x)u'(x) + c(x)u(x) = f(x) \quad x \in (0, 1)$$

mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen und die aus dem letzten Abschnitt erhaltene dazugehörige Diskretisierung

$$L_h U_h = F$$

über einem äquidistanten Gitter

$$x_i = ih, \quad i = 0, \dots, n+1, \quad h := 1/(n+1).$$

Außerdem nehmen wir in diesem Abschnitt an, dass $b \in C^2([0, 1])$, $c \in C([0, 1])$ sowie $c > 0$ gilt⁴, und dass das betrachtete Randwertproblem eine eindeutige Lösung $u \in C^4([0, 1])$ besitzt.

Konsistenz Zuerst charakterisieren wir, wie gut die wahren Lösungswerte

$$U := (u(x_1), \dots, u(x_n))^T$$

die diskretisierte Gleichung lösen.

Lemma 1.54

Es existiert ein $C > 0$, sodass

$$\|L_h U - F\|_\infty \leq Ch^2.$$

Man sagt auch, das Differenzenverfahren hat Konsistenzordnung 2.

Beweis: Der i -te Eintrag ($i = 1, \dots, n$, $u(x_0) = 0 = u(x_{n+1})$) von $L_h U - F$ ist

$$-D_h^2[u](x_i) + b(x_i)D_h[u](x_i) + c(x_i)u(x_i) - f(x_i).$$

⁴Da die stetige Funktion c auf dem Kompaktum $[0, 1]$ ihr Minimum annimmt gilt damit sogar $c(x) \geq c_0 := \min_{x \in [0, 1]} c(x) > 0$.

1.8. EINDIMENSIONALE RANDWERTPROBLEME

Da u die DGL $-u''(x_i) + b(x_i)u'(x_i) + c(x_i)u(x_i) - f(x_i) = 0$ löst, genügt es zu zeigen, dass

$$D_h[u](x_i) = u'(x_i) + O(h^2) \quad \text{und} \quad D_h^2[u](x_i) = u''(x_i) + O(h^2).$$

In der Tat erhalten wir durch Taylorentwicklung

$$\begin{aligned} u(x_i + h) &= u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{1}{2}h^2u''(x_i) + \frac{1}{3!}h^3u'''(x_i) + O(h^4), \\ u(x_i - h) &= u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{1}{2}h^2u''(x_i) - \frac{1}{3!}h^3u'''(x_i) + O(h^4) \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} D_h[u](x_i) &= \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} = \frac{2hu'(x_i) + O(h^3)}{2h} = u'(x_i) + O(h^2), \\ D_h^2[u](x_i) &= \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2} = \frac{h^2u''(x_i) + O(h^4)}{h^2} \\ &= u''(x_i) + O(h^2), \end{aligned}$$

womit die Behauptung gezeigt ist. □

Aus Konsistenz (im Sinne von Lemma 1.54) folgt mit dem folgenden einfachen Argument Konvergenz

$$\|U - U_h\|_\infty = \|L_h^{-1}L_h(U - U_h)\|_\infty \leq \|L_h^{-1}\|_\infty \|L_hU - F\|_\infty,$$

wenn wir zeigen können, dass L_h invertierbar und $\|L_h^{-1}\|_\infty$ (gleichmäßig in h) beschränkt ist. Die zweite Eigenschaft heißt auch *Stabilität* des Differenzenverfahrens.

Stabilität und Konvergenz Um die Stabilität zu zeigen, konstruieren wir eine Lösung w eines Randwertproblems, für die zugehörigen Auswertungen W

$$L_hW \geq \mathbb{1}$$

erfüllen. Zusammen mit einer noch zu zeigenden eintragsweisen Nichtnegativität von L_h^{-1} und einer daraus folgenden Monotonieeigenschaft folgt dann

$$\|L_h^{-1}\|_\infty = \|L_h^{-1}\mathbb{1}\|_\infty \leq \|L_h^{-1}L_hW\|_\infty \leq \max_{x \in [0,1]} w(x).$$

Bemerkung 1.55

Eine komponentenweise nicht-negative Matrix $M = (m_{ij})_{i,j=1}^n$ hat die Monotonie-eigenschaft

$$x \leq y \implies Mx \leq My,$$

wobei die Ungleichheitszeichen für die Vektoren $x, y, Mx, My \in \mathbb{R}^n$ komponentenweise zu verstehen sind.

Lemma 1.56

(a) Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine strikt diagonaldominante Matrix,

$$a_{ii} > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n,$$

mit positiven Diagonalelementen und nicht-positiven Nichtdiagonalelementen, dann ist A invertierbar und A^{-1} ist komponentenweise nicht-negativ.

(b) Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine invertierbare, diagonaldominante Matrix,

$$a_{ii} \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n,$$

mit positiven Diagonalelementen und nicht-positiven Nichtdiagonalelementen, dann ist A^{-1} komponentenweise nicht-negativ.

Inbesondere gilt gemäß Bemerkung 1.55 in beiden Fällen komponentenweise

$$Au \leq Av \implies u \leq v.$$

Beweis: (a) Wir zerlegen $A = D - N$ in seinen Diagonal- und Nichtdiagonalanteil. Nach Voraussetzung ist $D \geq 0$ und $N \geq 0$. Für $R = D^{-1}N$ gilt offenbar

$$A = D(I - R), \quad R \geq 0, \quad \|R\|_\infty = \|D^{-1}N\|_\infty < 1.$$

Mit Hilfe der Neumannschen Reihe (siehe z.B. Lemma 4.16 im Vorlesungsskript [NumerikWS1920]) folgt, dass $I - R$ invertierbar ist mit

$$(I - R)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} R^k.$$

Damit ist auch A invertierbar und

$$A^{-1} = (I - R)^{-1}D^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} R^k D^{-1}.$$

Die Einträge von A^{-1} sind also Grenzwerte von Summen und Produkten nicht-negativer Zahlen und damit nicht-negativ.

