



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT
GÖTTINGEN

Ein adaptives Mehrschritt-IMEX-Verfahren

Bachelorarbeit im Studiengang „Mathematik“

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
Georg-August-Universität Göttingen

vorgelegt von

Daniel Arndt

Erstgutachter:

Prof. Dr. Gert Lube

Zweitgutachter:

Prof. Dr. Russell Luke

Göttingen, den 1. August 2011

Ich erkläre hiermit, dass ich die Bachelorarbeit selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Göttingen, den 1. August 2011

Summary

The aim of this thesis is to introduce and analyse VSIMEX (variable step-size implicit-explicit) schemes based on the theory of linear multistep methods with variable step-size. After a short review on linear multistep methods VSIMEX schemes are introduced. An investigation on stability and consistency gives results on the restriction of the step-size ratios. Furthermore a generalization of BDF-schemes, the VSSBDF (variable step-size BDF) schemes, will be studied.

These methods are applied on an advection-diffusion and the Burgers' equations. The numerical results confirm the expected orders of convergence.

Finally a simple adaptive approach based on VSSBDF methods demonstrates that the number of necessary function evaluations can be reduced.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	I
Abbildungsverzeichnis	III
Tabellenverzeichnis	V
1 Einleitung und Überblick	1
2 Lineare Mehrschrittverfahren	3
2.1 Grundlagen	3
2.2 Definition der Mehrschrittverfahren	3
2.3 Konsistenz und Stabilität	6
2.3.1 Konsistenz	7
2.3.2 Stabilität	10
2.4 Konvergenz	15
2.5 BDF-Verfahren	20
2.6 Alternative Motivation der BDF-Verfahren	22
2.7 Stabilitätsgebiet	23
2.8 VBDF-Verfahren	27
3 VSIMEX-Verfahren	31
3.1 IMEX-Verfahren	31
3.2 VSIMEX-Verfahren	32
3.3 Konsistenz, Stabilität und Konvergenz	33
3.4 Verfahren erster Ordnung	37
3.5 Verfahren zweiter Ordnung	37
3.6 Verfahren dritter, vierter und fünfter Ordnung	38
3.7 Konvergenz der VSSBDF-Verfahren	43
4 Vorstellung eines adaptiven Algorithmus	47
4.1 Lokaler Fehlerschätzer	47
4.2 Die Schrittweitenformel	48
4.3 Adaptiver Grundalgorithmus	48
5 Implementierung und numerische Untersuchung	51
5.1 Räumliche Diskretisierung	51
5.2 Konvektions-Diffusions-Gleichung	53

5.3 Burgers-Gleichung	61
5.4 Anwendung des adaptiven Verfahrens	71
6 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick	77
Literatur	VII

Abbildungsverzeichnis

2.1	Nullstellen von ρ BDF1	21
2.2	Nullstellen von ρ BDF2	21
2.3	Nullstellen von ρ BDF3	21
2.4	Nullstellen von ρ BDF4	21
2.5	Nullstellen von ρ BDF5	22
2.6	Nullstellen von ρ BDF6	22
2.7	Stabilitätsgebiet BDF1	25
2.8	Stabilitätsgebiet BDF2	25
2.9	Stabilitätsgebiet BDF3	26
2.10	Stabilitätsgebiet BDF4	26
2.11	Stabilitätsgebiet BDF5	26
2.12	Stabilitätsgebiet BDF6	26
5.1	Lösung Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$	55
5.2	Fehlerentwicklung bei der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung	55
5.3	Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$.	56
5.4	Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und feste CFL-Zahl	57
5.5	Lösung Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$	59
5.6	Fehlerentwicklung bei der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung	59
5.7	Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$	60

5.8 Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl	61
5.9 Lösung Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$	63
5.10 Lösung Burgers-Gleichung für $\epsilon = 0$ mit UPWIND3-Diskretisierung	64
5.11 Fehlerentwicklung bei der Burgers-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung	64
5.12 Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$	65
5.13 Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl	66
5.14 Beschränktheitsanforderung an τ	67
5.15 Lösung Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$	69
5.16 Fehlerentwicklung bei der Burgers-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung	69
5.17 Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$	70
5.18 Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und fester CFL-Zahl	71
5.19 Vergleich VSSBDF2 äquidistant und adaptiv für $\epsilon = 0$	74

Tabellenverzeichnis

2.1	Koeffizienten der BDF-Verfahren	20
2.2	$A(\alpha)$ -Stabilität der BDF-Verfahren	26
3.1	Schrittweitenbeschränkung für die VBDF-Verfahren für die Stabilität . . .	46
5.1	Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$	56
5.2	Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und feste CFL-Zahl	57
5.3	Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$	60
5.4	Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl	61
5.5	Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$	65
5.6	Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl	66
5.7	Anforderungen an τ für Beschränktheit der Lösung	67
5.8	Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$	70
5.9	Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und fester CFL-Zahl	71
5.10	Untersuchung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $\epsilon = 0$	72
5.11	Untersuchung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und $\epsilon = 0$	73
5.12	Untersuchung der Burgers-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \chi_{[0.25\ 0.75]}(x)$ und $\epsilon = 0$	73

5.13 Untersuchung der Burgers-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung

 $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $\epsilon = 0$ 74

1 Einleitung und Überblick

In vielen physikalischen Anwendungen treten zeitabhängige Differentialgleichungen auf, die sich in natürlicher Weise aus verschiedenen Termen zusammensetzen. Ein effektiver und leicht anzuwendender Ansatz besteht, darin unterschiedliche Terme gemäß ihrer Eigenschaften zu behandeln. Solche Verfahren werden IMEX-Verfahren genannt. Bei dieser Vorgehensweise treten insbesondere auch steife Terme auf. Aus der Theorie der linearen Mehrschrittverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen ist bekannt, dass sich zur Behandlung dieser BDF-Verfahren gut eignen. Weiterhin haben solche Differentialgleichungen häufig unterschiedliche Zeitskalen, sodass sich die Lösung zu manchen Zeitpunkten mehr ändert als an anderen. Um dies effektiv auszunutzen ist es ratsam Verfahren mit variabler Schrittweite einzusetzen. In dieser Arbeit werden diese drei Ideen kombiniert. Die daraus resultierenden Verfahren nennen sich VSSBDF-Verfahren.

Im zweiten Abschnitt werden zunächst einige Grundlagen linearer Mehrschrittverfahren wiederholt, die für die spätere Vorgehensweise nützlich sind.

Nach einer kurzen Einführung zu IMEX-Verfahren werden im dritten Abschnitt, aufbauend auf einer Publikation von Wang ([Wan05]), VSIMEX-Verfahren entwickelt. Die Untersuchung von Konsistenz und Stabilität ermöglicht es notwendige und hinreichende Bedingungen für die Konvergenz zu finden. Insbesondere werden im dritten Abschnitt, aufbauend auf den BDF-Verfahren, die VSSBDF-Verfahren hergeleitet. Schließlich werden für diese Verfahren die Konvergenzbedingungen näher untersucht.

Im vierten Abschnitt wird dann ein adaptiver Algorithmus vorgestellt, der es ermöglichen soll die variablen Schrittweiten effektiv zu nutzen.

Anschließend werden die VSSBDF-Verfahren an Hand von zwei zeitabhängigen Konvektions-Diffusions-Gleichungen numerisch untersucht. Dabei sollen die hergeleiteten Konvergenzordnungen bestätigt werden. Abschließend werden die VSSBDF-Verfahren mit konstanter Schrittweite mit den adaptiven Verfahren verglichen.

Im letzten Abschnitt werden die Resultate der Arbeit zusammengefasst und mögliche Weiterführungen aufgezeigt.

2 Lineare Mehrschrittverfahren

In diesem Abschnitt werden allgemeine lineare Mehrschrittverfahren eingeführt. Das Ziel dabei ist es notwendige und hinreichende Bedingungen für deren Konvergenz zu entwickeln. Es wird sich zeigen, dass dafür die Begriffe Stabilität und Konsistenz eine große Rolle spielen. Dabei folgen wir dem Vorgehen in [DB08].

Im Anschluss wird noch auf eine wichtige Familie von linearen Mehrschrittverfahren, die sogenannten BDF-Verfahren, eingegangen. Diese Verfahren sind beliebt bei der Anwendung auf steife Differentialgleichungen und bilden aus diesem Grund eine wichtige Basis für die später vorgestellten Verfahren.

2.1 Grundlagen

Wir betrachten das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned}x'(t) &= f(t, x) & \forall t \in (t_0, T] \\x(t_0) &= x_0 \in \mathbb{R}^d\end{aligned}\tag{2.1}$$

mit $f : (t_0, T] \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$ lipschitzstetig und $t_0, T \in \mathbb{R}$.

Definition 2.1. Wir nennen $x : [t_0, T] \mapsto \mathbb{R}^d$ eine Lösung des Problems 2.1, wenn x die Gleichungen punktweise erfüllt.

Um das Anfangswertproblem numerisch zu lösen, diskretisieren wir $[t_0, T]$ und betrachten die Lösung auf dem Gitter

$$\Delta := \{t_0, t_1, \dots, t_N\} \quad t_0 < t_1 < \dots < t_N = T.$$

Wir suchen also eine Gitterfunktion $U : \Delta \mapsto \mathbb{R}^d$, die die Lösung x gut approximiert.

Dabei vereinbaren wir die Schreibweise $U(t_j) := U^j$ und definieren die Schrittweiten $\tau_j = t_{j+1} - t_j$ sowie die Schrittweitenverhältnisse $\omega_j = \frac{\tau_j}{\tau_{j-1}}$.

Nach diesen Grundlagen können wir nun zur Definition von linearen Mehrschrittverfahren kommen.

2.2 Definition der Mehrschrittverfahren

Definition 2.2. Ein allgemeines lineares s -Schrittverfahren zur Bestimmung der Gitterfunktion U ist durch eine Rekursion der Form

$$\frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} U^{n+j} = \sum_{j=0}^s \beta_{j,n} f(t_{n+j}, U^{n+j})\tag{2.2}$$

für $j = 0, \dots, n - s$ gegeben. Dabei gilt:

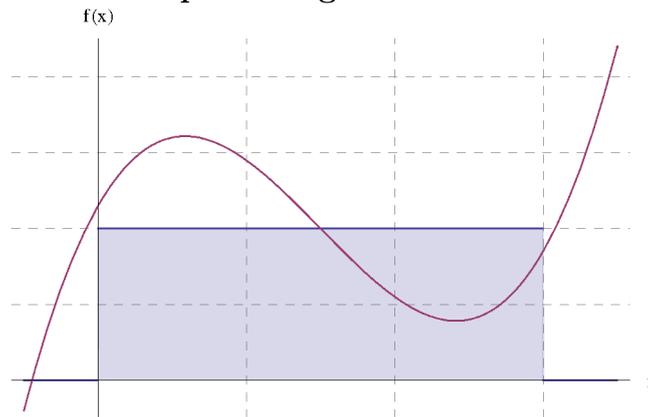
$$\begin{aligned} \alpha_{0,n}, \dots, \alpha_{s,n}, \beta_{0,n}, \dots, \beta_{s,n} &\in \mathbb{R}, \\ \alpha_{s,n} &\neq 0, \\ \tau_n &= t_{n+1} - t_n \quad \forall t_n, t_{n+1} \in \Delta. \end{aligned}$$

Die variablen Koeffizienten $\alpha_{j,n}, \beta_{j,n}$ hängen nur von den Schrittweitenverhältnissen $\omega_i := \tau_i / \tau_{i-1}$ ab.

Für $\beta_{s,n} = 0$ ist das Mehrschrittverfahren explizit, ansonsten implizit.

Wir wollen nun zeigen, wie sich ein Mehrschrittverfahren leicht aus Quadraturformeln bestimmen lässt.

Beispiel 2.3. Explizite Mittelpunktsregel



Wir betrachten die Taylorentwicklung der Funktion f . Für f hinreichend glatt gilt:

$$\begin{aligned} f(t, x(t)) - f(t_j, x(t_j)) &= \\ (t - t_j)f'(t_j, x(t_j)) + \frac{(t - t_j)^2}{2}f''(t_j, x(t_j)) + \mathcal{O}((t - t_j)^3). \end{aligned}$$

Auf einem äquidistanten Gitter mit Schrittweite τ ergibt also Integration nach t :

$$\begin{aligned} \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} f(t, x(t)) dt &= \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} f(t_j, x(t_j)) + (t - t_j)f'(t_j, x(t_j)) \\ &\quad + \frac{(t - t_j)^2}{2}f''(t_j, x(t_j)) + \mathcal{O}((t - t_j)^3) dt \\ &= 2\tau f(t_j, x(t_j)) + \mathcal{O}(\tau^3) \quad \text{mit } \tau = \tau_i \quad \forall i \\ x(t_{j+1}) &= x(t_{j-1}) + \int_{t_{j-1}}^{t_{j+1}} f(\sigma, x(\sigma)) d\sigma \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{x(t_{j+1}) - x(t_{j-1})}{2\tau} = f(t_j, x(t_j)) + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (2.3)$$

Der Fehler, den man bei dieser Näherung der ersten Ableitung macht, ist also von zweiter Ordnung in τ .

Es stellt sich nun die Frage, ob die Rekursion, die durch ein Mehrschrittverfahren definiert wird, immer eine (eindeutige) Lösung besitzt. Im expliziten Fall, das heißt für $\beta_{s,n} = 0$, lässt sich direkt schreiben:

$$U^{n+s} = \frac{\tau_{n+s-1} \sum_{i=0}^{s-1} (\beta_{i,n} f(t_{j+i}, U^{j+i}) - \alpha_{i,n} U^{j+i})}{\alpha_{k,n}}.$$

Für ein implizites Mehrschrittverfahren hingegen zeigt das folgende Lemma, dass eine Schrittweitenbeschränkung die Lösbarkeit des Gleichungssystems garantiert.

Lemma 2.4. *Die Abbildung $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ genüge der Lipschitzbedingung*

$$|f(t, x) - f(t, \bar{x})| \leq L|x - \bar{x}|$$

für alle $x, \bar{x} \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}$. Dann existiert, falls

$$\tau_n < \frac{|\alpha_{k,n}|}{|\beta_{s,n}|L} \quad \forall \tau_n,$$

zu beliebigen Startwerten U^0, \dots, U^{k-1} eine eindeutige Gitterfunktion U , welche die Rekursion des Mehrschrittverfahrens erfüllt.

Beweis. Es muss die Fixpunktgleichung

$$x_* = g(x_*)$$

$$g(x) := \tau_{n+s-1} \left(\frac{\beta_{s,n}}{\alpha_{k,n}} f(t_{j+k}, x) + \frac{\sum_{i=0}^{k-1} (\beta_{i,n} f(t_{j+i}, U^{j+i}) - \alpha_{i,n} U^{j+i})}{\alpha_{k,n}} \right)$$

gelöst werden. Nach Voraussetzung gilt aber

$$|g(x) - g(\bar{x})| \leq |\tau_{n+s-1} \frac{\beta_{s,n}}{\alpha_{k,n}}| |f(t_{j+k}, x) - f(t_{j+k}, \bar{x})| \leq |\tau_{n+s-1} \frac{\beta_{s,n}}{\alpha_{k,n}}| L|x - \bar{x}| < |x - \bar{x}|.$$

Gemäß Banachschen Fixpunktsatz hat die Fixpunktgleichung also eine eindeutige Lösung. \square

Durch die Einführung eines Shiftoperators lässt sich die gesamte Formulierung 2.2 leichter schreiben.

Aus einer Gitterfunktion $\phi : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^d$ wird durch

$$(E\phi)(t_j) = \phi(t_{j+1}) \quad j = 0, 1, \dots \quad (2.4)$$

die um eine Stelle verschobene Gitterfunktion $E\phi : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^d$.

Auf diese Weise lässt sich die Rekursion des Mehrschrittverfahrens folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} & (\alpha_{s,n}E^s + \alpha_{s-1,n}E^{s-1} + \dots + \alpha_{0,n})U^n = \\ & \tau_{n+s-1}(\beta_{s,n}E^s + \beta_{s-1,n}E^{s-1} + \dots + \beta_{0,n})f(t_n, U^n). \end{aligned}$$

Definiert man weiter

$$\begin{aligned} \rho(\zeta) &= \alpha_{k,n}\zeta^k + \alpha_{k-1,n}\zeta^{k-1} + \dots + \alpha_{0,n} \\ \sigma(\zeta) &= \beta_{s,n}\zeta^k + \beta_{k-1,n}\zeta^{k-1} + \dots + \beta_{0,n}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

so vereinfacht sich die Rekursion zu:

$$\rho(E)U^n = \tau_{n+s-1}\sigma(E)f(t_n, U^n) \quad \forall t_n \in \Delta. \quad (2.6)$$

Ein s -Schriftverfahren lässt sich also durch die Polynome ρ und σ eindeutig beschreiben.

Beispiel 2.5. Die explizite Mittelpunktsregel

$$U^{j+2} - U^j = 2\tau U^{j+1}$$

ist also gegeben durch

$$\begin{aligned} \rho(\zeta) &= \zeta^2 - 1 \\ \sigma(\zeta) &= 2\zeta. \end{aligned}$$

2.3 Konsistenz und Stabilität

In diesem Abschnitt werden einige wünschenswerte Eigenschaften von Mehrschrittverfahren betrachtet. Später werden wir sehen, dass die Konsistenz und die Stabilität wichtig sind um über die Konvergenz eines Verfahrens sprechen zu können.

2.3.1 Konsistenz

Gemäß Definition gilt:

$$\rho(E)U^n - \tau_{n+s-1}\sigma(E)f(t_n, U^n) = 0 \quad \forall t_n \in \Delta.$$

Wir setzen statt der Gitterfunktion die Lösung des Anfangswertproblems ein und definieren dadurch den Differenzoperator

$$\begin{aligned} L : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d &\mapsto \mathbb{R}^d & L(x, t_n) &= \rho(E)x(t_n) - \tau_{n+s-1}\sigma(E)f(t_n, x) \\ & & &= \rho(E)x(t_n) - \tau_{n+s-1}\sigma(E)x'(t_n). \end{aligned}$$

Über die Abweichung von L zu 0 definieren wir die Konsistenz eines Mehrschrittverfahrens.

Definition 2.6. Ein lineares Mehrschrittverfahren besitzt die Konsistenzordnung p , wenn für alle $x \in C^\infty([t_0, T], \mathbb{R}^d)$

$$L(x, t_n) = \mathcal{O}(\tau_n^p)$$

gleichmäßig für alle $t_n, \tau_n \in \mathbb{R}$ gilt.

Diese Definition ist etwas unhandlich um Verfahren auf Konsistenz zu überprüfen bzw. Verfahren mit einer bestimmten Konsistenzordnung zu konstruieren. Deshalb werden wir im folgenden Satz äquivalente Bedingungen aufstellen.