1.8. EINDIMENSIONALE RANDWERTPROBLEME

- (b) Für (nicht notwendigerweise strikt) diagonaldominantes und invertierbares A (mit positiven Diagonalelementen und nicht-positiven Nichtdiagonalelementen) erhalten wir aus Teil (a), dass $(A + \varepsilon I)$ invertierbar ist, und dass $(A + \varepsilon I)^{-1}$ komponentenweise nicht-negativ ist. Da A nach Voraussetzung invertierbar ist, folgt mit der Stetigkeit der Matrixinversen (siehe z.B. [NumerikWS1920, Lemma 4.17]), dass (für $\varepsilon \rightarrow 0$) $(A + \varepsilon I)^{-1} \rightarrow A^{-1}$ konvergiert. Die Einträge von A^{-1} sind also Grenzwerte nicht-negativer Zahlen und damit nicht-negativ. \square

Lemma 1.57

Es existieren $h_0 > 0$ und $C > 0$ mit

$$\|L_h^{-1}\|_{\infty} \leq C \quad \text{für alle } 0 < h < h_0.$$

Beweis: Nach Übungsaufgabe 10.2 existiert eine Lösung $w \in C^4[0, 1]$ des Randwertproblems

$$-w''(x) + b(x)w'(x) = 1 \quad x \in (0, 1), \quad w(0) = 0 = w(1).$$

Da w stetig ist, besitzt w sein globales Minimum in $[0, 1]$. Da in jedem inneren Minimum $w'(x) = 0 \leq w''(x)$ gilt und damit die DGL nicht erfüllt sein kann, muss das Minimum auf dem Rand liegen und es folgt

$$w(x) \geq 0 \quad \forall x \in [0, 1].$$

w erfüllt

$$L[w] = -w''(x) + b(x)w'(x) + c(x)w(x) = 1 + c(x)w(x).$$

Nach Lemma 1.54 existiert deshalb ein $C' > 0$, sodass für hinreichend kleine $h > 0$ mit den Bezeichnungen

$$W = (w(x_1), \dots, w(x_n))^T \quad \text{und} \\ G = (1 + c(x_1)w(x_1), \dots, 1 + c(x_n)w(x_n))^T$$

gilt, dass

$$\|L_h W - G\|_{\infty} \leq C' h^2,$$

und damit insbesondere

$$L_h W \geq G - C' h^2 \mathbb{1}.$$

Da c und w nicht-negativ sind, ist $G \geq \mathbb{1}$ und es folgt

$$L_h W \geq \mathbb{1} - C' h^2 \mathbb{1}.$$

KAPITEL 1. GEWÖHNLICHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Für hinreichend kleine $h > 0$ ist $1 - C'h^2 > \frac{1}{2}$ und die Matrix L_h erfüllt die Voraussetzungen von Lemma 1.56 (ist also strikt diagonaldominant mit positiven Diagonal- und nichtpositiven Nebendiagonalelementen). Zusammen mit Bemerkung 1.55 folgt dann für hinreichend kleine $h > 0$

$$L_h W \geq \frac{1}{2} \mathbb{1} \implies W \geq \frac{1}{2} L_h^{-1} \mathbb{1}$$

und damit

$$\|L_h^{-1}\|_\infty = \|L_h^{-1} \mathbb{1}\|_\infty \leq 2 \|W\|_\infty \leq 2 \max_{x \in [0,1]} w(x),$$

womit die Behauptung gezeigt ist.

Konvergenz Insgesamt ist damit gezeigt, dass die durch Finiten-Differenzen erhaltene Näherungslösung gegen die wahre Lösung konvergiert:

Folgerung 1.58

Es existieren $h_0 > 0$ und $C > 0$ mit

$$\|U - U_h\|_\infty \leq Ch^2 \quad \text{für alle } 0 < h < h_0.$$

Beweis: Mit

$$\|U - U_h\|_\infty = \|L_h^{-1} L_h(U - U_h)\|_\infty \leq \|L_h^{-1}\|_\infty \|L_h U - F\|_\infty$$

folgt die Behauptung aus Lemma 1.54 und Lemma 1.57. □

Kapitel 2

Partielle Differentialgleichungen

2.1 Motivation und Klassifikation

2.1.1 Mehrdimensionale Diffusion

Analog zu Abschnitt 1.8.1 können wir Diffusionsprozesse auch im Mehrdimensionalen modellieren. $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ und die Flussdichte $J(x, t)$ sind nun n -dimensionale Vektoren. Die j -te Komponente von $J(x, t)$ bezeichne dabei den Anteil des Flusses in die j -te Koordinatenrichtung. Ersetzen wir in Abschnitt 1.8.1 den Rohrabschnitt durch einen n -dimensionalen Würfel, so erhalten wir für die Änderung der Massenkonzentration $C(x, t)$ aufgrund eines Flusses $J(x, t)$ die *Bilanzgleichung*

$$\begin{aligned}\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial J_1(x, t)}{\partial x_1} - \frac{\partial J_2(x, t)}{\partial x_2} - \dots - \frac{\partial J_n(x, t)}{\partial x_n} \\ &= -\operatorname{div}(J(x, t)) = -\nabla \cdot J(x, t),\end{aligned}$$

wobei wir in der gesamten Vorlesung die Konvention verwenden, dass sich die (meist kurz mit dem Nabla-Operator „ ∇ “ geschriebenen) Operatoren Divergenz, Gradient und Rotation stets nur auf die räumlichen Koordinaten beziehen.

Fick's Gesetz lautet entsprechend

$$J_1(x, t) = -D(x, t) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x_1}, \quad \dots \quad J_n(x, t) = -D(x, t) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x_n},$$

also

$$J(x, t) = -D(x, t) \nabla C(x, t).$$

D sei dabei weiterhin ein Skalar. (Der Fall *anisotroper*, d.h. richtungsabhängiger, Diffusion lässt sich weitgehend analog mit einem Matrix-wertigem D behandeln.)

Konvektion, Absorption und Quellterme lassen sich wie im Eindimensionalen in die Gleichung integrieren (wobei die Geschwindigkeit $v(x, t)$ nun ein Vektor sei, dessen Einträge die Geschwindigkeit in die jeweilige Richtung darstellen):

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t}(x, t) = & \nabla \cdot (D(x, t) \nabla C(x, t)) \\ & - \nabla \cdot (v(x, t) C(x, t)) - a(x, t) C(x, t) + M(x, t). \end{aligned}$$

2.1.2 Klassifikation partieller Differentialgleichungen

Die Diffusionsmotivation enthält bereits drei der vier wichtigsten speziellen partiellen Differentialgleichungen:

- (a) Treten nur Diffusionsphänomene auf, so erhalten wir

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x, t) = \nabla \cdot (D(x, t) \nabla C(x, t)).$$

Diese Gleichung und insbesondere ihr Spezialfall (bei dem wir die gesuchte Funktion mit $u(x, t)$ und ihre zeitliche Ableitung mit $u_t(x, t)$ bezeichnen)

$$u_t = \Delta u.$$

heißt *Wärmeleitungsgleichung* (engl.: heat equation). Sie ist das Musterbeispiel einer sogenannten *parabolischen Gleichung*, bei der sich eine zu Beginn gegebene Konzentrations- (oder Temperatur-)verteilung mit der Zeit immer gleichmäßiger verteilt.

Intuitiv erscheint es sinnvoll, die Gleichung mit zeitlichen Anfangsbedingungen $u(x, t)|_{t=0}, x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ und örtlichen Randbedingungen $u(x, t)|_{x \in \partial \Omega}, t > 0$ zu kombinieren.

- (b) Wie in Abschnitt 1.8.1 erwarten wir intuitiv, dass (wenn alle Parameter, Randvorgaben und Quellen zeitlich konstant sind) sich eine Temperatur- oder Konzentrationsverteilung immer mehr einem Gleichgewichtszustand annähert. In diesem würde die zeitliche Ableitung verschwinden und wir erhalten

$$0 = \nabla \cdot (D(x) \nabla C(x)).$$

Diese Gleichung und insbesondere ihr Spezialfall (bei dem wir die gesuchte Funktion wieder mit $u(x, t)$ bezeichnen)

$$\Delta u = 0$$

2.1. MOTIVATION UND KLASSIFIKATION

heißt *Laplace-Gleichung*. Die Variante, bei der noch äußere Quellen vorhanden sind, also

$$-\Delta u = f,$$

heißt auch *Poisson-Gleichung*. Dies sind die Musterbeispiele sogenannter *elliptischer Gleichung*, die den Gleichgewichtszustand eines Diffusionsprozesses beschreiben.

Intuitiv erscheint es sinnvoll, die Gleichung mit Randbedingungen

$$u(x, t)|_{x \in \partial\Omega}$$

zu kombinieren.

- (c) Wird der Stoff lediglich mit der Geschwindigkeit $v(x, t)$ transportiert (nur Konvektion, keine Diffusion), so erhalten wir

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x, t) = -\nabla \cdot (v(x, t)C(x, t)).$$

Diese Gleichung und insbesondere ihr Spezialfall konstanter Geschwindigkeit (bei dem wir die gesuchte Funktion wieder mit $u(x, t)$ bezeichnen)

$$u_t = -v \cdot \nabla u$$

heißt *Transport-Gleichung*. Sie ist das Musterbeispiel einer sogenannten *hyperbolischen Gleichung*, bei der die Masse lediglich transportiert wird.

Intuitiv erscheint es sinnvoll, die Gleichung mit Anfangsbedingungen und Randbedingungen

$$u(x, t)|_{t=0} \quad \text{für } x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad \text{und} \quad u(x, t)|_{x \in \Gamma} \quad \text{für } t \geq 0$$

auf dem ganzen Rand $\Gamma = \partial\Omega$ oder zumindest einem *einfallenden Teil des Randes* $\Gamma \subset \partial\Omega$ zu kombinieren.

- (d) Um die vierte wichtige spezielle PDGL zu motivieren, stellen wir uns vor, dass $u(x, t)$ die Auslenkung einer Gitarrenseite beschreibe, vgl. die in der Vorlesung gemalten Skizzen. Ähnlich wie bei einem Diffusionsprozess zieht eine starke Auslenkung an einer Stelle (etwa nach oben) die danebenliegenden weniger ausgelenkten Punkte mit nach oben. Dies geschieht jedoch nicht durch Herüberwandern von Teilchen wie bei einem Diffusionsprozess, sondern durch elastische Kräfte mit denen nebenliegende Punkte *beschleunigt* werden. Die Beschleunigung ist die zweite Ableitung der Auslenkung und so ergibt sich ähnlich wie bei der Diffusionsgleichung die sogenannte *Wellengleichung*

$$u_{tt} = \Delta u.$$

Diese Gleichung wird ebenfalls als *hyperbolische Gleichung* bezeichnet, die Auslenkung scheint sich wie durch einen Transportprozess auszubreiten.

Bemerkung 2.1

Wir betrachten eine lineare partielle Differentialgleichung 2. Ordnung der Form

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} u(x) + \sum_{i=1}^n b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) + c(x)u(x) = f(x),$$

wobei (o.B.d.A) $a_{ij}(x) = a_{ji}(x)$. Die Abbildung

$$L : u \mapsto \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} u(x) + \sum_{i=1}^n b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) + c(x)u(x)$$

bezeichnet man auch als Differentialoperator. Der Term mit den höchsten Ableitungen $\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} u(x)$ wird als Hauptteil bezeichnet. (Beachte, dass für eine rigorose mathematische Definition der Abbildung noch der Ausgangs- und Zielraum festgelegt werden muss.)

Die zum Hauptteil gehörige symmetrische Matrix $A(x) = (a_{ij}(x))_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ bestimmt den Typ der Differentialgleichung. Die Gleichung heißt

- elliptisch in x , falls alle Eigenwerte von A positiv oder alle negativ sind.
- hyperbolisch in x , falls genau $n - 1$ Eigenwerte positiv sind und einer negativ ist, oder $n - 1$ Eigenwerte negativ sind und einer positiv ist.
- parabolisch in x , falls ein Eigenwert Null ist und die anderen $n - 1$ Eigenwerte entweder alle positiv oder alle negativ sind.

2.2 Finite Differenzen für elliptische DGL

Wir beginnen mit der numerischen Lösung von Gleichungen, die Gleichgewichtszustände beschreiben und betrachten dazu exemplarisch

$$-\Delta u(x) = f(x) \tag{2.1}$$

in einer nicht-leeren, beschränkten, offenen Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Dabei sei $f \in C(\Omega)$ eine stetige Funktion. Entsprechend der Modellierung aus dem letzten Abschnitt können wir uns f als die Verteilung angelegter Wärmequellen vorstellen und die Lösung u beschreibt dann die sich im Gleichgewicht einstellende Temperatur.

Es ist anschaulich klar, dass für die Gleichgewichtsverteilung der Temperatur auch der Rand des Gebiets $\partial\Omega$ eine Rolle spielen wird, etwa wenn dieser Rand immer

auf einer konstanten Temperatur gehalten wird. Tatsächlich werden wir sehen, dass u durch (2.1) und Vorgabe von $u|_{\partial\Omega}$ eindeutig bestimmt ist.

Damit die Gleichung (2.2) und eventuelle Randwerte überhaupt einen Sinn ergeben, betrachten wir als Lösungskandidaten nur Funktionen $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ (sogenannte *klassische Lösungen*). Lösungen der Laplace-Gleichung $\Delta u = 0$ heißen auch *harmonische Funktionen*.

2.2.1 Das Maximumsprinzip

Formulierung und Beweis

Satz 2.2 (Maximumsprinzip)

Sei $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ mit

$$-\Delta u(x) \leq 0 \quad \forall x \in \Omega. \quad (2.2)$$

Dann nimmt u sein Maximum auf dem Rand $\partial\Omega$ an (d.h. mindestens ein globales Maximum von u liegt auf $\partial\Omega$).