Satz 2.7. Ein lineares s -Schrittverfahren hat genau dann die Konsistenzordnung p , wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind

$$\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0 \tag{2.7a}$$

$$\sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n}}{\tau_{n+s-1}} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} = (i+1) \sum_{j=0}^s \beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i. \quad \text{für } i = 0, \dots, p-1. \tag{2.7b}$$

Beweis. Um den lokalen Fehler $L(x, t_n)$ abschätzen zu können, entwickeln wir zunächst ρ und σ in Taylorreihen:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} x(t_{n+j}) &= \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} \sum_{i=0}^p \frac{u^{(i)}(t_n)}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n)^{p+1} \\ &\stackrel{2.1}{=} \alpha_{0,n} x(t_n) + \sum_{j=1}^s \alpha_{j,n} \left(x(t_n) + \sum_{i=0}^{p-1} \frac{f(t_n, x(t_n))^{(i)}}{(i+1)!} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} \right) + \mathcal{O}(\tau_n)^{p+1} \end{aligned}$$

$$\sum_{j=0}^s \beta_{j,n} f(t_{n+j}, x(t_{n+j})) = \sum_{j=0}^s \beta_{j,n} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{f(t_n, x(t_n))^{(i)}}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n)^p.$$

Es folgt also für $L(x, t_n)$:

$$L(x, t_n) = \frac{\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n}}{\tau_{n+s-1}} + \sum_{i=0}^{p-1} f(t_n, x(t_n))^{(i)} \left(\sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^{i+1}}{\tau_{n+s-1} (i+1)!} - \sum_{j=0}^s \frac{\beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i}{i!} \right) + \mathcal{O}(\tau_n)^p.$$

Damit nun $L(x, t_n) = \mathcal{O}(\tau_n^p)$ gilt, müssen die Terme

$$\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^{i+1}}{\tau_{n+s-1} (i+1)!} - \sum_{j=0}^s \frac{\beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i}{i!}$$

für $i = 1 \dots k$ verschwinden. Dies sind aber gerade die Ordnungsbedingungen 2.7a und 2.7b. \square

Bemerkung 2.8. Für äquidistante Gitter vereinfachen sich obige Bedingungen für ein s -Schrittverfahren der Konsistenzordnung p auf

$$\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0 \tag{2.8a}$$

$$\sum_{j=1}^s \alpha_{j,n} j^{i+1} = (i+1) \sum_{j=0}^s \beta_{j,n} j^i \quad \text{für } i = 0, \dots, p-1. \tag{2.8b}$$

Im Vergleich zu den Bedingungsgleichungen bei Runge-Kutta-Verfahren ist das Aufstellen der Bedingungsgleichungen also wesentlich weniger aufwendig. Dies ist der Tatsache geschuldet, dass wir keine geschachtelten Ausdrücke betrachten müssen.

Beispiel 2.9. Explizite Mittelpunkregel

Die explizite Mittelpunkregel hat die Koeffizienten

$$\begin{array}{lll} \alpha_{2,n} = 1 & \alpha_{1,n} = 0 & \alpha_{0,n} = -1 \\ \beta_{2,n} = 0 & \beta_{1,n} = 2 & \beta_{0,n} = 0. \end{array}$$

Damit gilt:

$$\sum_{j=0}^2 \alpha_{j,n} = 0$$

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^2 \alpha_{j,n} j^1 &= 2 = 1 \sum_{j=0}^2 \beta_{j,n} j^0 \\ \sum_{j=0}^2 \alpha_{j,n} j^2 &= 4 = 2 \sum_{j=0}^2 \beta_{j,n} j^1 \\ \sum_{j=0}^2 \alpha_{j,n} j^3 &= 8 \neq 6 = \sum_{j=0}^2 \beta_{j,n} j^2.\end{aligned}$$

Das Verfahren hat also Konsistenzordnung 2.

Tatsächlich besteht ein einfacher Zusammenhang zwischen dem Abschneidefehler $L(x, t_n)$ und dem lokalen Fehler $U^n - x(t_n)$, wobei für die Anfangswerte $U^{n-i} = x(t_{n-i})$ für $i = 1 \dots s-1$ vorausgesetzt wird.

Satz 2.10. *Sei f stetig differenzierbar. Dann gilt für den lokalen Fehler*

$$L(x, t_n) = \left(\frac{\alpha_{s,n}}{\tau_{n-1}} I - \nabla f(t_n, \eta) \right) (U^n - x(t_n))$$

für ein η auf der Strecke zwischen $x(t_n)$ und U^n .

Insbesondere gilt für ein Verfahren der Konsistenzordnung p auch $U^n - x(t_n) = \mathcal{O}(\tau_n^p)$.

Beweis. Aus der Definition der Mehrschrittverfahren der betrachteten Lösung für den lokalen Fehler folgt für den Zeitschritt t_n die implizite Gleichung

$$\sum_{j=0}^{s-1} \left(\frac{1}{\tau_{n-1}} \alpha_{j,n} x(t_j) - \beta_{j,n} f(t_j, x(t_j)) \right) = -\frac{1}{\tau_{n-1}} \alpha_{s,n} U^s + \beta_{s,n} f(t_n, U^n).$$

Mit dem Operator L schreibt sich diese als

$$\begin{aligned}L(x, t_n) - \frac{1}{\tau_{n-1}} \alpha_{s,n} x(t_n) + \beta_{s,n} f(t_n, x(t_n)) &= -\frac{1}{\tau_{n-1}} \alpha_{s,n} U^s + \beta_{s,n} f(t_n, U^n) \\ \Rightarrow L(x, t_n) &= \frac{1}{\tau_{n-1}} \alpha_{s,n} (x(t_n) - U^n) - \beta_{s,n} (f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, U^n)).\end{aligned}$$

Mit dem Mittelwertsatz folgt nun, dass es η auf der Strecke zwischen $x(t_n)$ und U^n mit $f(t_n, x(t_n)) - f(t_n, U^n) = \nabla f(t_n, \eta) \cdot (x(t_n) - U^n)$ gibt. Folglich gilt mit diesem η

$$L(x, t_n) = \left(\frac{\alpha_{k,n}}{\tau_{n-1}} I - \nabla f(t_n, \eta) \right) (U^n - x(t_n)).$$

□

Um ein s -Schrittverfahren mit möglichst hoher Konsistenzordnung zu konstruieren, müssen wir die $p+1$ linearen Bedingungsgleichungen in den $2k+2$ Parametern $\alpha_{0,n}, \dots, \alpha_{s,n}, \beta_{0,n}, \beta_{s,n}$ lösen. Da wir stets $\alpha_{s,n} \neq 0$ vorausgesetzt haben, können wir $\alpha_{s,n} = 1$ setzen.

Es gilt folgendes Lemma für äquidistante Gitter:

Lemma 2.11.

- *Es gibt kein s -Schrittverfahren der Ordnung $2p + 1$.*
- *Es existiert genau ein implizites s -Schrittverfahren der Ordnung $2p$ mit $\alpha_{s,n} = 1$.*
- *Es existiert genau ein explizites s -Schrittverfahren der Ordnung $2p - 1$ mit $\alpha_{s,n} = 1$.*

Beweis. Vgl. [Dah56] □

Diese Verfahren sind aber praktisch kaum benutzbar. Wir werden nämlich sehen, dass sie nicht stabil sind.

2.3.2 Stabilität

Das eindeutige explizite Zweischnittverfahren der Ordnung $p = 3$ mit $\alpha_{s,n} = 1$ und konstanter Schrittweite ist gegeben durch

$$\rho(\zeta) = \zeta^2 + 4\zeta - 5, \sigma(\zeta) = 4\zeta + 2.$$

Wendet man dieses Verfahren auf das Anfangswertproblem

$$x' = 0 \quad x(0) = 1$$

mit

$$U^0 = 1 \quad U^1 = 1 + \tau\epsilon$$

an, so erhält man die Gitterfunktion

$$U^j = 1 + \tau\epsilon(1 - (-5)^{t_j/\tau})/6 \quad \text{für } t_j \in \Delta.$$

Es gilt somit

$$\lim_{t_j/\tau \rightarrow \infty} U^j = \infty$$

für $\epsilon \neq 0$ und festes t . Dies steht in starkem Kontrast zur konstanten Lösung des Anfangswertproblems. Offensichtlich reicht also der Begriff der Konsistenz nicht aus um Konvergenz des Verfahrens zu erreichen.

Dieses Beispiel motiviert die Einführung eines weiteren Begriffs.

Definition 2.12. Nullstabilität

Ein lineares Mehrschrittverfahren heißt nullstabil, falls für die durch das Anfangswertproblem

$$x' = 0 \quad x(0) = 1$$

erzeugte Gitterfunktion U gilt:

Es gibt für jedes k -Tupel von Anfangswerten eine Konstante M , sodass gilt:

$$U^n < M, n = 0, 1, 2, \dots$$

Dabei ist die Gitterfunktion gegeben durch die Lösung der Differenzgleichung

$$\rho(E)U = 0.$$

Bevor wir nun zu einer äquivalenten Bedingung für die Nullstabilität kommen können, benötigen wir noch das folgende Lemma.

Lemma 2.13. *Gegeben sei die homogene lineare Differenzgleichung*

$$\sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} x_{k+j} = 0, \quad k = 0, 1, \dots$$

mit dem charakteristischen Polynom

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} z^j. \tag{2.9}$$

Weiter seien λ_i die s verschiedenen Nullstellen von ρ und μ_i ihre Vielfachheit. Dann ist jede Lösung $(x_k)_{k \geq 0}$ der Differenzgleichung eine Linearkombination der folgenden m

linear unabhängigen Fundamentallösungen:

$$\begin{aligned}
 x_i^{(1)}(k) &= \lambda_i^k \\
 x_i^{(2)}(k) &= k\lambda_i^{k-1} \\
 &\vdots \\
 x_i^{(\mu_i)}(k) &= k(k-1)\dots(k-\mu_i+2)\lambda_i^{k-\mu_i+1}.
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Beweis. Die Fundamentallösungen lösen die Gleichung:

Da λ_i eine μ_i -fache Nullstelle ist, gilt:

$$\rho(\lambda_i) = \rho'(\lambda_i) = \dots = \rho^{(\mu_i-1)}(\lambda_i) = 0.$$

Daraus folgt für $1 \leq r \leq \mu_i$

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} x_i^{(1)}(k+j) &= \sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} \lambda_i^{k+j} \\
 &= \lambda_i^k \rho(\lambda_i) = 0 \\
 \sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} x_i^{(r)}(k+j) &= \sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} (k+j)(k+j-1)\dots(k+j-r+2) \lambda_i^{k+j-r+1} \\
 &= \frac{d^r}{dx^{r-1}} \left(\sum_{j=0}^m \alpha_{j,n} x^{k+j} \right) \Big|_{x=\lambda_i} \\
 &= \frac{d^r}{dx^{r-1}} (x^k \rho(x)) \Big|_{x=\lambda_i} = 0.
 \end{aligned}$$

Nun ist jede Linearkombination von Lösungen einer homogenen Differenzgleichung wieder eine Lösung dieser Gleichung.

Die Fundamentallösungen erzeugen alle Lösungen:

Um dies zu zeigen genügt es sich die ersten m -Funktionswerte anzuschauen. Man betrachtet die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} x_1^{(1)}(1) & x_1^{(1)}(2) & \dots & x_1^{(1)}(m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{(\mu_1)}(1) & x_1^{(\mu_1)}(2) & \dots & x_1^{(\mu_1)}(m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_s^{(\mu_s)}(1) & x_s^{(\mu_s)}(2) & \dots & x_s^{(\mu_s)}(m) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_1^2 & \cdots & \cdots & \cdots & \lambda_1^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & (\mu_1 - 1)! & \cdots & m(m-1) \cdots (m - \mu_1 + 2) \lambda_1^{m-\mu_1+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & (\mu_s - 1)! & \cdots & m(m-1) \cdots (m - \mu_s + 2) \lambda_s^{m-\mu_s+1} \end{pmatrix}.$$

Dies ist aber gerade die Matrix des Hermite-Interpolationsproblems:

Finde ein Polynom P vom Grad $\leq m$ mit

$$\begin{aligned} P(\lambda_1) &= y_{11}, \dots, P^{(\mu_1)}(\lambda_1) = y_{1\mu_1} \\ &\vdots \\ P(\lambda_s) &= y_{s1}, \dots, P^{(\mu_s)}(\lambda_s) = y_{s\mu_s}. \end{aligned}$$

Dieses Problem ist für beliebige (paarweise verschiedene) $y_{11}, \dots, y_{s\mu_s}$ eindeutig lösbar.

Also gilt $\det(A) \neq 0$ und die Fundamentallösungen erzeugen jede Lösung.

Jede Lösung lässt sich daher als Linearkombination der Fundamentallösungen schreiben. \square

Mit Hilfe dieses Lemmas lässt sich der nun folgende Satz leicht beweisen.

Satz 2.14 (Dahlquistsche-Wurzelbedingung).

Ein lineares Mehrschrittverfahren ist genau dann stabil, wenn jede Wurzel ζ des Polynoms ρ der Bedingung $|\zeta| \leq 1$ genügt und $|\zeta| = 1$ nur für einfache Nullstellen vorliegt.

Beweis. Gemäß der Definition der Stabilität genügt es die homogene Differenzgleichung mit dem charakteristischen Polynom ρ zu betrachten. Für große n entscheidet gemäß dem Lemma nur noch eine betragsmäßig größte Nullstelle über die Beschränktheit von U . Nun gilt aber

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\zeta|^n < \infty \iff |\zeta| \leq 1.$$

Ist nun weiter eine Nullstelle ζ mit $|\zeta| = 1$ mehrfach, so hat der entscheidende Term die Form $n^s \zeta^n$ mit $s \in \mathbb{N}$. Aus

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |n^s \zeta^n| = |n|^s < \infty \iff s \leq 1$$

folgt also, dass die Dahlquistsche-Wurzelbedingung notwendig und hinreichend für die Stabilität des linearen Mehrschrittverfahrens ist. \square

Bemerkung 2.15.

1. Für ein konsistentes lineares Einschrittverfahren gilt $\rho(\zeta) = \zeta - 1$. Dieses hat nur die Nullstelle 1. Folglich ist jedes *lineare* Einschrittverfahren in diesem Sinne stabil.
2. Für ein Verfahren mit konstanten Koeffizienten (z.B. durch Definition auf einem äquidistanten Gitter) ist die Dahlquistsche-Wurzelbedingung eine gute Möglichkeit Stabilität festzustellen. Bei einem allgemeinen Verfahren garantieren hingegen erst Schrittweitenbeschränkungen die Stabilität des Verfahrens.

Definieren wir die Begleitmatrix durch

$$A_n = \begin{pmatrix} -\alpha'_{s-1,n} & -\alpha'_{s-2,n} & \cdots & -\alpha'_{0,n} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

so bietet sich eine weitere äquivalente Bedingung zur Stabilität. Dieses Ergebnis wird sich als nützlich für die Betrachtung der Konvergenz des Verfahrens erweisen.

Lemma 2.16. *Das Mehrschrittverfahren ist genau dann stabil, wenn für eine induzierte Matrixnorm $\|\cdot\|$ die Beschränkung $\|A_n \dots A_0\| \leq M$ für alle n gilt.*

Beweis. Mit $f \equiv 0$ schreibt sich das Mehrschrittverfahren als

$$\frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} U^{n+j} = 0 \quad (2.12)$$

$$\stackrel{\alpha_{s,n} \neq 0}{\iff} U^{n+s} + \sum_{j=0}^{s-1} \alpha_{j,n} U^{n+j} = 0. \quad (2.13)$$

Führt man nun $X_n := (U^{n+s-1}, \dots, U^n)^T$ ein, so ist die Rekursion äquivalent zu

$$X_{n+1} = A_n X_n \quad (2.14)$$

$$\Rightarrow X_{n+1} = A_n \dots A_0 X_0. \quad (2.15)$$

Die Lösung bleibt also genau dann für beliebige Startwerte beschränkt, wenn

$$\|A_n \dots A_0\| \leq M \quad (2.16)$$

für eine induzierte Matrixnorm und alle $n \in \mathbb{N}$ gilt. □

2.4 Konvergenz

Bei der Entwicklung einer Konvergenztheorie orientieren wir uns an [HNW93].

Definition 2.17. Sei $x \in C^\infty([t_0, T], \mathbb{R}^d)$ die Lösung eines Anfangswertproblem $x' = f(t, x), x(t_0) = x_0$. Ein Mehrschrittverfahren konvergiert gegen diese Lösung, wenn

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} U^j = x(t_j) \quad \tau = \max_{j=0, \dots, N-1} \tau_j$$

für alle $t \in \Delta \cup [t_0, T]$ gilt, sobald die Startwerte

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} U^j = x_0 \quad j = 0, \dots, k-1$$

erfüllen. Ein lineares Mehrschrittverfahren, das für beliebige Anfangswertprobleme mit hinreichend glatter rechter Seite konvergiert, heißt konvergent.

Um eine Aussage über allgemeine schrittweitenabhängige Mehrschrittverfahren machen zu können, benötigen wir noch die beiden folgenden Definitionen.

Definition 2.18. Seien $\bar{\alpha}, \bar{\beta}$ positive reelle Konstanten. Dann gehört eine Gitterfolge Δ_N zur Menge $\mathcal{H}(\bar{\alpha}, \bar{\beta})$, falls mit $\tau = \max_{0 \leq k \leq N} \tau_k$ gilt:

1. Es gibt eine Konstante $c > 0$ mit $\tau N \leq c$ für beliebige N .
2. $0 < \bar{\alpha} \leq \omega_k \leq \bar{\beta} < \infty \quad k = 1, \dots, N$

Wir nennen solche Gitterfolgen stabil.

Weiterhin sollen die Koeffizienten in Abhängigkeit von den Schrittweitenverhältnissen nicht beliebig wachsen dürfen.

Definition 2.19. Die Koeffizienten $\alpha_{i,n}$ und $\beta_{i,n}$ heißen gleichmäßig beschränkt, falls zwei Konstanten α und β existieren mit

$$\begin{aligned} |\alpha_{i,n}| &\leq \alpha < \infty & i = 0, \dots, s-1 \\ |\beta_{i,n}| &\leq \beta < \infty & i = 0, \dots, s-1 \end{aligned}$$

für alle konstanten Gitterfolgen $\Delta \in \mathcal{H}(\bar{\alpha}, \bar{\beta})$.

Nun ist es möglich ein Konvergenzresultat zu formulieren.

Für den Beweis der Konvergenz wird es sich als nützlich erweisen Mehrschrittverfahren als höherdimensionale Einschrittverfahren zu schreiben. Dafür definieren wir zunächst

$$\psi_n = \sum_{j=0}^{s-1} \beta'_{j,n} f(t_{n+j}, U^{n+j}) + \beta'_{s,n} f(t_{n+s}, \tau_{s+n-1} \psi_n) - \sum_{j=0}^{s-1} \alpha'_j U^{n+j} \quad (2.17)$$

mit $\alpha'_j = \alpha_j/\alpha_k$ und $\beta'_j = \beta_j/\beta_k$. Damit schreibt sich das Mehrschrittverfahren als

$$U^{n+s} = \tau_{s+n-1}\psi_n - \sum_{j=0}^{k-1} \alpha'_j U^{n+j}. \quad (2.18)$$

Mit dem $d \cdot s$ dimensionalen Vektoren (d sei die Dimension der Differentialgleichung)

$$X_n = (U^{n+s-1}, U^{n+s-2}, \dots, U^n)^T \quad n \geq 0 \quad (2.19)$$

und der Begleitmatrix

$$A_n = \begin{pmatrix} -\alpha'_{s-1,n} & -\alpha'_{s-2,n} & \cdots & -\alpha'_{0,n} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

kann das Mehrschrittverfahren schließlich geschrieben werden als

$$X_{n+1} = (A_n \otimes I)X_n + \tau_{n+s-1}\Phi_n(t_n, X_n, \tau_n) \quad (2.21)$$

$$\Phi_n(t_n, X_n, \tau_n) = (e_1 \otimes I)\psi_n. \quad (2.22)$$

Satz 2.20. *Unter den Voraussetzungen*

1. *das Mehrschrittverfahren ist stabil, hat Ordnung p und gleichmäßig beschränkte Koeffizienten $\alpha_{i,n}$ und $\beta_{i,n}$,*
2. *die Startwerte erfüllen $\|U^i - x(t_i)\| = \mathcal{O}(\tau_i^p) \quad \forall i = 0, \dots, s-1,$*
3. *die Schrittweitenverhältnisse sind gleichmäßig beschränkt ($\omega_n \leq C \quad \forall n \geq 1$ für eine Konstante C)*

konvergiert das Mehrschrittverfahren mit der Konvergenzordnung p .