Beweis: (i) Betrachte zunächst den Fall $f(x) := -\Delta u(x) < 0$ für alle $x \in \Omega$.

Angenommen es gibt ein inneres Maximum, also $y \in \Omega$ mit

$$u(y) \geq u(x) \quad \forall x \in \overline{\Omega}.$$

Dann ist y insbesondere ein Maximum in jeder Koordinatenrichtung, also

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} u(y) \leq 0 \quad j = 1, \dots, n$$

und damit $-\Delta u \geq 0$, was $-\Delta u = f < 0$ widerspricht. u kann also kein inneres Maximum haben. Da u als stetige Funktion auf dem Kompaktum $\overline{\Omega}$ aber mindestens ein Maximum besitzt, muss ein Maximum auf dem Rand liegen.

(ii) Nun sei $f(x) = -\Delta u(x) \leq 0$ für alle $x \in \Omega$. Angenommen es liegt kein Maximum auf dem Rand, dann gibt es ein inneres Maximum $\hat{x} \in \Omega$ mit

$$u(\hat{x}) > u(x) \quad \forall x \in \partial\Omega \quad \text{und} \quad u(\hat{x}) \geq u(x) \quad \forall x \in \Omega.$$

Mit diesem \hat{x} definieren wir die Funktion

$$h(x) := \|x - \hat{x}\|^2 = \sum_{j=1}^n (x_j - \hat{x}_j)^2.$$

Offensichtlich gilt $h(\hat{x}) = 0$ und $-\Delta h(x) = -2n$ für alle $x \in \Omega$.

Da Ω beschränkt ist, ist $\partial\Omega$ kompakt und die stetigen Funktionen u und f nehmen ihr Maximum auf $\partial\Omega$ an. Für hinreichend kleines $\delta > 0$ kann daher

$$w(x) := u(x) + \delta h(x)$$

sein Maximum nicht auf dem Rand annehmen. Wir wählen dazu z.B.

$$\delta := \frac{u(\hat{x}) - \max_{x \in \partial\Omega} u(x)}{2 \max_{x \in \partial\Omega} h(x)} > 0,$$

dann ist

$$\max_{x \in \partial\Omega} w(x) \leq \max_{x \in \partial\Omega} u(x) + \delta \max_{x \in \partial\Omega} h(x) \leq \frac{1}{2} \max_{x \in \partial\Omega} u(x) + \frac{1}{2} u(\hat{x}) < u(\hat{x}) = w(\hat{x}).$$

Da

$$-\Delta w(x) = -\Delta u(x) - \delta \Delta h(x) = f(x) - 2n\delta < 0 \quad \text{für alle } x \in \Omega,$$

widerspricht dies aber der in Teil (i) gezeigten Aussage. \square

Folgerungen aus dem Maximumsprinzip

Satz 2.3

Sei $f \in C(\Omega)$.

(a) Ist $f \geq 0$ und $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ eine Lösung von $-\Delta u = f \geq 0$ in Ω , so nimmt u sein Minimum auf dem Rand $\partial\Omega$ an (Minimumsprinzip).

(b) Gilt für $u, v \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$

$$-\Delta u \leq -\Delta v \text{ in } \Omega \quad \text{und} \quad u \leq v \text{ auf } \partial\Omega$$

so gilt $u \leq v$ in ganz Ω .

(c) Die Nullfunktion ist die einzige Lösung $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ von

$$-\Delta u = 0, \quad u|_{\partial\Omega} = 0.$$

Eine Lösung $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ von

$$-\Delta u = f$$

ist also (wenn sie existiert) eindeutig durch f und $u|_{\partial\Omega}$ bestimmt.

2.2. FINITE DIFFERENZEN FÜR ELLIPTISCHE DGL

(d) Erfüllen $u_1, u_2 \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$

$$-\Delta u_1 = f = -\Delta u_2$$

so ist

$$\|u_1 - u_2\|_\infty := \max_{x \in \bar{\Omega}} |u_1(x) - u_2(x)| = \max_{x \in \partial\Omega} |u_1(x) - u_2(x)|.$$

Die Lösungen des Dirichlet-Problems hängen also (so sie denn existieren) stetig von den vorgegebenen Dirichlet-Randdaten ab.

(e) Es existiert ein (von der Menge Ω abhängiges) $C > 0$, sodass für alle Funktionen $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ gilt

$$\|u\|_\infty = \max_{x \in \bar{\Omega}} |u(x)| \leq \max_{x \in \partial\Omega} |u(x)| + C \sup_{x \in \Omega} |\Delta u|.$$

In diesem Sinne hängt eine Lösung von $\Delta u = f$ (so sie denn existiert) also auch stetig von der rechten Seite ab.

(f) Sind $c, f \in C(\Omega)$, $c \geq 0$, $f \leq 0$ und $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ erfüllt

$$-\Delta u + cu = f \leq 0,$$

so gilt

$$\max_{x \in \bar{\Omega}} u(x) \leq \max\{0, \max_{x \in \partial\Omega} u(x)\}.$$

Beweis: (a) folgt aus Anwendung des Maximumprinzips auf $-u$.

(b) folgt aus Anwendung des Maximumprinzips auf $u - v$.

(c) folgt aus Anwendung des Maximumsprinzips und des Minimumsprinzips.

(d) folgt aus Anwendung des Maximums- und Minimumprinzips auf $u_1 - u_2$.

(e) Für $\sup_{x \in \Omega} |\Delta u(x)| = \infty$ ist die Aussage erfüllt. Sei also $\Delta u(x)$ beschränkt.

Wähle $R > 0$ so groß, dass $\Omega \subseteq B_R(0) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| < R\}$. Für

$$w(x) := R^2 - \frac{1}{n} \|x\|^2$$

gilt $-\Delta w(x) = 2$ und $w(x) \geq 0$ für alle $x \in \bar{\Omega}$.

Definiere außerdem

$$v(x) := \max_{z \in \partial\Omega} |u(z)| + \frac{w(x)}{2} \sup_{z \in \Omega} |\Delta u(z)|.$$

Dann ist

$$-\Delta v(x) = \sup_{z \in \Omega} |\Delta u(z)| \geq -\Delta u(x) \quad \forall x \in \Omega \quad \text{und} \quad v|_{\partial\Omega} \geq u|_{\partial\Omega}$$

also nach (b) $u \leq v$ auf Ω . Genauso folgt $u \geq -v$ auf Ω und damit

$$\begin{aligned} |u(x)| &\leq |v(x)| = v(x) = \max_{z \in \partial\Omega} |u(z)| + \frac{w(x)}{2} \sup_{z \in \Omega} |\Delta u(z)| \\ &\leq \max_{z \in \partial\Omega} |u(z)| + \frac{R^2}{2} \sup_{z \in \Omega} |\Delta u(z)|, \end{aligned}$$

also folgt die Behauptung mit $C := \frac{R^2}{2}$.

(f) Wir definieren die (möglicherweise leere) Menge

$$O := \{x \in \Omega : u(x) > 0\}.$$

O ist das Urbild des offenen Intervalls $(0, \infty)$ unter der stetigen Abbildung $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und damit offen in der Relativtopologie von Ω . Da Ω offen in \mathbb{R}^n ist, ist auch O offen in \mathbb{R}^n .

Zur Anwendung des Maximumsprinzips charakterisieren wir noch ∂O . Da O offen ist, gilt für jedes $x \in \partial O$, dass $x \notin O$ und damit entweder $x \notin \Omega$ oder $u(x) \leq 0$. Im ersten Fall ($x \in \partial O$ und $x \notin \Omega$) gilt offenbar $x \in \partial\Omega$, insgesamt ist also

$$\partial O \subseteq \partial\Omega \cup \{x \in \Omega : u(x) \leq 0\}.$$

Aus der Stetigkeit von u folgt auch sofort, dass $\partial O \subseteq \partial\Omega \cup \{x \in \Omega : u(x) = 0\}$ gilt, aber das benötigen wir im Folgenden nicht.

Nun können wir die Behauptung

$$\max_{x \in \bar{\Omega}} u(x) \leq \max\{0, \max_{x \in \partial\Omega} u(x)\} \tag{2.3}$$

beweisen. Ist $O = \emptyset$, so ist $\max_{x \in \Omega} u(x) \leq 0$ und wegen der Stetigkeit von u gilt dies auch auf $\bar{\Omega}$, so dass (2.3) folgt. Ansonsten gilt dass

$$-\Delta u(x) = f(x) - c(x)u(x) \leq 0 \quad \text{für alle } x \in O \neq \emptyset,$$

und aus der Konstruktion von O sowie dem Maximumsprinzip Satz 2.2 folgt, dass ein Punkt $\hat{x} \in \partial O$ existiert mit

$$\max_{x \in \bar{\Omega}} u(x) = \max_{x \in \bar{O}} u(x) = u(\hat{x}).$$

Mit der obigen Charakterisierung folgt, dass entweder $\hat{x} \in \partial\Omega$ oder $u(\hat{x}) \leq 0$ gilt. In beiden Fällen folgt (2.3). \square

2.2.2 Finite Differenzen für elliptische PDGL

Wie in Abschnitt 1.8.2 betrachten wir finite Differenzen und definieren für eine Funktion $u(x)$

$$\begin{aligned} D_{h,i}^+[u](x) &:= \frac{u(x + he_i) - u(x)}{h}, \\ D_{h,i}^-[u](x) &:= \frac{u(x) - u(x - he_i)}{h}, \\ D_{h,i}[u](x) &:= \frac{u(x + he_i) - u(x - he_i)}{2h}, \\ D_{h,i}^2[u](x) &:= D_{h,i}^+ D_{h,i}^- [u](x) = D_{h,i}^- D_{h,i}^+ [u](x) \\ &= \frac{u(x + he_i) - 2u(x) + u(x - he_i)}{h^2}. \end{aligned}$$

Wir verwenden für mehrfache partielle Ableitungen auch die folgende *Multiindex-Notation*. Für $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$ ist

$$D^\alpha u = \frac{\partial^{|\alpha|} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}},$$

und $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$, $\alpha! = \alpha_1! \dots \alpha_n!$. Für $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n$, $\beta \leq \alpha$ ist außerdem $\binom{\alpha}{\beta} = \frac{\alpha!}{\beta!(\alpha-\beta)!}$ wobei

$$\alpha \leq \beta \quad :\iff \quad \alpha_j \leq \beta_j \quad \text{für alle } j = 1, \dots, n.$$

Mit dieser Notation definieren wir für $u \in C^k(\overline{\Omega})$ die Halbnorm

$$|u|_{C^k(\overline{\Omega})} := \max_{|\alpha|=k} \max_{x \in \overline{\Omega}} |D^\alpha u(x)|$$

und die Norm

$$\|u\|_{C^k(\overline{\Omega})} := \max_{|\alpha| \leq k} \max_{x \in \overline{\Omega}} |D^\alpha u(x)|.$$

Man rechnet leicht nach, dass letzteres tatsächlich eine Norm ist, die $C^k(\overline{\Omega})$ zu einem Banachraum (also einem vollständigen normierten Vektorraum) macht.

Lemma 2.4

Sei $x \in \Omega$, $j \in \{1, \dots, n\}$ und $h > 0$ hinreichend klein, sodass

$$x \pm the_j \in \Omega \quad \text{für alle } t \in [-1, 1].$$

(a) Für $u \in C^2(\overline{\Omega})$ ist $\left| D_{h,i}^+[u](x) - \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \right| \leq \frac{h}{2} |u|_{C^2(\overline{\Omega})}$.

(b) Für $u \in C^2(\overline{\Omega})$ ist $\left| D_{h,i}^-[u](x) - \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \right| \leq \frac{h}{2} |u|_{C^2(\overline{\Omega})}$.

(c) Für $u \in C^3(\overline{\Omega})$ ist $\left| D_{h,i}[u](x) - \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) \right| \leq \frac{h^2}{6} |u|_{C^3(\overline{\Omega})}$.

(d) Für $u \in C^4(\overline{\Omega})$ ist $\left| D_{h,i}^2[u](x) - \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u(x) \right| \leq \frac{h^2}{12} |u|_{C^4(\overline{\Omega})}$.

Beweis: Das folgt wie im Beweis von Lemma 1.54 durch Taylorentwicklung. \square

Beispiel 2.5

Wir betrachten die Gleichung

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega \quad \text{und} \quad u|_{\partial\Omega} = 0,$$

zu gegebenen Quelltermen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, wobei $\Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2$ ein zweidimensionales Quadrat mit Seitenlänge 1 sei.