Beweis. Zunächst definieren wir $X(t_n) := (x(t_{n+s-1}), \dots, x(t_{n+1}), x(t_n))$ durch die exakten Werte, die durch X_n approximiert werden sollen.

Da das Verfahren Konsistenzordnung p hat und sowohl die Schrittweiten als auch die Koeffizienten beschränkt sind, gilt für den lokalen Fehler

$$\delta_{n+1} := X(t_{n+1}) - (A \otimes I)X(t_n) - \tau_{n+s-1}\Phi_n(U^n, X(t_n), \tau_n) \quad (2.23)$$

$$\|\delta_{n+1}\| = \mathcal{O}(\tau_n)^{p+1}. \quad (2.24)$$

Mit Gleichung 2.22 folgt

$$X(t_{n+1}) - X_{n+1} = (A_n \otimes I)(X(t_n) - X_n) + \quad (2.25)$$

$$\tau_{n+s-1}(\Phi_n(t_n, X(t_n), \tau_n) - \Phi_n(t_n, X_n, \tau_n)) + \delta_{n+1}. \quad (2.26)$$

Setzt man nun im ersten Term der rechten Seite wieder $X(t_n) - X_n$ ein, so erhält man

$$\begin{aligned} X(t_{n+1} - X_{n+1}) &= (A_n \otimes I)((A_{n-1} \otimes I)(X(t_{n-1}) - X_{n-1}) \\ &\quad + \tau_{n+s-2}(\Phi_{n-1}(t_{n-1}, X(t_{n-1}), \tau_{n-1}) - \Phi_{n-1}(t_{n-1}, X_{n-1}, \tau_{n-1})) + \delta_n) \\ &\quad + \tau_{n+s-1}(\Phi_n(t_n, X(t_n), \tau_n) - \Phi_n(t_n, X_n, \tau_n)) + \delta_{n+1} \end{aligned}$$

wegen $(A_n \otimes I)(A_m \otimes I) = (A_n A_m) \otimes I$.

Induktiv folgt

$$X(t_{n+1}) - X_{n+1} = ((A_n \dots A_0) \otimes I)(X(t_0) - X_0) \quad (2.27)$$

$$+ \sum_{j=0}^n \tau_{j+s-1}(((A_n \dots A_{j+1}) \otimes I)(\Phi_j(t_j, X(t_j), \tau_j) - \Phi_j(t_j, X_j, \tau_j)) \quad (2.28)$$

$$+ \sum_{j=0}^{n-1} ((A_n \dots A_{j+1}) \otimes I)\delta_{j+1}) + \delta_{n+1}. \quad (2.29)$$

Mit der Lipschitzstetigkeit der Funktion f ist auch Φ im zweiten Argument lipschitzstetig mit der Lipschitzkonstanten L . Nutzt man nun noch die Stabilität des Mehrschrittverfahrens aus, so kann man die Gleichung 2.29 abschätzen zu

$$\|X(t_{n+1}) - X_{n+1}\| \leq M(\|X(t_0) - X_0\| + L \sum_{j=0}^n \tau_{j+s-1} \|X(t_j) - X_j\| + \sum_{j=0}^{n-1} \|\delta_{j+1}\| + \|\delta_{n+1}\|). \quad (2.30)$$

Benutzt man nun noch die Fehlerabschätzung 2.24 und die Ordnung der Startwerte, folgt weiter

$$\|X(t_{n+1}) - X_{n+1}\| \leq \sum_{j=0}^n \tau_{j+s-1} \tilde{L} \|X(t_j) - X_j\| + C\tau^p. \quad (2.31)$$

Wir definieren die Folge $\{\epsilon_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ durch

$$\epsilon_0 := \|X(t_0) - X_0\| \quad \epsilon_{n+1} = \sum_{j=0}^n \tau_{j+s-1} \tilde{L} \epsilon_j + C\tau^p. \quad (2.32)$$

Induktiv ergibt sich aus 2.31

$$\|X(t_0) - X_0\| \leq \epsilon_n. \quad (2.33)$$

Damit folgt aus der Definition 2.32 von ϵ_n für $n \geq 1$

$$\epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \tau_{n+s-1} L \epsilon_n \quad (2.34)$$

$$\Rightarrow \epsilon_{n+1} = \epsilon_n (1 + \tau_{n+s-1} L) \leq \exp(\tau_{n+s-1}) \epsilon_n. \quad (2.35)$$

Daraus können wir schließen

$$\epsilon_n \leq \exp((t_n - t_0)L) \epsilon_1 = \exp((t_n - t_0)L) (\tau_{s-1} \tilde{L} \|X(t_0) - X_0\| + C\tau^p). \quad (2.36)$$

Zusammen mit 2.33 und der Ordnung der Startwerte folgt also

$$\|X(t_n) - X_n\| \leq C\tau^p. \quad (2.37)$$

□

Ein wesentliches Problem ist es also das Verfahren zu starten. Man benötigt eine ebenso große Fehlerordnung der Anfangswerte wie Konsistenzordnung um die gleiche Konvergenzordnung zu erhalten. Um diese Startwerte zu bekommen, bieten sich zum Beispiel Runge-Kutta-Verfahren an. Andererseits ist es aber durchaus üblich die Verfahren einer Klasse sich selbst starten zu lassen. Hierbei beginnt man mit einem Einschrittverfahren und nimmt in jedem Schritt eine Stützstelle mehr hinzu bis man bei dem gewünschten Mehrschrittverfahren angelangt ist.

Satz 2.21. *Ein konvergentes Mehrschrittverfahren ist notwendigerweise stabil und konsistent.*

Beweis. Angenommen, das Verfahren ist nicht stabil. Dann hat das Polynom ρ eine Nullstelle ζ_1 vom Betrag größer als 1 oder eine Nullstelle ζ_2 vom Betrag 1, deren Vielfachheit größer als 1 ist. Dann ist ζ_1^n oder $n\zeta_2^n$ eine divergente Lösung der Differenzgleichung, die durch $\rho(E)(U) = 0$ gegeben ist. Wir wählen die Startwerte zu $U_1(0) = \sqrt{\tau}, \dots, U_1((s -$

$1)\tau) = \sqrt{\tau}\zeta_1^{(s-1)\tau}$ bzw. $U_2(0) = 0, \dots, U_2((s-1)\tau) = \sqrt{\tau}\tau(s-1)\zeta_2^{(s-1)\tau}$, die für $\tau \rightarrow 0$ alle gegen Null streben. Damit sind die Lösungen gegeben durch:

$$U_1(t) = \sqrt{\tau}\zeta_1^{t/\tau} \quad (2.38)$$

$$U_2(t) = t/\sqrt{\tau}\zeta_2^{t/\tau}. \quad (2.39)$$

Da für jedes feste t U_1 und U_2 für $\tau \rightarrow 0$ divergieren, kann das Mehrschrittverfahren nicht konvergieren.

Wir betrachten wieder das Problem $x'(t) = 0, x(0) = 1$ mit der konstanten Lösung $x \equiv 1$. Die Anwendung eines Mehrschrittverfahrens ergibt dann die Differenzengleichung

$$\alpha_{s,n}U(t_n + s\tau) + \dots + \alpha_{0,n}U(t_n) = 0. \quad (2.40)$$

Auf Grund der Konvergenz der Lösung erhält man beim Übergang $\tau \rightarrow 0$ die Bedingung $\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0$.

Als Letztes betrachten wir das Problem $x'(t) = 1, x(0) = 0$ mit der Lösung $x(t) = t$. Hier lautet die Differenzengleichung

$$\alpha_{s,n}U^{n+s} + \dots + \alpha_{0,n}U^n = \tau(\beta_{s,n} + \dots + \beta_{0,n}). \quad (2.41)$$

Macht man den linearen Ansatz $U^n = t_n k$, so folgt mit der Differenzengleichung und $\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0$

$$\alpha_{s,n}t_{n+s}k + \dots + \alpha_{0,n}t_n k = \tau_{n+s-1}(\beta_{s,n} + \dots + \beta_{0,n}) \quad (2.42)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=1}^s \alpha_{j,n}(t_{n+s} - t_n) = \tau_{n+s-1} \sum_{j=0}^s \beta_{j,n}(t_{n+s} - t_n). \quad (2.43)$$

Mit $U^n = t_n$ gilt $U(t) = tk$ und aus der Konvergenz folgt $k = 1$. Damit sind die beiden Bedingungen für die Konsistenz erfüllt. \square

Bemerkung 2.22. Im Falle äquidistanter Gitter ist ein Verfahren genau dann konvergent, wenn es stabil und konsistent ist.

Eine Aussage darüber, welche Konsistenzordnungen nun für stabile Mehrschrittverfahren erwartet werden können, macht das folgende Theorem.

Theorem 2.23 (Erste Dahlquist-Schranke).

Für die Konsistenzordnung p eines stabilen linearen s -Schriftverfahrens gelten die Beschränkungen

- $p \leq k + 2$, wenn k gerade ist,

- $p \leq k + 1$, wenn k ungerade ist,
- $p \leq k$, wenn $\beta_{s,n}/\alpha_{s,n} \leq 0 \forall n$ ist, also auch für explizite Verfahren.

Beweis. Vgl. [HNW93]

□

2.5 BDF-Verfahren

Nun wollen wir ein Verfahren aus den obigen Überlegungen konstruieren, das sich aus verschiedenen Gründen einer großen Beliebtheit bei der Anwendung auf steife Anfangswertprobleme erfreut. Diese Familie von Verfahren heißt BDF-Verfahren (backward differentiation formula) und ist zunächst nur für äquidistante Gitter definiert.

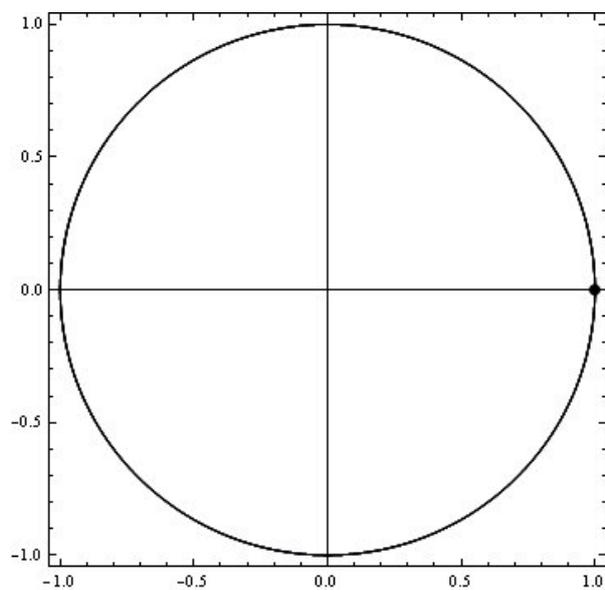
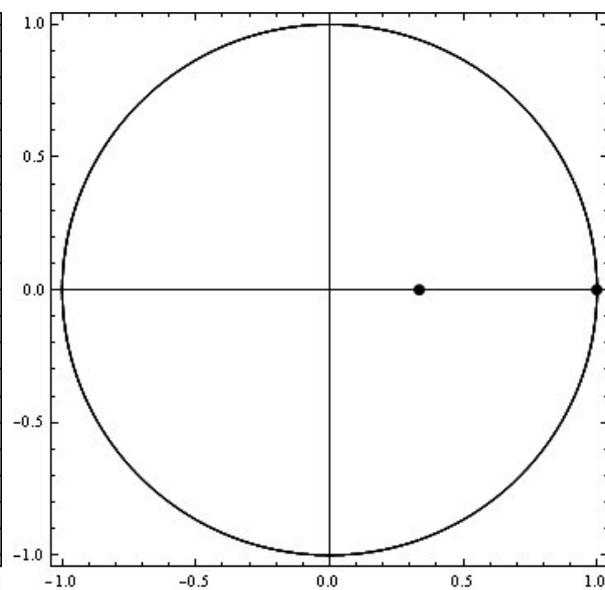
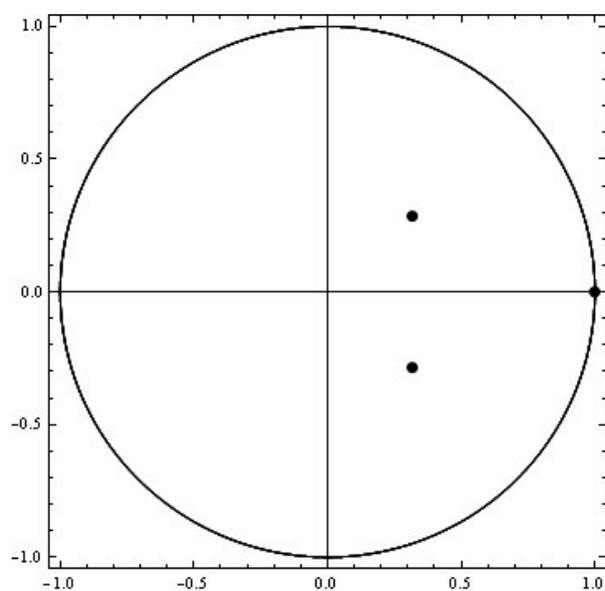
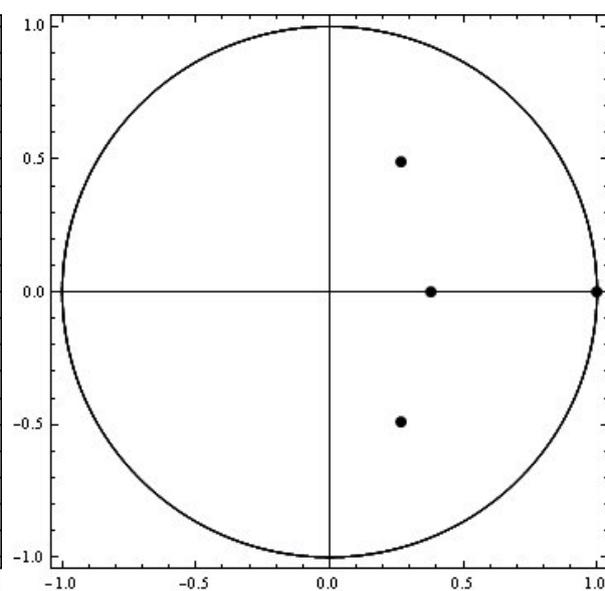
Wir betrachten zunächst einen unhistorischen Zugang, indem wir die Koeffizienten aus den Konsistenzbedingungen ermitteln. Für ein BDF-Verfahren der Schrittweite s wählen wir $\beta_s = 1$ und $\beta_i = 0$ für $i = 0 \dots s - 1$. Die verbleibenden Koeffizienten werden dann so gewählt, dass die Ordnung maximal wird. Dies führt uns auf die folgende Tabelle mit den Koeffizienten der BDF-Verfahren bis Ordnung 6.

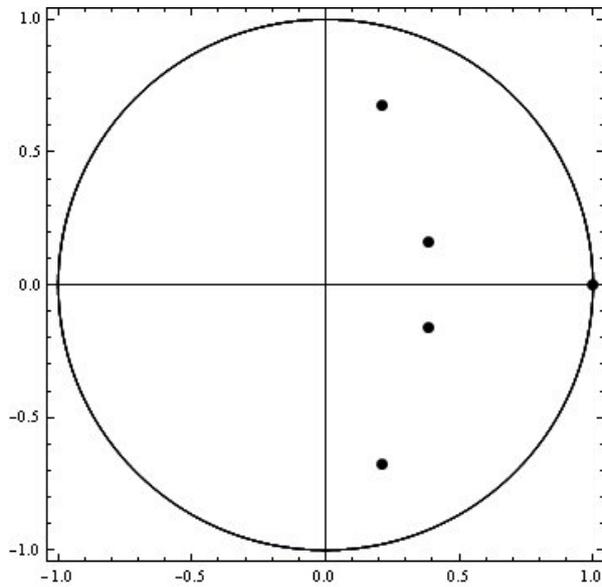
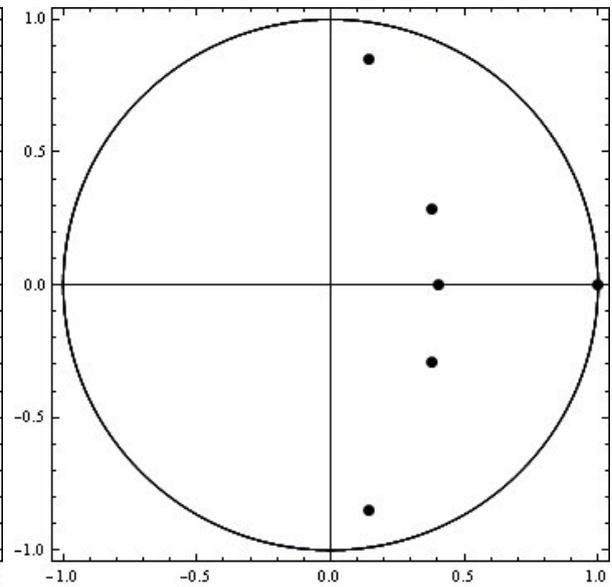
Tabelle 2.1: Koeffizienten der BDF-Verfahren

	$\alpha_{0,n}$	$\alpha_{1,n}$	$\alpha_{2,n}$	$\alpha_{3,n}$	$\alpha_{4,n}$	$\alpha_{5,n}$	$\alpha_{6,n}$
$k = 1$	-1	1					
$k = 2$	$\frac{1}{2}$	-2	$\frac{3}{2}$				
$k = 3$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{3}{2}$	-3	$\frac{11}{6}$			
$k = 4$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{4}{3}$	3	-4	$\frac{25}{12}$		
$k = 5$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{5}{4}$	$-\frac{10}{3}$	5	-5	$\frac{137}{60}$	
$k = 6$	$\frac{1}{6}$	$-\frac{6}{5}$	$\frac{15}{4}$	$-\frac{20}{3}$	$\frac{15}{2}$	-6	$\frac{49}{20}$

Die BDF-Verfahren ab der Ordnung 7 sind nicht mehr stabil und aus diesem Grund für unsere Betrachtungen nicht interessant. Einen Beweis dafür findet man in [HW83].

Die Stabilität der Verfahren bis Ordnung 6 erkennt man an den folgenden Grafiken für die Nullstellen des Polynoms ρ .