Wir diskretisieren Ω durch ein Punktegitter mit der Schrittweite

$$h = 1/(k+1), \quad k \in \mathbb{N},$$

und ordnen

die inneren Punkte entsprechend Abbildung 2.1 an

$$x^{(i+(j-1)k)} := (ih, jh) \in \Omega, \quad i, j = 1, \dots, k.$$

Wir setzen noch $f_h = (f^{(i)})_{i=1, \dots, k^2} \in \mathbb{R}^{k^2}$, $f^{(i)} = f(x^{(i)})$ und versuchen einen Vektor von Approximationen

$$u_h = (u^{(i)})_{i=1, \dots, k^2} \in \mathbb{R}^{k^2}, \quad u^{(i)} = u(x^{(i)})$$

zu finden. Für jeden inneren Gitterpunkt $x^{(i)} \in \Omega$ erhalten wir durch die obigen Differenzenverfahren 2. Ordnung die lineare Gleichung

$$\begin{aligned} f^{(i)} = f(x^{(i)}) &= -\Delta u|_{x=x^{(i)}} \approx -D_{h,1}^2 u(x)|_{x=x^{(i)}} - D_{h,2}^2 u(x)|_{x=x^{(i)}} \\ &= -\frac{1}{h^2} \left(u(x^{(i)} + he_1) - 2u(x^{(i)}) + u(x^{(i)} - he_1) \right. \\ &\quad \left. + u(x^{(i)} + he_2) - 2u(x^{(i)}) + u(x^{(i)} - he_2) \right) \\ &\approx \frac{1}{h^2} \left(4u^{(i)} - u^{(i-1)} - u^{(i+1)} - u^{(i-k)} - u^{(i+k)} \right), \end{aligned}$$

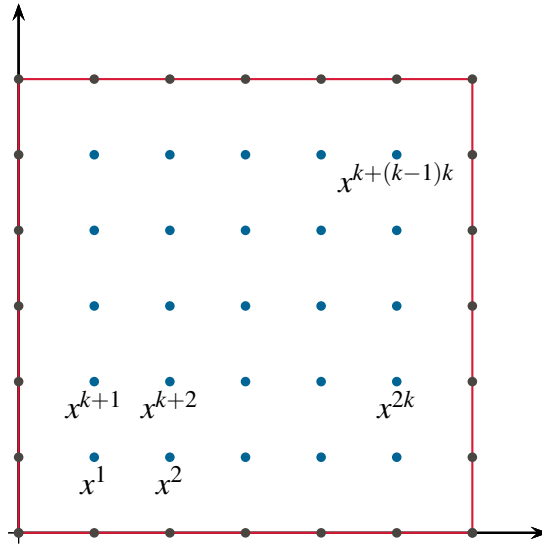


Abbildung 2.1: Nummerierung der inneren Punkte

falls alle benachbarten Punkte ebenfalls innere Punkte sind. Ist ein benachbarter Punkt ein Randpunkt, so erhalten wir einen analogen Ausdruck, bei dem der zum Randpunkt gehörige Summand (wegen $u|_{\partial\Omega} = 0$) fehlt.

Insgesamt erhalten wir so ein lineares Gleichungssystem

$$A_h u_h = f_h,$$

wobei die Matrix A_h die folgende Blocktridiagonalgestalt besitzt

$$A_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} C & -I & & & \\ -I & C & -I & & \\ & -I & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -I \\ & & & -I & C \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k^2 \times k^2}$$

mit

$$C := \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k},$$

und der $k \times k$ -Einheitsmatrix I .

Bemerkung 2.6

Für zwei Matrizen $K = (k_{i,j}) \in \mathbb{R}^{l \times m}$ und $L \in \mathbb{R}^{r \times s}$ ist das Kronecker Produkt definiert durch

$$K \otimes L = \begin{pmatrix} k_{1,1}L & k_{1,2}L & \dots & k_{1,m}L \\ k_{2,1}L & k_{2,2}L & \dots & k_{2,m}L \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{l,1}L & k_{l,2}L & \dots & k_{l,m}L \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{lr \times ms}.$$

Damit lässt sich die Matrix A_h aus 2.5 schreiben als

$$A_h = \frac{1}{h^2} (I \otimes T + T \otimes I)$$

mit

$$T := \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k \times k}.$$

Inhomogene Dirichlet-Probleme

$$-\Delta u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = g$$

lassen sich analog behandeln, indem entweder der Effekt der Randpunkte auf die Differenzenverfahren der randnahen Punkte in der rechten Seite berücksichtigt wird (vgl. Übungsaufgabe 11.4), oder indem die Randpunkte als Unbekannte hinzugenommen werden und für jeden Randpunkt $x^{(j)}$ die Gleichung

$$u^{(j)} = g(x^{(j)})$$

aufgenommen wird.

2.2.3 Allgemeinere Fälle und ein diskretes Maximumsprinzip

Allgemeinere Gebiete Allgemeinere Gebiete $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ lassen sich analog behandeln, indem wir über sie ein Gitter mit Maschenweite h legen

$$\Omega_h := \{x = hk, \quad k \in \mathbb{Z}^n\} \cap \Omega$$

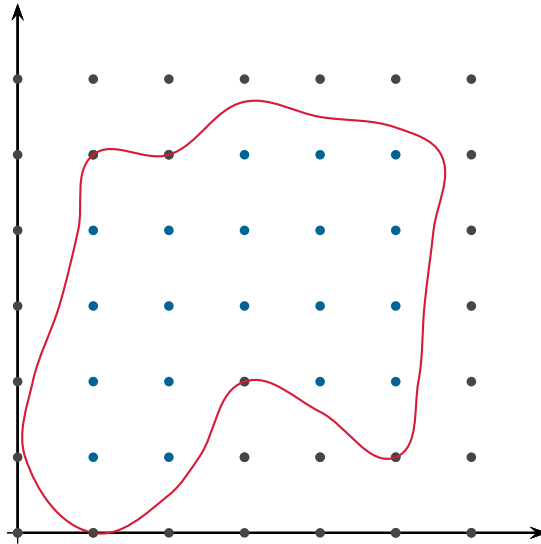


Abbildung 2.2: Hinzunahme von Randpunkten bei allgemeineren Gebieten

und zusätzlich diejenigen Punkte als Randpunkte dazunehmen, bei denen $\partial\Omega$ eine der Gitterlinien schneidet

$$\Gamma_h := \{x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \partial\Omega, \exists i \in \{1, \dots, n\} : x_i = hk, k \in \mathbb{Z}\}$$

(vgl. das in der Vorlesung gemalte Bild).

Für die *randnahen* Punkte (also denen, die Nachbarn in Γ_h besitzen) lassen sich finite Differenzen aufstellen, die jeweils in unterschiedliche Richtungen verschiedene Schrittweiten besitzen:

Lemma 2.7 (Shortley-Weller-Approximation in 2D)

Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ offen und $x \in \Omega$. Sei $u \in C^3(\bar{\Omega})$. Dann existiert $C > 0$, sodass für $h > 0$ und $h_O, h_W, h_N, h_S \leq h$ (die hinreichend klein seien, sodass die Auswertungen von u definiert sind)

$$\left| \frac{2}{h_O(h_O + h_W)} u_O + \frac{2}{h_W(h_O + h_W)} u_W + \frac{2}{h_S(h_S + h_N)} u_S + \frac{2}{h_N(h_S + h_N)} u_N - \left(\frac{2}{h_O h_W} + \frac{2}{h_S h_N} \right) u_Z - \Delta u(x) \right| \leq C |u|_{C^3(\bar{\Omega})} h,$$

wobei $u_Z := u(x)$, $u_W := u(x - h_W e_1)$, $u_O := u(x + h_O e_1)$, $u_N := u(x + h_N e_2)$ und $u_S := u(x - h_S e_2)$.