Abbildung 2.1: Nullstellen von ρ BDF1Abbildung 2.2: Nullstellen von ρ BDF2Abbildung 2.3: Nullstellen von ρ BDF3Abbildung 2.4: Nullstellen von ρ BDF4

Abbildung 2.5: Nullstellen von ρ BDF5Abbildung 2.6: Nullstellen von ρ BDF6

2.6 Alternative Motivation der BDF-Verfahren

Wir betrachten noch einmal die Ordnungsbedingungen für lineare Mehrschrittverfahren

$$\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0$$

$$\sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n}}{\tau_{n+s-1}} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} = (i+1) \sum_{j=0}^s \beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i \quad \text{für } i = 0, \dots, p-1.$$

Mit der Vandermonde-Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & t_{n+1} - t_n & \dots & t_{n+s} - t_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & (t_{n+1} - t_n)^p & \dots & (t_{n+s} - t_n)^p \end{pmatrix}$$

sowie den Vektoren

$$b = \tau_{n+s-1} (0, 1, 2(t_{n+s} - t_n), \dots, p(t_{n+s} - t_n)^{p-1})^T$$

$$a = (\alpha_{0,n}, \alpha_{1,n}, \dots, \alpha_{s,n})^T$$

lassen sich diese Bedingungen auch schreiben als

$$A \cdot a = b \Leftrightarrow a_i = \sum_{j=0}^s c_{ij} \cdot b_j \text{ für } (A^{-1})_{i,j} = c_{ij}. \quad (2.44)$$

Nun betrachten wir das Problem, das Interpolationspolynom $p \in \Pi_s$ mit

$$p(t_{n+j} - t_n) = \sum_{j=0}^s d_i (t_{n+j} - t_n)^i = U^{n+i} \quad i = 0, \dots, s \quad (2.45)$$

zu bestimmen, und wählen U^{n+s} so, dass

$$p'(t_{n+s} - t_n) = f(t_{n+s}, U^{n+s}) \quad (2.46)$$

gilt. Das Interpolationsproblem lässt sich damit und mit den obigen Definitionen in der Form

$$A^T \cdot d = (U^n, U^{n+1}, \dots, U^{n+s})^T$$

schreiben. Somit gilt also

$$p(x) = \sum_{j=0}^s \sum_{k=0}^s c_{kj} U^{n+k} x^j$$

und folglich

$$\begin{aligned} f(t_{n+s}, U^{n+s}) &= p'(t_{n+s}) = \sum_{k=0}^s U^{n+k} \sum_{j=0}^s j \cdot c_{kj} \cdot t_{n+s}^{j-1} \\ &\stackrel{2.44}{=} \frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{k=0}^s \alpha_{k,n} U^{n+k}. \end{aligned}$$

Somit ist die Konstruktion eines BDF-Verfahrens äquivalent zum Lösen des Interpolationsproblems 2.45.

Im folgenden Abschnitt werden wir sehen, warum sich die BDF-Verfahren so gut für die Anwendung auf steife Probleme eignen.

2.7 Stabilitätsgebiet

Für $\lambda \in \mathbb{C}_- = \{z \in \mathbb{C} : \Re(z) \leq 0\}$ fällt die Lösung der Differentialgleichung

$$f'(x) = \lambda x \quad (2.47)$$

exponentiell ab. Ein Verfahren, das diese Eigenschaft widerspiegelt, ist also besonders geeignet um schnell abklingende Lösungskomponenten zu approximieren. Diese treten insbesondere bei steifen Differentialgleichungen auf.

Wir betrachten also die Testgleichung 2.47 und untersuchen für welche $\lambda \in \mathbb{C}$ die Lösung aus dem Mehrschrittverfahren abfällt.

Anwenden eines Mehrschrittverfahrens auf diese Gleichung ergibt

$$\rho(E)U = \tau\sigma(E)\lambda U \Leftrightarrow (\rho - (\tau\lambda)\sigma)(E)U = 0.$$

Die Bedingung, dass die Lösung des Mehrschrittverfahrens abfällt, ist also äquivalent zur Stabilität der Differenzgleichung

$$(\rho - z\sigma)(E)x_\tau = 0 \quad \text{mit } z = \tau\lambda.$$

Damit definieren wir das Stabilitätsgebiet \mathcal{S} durch

$$\mathcal{S} = \{z \in \mathbb{C} : (\rho - (\tau\lambda)\sigma)(E)x_\tau = 0 \text{ ist eine stabile Differenzgleichung}\}.$$

Nach der Dahlquist'schen Wurzelbedingung besitzt das Polynom $\rho - z\sigma$ für $z \in \delta\mathcal{S}$ mindestens eine Nullstelle ζ mit $|\zeta| = 1$. Nun gilt

$$(\rho - z\sigma)(\zeta) = 0 \Leftrightarrow z = \frac{\rho(\zeta)}{\sigma(\zeta)}.$$

Mit der Wurzelortskurve $\mathcal{C} = \{\rho(\exp(i\phi))/\sigma(\exp(i\phi)) : \phi \in [0, 2\pi]\}$ folgt also

$$\delta\mathcal{S} \subset \mathcal{C}.$$

Das Berechnen dieser Kurve bietet also eine gute Möglichkeit das Stabilitätsgebiet abzuschätzen. Die Kurve teilt die komplexe Ebene in disjunkte Gebiete. Das Verfahren ist in einem solchen Gebiet genau dann stabil, wenn es für einen beliebigen Punkt in diesem Gebiet stabil ist.

Definition 2.24. Ein Verfahren heißt nun $A(\alpha)$ -stabil, falls für

$$\mathcal{S}_\alpha := \{z \in \mathbb{C} : |\arg(-z)| \leq \alpha\} \quad \alpha \in [0, \pi/2] \quad (2.48)$$

gilt

$$\mathcal{S}_\alpha \subset \mathcal{S}. \quad (2.49)$$

Ein $A(\alpha)$ – stabiles Verfahren mit $\alpha = \pi/2$ heißt A – stabil.

Bemerkung 2.25. Das Stabilitätsgebiet eines expliziten linearen Mehrschrittverfahrens ist beschränkt (vgl. [DB08, S. 377]). Aus diesem Grund ist es nötig implizite Mehrschrittverfahren zu betrachten um steife Probleme geeignet lösen zu können.

Nun wollen wir die Stabilitätsgebiete der BDF-Verfahren analysieren. Die folgenden Grafiken zeigen die Gebiete für die Verfahren bis Ordnung 6.

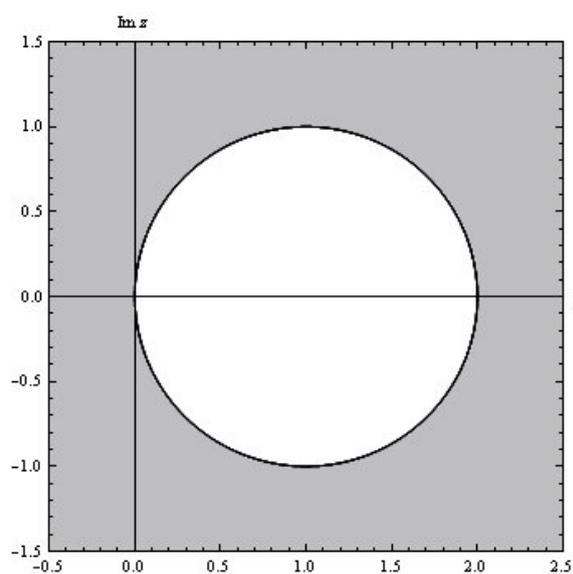


Abbildung 2.7: Stabilitätsgebiet BDF1

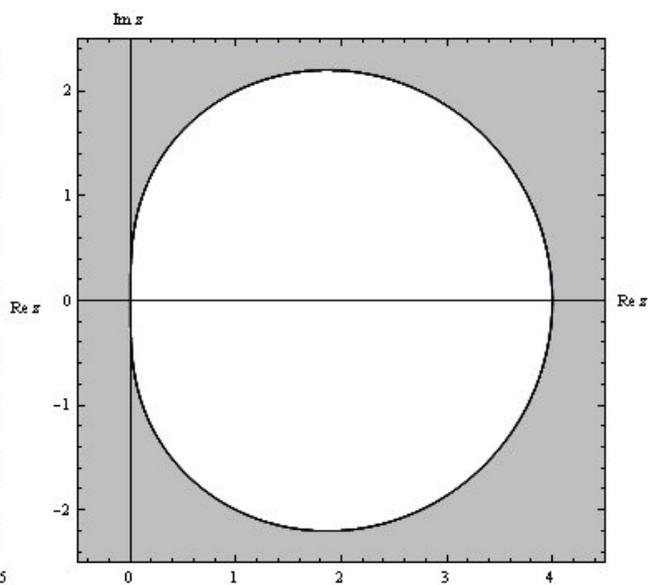


Abbildung 2.8: Stabilitätsgebiet BDF2

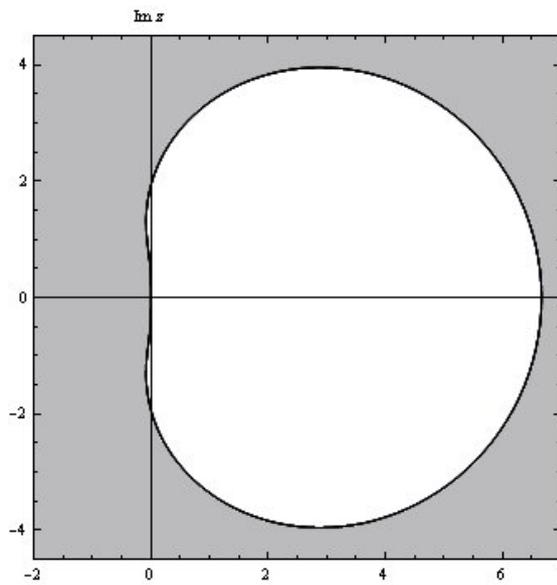


Abbildung 2.9: Stabilitätsgebiet BDF3

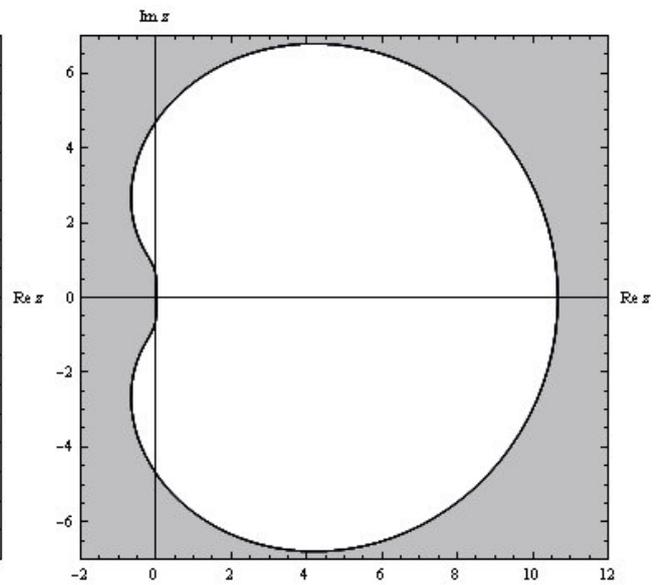


Abbildung 2.10: Stabilitätsgebiet BDF4

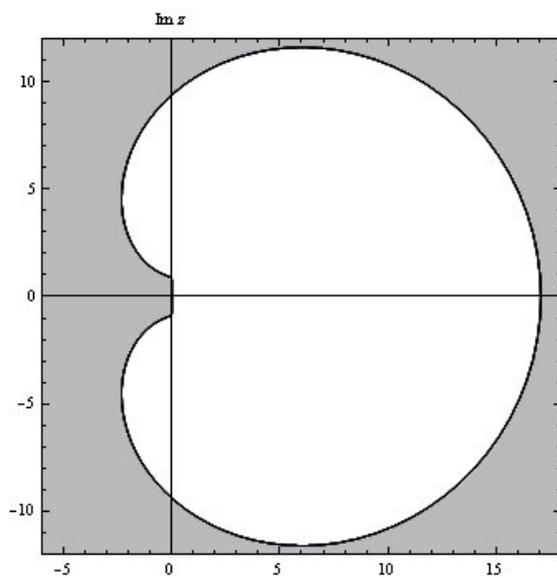


Abbildung 2.11: Stabilitätsgebiet BDF5

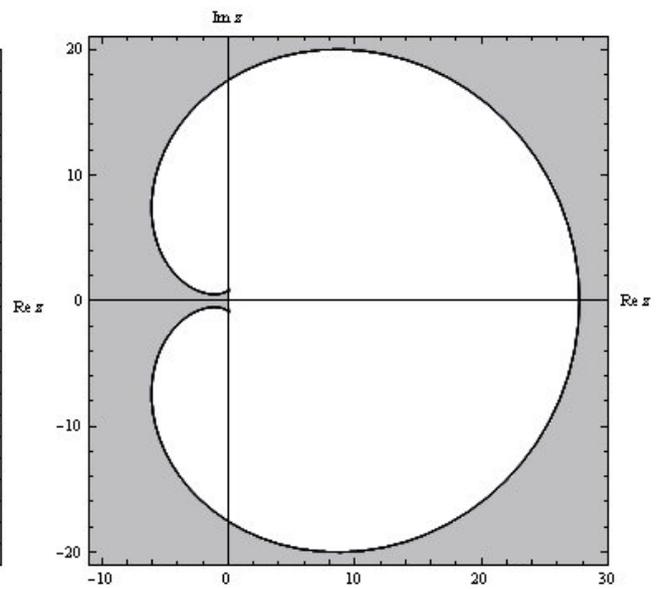


Abbildung 2.12: Stabilitätsgebiet BDF6

Man erkennt, dass alle Verfahren für $z \in \mathbb{C}$ für $|z|$ hinreichend groß stabil sind. Tatsächlich sind die Verfahren sogar $A(\alpha)$ -stabil mit den folgenden Winkeln α .

Tabelle 2.2: $A(\alpha)$ -Stabilität der BDF-Verfahren

k	1	2	3	4	5	6
α	90°	90°	86.03°	73.35°	51.84°	17.84°

Problematisch ist hier, dass die Verfahren hoher Ordnung für $z \in \mathbb{C}$ für kleine $|z|$ nicht mehr stabil sind, wenn z zu weit von der imaginären Achse entfernt ist. Um Stabilität garantieren zu können, darf man also unter Umständen keine zu kleine Schrittweite wählen. Weiterhin wird aus den Stabilitätsgebieten deutlich, dass die Verfahren auch für $z \in \mathbb{C}_+$ mit $|z|$ hinreichend groß stabil sind. Dies steht aber im Widerspruch zu der Lösung $x'(t) = \lambda x$, die exponentiell steigt. Insbesondere sind die BDF-Verfahren also nicht unbedingt zur Lösung von nichtsteifen Problemen geeignet.

2.8 VBDF-Verfahren

Die VBDF-Verfahren (variable Schrittweite BDF-Verfahren) ergeben sich, wenn wir die feste Schrittweite aufgeben, aber dieselben Koeffizienten β_i wie zuvor fordern. Die restlichen Koeffizienten werden so gewählt, dass die Ordnung maximiert wird. Die BDF-Verfahren ergeben sich dann im Fall äquidistanter Schrittweite.

Wir entwickeln hier die VBDF-Verfahren aus den Ordnungsbedingungen bis zur Ordnung 5. Zum Berechnen der Koeffizienten wurde Wolfram Mathematica 6.0 benutzt.

Für die Koeffizienten des Einschnittverfahrens ergibt sich aus den Ordnungsgleichungen:

$$\alpha_{1,n} = 1 \quad \alpha_{0,n} = -1. \quad (2.50)$$

Damit ist das Einschnitt-VBDF-Verfahren gleich dem BDF-Verfahren und damit gleich dem impliziten Euler-Verfahren.

Für das Zweischrittverfahren ergibt sich entsprechend:

$$\alpha_{0,n} = \frac{\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}}$$

$$\alpha_{1,n} = -1 - \omega_{n+1} \quad (2.51)$$

$$\alpha_{2,n} = \frac{2\omega_{n+1} + 1}{1 + \omega_{n+1}}.$$

Auch hier bemerken wir, dass sich im Falle konstanter Schrittweiten das Verfahren zum Zweischritt-BDF-Verfahren vereinfacht.

Für das Dreischrittverfahren folgt:

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= -\frac{\omega_{n+1}^3 \omega_{n+2}^2 (1 + \omega_{n+2})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})} \\
\alpha_{1,n} &= -1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+1} \omega_{n+2}^2 + (1 + \omega_{n+2})^{-1} \\
\alpha_{2,n} &= -\frac{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})}{1 + \omega_{n+1}} \\
\alpha_{3,n} &= 3 - \frac{1}{1 + \omega_{n+2}} - \frac{1 + \omega_{n+1}}{1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2}}.
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Schließlich ergibt sich das Vierschrittverfahren zu

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= \frac{\omega_{n+1}^4 \omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))} \\
\alpha_{1,n} &= -\frac{\omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})} \\
\alpha_{2,n} &= \frac{\omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+3})} \\
\alpha_{3,n} &= -\frac{(1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})} \\
\alpha_{4,n} &= 4 - \frac{1}{1 + \omega_{n+3}} - \frac{1 + \omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}} - \frac{1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2} + \omega_{n+1} \omega_{n+2} \omega_{n+3}}
\end{aligned} \tag{2.53}$$

und für die Koeffizienten des Fünfschrittverfahrens gilt:

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= -\frac{\omega_{n+1}^5 \omega_{n+2}^4 \omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1}\omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}))} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))} \\
\alpha_{1,n} &= \frac{\omega_{n+2}^4 \omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))} \\
\alpha_{2,n} &= -\frac{\omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})} \\
\alpha_{3,n} &= \frac{\omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+4})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1}\omega_{n+2})} \\
\alpha_{4,n} &= -\frac{(1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}))} \\
\alpha_{5,n} &= 5 - \frac{1}{1 + \omega_{n+4}} - \frac{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}}{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}\omega_{n+4}} \\
&\quad - \frac{1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})}{1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))} - \frac{1 + \omega_{n+3}}{1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}}.
\end{aligned} \tag{2.54}$$

3 VSIMEX-Verfahren

In diesem Abschnitt führen wir zunächst IMEX-Verfahren ein. Im Anschluss daran geben wir die konstante Zeitschrittweite auf und gelangen somit zu VSIMEX-Verfahren. Für diese Verfahren betrachten wir, wie bei den Mehrschrittverfahren, die Begriffe der Konsistenz, Stabilität und Konvergenz. Dabei wird versucht möglichst viel aus der Theorie der Mehrschrittverfahren zu übertragen.

Wang betrachtet in seiner Arbeit [Wan05] VSIMEX-Verfahren bis zur Ordnung 3 und gibt das VSSBDF der Ordnung 4 an. Wir entwickeln VSIMEX-Verfahren der Ordnung 1 und 2 und, aufbauend auf den zuvor betrachteten VBDF-Verfahren, die für uns interessanten VSSBDF-Verfahren bis zur Ordnung 5. Die Koeffizienten wurden, wie schon bei den VBDF-Verfahren, mit Hilfe von Wolfram Mathematica 6.0 gefunden bzw. bestätigt.

3.1 IMEX-Verfahren

Für viele Probleme lässt sich die Funktion \tilde{f} in der Differentialgleichung

$$x'(t) = \tilde{f}(t, x(t)) = f(t, x(t)) + g(t, x(t))$$

in einen nichtsteifen Teil f und einen steifen Teil g zerlegen. Eine rein explizite Behandlung der gesamten Gleichung erfordert eine sehr kleine Schrittweite um Stabilität gewährleisten zu können. Durch eine rein implizite Behandlung der Gleichung hingegen entstehen für das Lösen des Gleichungssystems häufig hohe Kosten.

Daher bietet es sich an die einzelnen Teile entsprechend ihrer Eigenschaft zu behandeln. Für den nichtsteifen Teil genügen häufig explizite Formeln, während man für den steifen Teil auf implizite Formeln angewiesen ist. Eine solche Kombination von einem impliziten mit einem expliziten Verfahren nennt man IMEX (implizit-explizit)-Verfahren. Wir betrachten hier zunächst nur den Fall konstanter Schrittweiten und folgen der Motivation in [HV03].

Die einfachst mögliche IMEX-Methode ist gegeben durch

$$U^{n+1} = U^n + \tau f(t_n, U^n) + (1 - \theta)\tau g(t_n, U^n) + \theta\tau g(t_{n+1}, U^{n+1}). \quad (3.1)$$

Dabei wird das explizite Euler-Verfahren für den nichtsteifen Teil f mit dem A -stabilen impliziten θ -Verfahren kombiniert. Setzt man die exakte Lösung x in 3.1 ein, so erhält man den Abschneidefehler

$$\rho_n = \tau^{-1}(x(t_{n+1}) - x_n) - (1 - \theta)f(t_n, x(t_n))$$

$$\begin{aligned}
& -\theta f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) + \theta(f(t_{n+1}, x(t_{n+1})) - f(t_n, x(t_n))) \\
& = \left(\frac{1}{2} - \theta\right) \tau x''(t_n) + \theta \tau f'(t_n, x(t_n)) + \mathcal{O}(\tau^2).
\end{aligned}$$

Das Verfahren hat also genau wie das implizite θ -Verfahren die Konsistenzordnung 2.

3.2 VSIMEX-Verfahren

Bei vielen Anwendungsproblemen ändert sich die Lösung in manchen Gebieten sehr schnell, während in anderen Gebieten diese Änderung nur sehr langsam vorstättengeht. Um die Lösung also akkurat darstellen zu können erfordern Gebiete vom ersten Typ sehr kleine Schrittweiten, wohingegen bei Gebieten vom zweiten Typ auch eine größere Schrittweite gute Ergebnisse liefert. Diese Überlegung motiviert die Benutzung eines adaptiven Schemas um gute Lösungen und einen möglichst geringen Aufwand zu erhalten.

Wir wollen also das Problem

$$x'(t) = f(t, x(t)) + g(t, x(t)) \quad (3.2)$$

mit einem IMEX-Verfahren variabler Schrittweite lösen. Dabei setzen wir f und g als lipschitzstetig bezüglich x voraus.

Definition 3.1. Ein allgemeines lineares s -Schritt VSIMEX-Mehrschrittverfahren (variable Schrittweite IMEX) hat die Form

$$\frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} U^{n+j} = \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} f(t_{n+j}, U^{n+j}) + \sum_{j=0}^s \gamma_{j,n} g(t_{n+j}, U^{n+j}), \quad (3.3)$$

wobei $\alpha_{s,n} \neq 0$, $\gamma_{s,n} \neq 0$ und $s \geq 2$. Die variablen Koeffizienten $\alpha_{j,n}$, $\beta_{j,n}$ und $\gamma_{j,n}$ hängen dabei nur von den Schrittweitenverhältnissen $\omega_i = \tau_i/\tau_{i-1}$ ab.

Analog zu Lemma 2.4 garantiert eine Schrittweitenbeschränkung die Lösbarkeit des impliziten Gleichungssystems.

Lemma 3.2. Sei L die Lipschitzkonstante von g bezüglich x . Dann hat das implizite Gleichungssystem für

$$\tau_n < \frac{|\alpha_{k,n}|}{|\gamma_{s,n}|L} \quad \forall \tau_n \quad (3.4)$$

eine eindeutige Lösung.

Beweis. siehe Lemma 2.4. □

3.3 Konsistenz, Stabilität und Konvergenz

Wir betrachten als Nächstes den lokalen Abschneidefehler ϵ_n , der sich ergibt, wenn man die Lösung x des Problems 3.2 in die Gleichung 3.3 einsetzt und die Differenz der beiden Seiten bildet:

$$\epsilon_n = \frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} x(t_{n+j}) - \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} f(t_{n+j}, x(t_{n+j})) - \sum_{j=0}^s \gamma_{j,n} g(t_{n+j}, x(t_{n+j})). \quad (3.5)$$

Unter der Annahme, dass x , f und g hinreichend oft differenzierbar sind, können wir nun ϵ_n in eine Taylorreihe um t_n entwickeln.

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} x(t_{n+j}) &= \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} \sum_{i=0}^p \frac{x^{(i)}(t_n)}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n)^{p+1} \\ &\stackrel{3.2}{=} \alpha_{0,n} x(t_n) + \sum_{j=1}^s \alpha_{j,n} (x(t_n) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{p-1} \frac{(f(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n) + (g(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n)}{(i+1)!} (t_{n+j} - t_n)^{i+1}) + \mathcal{O}(\tau_n^{p+1}) \\ \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} f(t_{n+j}, x(t_{n+j})) &= \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{(f(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n)}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n)^p \\ \sum_{j=0}^s \gamma_{j,n} g(t_{n+j}, x(t_{n+j})) &= \sum_{j=0}^s \gamma_{j,n} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{(g(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n)}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n)^p. \end{aligned}$$

Es folgt also für ϵ_n :

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= \frac{1}{\tau_{n+s-1}} \sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{p-1} (f(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n) \left(\sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n}}{\tau_{n+s-1} (i+1)!} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} - \sum_{j=0}^{s-1} \frac{\beta_{j,n}}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i \right) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{p-1} (g(\cdot, x(\cdot)))^{(i)}(t_n) \left(\sum_{j=1}^s \frac{\alpha_{j,n}}{\tau_{n+s-1} (i+1)!} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} - \sum_{j=0}^s \frac{\gamma_{j,n}}{i!} (t_{n+j} - t_n)^i \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(\tau_n^p). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Mit diesem Ergebnis lässt sich der folgende Satz formulieren.

Satz 3.3. Ein s -Schritt-VSIMEX-Verfahren hat genau dann die Konsistenzordnung p , wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$\sum_{j=0}^s \alpha_{j,n} = 0 \quad (3.7a)$$

$$\sum_{j=1}^s \alpha_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^{i+1} = \tau_{n+s-1} (i+1) \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i \quad i = 0 \dots p-1 \quad (3.7b)$$

$$= \tau_{n+s-1} (i+1) \sum_{j=0}^s \gamma_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i \quad i = 0 \dots p-1. \quad (3.7c)$$

Beweis. Folgt direkt aus Gleichung 3.6. □

Bemerkung 3.4. Für den Fall konstanter Schrittweite lässt sich zeigen, dass die $2p+1$ -Ordnungsbedingungen linear unabhängig sind und ein s -Schritt-IMEX-Verfahren maximal die Konsistenzordnung s hat. Alle s -Schritt-IMEX-Verfahren maximaler Konsistenzordnung können durch eine s -parametrische Familie beschrieben werden. Vergleiche dazu [J.R93, S. 9]. Insbesondere hat also ein s -VSIMEX-Verfahren höchstens die Konsistenzordnung s .

Die Definition der Stabilität eines VSIMEX-Verfahrens lässt sich nahezu unverändert aus der Definition der Stabilität für lineare Mehrschrittverfahren übertragen.

Definition 3.5. Nullstabilität

Ein VSIMEX-Verfahren heißt nullstabil, falls für die durch das Anfangswertproblem

$$x' = 0 \quad x(0) = 1$$

erzeugte Gitterfunktion U gilt:

Es gibt für jedes k -Tupel von Anfangswerten eine Konstante M so, dass gilt:

$$U^n < M, n = 0, 1, 2, \dots$$

Auch der Begriff der Konvergenz eines VSIMEX-Verfahrens lässt sich leicht aus dem Begriff der Konvergenz von linearen Mehrschrittverfahren übertragen.

Definition 3.6. Sei $x \in C^\infty([t_0, T], \mathbb{R}^d)$ die Lösung des Anfangswertproblems

$$x' = f(t, x) + g(t, x) \quad x(t_0) = x_0.$$

Ein VSIMEX-Verfahren konvergiert gegen diese Lösung, wenn

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} U^j = x(t_j) \quad \tau = \max_{j=0, \dots, N-1} \tau_j$$

für alle $t \in \Delta \cup [t_0, T]$ gilt, sobald die Startwerte

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} U^j = x_0 \quad j = 0, \dots, k-1$$

erfüllen. Ein VSIMEX-Verfahren, das für beliebige Anfangswertprobleme mit hinreichend glatter rechter Seite konvergiert, heißt konvergent.

Erfreulicherweise lässt sich nun das wichtige Konvergenzresultat für lineare Mehrschrittverfahren auch auf den Fall von VSIMEX-Verfahren übertragen. Dabei wird der Begriff der beschränkten Koeffizienten aus der Definition für Mehrschrittverfahren übernommen.

Satz 3.7. *Unter den Voraussetzungen*

1. *das VSIMEX-Verfahren ist stabil, hat Ordnung p und gleichmäßig beschränkte Koeffizienten $\alpha_{i,n}$, $\beta_{i,n}$ und $\gamma_{i,n}$,*
2. *die Startwerte erfüllen $\|U^i - x(t_i)\| = \mathcal{O}(\tau_i^p) \quad \forall i = 0, \dots, s-1$,*
3. *die Schrittweitenverhältnisse sind gleichmäßig beschränkt ($\omega_n \leq C \quad \forall n \geq 1$ für eine Konstante C)*

konvergiert das VSIMEX-Verfahren mit der Konvergenzordnung p .

Beweis. Analog zu Satz 2.20 mit

$$\psi_n = \sum_{j=0}^{s-1} \beta'_{j,n} f(t_{n+j}, U^{n+j}) + \gamma'_{j,n} g(t_{n+j}, U^{n+j}) + \gamma'_{s,n} g(t_{n+s}, \tau_{s+n-1} \psi_n - \sum_{j=0}^{s-1} \alpha'_j U^{n+j}) \quad (3.8)$$

in der Umformulierung des Mehrschrittverfahrens in ein Einschrittverfahren 2.17. \square

Bei den im folgenden Abschnitt entwickelten VSIMEX-Verfahren beschränken wir uns fast ausschließlich auf die sogenannten VSSBDF-Verfahren (variable Schrittweite Semi-BDF-Verfahren). Hierbei wird der steife Teil gemäß dem zugehörigen VBDF-Verfahren behandelt. Die Koeffizienten des nichtsteifen Term werden so gewählt, dass die Ordnung maximiert wird.

Wie schon zuvor für die BDF-Verfahren können wir auch die VSSBDF-Verfahren wieder als Interpolationsprobleme auffassen. Zunächst bemerken wir, dass die erste und

dritte Ordnungsbedingung in 3.7 identisch ist mit der ersten und dritten Ordnungsbedingung in 2.7 für die BDF-Verfahren. Gemäß den Überlegungen für BDF-Verfahren sind diese Bedingungen äquivalent zum Lösen des polynomiellen Interpolationsproblems das Interpolationspolynom $p \in \Pi_s$ mit

$$p(t_{n+j} - t_n) = \sum_{j=0}^s d_j (t_{n+j} - t_n)^j = U^{n+i} \quad i = 0, \dots, s$$

und U^{n+s} mit

$$p'(t_{n+s} - t_n) = f(t_{n+s}, U^{n+s}) \quad (3.9)$$

zu bestimmen.

Nun betrachten wir das Approximationsproblem mit

$$\delta_n := F(t_{n+s}) - \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} F(t_{n+j}) = \mathcal{O}(\tau_n^p). \quad (3.10)$$

Mittels der Taylorentwicklung von δ_n erhält man

$$\begin{aligned} \delta_n &= F(t_{n+s}) - \sum_{j=0}^{s-1} \beta_{j,n} F(t_{n+j}) = \sum_{i=0}^{p-1} \frac{F^{(i)}(t_n)}{i!} (t_{n+s} - t_n)^i \\ &\quad - \sum_{j=0}^{s-1} \sum_{i=0}^{p-1} \frac{F^{(i)}(t_n)}{i!} \beta_{j,n} (t_{n+j} - t_n)^i + \mathcal{O}(\tau_n^p) \\ &= \sum_{i=0}^{p-1} \frac{F^{(i)}(t_n)}{i!} ((t_{n+s} - t_n)^i - \sum_{j=0}^{s-1} \beta_j (t_{n+j} - t_n)^i) + \mathcal{O}(\tau_n^p). \end{aligned}$$

Somit ist also das Approximationsproblem 3.10 äquivalent zu

$$\sum_{j=0}^{s-1} \beta_j (t_{n+j} - t_n)^i = (t_{n+s} - t_n)^i \quad i = 0, \dots, p-1.$$

Betrachtet man nun noch einmal die zweite Ordnungsbedingung 3.7b und beachtet wieder $\beta_{0,n} = \beta_{1,n} = \dots = \beta_{s-1,n} = 0$, $\beta_{s,n} = 1$, so erkennt man wieder die Äquivalenz. Die VSSBDF-Verfahren entstehen also aus den BDF-Verfahren durch Extrapolation des nichtsteifen Terms.

3.4 Verfahren erster Ordnung

Aus den obigen Formeln folgt, dass die folgenden Bedingungen für ein Verfahren erster Ordnung erfüllt sein müssen

$$\alpha_{0,n} + \alpha_{1,n} = 0 \tag{3.11}$$

$$\alpha_{1,n}\tau_n = \tau_n\beta_{0,n} = \tau_n(\gamma_{0,n} + \gamma_{1,n}).$$

Dies führt also auf die einparametrische Schar von Einschrittverfahren erster Ordnung

$$U_{n+1} - U_n = \tau_n(f(t_n, U_n) + (1 - \lambda)g(t_n, U_n) + \lambda g(t_{n+1}, U_{n+1})). \tag{3.12}$$

Diese Verfahren sind θ -IMEX-Verfahren, die wir schon bei der Einführung von IMEX-Verfahren betrachtet haben. Die Koeffizienten sind hier unabhängig von der Schrittweite.

Das für uns interessante Verfahren erster Ordnung erhält man, wenn man $\lambda = 1$ setzt:

$$U^{n+1} - U^n = \tau_n(f(t_n, U^n) + g(t_{n+1}, U^{n+1})). \tag{3.13}$$

Hier wird also das BDF-Verfahren erster Ordnung (implizites Euler-Verfahren) auf den steifen Term und das explizite Euler-Verfahren auf den nichtsteifen Term angewandt. Wir nennen das resultierende Verfahren VSSBDF1.

3.5 Verfahren zweiter Ordnung

Die Bedingungen für Verfahren zweiter Ordnung schreiben sich mit $t_{n+j} - t_n = \sum_{i=0}^{j-1} \tau_i$ als

$$\alpha_{0,n} + \alpha_{1,n} + \alpha_{2,n} = 0$$

$$\alpha_{1,n}\tau_n + \alpha_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1}) = \tau_{n+1}(\beta_{0,n} + \beta_{1,n}) = \tau_{n+1}(\gamma_{0,n} + \gamma_{1,n} + \gamma_{2,n}) \tag{3.14}$$

$$\alpha_{1,n}\tau_n^2 + \alpha_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})^2 = 2\tau_{n+1}\beta_{1,n}\tau_n = 2\tau_{n+1}(\gamma_{1,n}\tau_n + \gamma_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1}))$$

und werden gelöst durch die zweiparametrische Schar

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= \frac{(2d-1)\tau_{n+1}^2}{\tau_n(\tau_n + \tau_{n+1})} = \frac{(2d-1)\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}} & \gamma_{0,n} &= \frac{c}{2} \\
\alpha_{1,n} &= \frac{(1-2d)\tau_{n+1} - \tau_n}{\tau_n} = (1-2d)\omega_{n+1} - 1 & \gamma_{1,n} &= \frac{\tau_{n+1}(2-2d-c) - c\tau_n}{2\tau_{n+1}} \\
& & &= 1 - d - \frac{c}{2} \left(1 + \frac{1}{\omega_{n+1}}\right) & (3.15) \\
\alpha_{2,n} &= \frac{\tau_n + 2d\tau_{n+1}}{\tau_n + \tau_{n+1}} = \frac{1 + 2d\omega_{n+1}}{1 + \omega_{n+1}} & \gamma_{2,n} &= \frac{2\tau_{n+1}d + c\tau_n}{2\tau_{n+1}} = d + \frac{c}{2\omega_{n+1}} \\
\beta_{0,n} &= -\frac{d\tau_{n+1}}{\tau_n} = -d\omega_{n+1} & \beta_{1,n} &= \frac{\tau_n + d\tau_{n+1}}{\tau_n} = 1 + d\omega_{n+1}.
\end{aligned}$$

Wählt man hier $c = 0$ und $d = 1$, so wird für den Fall konstanter Schrittweiten auf den zweiten Term das BDF-Verfahren zweiter Ordnung angewendet. Das daraus resultierende Verfahren wollen wir VSSBDF2 nennen:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\tau_{n+1}} \left(\frac{1 + 2\omega_{n+1}}{1 + \omega_{n+1}} U^{n+2} - (1 + \omega_{n+1}) U^{n+1} + \frac{\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}} U^n \right) \\
&= (1 + \omega_{n+1}) f(t_{n+1}, U^{n+1}) - \omega_{n+1} f(t_n, U^n) + g(t_{n+2}, U^{n+2}).
\end{aligned} \tag{3.16}$$

3.6 Verfahren dritter, vierter und fünfter Ordnung

Für Verfahren dritter und vierter Ordnung wollen wir nicht mehr alle möglichen Lösungen der Ordnungsgleichungen 3.7 bestimmen. Stattdessen beschränken wir uns darauf die entsprechenden Formeln für VSSBDF zu bestimmen. Die Gleichungen für die dritte Ordnung lauten:

$$\begin{aligned}
& \alpha_{0,n} + \alpha_{1,n} + \alpha_{2,n} + \alpha_{3,n} = 0 \\
& \alpha_{1,n}\tau_n + \alpha_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1}) + \alpha_{3,n}(\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2}) \\
& \quad = \tau_{n+2}(\beta_{0,n} + \beta_{1,n} + \beta_{2,n}) = \tau_{n+2}(\gamma_{0,n} + \gamma_{1,n} + \gamma_{2,n} + \gamma_{3,n}) \\
& \alpha_{1,n}\tau_n^2 + \alpha_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})^2 + \alpha_{3,n}(\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^2 \\
& \quad = 2\tau_{n+2}(\beta_{1,n}\tau_n + \beta_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})) \\
& \quad = 2\tau_{n+2}(\gamma_{1,n}\tau_n + \gamma_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1}) + \gamma_{3,n}(\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})) \\
& \alpha_{1,n}\tau_n^3 + \alpha_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})^3 + \alpha_{3,n}(\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^3 \\
& \quad = 3\tau_{n+2}(\beta_{1,n}\tau_n^2 + \beta_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})^2) \\
& \quad = 3\tau_{n+2}(\gamma_{1,n}\tau_n^2 + \gamma_{2,n}(\tau_n + \tau_{n+1})^2 + \gamma_{3,n}(\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^2).
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Mit den Koeffizienten für das BDF-Verfahren dritter Ordnung

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= -\frac{\omega_{n+1}^3\omega_{n+2}^2(1 + \omega_{n+2})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1}\omega_{n+2})} \\
\alpha_{1,n} &= \omega_{n+2}^2\left(\omega_{n+1} + \frac{1}{1 + \omega_{n+2}}\right) \\
\alpha_{2,n} &= -1 - \omega_{n+2} - \frac{\omega_{n+1}\omega_{n+2}(1 + \omega_{n+2})}{1 + \omega_{n+1}} \\
\alpha_{3,n} &= 1 + \frac{\omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+2}} + \frac{\omega_{n+1}\omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2})} \\
\gamma_{0,n} &= \gamma_{1,n} = \gamma_{2,n} = 0 \\
\gamma_{3,n} &= 1
\end{aligned} \tag{3.18}$$

folgen die restlichen Koeffizienten

$$\begin{aligned}\beta_{0,n} &= \frac{\omega_{n+1}^2 \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+2})}{1 + \omega_{n+1}} \\ \beta_{1,n} &= -\omega_{n+2} (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2})) \\ \beta_{2,n} &= \frac{(1 + \omega_{n+2}) (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2}))}{1 + \omega_{n+1}}\end{aligned}\tag{3.19}$$

für das VSSBDF3-Verfahren.