Beweis: Das folgt wie im Beweis von Lemma 1.54 und 2.4 durch Taylorentwicklung. □

Bemerkung 2.8

Offensichtlich lassen sich auch höhere Dimensionen und allgemeinere Gleichungen (mit veränderlichen Diffusionskoeffizienten, Absorptions- und Konvektionstermen) analog behandeln und führen wiederum auf lineare Gleichungssysteme der Form

$$A_h u_h = f_h.$$

Wir gehen darauf im Rahmen dieser Vorlesung aber nicht mehr ein.

Das Sternlemma und ein diskretes Maximumsprinzip Die so entstehenden Diskretisierungsmatrizen A_h sind üblicherweise von der Gestalt, dass die Diagonaleinträge positiv sind, die Nebendiagonaleinträge negativ sind, und zeilenweise der Diagonaleintrag die Zeile dominiert. Wir werden sehen, dass solche Matrizen ein diskretes Maximumsprinzip erfüllen. Zur Motivation betrachten wir zunächst eine Gleichung der Gestalt

$$4u_Z - u_W - u_O - u_S - u_N = 0 \tag{2.4}$$

die einen positiven und ansonsten nur negative Koeffizienten enthält, und bei der die Summe aller Koeffizienten Null ist. Dies kann so interpretiert werden kann, dass

$$u_Z = \frac{1}{4}(u_W + u_O + u_S + u_N),$$

d.h. der Eintrag mit dem positiven Koeffizienten ist der Mittelwert der Einträge mit den negativen Koeffizienten ist. u_Z kann daher nicht größer als das Maximum über $\{u_W, u_O, u_S, u_N\}$ sein, und $u_Z = \max\{u_W, u_O, u_S, u_N\}$ ist nur möglich im Falle

$$u_Z = u_W = u_O = u_S = u_N.$$

Dieses Maximumsargument bleibt offenbar auch gültig, wenn die rechte Seite (2.4) nicht-positiv ist. Unter der Zusatzannahme, dass $u_Z \geq 0$ ist, bleibt das Maximumsargument auch gültig, wenn die Summe aller Koeffizienten in (2.4) nicht-negativ ist.

Lemma 2.9 (Sternlemma)

Sei $L \geq 0$ und $\alpha_l, x_l, l = 0, \dots, L$ erfüllen

$$\alpha_l < 0 \quad \forall l > 0, \quad \sum_{l=0}^L \alpha_l \geq 0, \quad \sum_{l=0}^L \alpha_l x_l \leq 0 \quad \text{und} \quad x_0 \geq 0.$$

Ist $x_0 \geq \max_{l=1, \dots, L} x_l$, so gilt $x_0 = x_1 = \dots = x_L$.

Beweis: Für $L = 0$ ist die Aussage trivial. Ansonsten ist

$$\sum_{l=1}^L \underbrace{\alpha_l}_{<0} \underbrace{(x_l - x_0)}_{\leq 0} = \sum_{l=0}^L \alpha_l (x_l - x_0) = \underbrace{\sum_{l=0}^L \alpha_l x_l}_{\leq 0} - x_0 \underbrace{\sum_{l=0}^L \alpha_l}_{\geq 0} \leq 0$$

und es folgt $x_l = x_0$ für alle $l = 1, \dots, L$. \square

Offenbar kann für $\sum_{l=0}^L \alpha_l = 0$ auf die Voraussetzung $x_0 \geq 0$ in Lemma 2.9 verzichtet werden.

Satz 2.10

Sei $A_h \in \mathbb{R}^{N \times N}$ eine (nicht-notwendigerweise strikt) diagonaldominante Matrix mit positiven Diagonal- und negativen Nebendiagonaleinträgen, also

$$a_{ii}^h \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}^h| \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad a_{ij}^h \leq 0 \quad \forall i \neq j.$$

Sei $f_h \in \mathbb{R}^N$ und $u_h \in \mathbb{R}^N$ sei eine Lösung von $A_h u_h = f_h$. Außerdem sei $f_h \leq 0$, also komponentenweise nicht-positiv.

Betrachte die i -te Zeile des LGS $A_h u_h = f_h$,

$$\sum_{j=1}^N a_{ij}^h u_j^h = f_i^h \leq 0.$$

Ist $u_i^h \geq \max\{0, \max_{j: j \neq i, a_{ij} \neq 0} u_j^h\}$, so ist $u_i^h = u_j^h$ für alle j mit $a_{ij} \neq 0$.

Beweis: Wir setzen $\alpha_0 = a_{ii}^h$, $x_0 = u_i^h$. Entsprechend seien α_l und x_l , $l = 1, \dots, k$ die anderen von Null verschiedenen Einträge a_{ij}^h , $j \neq i$ und dazugehörigen u_j^h . Dann folgt die Behauptung aus Lemma 2.9. \square

Bemerkung 2.11

(a) Im Kontext unserer Finite-Differenzen-Diskretisierungen kann Theorem 2.10 als diskretes Maximumsprinzip (in Analogie zu Theorem 2.3(f)) interpretiert werden. Die diskrete Lösung u_h kann nicht in einem Gitterpunkt einen nicht-negativen Wert annehmen, der strikt maximal ist unter allen im Rahmen der Differenzenquotienten betrachteten Nachbarwerten. Mehr noch: nimmt die diskrete Lösung einen in diesem Sinne maximalen Wert an, so besitzen alle (in diesem Sinne) benachbarten Werte den gleichen maximalen Wert.

(b) Mit dem diskreten Maximumsprinzip lässt sich oft die Lösbarkeit der diskretisierten Gleichung beweisen. Betrachten wir exemplarisch die Matrix A_h aus

der Diskretisierung des Poisson-Problems auf dem Einheitsquadrat. A_h ist genau dann invertierbar, wenn es injektiv ist, also nur der Nullvektor das homogene LGS $A_h u_h = 0$ löst. Sei also u_h eine solche Lösung. Dann besitzt u_h einen maximalen Eintrag u_h^j . O.B.d.A. sei $u_h^j \geq 0$, ansonsten betrachten wir $-u_h$. Da wir jeden anderen Gitterpunkt über einen Weg aus (bei den Differenzenquotienten vorkommenden) Nachbarwerten erreichen können (das Gitter ist diskret zusammenhängend), folgt aus dem diskreten Maximumsprinzip, dass alle Einträge von u_h^j übereinstimmen. Aus der ersten Zeile von A_h folgt dann, dass $u_h = 0$ gelten muss.