Die Gleichungen für die vierte Ordnung lauten:

$$\begin{aligned}\alpha_{0,n} + \alpha_{1,n} + \alpha_{2,n} + \alpha_{3,n} + \alpha_{4,n} &= 0 \\ \alpha_{1,n} \tau_n + \alpha_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1}) + \alpha_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2}) + \alpha_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3}) \\ &= \tau_{n+3} (\beta_{0,n} + \beta_{1,n} + \beta_{2,n} + \beta_{3,n}) \\ &= \tau_{n+3} (\gamma_{0,n} + \gamma_{1,n} + \gamma_{2,n} + \gamma_{3,n} + \gamma_{4,n}) \\ \alpha_{1,n} \tau_n^2 + \alpha_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^2 + \alpha_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^2 + \alpha_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})^2 \\ &= 2\tau_{n+3} (\beta_{1,n} \tau_n + \beta_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1}) + \beta_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})) \\ &= 2\tau_{n+3} (\gamma_{1,n} \tau_n + \gamma_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1}) + \gamma_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2}) + \gamma_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})) \\ \alpha_{1,n} \tau_n^3 + \alpha_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^3 + \alpha_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^3 + \alpha_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})^3 \\ &= 2\tau_{n+3} (\beta_{1,n} \tau_n^2 + \beta_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^2 + \beta_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^2) \\ &= 2\tau_{n+3} (\gamma_{1,n} \tau_n^2 + \gamma_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^2 + \gamma_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^2 + \gamma_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})^2) \\ \alpha_{1,n} \tau_n^4 + \alpha_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^4 + \alpha_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^4 + \alpha_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})^4 \\ &= 2\tau_{n+3} (\beta_{1,n} \tau_n^3 + \beta_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^3 + \beta_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^3) \\ &= 2\tau_{n+3} (\gamma_{1,n} \tau_n^3 + \gamma_{2,n} (\tau_n + \tau_{n+1})^3 + \gamma_{3,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2})^3 + \gamma_{4,n} (\tau_n + \tau_{n+1} + \tau_{n+2} + \tau_{n+3})^3).\end{aligned}\tag{3.20}$$

Mit den Koeffizienten für das BDF-Verfahren vierter Ordnung

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= \frac{\omega_{n+1}^4 \omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))} \\
\alpha_{1,n} &= -\frac{\omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})} \\
\alpha_{2,n} &= \frac{\omega_{n+3}^2 (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+3})} \\
\alpha_{3,n} &= -\frac{(1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})} \\
\alpha_{4,n} &= 4 - \frac{1}{1 + \omega_{n+3}} - \frac{1 + \omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}} - \frac{1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2}}{1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2} + \omega_{n+1} \omega_{n+2} \omega_{n+3}}
\end{aligned} \tag{3.21}$$

folgen die restlichen Koeffizienten

$$\begin{aligned}
\beta_{0,n} &= -\frac{\omega_{n+1}^3 \omega_{n+2}^2 \omega_{n+3} (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})} \\
\beta_{1,n} &= \frac{\omega_{n+2}^2 \omega_{n+3} (1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{1 + \omega_{n+2}} \\
\beta_{2,n} &= -\frac{\omega_{n+3} (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{1 + \omega_{n+1}} \\
\beta_{3,n} &= \frac{(1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})}
\end{aligned} \tag{3.22}$$

für das VSSBDF4-Verfahren.

Mit den Koeffizienten für das BDF-Verfahren fünfter Ordnung

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,n} &= -\frac{\omega_{n+1}^5 \omega_{n+2}^4 \omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1}\omega_{n+2})(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}))} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))} \\
\alpha_{1,n} &= \frac{\omega_{n+2}^4 \omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))} \\
\alpha_{2,n} &= -\frac{\omega_{n+3}^3 \omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+1})(1 + \omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})} \\
\alpha_{3,n} &= \frac{\omega_{n+4}^2 (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+2})(1 + \omega_{n+4})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1}\omega_{n+2})} \\
\alpha_{4,n} &= -\frac{(1 + \omega_{n+4})(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+3})(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})} \\
&\quad \frac{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4})))}{(1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}))} \\
\alpha_{5,n} &= 5 - \frac{1}{1 + \omega_{n+4}} - \frac{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}}{1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3} + \omega_{n+2}\omega_{n+3}\omega_{n+4}} \\
&\quad - \frac{1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2}\omega_{n+3})}{1 + \omega_{n+1}(1 + \omega_{n+2}(1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}))} - \frac{1 + \omega_{n+3}}{1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3}\omega_{n+4}}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

folgen die restlichen Koeffizienten

$$\begin{aligned}
\beta_{0,n} &= \frac{\omega_{n+1}^4 \omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 \omega_{n+4} (1 + \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+1}) (1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2}) (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))} \\
&\quad (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4})) \\
\beta_{1,n} &= - \frac{\omega_{n+2}^3 \omega_{n+3}^2 \omega_{n+4} (1 + \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4})}{(1 + \omega_{n+2}) (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3})} \\
&\quad (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))) \\
\beta_{2,n} &= \frac{\omega_{n+3}^2 \omega_{n+4} (1 + \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+1}) (1 + \omega_{n+3})} \\
&\quad (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))) \\
\beta_{3,n} &= - \frac{\omega_{n+4} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+2}) (1 + \omega_{n+1} + \omega_{n+1} \omega_{n+2})} \\
&\quad (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))) \\
\beta_{4,n} &= \frac{(1 + \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}) (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4}))}{(1 + \omega_{n+3}) (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}) (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} + \omega_{n+2} \omega_{n+3}))} \\
&\quad (1 + \omega_{n+1} (1 + \omega_{n+2} (1 + \omega_{n+3} + \omega_{n+3} \omega_{n+4})))
\end{aligned} \tag{3.24}$$

für das VSSBDF5-Verfahren.

3.7 Konvergenz der VSSBDF-Verfahren

Im vorigen Abschnitt wurden die VSSBDF-Verfahren so konstruiert, dass sie konsistent sind. Um nun auf die Konvergenz mit Hilfe von Satz 3.7 schließen zu können, sind noch die Beschränktheit der Koeffizienten und die Nullstabilität zu untersuchen.

Beschränktheit der Koeffizienten

Damit die Koeffizienten beschränkt sind, muss für alle stabilen Gitter Δ gelten:

$$\max_{\tau_n \in \Delta} (|\alpha_{k,n}|, \beta_{k,n}, \gamma_{k,n}) \leq C.$$

Nun stellen wir fest, dass die Nenner der Koeffizienten der VSSBDF-Verfahren für alle möglichen Schrittweitenverhältnisse größer als 1 sind. Die Zähler sind als Polynome in

ω_n auf jeden Fall beschränkt. Folglich sind die Koeffizienten der VSSBDF-Verfahren beschränkt.

Nullstabilität

Die Stabilität der VSSBDF-Verfahren hängt nicht von den Funktionen f und g ab. Ein VSSBDF-Verfahren ist also genau dann stabil, wenn das zugehörige VBDF-Verfahren stabil ist.

Zunächst hängen beim Einschrittverfahren die Koeffizienten nicht von den Schrittweitenverhältnissen ω_n ab. Das Polynom $\rho(z) = z - 1$ hat als einzige Nullstelle $z = 1$. Somit ist das Einschrittverfahren stabil.

Im Falle des Zweischrittverfahrens können wir die Nullstabilität einfach untersuchen.

$$\rho(z) = \frac{2\omega_{n+1} + 1}{1 + \omega_{n+1}}z^2 + (-1 - \omega_{n+1})z + \frac{\omega_{n+1}^2}{1 + \omega_{n+1}} = 0 \Leftrightarrow z_1 = 1 \vee z_2 = \frac{\omega_{n+1}^2}{1 + 2\omega_{n+1}}$$

Wir erhalten also zwei reelle Nullstellen. Das Zweischrittverfahren ist also genau dann stabil, wenn $z_2 < 1$ ist.

$$z_2 = \frac{\omega_{n+1}^2}{1 + 2\omega_{n+1}} < 1 \Leftrightarrow 1 - \sqrt{2} < \omega_{n+1} < 1 + \sqrt{2}$$

Das Zweischrittverfahren ist genau dann stabil, wenn $\omega_{n+1} < 1 + \sqrt{2}$ gilt.

Für die Betrachtung der Stabilität der Verfahren höherer Schrittzahl benutzen wir die Darstellung in [HNW93, S. 404 f].

Wir betrachten wieder die Begleitmatrix aus Lemma 2.16

$$A_n = \begin{pmatrix} -\alpha'_{s-1,n} & -\alpha'_{s-2,n} & \cdots & -\alpha'_{0,n} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Dort hatten wir schon eingesehen, dass die Beschränkung

$$\|A_n \dots A_0\| \leq M.$$

notwendig und hinreichend für die Konvergenz des Mehrschrittverfahrens ist. Nun ist das charakteristische Polynom von A_n gerade durch $\chi_{A_n}(z) = -z^s - \sum_{j=0}^{s-1} \alpha'_{j,n} z^j$ gegeben. Da

die VSSBDF-Verfahren konsistent sind, ist $\chi_{A_n}(1) = 0$ und A_n hat somit den Eigenwert 1 mit dem Eigenvektor $v = (1, \dots, 1)^T$. Nun folgt mit

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & 1 & 1 & \dots & 1 \\ & & 1 & \dots & 1 \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \quad T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & 0 \\ & 1 & -1 & & \\ & & 1 & \ddots & \\ & & & \ddots & -1 \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

die Transformation

$$T^{-1}A_nT = \begin{pmatrix} A_n^* & 0 \\ 0, \dots, 0, 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit } A_n^* = \begin{pmatrix} -\alpha_{s-2,n}^* & -\alpha_{s-3,n}^* & \dots & -\alpha_{0,n}^* \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & & \dots \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und den Koeffizienten

$$\begin{aligned} \alpha_{s-2,n}^* &= 1 + \alpha'_{s-1,n} & \alpha_{0,n} &= -\alpha_{0,n} \\ \alpha_{s-i,n}^* - \alpha_{s-i-1,n}^* &= -\alpha'_{s-i,n} & \forall i &= 2, \dots, s-1. \end{aligned}$$

Diese Darstellung ermöglicht es nun, die Dimension der zu betrachtenden Matrix um eins zu vermindern.

Satz 3.8. *Ein konsistentes Mehrschrittverfahren ist genau dann stabil, wenn es Konstanten M_1, M_2 gibt so, dass*

1. $\|A_n^* \cdots A_0^*\| \leq M_1$,
2. $\|(0, \dots, 0, 1) \sum_{j=0}^n \prod_{i=0}^{j-1} A_i^*\| \leq M_2$

für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt.

Beweis. Induktiv sieht man, dass

$$T^{-1}A_n \cdots A_0T = \begin{pmatrix} A_n^* \cdots A_0^* & 0 \\ b_n^T & 1 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

mit

$$b_n^T = (0, \dots, 0, 1) \sum_{j=0}^n \prod_{i=0}^{j-1} A_i^*. \quad (3.28)$$

gilt. □

Aufbauend auf diesem Resultat, ist nun die Idee geeignete Matrixnormen zu konstruieren, mit denen man die Beschränktheit der Matrixfolge $\|A_n^* \cdots A_0^*\|$ zeigen kann. Auf diese Weise konnte Griegorieff in [Gri83] die folgenden Grenzen der Schrittweitenbeschränkungen berechnen.

Tabelle 3.1: Schrittweitenbeschränkung für die VBDF-Verfahren für die Stabilität

s	2	3	4	5
$\bar{\alpha}$	0	0.836	0.979	0.997
$\bar{\beta}$	2.414	1.127	1.019	1.003

Für den Fall des Dreischrittverfahrens konnten Butcher und Heard in [BH02] zeigen, dass das Verfahren für $\omega_i \leq \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ stabil ist. Diese Grenze ist wie die von für das Zweischrittverfahren gefundene sogar scharf. Das heißt, dass es für $\omega_i > \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ Gitter gibt so, dass das Verfahren instabil ist.

Für das Vierschrittverfahren konnten Calvo, Grand und Griegorieff in [CGG90] zeigen, dass das Verfahren für $\omega_i \leq 1.101$ stabil ist.

Für den Fall des Sechsschrittverfahrens sind keine Beschränkungen der Schrittweitenverhältnisse bekannt, um Stabilität zu erreichen. Da aber für das Fünfschrittverfahren das Gitter schon nahezu äquidistant sein muss, ist auch für den Fall des Sechsschrittverfahrens eine sehr starke Beschränkung zu erwarten. Allerdings haben wir schon bei der Diskussion von BDF-Verfahren gesehen, dass zumindest im Fall konstanter Schrittweite das Verfahren stabil ist. Aus diesem Grund wurden die VSSBDF-Verfahren hier nur bis zur Ordnung 5 entwickelt.

Mit Hilfe dieser Ergebnisse sind die VSSBDF-Verfahren für lipschitzstetige f und g konvergent von ihrer jeweiligen Konsistenzordnung, falls die Schrittweiten entsprechend beschränkt werden.

4 Vorstellung eines adaptiven Algorithmus

In den vorherigen Abschnitten wurden die VSSBDF-Verfahren bis zur Ordnung 5 entwickelt und ihre Konvergenz gezeigt. In diesem Abschnitt soll aufbauend auf dieser Theorie ein adaptiver Algorithmus vorgestellt werden.

Dabei gehen wir zunächst auf mögliche Fehlerschätzer ein und entwickeln daraus eine Schrittweitenformel, die eine geeignete Schrittweite vorschlägt. Schließlich wird ein adaptiver Grundalgorithmus vorgestellt, der es erlaubt sowohl das Verfahren als auch die Schrittweite zu variieren.

4.1 Lokaler Fehlerschätzer

Um einen adaptiven Algorithmus formulieren zu können, ist es wichtig den lokalen Fehler gut zu schätzen. Beruhend auf dem lokalen Fehler wird nämlich die Schrittweite für den nächsten Schritt gewählt. Dies wird im nächsten Abschnitt näher erläutert.

Gemäß [DB08] ergibt sich ein guter Prädiktor für die Lösung im neuen Zeitschritt durch polynomiale Interpolation durch die letzten $s + 1$ -Lösungswerte für BDF-Verfahren. Da die VSIMEX-Verfahren, die wir hier betrachten, den impliziten Teil nach BDF-Verfahren behandeln, werden wir zunächst diesen Prädiktor übernehmen. Der lokale Fehlerschätzer ergibt sich dann gerade aus der Norm der Differenz von Prädiktor und der Lösung des impliziten Gleichungssystems.

Mit Hilfe des Neville-Aitken-Interpolationspolynoms ist es leicht möglich, aus dem Prädiktor für das $(s - 1)$ -Schrittverfahren die Prädiktoren für das s und das $(s + 1)$ -Schrittverfahren zu berechnen. Bei der Anwendung auf die betrachteten Probleme zeigt sich jedoch, dass diese Fehlerschätzer für eine Schrittzahl $s \geq 3$ nicht geeignet sind. In diesen Fällen wird der Fehler so groß geschätzt, dass jeder Schritt verworfen wird.

Aus diesem Grund betrachten wir einen anderen Fehlerschätzer, der diese Probleme nicht mit sich bringt:

Sei U_s die Lösung eines Schrittes des s -Schrittverfahrens und U_{s-1} die Lösung eines Schrittes des $s - 1$ -Schrittverfahrens. Dann benutzen wir

$$\|U_s - U_{s-1}\|$$

als lokalen Fehlerschätzer. Dieser Fehlerschätzer ist sinnvoll für den Fall, dass das s -Schrittverfahren genauer ist als das $s - 1$ -Schrittverfahren. Eine genauere Betrachtung findet sich in [DB08, 5.3].

4.2 Die Schrittweitenformel

Die neue Schrittweite soll so gewählt werden, dass der lokale Fehler der Toleranz in etwa entspricht.

$$|\epsilon_{j+1}^*| \approx TOL$$

Nun wird der lokale Fehler mit dem Fehlerschätzer $[\epsilon_{j+1}]$ approximiert. Besteht zwischen dem lokalen Fehler $|\epsilon_{j+1}|$ und der zugehörigen Schrittweite τ_j der Zusammenhang

$$|[\epsilon_{j+1}]| \approx |\epsilon_{j+1}| = c(t_j)\tau_j^{p+1} + \mathcal{O}(\tau_j^{p+2}) \approx c(t_j)\tau_j^{p+1}$$

so folgt

$$\begin{aligned} \frac{TOL}{|[\epsilon_{j+1}]|} &\approx \frac{|\epsilon_{j+1}^*|}{|[\epsilon_{j+1}]|} \approx \frac{c(t_j)(\tau_j^*)^{p+1}}{c(t_j)\tau_j^{p+1}} \\ &\Rightarrow \tau_j^* = \left(\frac{TOL}{|[\epsilon_{j+1}]|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \tau_j. \end{aligned}$$

Mit einem zusätzlichen Sicherheitsfaktor $\rho < 1$, der dafür sorgen soll, dass die Toleranz nicht überschritten wird, ergibt sich die Schrittweitenformel

$$\tau_j^* = \left(\frac{\rho \cdot TOL}{|[\epsilon_{j+1}]|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \tau_j. \quad (4.1)$$

4.3 Adaptiver Grundalgorithmus

Mit Hilfe unserer vorherigen Überlegungen lässt sich jetzt der adaptive Grundalgorithmus für $s \geq 2$ das s -Schrittverfahren formulieren.

1. $U^0 = x_0$
2. $U^j = VSSBDF_j(t_0 + \tau_{min} \cdot j)$ für $j = 1, \dots, s - 1$ mit Schrittweite τ_{min}
3. while($t < t_{ende}$)
 - a) Berechne Lösung des $s - 1$ -Schrittverfahrens
 - b) Berechne Lösung des s -Schrittverfahrens
 - c) Benutze Norm der Differenz als Fehlerschätzer err
 - d) Berechne neue Schrittweite τ_{neu} mit der Schrittweitenformel
 - e) Falls $err < tol$ akzeptiere den Schritt, ansonsten verwerfen.

$$f) \tau = \min\{\max\{q \cdot \tau_{neu}, \tau_{min}\}, \omega_{max} \cdot \tau, \tau_{max}\}$$

Dabei werden die folgenden Parameter benutzt:

- τ_{min}, τ_{max} : minimaler bzw. maximale Zeitschrittweite
- tol : gewünschte Toleranz, maximaler erwünschter Fehler
- q : Sicherheitsfaktor
- ω_{max} : maximales Schrittweitenverhältnis

Da es sich bei den betrachteten Verfahren um Mehrschrittverfahren handelt, müssen zunächst s Startwerte berechnet werden, bevor das s -Schrittverfahren angewendet werden kann. Um den Fehler hinreichend klein zu halten, berechnet man diese Startwerte mit kleinstmöglicher Schrittweite und dem Verfahren mit der am höchsten zur Verfügung stehenden Ordnung. Alternativ können hierfür auch Einschrittverfahren wie Runge-Kutta-Verfahren benutzt werden.

Anschließend kann mit dem eigentlichen Algorithmus begonnen werden. Man schätzt den Fehler, wie zuvor besprochen, indem man die Differenz der Lösung des s - und des $s - 1$ -Schrittverfahrens in einer geeigneten Norm berechnet. Falls dieser geschätzte Fehler kleiner als die Toleranz ist, wird der Schritt akzeptiert und ansonsten verworfen. Weiterhin lässt sich aus dem Fehlerschätzer eine vorläufige neue Schrittweite berechnen. Diese ist so gewählt, dass bei einem Schritt mit dieser Schrittweite gerade die Toleranz als Fehler erwartet wird. Damit der Schritt akzeptiert wird, multipliziert man die geschätzte Schrittweite noch mit einem Sicherheitsfaktor. Schließlich möchte man die Schrittweite weder zu groß noch zu klein wählen und eventuell auch die Schrittweite nicht zu stark wachsen lassen. Eine solche Schrittweitenbeschränkung, die für die Stabilität der Verfahren sorgen soll, wurde im vorigen Abschnitt diskutiert. Aus all diesen Vorgaben lässt sich schließlich die neue Schätzung für den Zeitschritt τ gewinnen. Mit dieser Schrittweite geht man in eine neue Iteration bis die Lösung bis zum gewünschten Endzeitpunkt vorliegt.

5 Implementierung und numerische Untersuchung

In diesem Abschnitt sollen die VSSBDF-Verfahren bei der Anwendung auf zwei partielle Differentialgleichungen numerisch getestet werden. Um diese auf gewöhnliche Differentialgleichungen zurückzuführen, werden die Differentialoperatoren in Raumrichtung gemäß der Linienmethode (method of lines) diskretisiert.

Bei der Auswertung der partiellen Differentialgleichungen setzen wir zunächst ein äquidistantes Gitter voraus. Wir betrachten eine Konvektions-Diffusions-Gleichung und die Probleme, die sich bei der numerischen Lösung für eine glatte und eine unstetige Anfangsfunktion, ergeben. Dabei wollen wir die gefundenen Konvergenzordnungen auch numerisch bestätigen. Anschließend untersuchen wir die Anwendung auf die Burgers-Gleichung. Auch hier unterscheiden wir die Ergebnisse, die sich bei der Anwendung auf eine glatte Anfangsfunktion ergeben, von den Ergebnissen für eine unstetige Anfangsfunktion.

Im Anschluss wenden wir das adaptive Verfahren auf die beiden Testgleichungen an und vergleichen die gewonnenen Ergebnisse mit dem Fall der äquidistanten Schrittweite. Die Hoffnung ist, dass durch die Anwendung des adaptiven Verfahrens bei gleichbleibendem Fehler die Anzahl der Funktionsauswertungen deutlich reduziert wird.

5.1 Räumliche Diskretisierung

Um den im nächsten Abschnitt vorgestellten Algorithmus auf zeitabhängige Konvektions-Diffusions-Reaktions-Gleichungen anwenden zu können, müssen die entsprechenden Differentialoperatoren diskretisiert werden. Hierbei wählen wir ein äquidistantes Gitter und nehmen an, dass u hinreichend oft nach x differenzierbar ist.

Diskretisierung des Laplaceoperators

Mit $u(t, x - jh) = \sum_{j=0}^p \frac{u^{(j)}(t, x)}{j!} (-h)^j + \mathcal{O}(h^{p+1})$ folgt also, dass die Diskretisierung

$$(D_h^2 u)(t, x) := \frac{u(t, x - h) - 2u(t, x) + u(t, x + h)}{h^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.1)$$

zweiter Ordnung ist.

Entwickeln wir nun die nächsten Stützstellen auch noch in eine Taylorreihe so folgt, dass die Diskretisierung

$$\begin{aligned} & \frac{-u(t, x - 2h) + 16u(t, x - h) - 30u(t, x) + 16u(t, x + h) - u(t, x + 2h)}{12h^2} \\ &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) - \frac{h^4}{90} \frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(t, x) + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned} \quad (5.2)$$

vierter Ordnung ist.

Diskretisierung des Gradienten

Aus den Entwicklungen des vorigen Abschnitts erhalten wir, dass die Diskretisierung

$$\frac{u(t, x + h) - u(t, x - h)}{2(h)} = \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t, x) + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.3)$$

zweite Ordnung und die Diskretisierung

$$\frac{u(t, x - 2h) - 8u(t, x - h) + 8u(t, x + h) - u(t, x + 2h)}{12h} = \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \frac{h^4}{30} \frac{\partial^5 u}{\partial x^5}(t, x) + \mathcal{O}(h^6) \quad (5.4)$$

vierte Ordnung hat.

Diese beiden Diskretisierungsverfahren berücksichtigen aber nicht die Transporteigenschaft der betrachteten Gleichungen. Tatsächlich verhalten sich diese zentralen Verfahren bei reinen Konvektionsproblemen nicht günstig. Zumindest das erste Verfahren verhält sich schnell instabil bei zu groß gewählten Zeitschrittweiten und ist zu dispersiv.

Die UPWIND-Verfahren erster Ordnung

$$\begin{aligned} (D_{h,1}^+ u)(t, x) &:= \frac{u(t, x + h) - u(t, x)}{h} = \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + \mathcal{O}(h^2) \\ (D_{h,1}^- u)(t, x) &:= \frac{u(t, x) - u(t, x - h)}{h} = \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

berücksichtigen hingegen die Konvektionseigenschaft der betrachteten Gleichungen. Diese UPWIND-Verfahren verhalten sich aber zu diffusiv (vgl. hierzu auch [HV03, S.52-58]).

Als weitere Diskretisierungen betrachten wir die UPWIND-Verfahren dritter Ordnung

$$\begin{aligned} (D_{h,3}^+ u)(t, x) &:= \frac{-u(t, x + 2h) + 6u(t, x + h) - 3u(t, x) - 2u(t, x - h)}{6h} \\ &= \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \frac{h^3}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) + \mathcal{O}(h^4) \\ (D_{h,3}^- u)(t, x) &:= \frac{2u(t, x + h) + 3u(t, x) - 6u(t, x - h) + u(t, x - 2h)}{6h} \\ &= \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \frac{h^3}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(t, x) + \mathcal{O}(h^4), \end{aligned}$$

die auch die Transportstruktur der Gleichungen berücksichtigen.

Bemerkung 5.1. Sei u die hinreichend glatte eindeutige Lösung einer partiellen zeitabhängigen Differentialgleichung, U_h die exakte Lösung der im Ort diskretisierten Differentialgleichung und U die Lösung der diskretisierten Differentialgleichung mit einem Lösungsverfahren der

Konvergenzordnung p_1 . Falls die verwendete Ortsdiskretisierung die Konvergenzordnung p_2 hat, so gilt für den globalen Fehler auf dem Gitter Δ

$$\|u(t_n, \cdot) - U^n\| \leq \|u(t_n, \cdot) - U_h(t_n)\| + \|U_h(t_n) - U^n\| \leq C_1 \tau^{p_1} + C_2 h^{p_2}.$$

Falls C_1, C_2, p_1, p_2 voneinander unabhängig sind, ist also für $\tau/h = \text{const.}$ konstant mindestens die Konvergenzordnung $\min\{p_1, p_2\}$ zu erwarten.

5.2 Konvektions-Diffusions-Gleichung

Um das entwickelte Verfahren zu testen, betrachten wir zunächst die Anwendung auf eine Konvektions-Diffusions-Gleichung der Form

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, x) &= \epsilon u_{xx}(t, x) + c \partial_x u(t, x) & \forall t \in (0, 1], x \in [0, 1] \\ u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in [0, 1] \\ u(t, 0) &= u(t, 1) & \forall t \in [0, 1] \end{aligned} \quad (5.5)$$

mit periodischen Randwerten.

Dabei werden wir den Diffusionsterm ϵu_{xx} implizit und den Konvektionsterm $c \cdot \partial_x u$ explizit behandeln. Auf Grund der Linearität der auftretenden Terme bzw. der Diskretisierungen, muss in jedem Zeitschritt nur ein lineares Gleichungssystem gelöst werden.

Wir setzen $c = 1$ und benutzen die oben vorgeschlagene Diskretisierung des Laplaceoperators D_h^2 und das UPWIND-Schema dritter Ordnung $D_{h,3}^-$ als Diskretisierung des Gradienten. Damit lässt sich das Gleichungssystem, das in jedem Zeitschritt gelöst werden muss, in der Form $A \cdot U^n = F$ schreiben mit

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2\epsilon}{h^2} + \frac{\alpha_{s,n}}{\tau_{n+s-1}} & & & & & & \frac{-\epsilon}{h^2} \\ \frac{-\epsilon}{h^2} & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \frac{2\epsilon}{h^2} + \frac{\alpha_{s,n}}{\tau_{n+s-1}} & & & & \frac{-\epsilon}{h^2} \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \frac{-\epsilon}{h^2} & & \\ & & & & & \frac{2\epsilon}{h^2} + \frac{\alpha_{s,n}}{\tau_{n+s-1}} & \frac{-\epsilon}{h^2} \\ \frac{-\epsilon}{h^2} & & & & & \frac{-\epsilon}{h^2} & \frac{2\epsilon}{h^2} + \frac{\alpha_{s,n}}{\tau_{n+s-1}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

$$U^n = (U_1^n, \dots, U_d^n)^T \in \mathbb{R}^d$$

$$F = \sum_{i=0}^{s-1} \left(a \cdot \beta_{i,n} D_{h,3}^-(U^{n-s+1+i}) - \frac{\alpha_{i,n}}{\tau_{n+s-1}} U^{n-s+i} \right) \in \mathbb{R}^d.$$

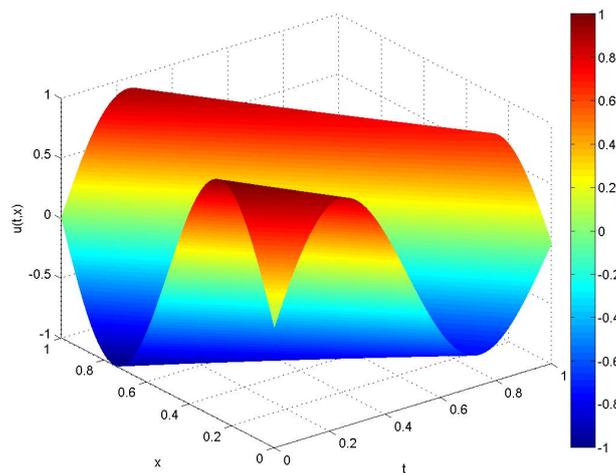
Für die Anfangsbedingung $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ lässt sich die Lösung des Problems 5.5

geschlossen als

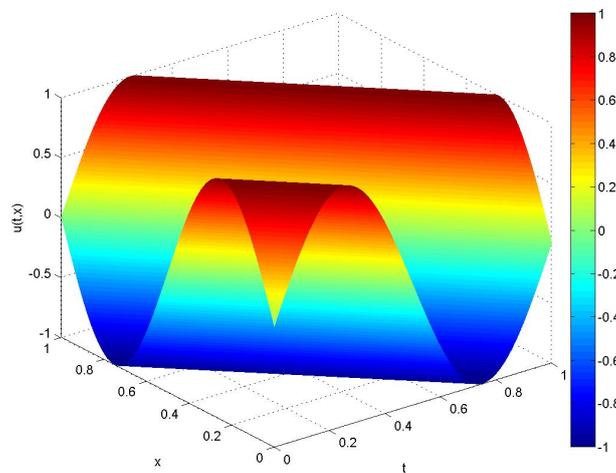
$$u(t, x) = \sin(2\pi(x + ct)) \exp(-4\pi^2 \epsilon t) \quad (5.6)$$

darstellen.

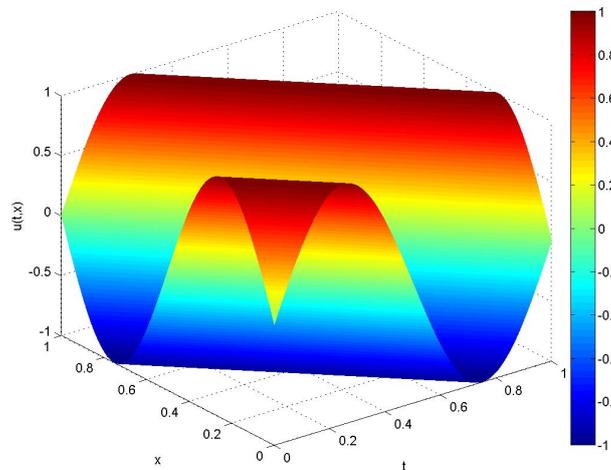
Wir betrachten nun in Abbildung 5.1 die Lösungen, die sich für $\epsilon \in \{10^{-2}, 10^{-4}, 0\}$ ergeben. In diesen Fällen ist die Differentialgleichung 5.5 konvektionsdominiert.



(a) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 10^{-2}$



(b) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 10^{-4}$

(c) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 0$ Abbildung 5.1: Lösung Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$

Die nachfolgende Abbildung zeigt die Form des absoluten Fehlers, der sich bei der Anwendung eines VSSBDF-Verfahrens ergibt. Man erkennt, dass sich der Fehler entlang der Transportrichtung entwickelt und mit der Zeit wächst.

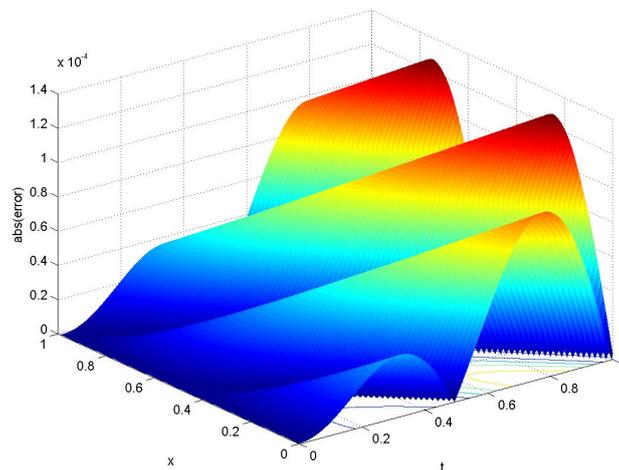
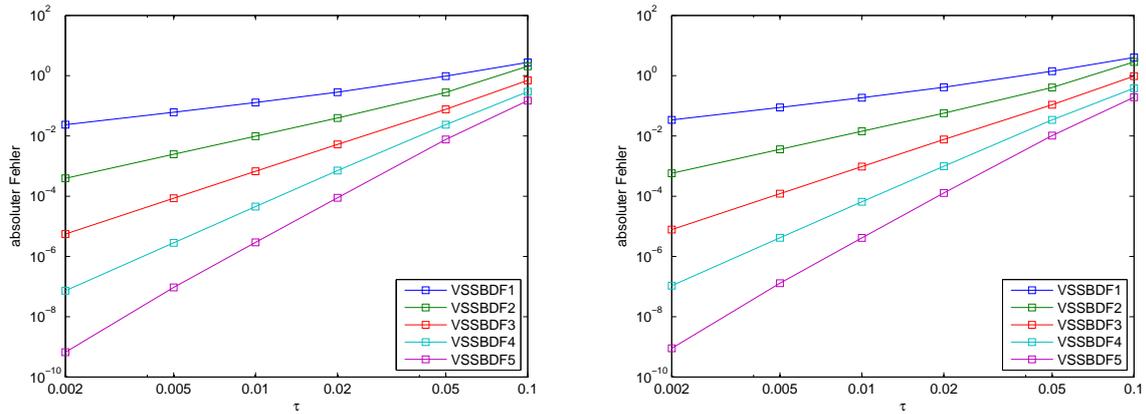


Abbildung 5.2: Fehlerentwicklung bei der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung

Wir wollen nun die theoretisch hergeleiteten Konvergenzordnungen der Verfahren bestätigen. Dazu betrachten wir ein festes $h = \frac{1}{10}$ und berechnen für diesen Fall eine Referenzlösung mit dem VSSBDF-Verfahren und $\tau = 10^{-5}$. Wir vergleichen diese Lösung nun mit den

Ergebnissen, die sich bei der Variation von τ ergeben. Die folgenden Darstellungen zeigen die Differenz zur Referenzlösung in der Maximumsnorm.



(a) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 10^{-2}$

(b) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 0$

Abbildung 5.3: Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$

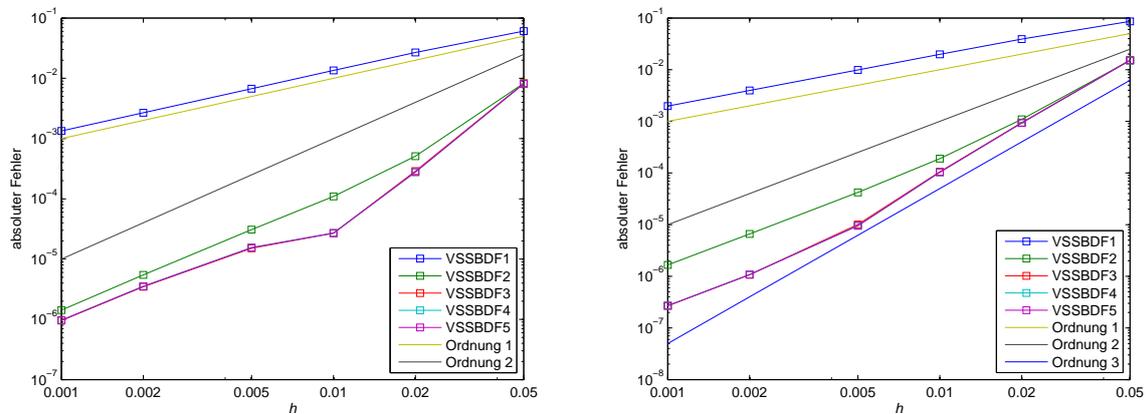
Eine lineare Interpolation liefert dann die folgenden Konvergenzordnungen:

Tabelle 5.1: Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	1.2128	2.1387	2.9852	3.8729	4.9072
$\epsilon = 10^{-2}$	1.2103	2.1473	2.9884	3.8971	4.9159

Die Anwendung auf das Differentialgleichungssystem, das sich für festes h ergibt, bestätigt also gut die theoretisch hergeleiteten Konvergenzordnungen.

Nun untersuchen wir für den Fall einer festen CFL-Bedingung, d.h. $\tau/h = \frac{1}{10}$, den Fehler in der Maximumsnorm. Bei der Ortsdiskretisierung haben wir für die zweite Ableitung ein Verfahren zweiter Ordnung und für die erste Ableitung ein Verfahren dritter Ordnung verwendet. Aus diesem Grund ist für $\epsilon \neq 0$ höchstens die Konvergenzordnung zwei und für $\epsilon = 0$ höchstens die Konvergenzordnung drei zu erwarten.

(a) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 10^{-2}$ (b) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 0$ Abbildung 5.4: Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und feste CFL-Zahl

Tatsächlich zeigt sich in der Abbildung 5.4 und in der Tabelle 5.2, dass die Konvergenzordnung drei auch im Fall $\epsilon = 0$ nicht übersteigt. Während beim Einschrittverfahren die Konvergenzordnung gut eingehalten wird ist die Konvergenzordnung beim Zweisrittverfahren sogar höher als erwartet. Die Konvergenzordnung der übrigen Verfahren ist nahezu identisch und liegt wie erwartet in der Nähe von zwei bzw. drei.