- (c) Auch für die Monotonieeigenschaft aus Theorem 2.3(b) existiert ein diskretes Analogon. In Lemma 1.56 hatten wir gezeigt, dass für jede invertierbare, diagonaldominante Matrix $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit positiven Diagonalelementen und nicht-positiven Nichtdiagonalelementen gilt, dass

$$Au \leq Av \implies u \leq v.$$

2.2.4 Konsistenz, Stabilität und Konvergenz

Sei $A_h u_h = f_h$ die entsprechend den letzten Abschnitten erstellte Diskretisierung des Poisson-Problems

$$-\Delta u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = g.$$

Der Einfachheit halber bezeichnen wir mit $u \in \mathbb{R}^N$ auch den Vektor der Auswertungen der Funktion $u(x)$ auf den Gitterpunkten der Diskretisierung.

Bereits in Abschnitt 1.8.3 haben wir den folgenden Zusammenhang zwischen Konsistenz, Stabilität und Konvergenz kennengelernt:

$$\|u - u_h\|_\infty = \|A_h^{-1} A_h (u - u_h)\|_\infty \leq \|A_h^{-1}\|_\infty \|A_h u - f_h\|_\infty.$$

Erfüllt also (für $h \rightarrow 0$) die wahre Lösung (genauer: ihre Auswertungen) immer besser die diskretisierte Gleichung (Konsistenz), d.h.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|A_h u - f_h\|_\infty = 0,$$

und bleibt $\|A_h^{-1}\|_\infty$ beschränkt (Stabilität), so nähert die Lösung der diskreten Gleichung die wahre Lösung immer besser an.

Die Konsistenz von finiten Differenzen-Verfahren erhalten wir sofort aus Abschätzungen, wie sie in Lemma 2.4 und Lemma 2.7 vorkommen, die ihrerseits leicht aus Anwendungen der Taylor-Formel folgen. Konsistente Differenzenverfahren

lassen sich deshalb in der Praxis meist sehr leicht für eine gegebene partielle Differentialgleichung konstruieren.

Der Beweis von Stabilität ist ungleich schwerer. Wir zeigen im Rahmen dieser Vorlesung nur exemplarisch am zweidimensionalen Poisson-Problem mit Dirichlet-Randbedingungen, wie sich (ähnlich wie in Abschnitt 1.8.3) mit Hilfe einer speziellen Lösung und der im letzten Abschnitt gezeigten Monotonieeigenschaft die Stabilität zeigen lässt.

Satz 2.12

Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ offen und beschränkt. Dann existiert ein $C > 0$, sodass für die entsprechend den letzten Abschnitten (mit den Differenzenquotienten aus Lemma 2.4 und Lemma 2.7) erstellte Diskretisierungsmatrix A_h zum Poisson-Problem

$$-\Delta u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = g$$

gilt $\|A_h^{-1}\|_{\infty} < C$ für alle $h > 0$.

Beweis: Sei $R > 0$ hinreichend groß, sodass $\Omega \subseteq B_R(0)$ und betrachte die Funktion $w(x) = \frac{1}{4}(R^2 - \|x\|^2)$. Offenbar gilt $-\Delta w = 1$.

Wir bezeichnen den Vektor der Auswertungen von $w(x)$ in den Gitterpunkten mit W . Für jeden nicht-randnahen Gitterpunkt x_j gilt, dass

$$(A_h W)_j = -D_{h,1}^2[w](x_j) - D_{h,2}^2[w](x_j) = -\Delta w(x_j) = 1,$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass nach Lemma 2.4(d) wegen $|w|_{C^4(\bar{\Omega})} = 0$ die verwendeten Differenzenquotienten für die Funktion w exakt sind.

Nach Lemma 2.7 ist auch die Anwendung der Shortley-Weller-Differenzenquotienten in den randnahen Punkten wegen $|w|_{C^3(\bar{\Omega})} = 0$ exakt. Jedoch bleiben bei der Anwendung von A_h auf W in den randnahen Gitterpunkten die Randpunkte unberücksichtigt. Ist etwa x_j ein Punkt, an den links (und an keiner anderen Seite) ein Randpunkt x_W angrenzt, so ist

$$(A_h W)_j - \frac{2}{h_W(h_O + h_W)} w(x_W) = -\Delta w(x_j) = 1.$$

Da $w(x_W) \geq 0$ ist, gilt also auch in diesem Fall (und analog in allen anderen randnahen Punkten) $(A_h W)_j \geq 1$, sodass insgesamt

$$A_h W \geq \mathbb{1}$$

folgt. Damit ist

$$\|A_h^{-1}\|_{\infty} = \|A_h^{-1}\mathbb{1}\|_{\infty} \leq \|A_h^{-1}A_h W\|_{\infty} \leq \max_{x \in B_R(0)} |w(x)| = \frac{R^2}{4},$$

sodass die Behauptung bewiesen ist. □

Folgerung 2.13

Falls eine hinreichend glatte¹ Lösung des Poisson-Problems

$$-\Delta u = f, \quad u|_{\partial\Omega} = g$$

existiert, so konvergieren die durch die Differenzenquotienten aus Lemma 2.4 und Lemma 2.7 erhaltenen Approximationen u_h gegen die Lösung.

¹Die nötige Glattheit ergibt sich dabei aus den Taylorentwicklungen in den Konsistenzbeweisen. In unserem Fall genügt $u \in C^3$ für Konvergenz mit Ordnung 1. Falls nur zentrale Finiten Differenzen verwendet werden, ergibt sich für $u \in C^4$ Konsistenzordnung 2.

Literaturverzeichnis

- [FulfordBroadbridge] G. R. Fulford, P. Broadbridge: *Industrial Mathematics: Case Studies in the Diffusion of Heat and Matter*, Australian Mathematical Society Lecture Series 16, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [Hanke] M. Hanke-Bourgeois: *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*, Teubner Verlag, Wiesbaden, 2009.
- [HairerNorsettWanner] E. Hairer, S. P. Nørsett, G. Wanner: *Solving ordinary differential equations I. Nonstiff problems*, Springer, 1987.
- [NumerikWS1920] B. Harrach: Vorlesungsskript *Numerische Mathematik*, Goethe-Universität Frankfurt am Main, WS19/20.
<http://numerical.solutions>
- [Heuser] H. Heuser: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2009.