Tabelle 5.2: Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und feste CFL-Zahl

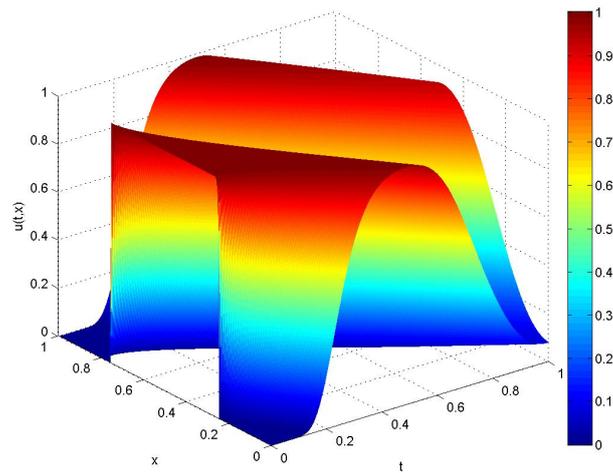
	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	0.9731	2.2982	2.8501	2.8451	2.8469
$\epsilon = 10^{-2}$	0.9820	2.1469	2.1825	2.1707	2.1723

Als Nächstes betrachten wir das Problem mit der unstetigen Anfangsfunktion $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$. Im Fall $\epsilon = 0$ lautet die Lösung

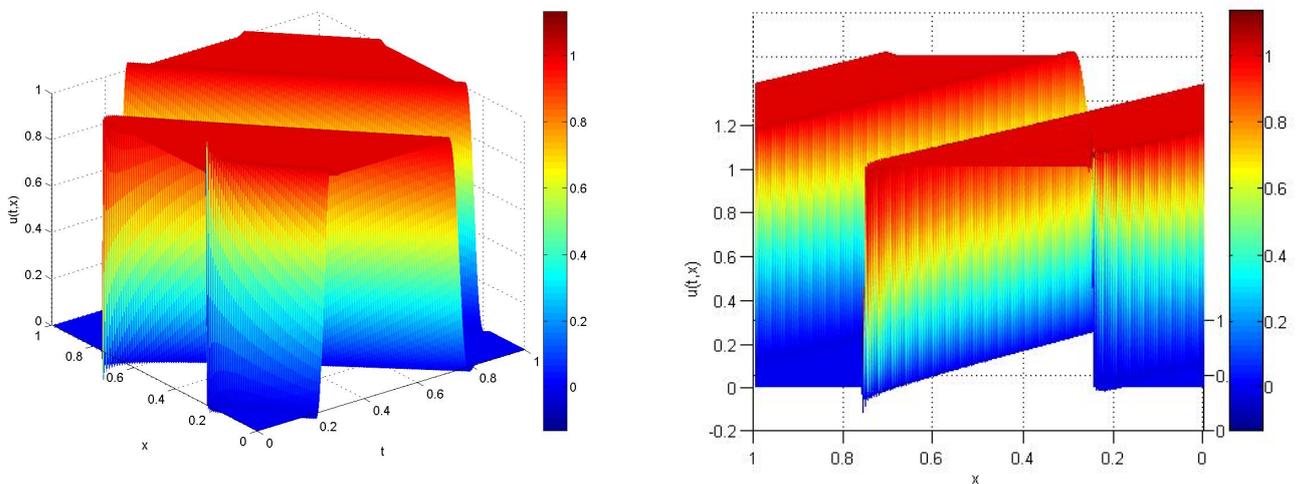
$$u(t, x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x + ct). \quad (5.7)$$

Für $\epsilon \neq 0$ wurden die Lösungsdarstellungen mit dem VSSBDF5-Verfahren mit den Parametern $h = 5 \cdot 10^{-3}$ und $\tau = 10^{-4}$ berechnet. Dabei wurde das UPWIND-Verfahren dritter Ordnung verwendet. Im Fall $\epsilon = 10^{-2}$ lässt sich die Glättung der Anfangslösung gut erkennen. Vergleicht man die Darstellung für $\epsilon = 0$ mit der für $\epsilon = 10^{-4}$, erkennt man schon das größte Problem, das sich für unstetige Anfangswerte ergibt. Ähnlich dem

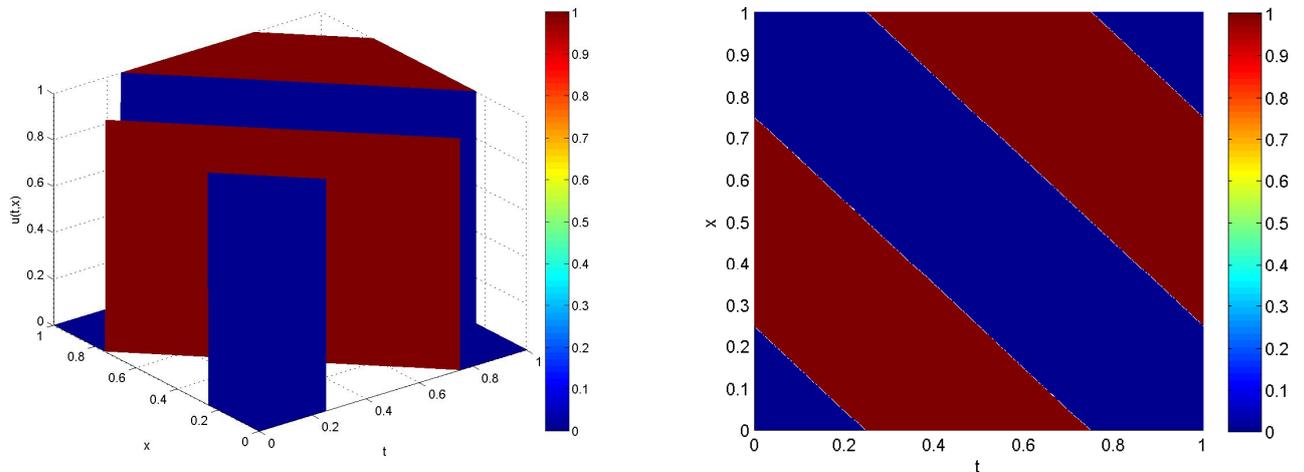
Gibbs-Phänomen kommt es an den Unstetigkeitsstellen zu Über- bzw. Unterschwingern der Lösung.



(a) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 10^{-2}$



(b) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 10^{-4}$

(c) Lösung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für $\epsilon = 0$ Abbildung 5.5: Lösung Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$

In der folgenden Grafik sehen wir die Form der Entwicklung des absoluten Fehlers, der sich bei der Anwendung eines VSSBDF-Verfahrens ergibt. Wie im Fall der stetigen Anfangsbedingung breitet sich der Fehler entlang der Transportrichtung der Lösung aus. Der wesentliche Fehler tritt also gerade an den Unstetigkeitsstellen auf und lässt sich nur schwer unter Kontrolle bringen. Um dies zu erreichen wählen wir für die Ortsdiskretisierung das UPWIND-Verfahren erster Ordnung.

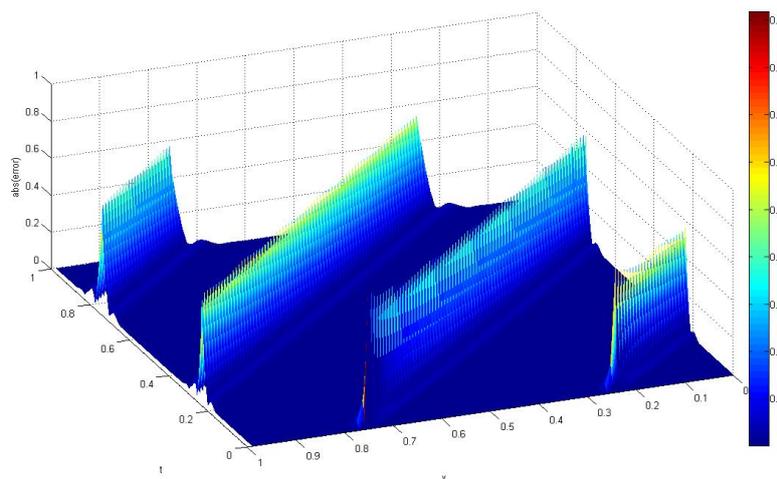
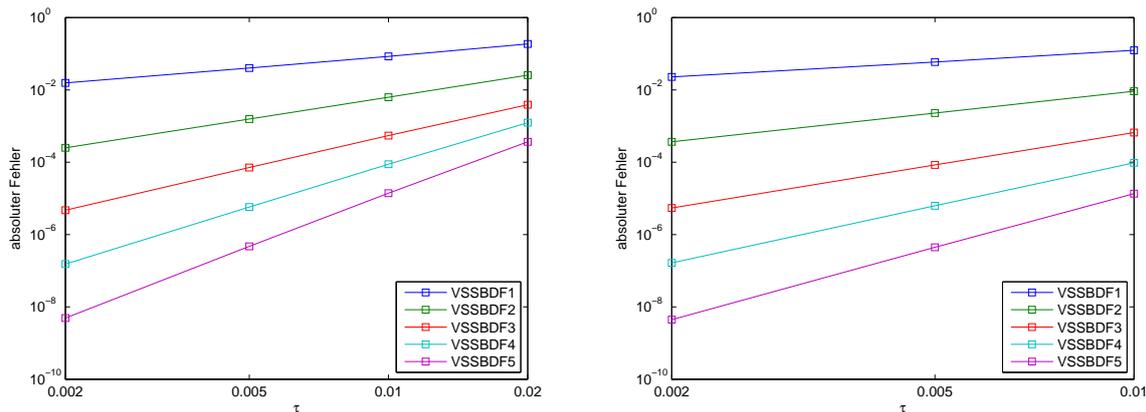


Abbildung 5.6: Fehlerentwicklung bei der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung

Auch hier untersuchen wir zunächst wieder den Fall eines festen $h = 10^{-1}$. Dazu berechnen

eine Referenzlösung mit $\tau = 10^{-5}$ und betrachten die Abweichungen von dieser in der Maximumsnorm. Die lineare Diskretisierung in Ortsrichtung mit dem UPWIND-Verfahren sorgt für den Fall von fixiertem h für die nötige Glattheit der Lösung. Aus diesem Grund ist trotz der Unstetigkeit des Anfangswerts im kontinuierlichen Fall keine Reduktion der Konvergenzordnungen zu erwarten.



(a) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 10^{-2}$

(b) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 0$

Abbildung 5.7: Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$

Tabelle 5.3: Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	1.0504	2.0031	2.9859	3.9609	4.9864
$\epsilon = 10^{-2}$	1.0749	2.0083	2.9191	3.9128	4.8780

Die Tabelle 5.3 und die Abbildung 5.7 zeigen, dass die VSSBDF-Verfahren von ihrer jeweiligen Ordnung konvergieren.

Nun halten wir wieder den Quotienten $\tau/h = \frac{1}{10}$ fest und ermitteln die sich ergebenden Konvergenzordnungen. Dazu berechnen wir eine Referenzlösung mit den Parametern $\tau = 2 \cdot 10^{-3}$, $h = 2 \cdot 10^{-4}$ und untersuchen die Differenz der Lösungen der VSSBDF-Verfahren zu dieser. Auf Grund der oben beschriebenen Schwierigkeit und der Unstetigkeit des Anfangswerts scheint die Maximumsnorm in diesem Falle nicht für eine geeignete Fehlerdarstellung geeignet zu sein. Stattdessen benutzen wir hier die \mathcal{L}^2 -Norm bzw. eine geeignete Diskretisierung dieser. Wegen der fehlenden Glattheit der Lösung erwarten wir für diesen Fall nicht die maximalen Konvergenzordnungen, die sich aus den verwendeten Diskretisierungen ergeben.

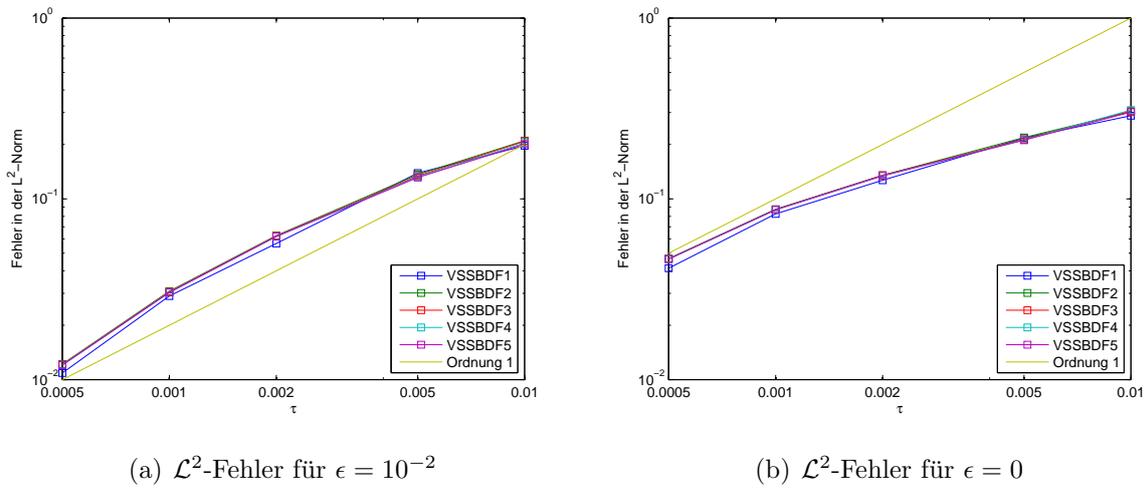


Abbildung 5.8: Fehler Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl

Tabelle 5.4: Konvergenzordnungen Konvektions-Diffusions-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	0.6356	0.6099	0.6102	0.6128	0.6062
$\epsilon = 10^{-2}$	1.0880	1.0393	1.0349	1.0310	1.0292

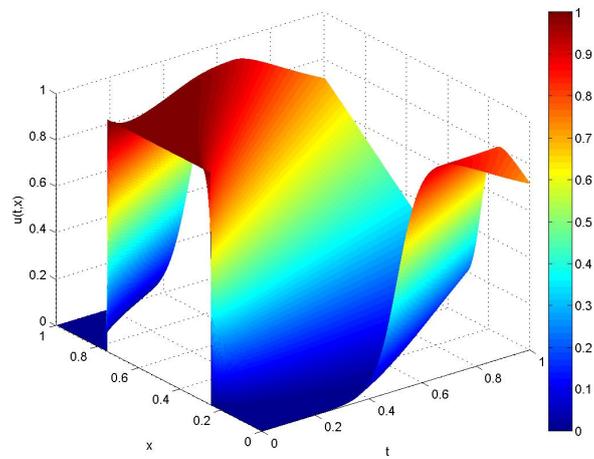
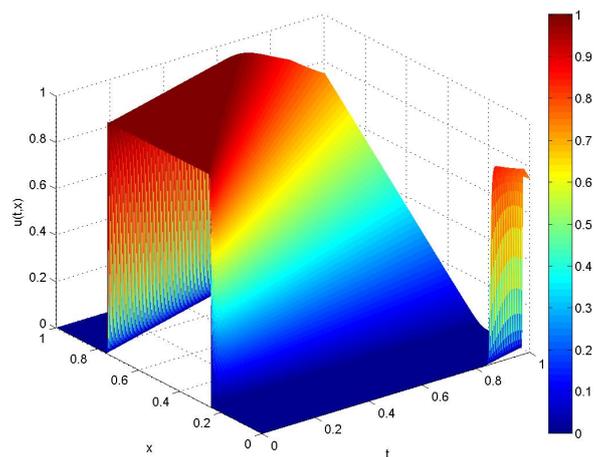
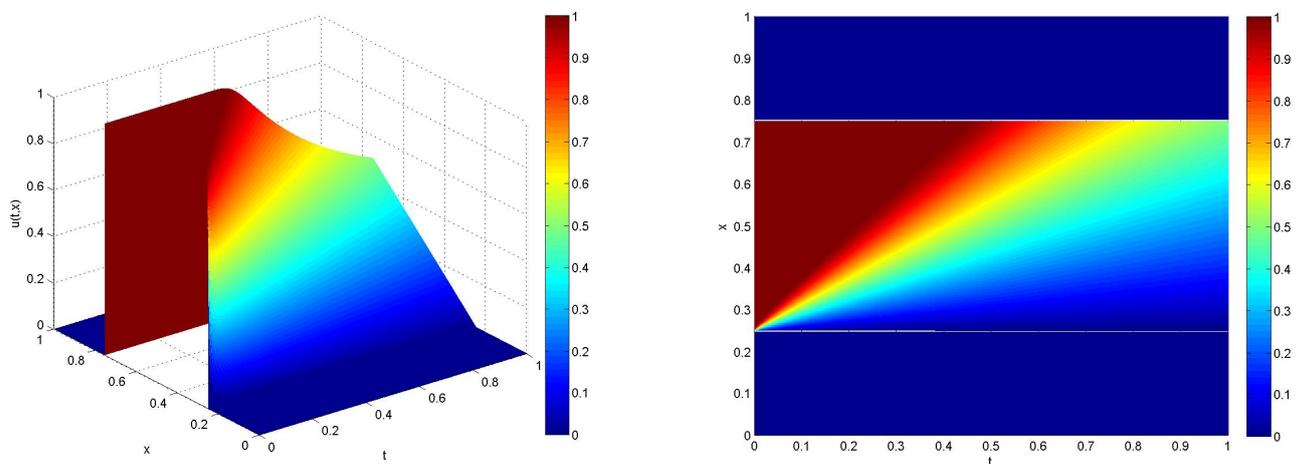
Aus Abbildung 5.8 und Tabelle 5.4 geht nun hervor, dass die Nichterfüllung der Glattheitsbedingungen Einfluss auf die Konvergenzordnung im Fall $\epsilon = 0$ hat. Obwohl durchgängig Verfahren mit einer Ordnung von mindestens 1 für die Ortsdiskretisierung verwendet wurden, konvergiert die Lösung für alle VSSBDF-Verfahren nur mit einer Ordnung von etwa 0.6.

Wählt man dagegen $\epsilon = 10^{-2}$, so tritt dieser Effekt nicht auf. Man beobachtet die zu erwartende Konvergenzordnung.

5.3 Burgers-Gleichung

Das zweite Beispiel ist die Burgers-Gleichung

$$\begin{aligned}
 \partial_t u(t, x) &= -u(t, x) \partial_x u(t, x) + \epsilon \cdot \partial_{xx} u(t, x) & \forall t \in (0, 1], x \in [0, 1] \\
 u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in [0, 1] \\
 u(t, 0) &= u(t, 1) & \forall t \in [0, 1]
 \end{aligned}$$

(a) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 10^{-2}$ (b) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 10^{-4}$ (c) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 0$ Abbildung 5.9: Lösung Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$

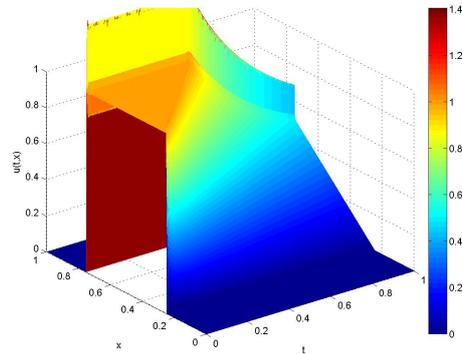


Abbildung 5.10: Lösung Burgers-Gleichung für $\epsilon = 0$ mit UPWIND3-Diskretisierung

Auch für diese Differentialgleichung betrachten wir wieder die Entwicklung des absoluten Fehlers, der sich bei der Anwendung eines der betrachteten Verfahren ergibt. Vergleicht man dieses Bild mit dem der Lösung für $\epsilon = 0$, so erkennt man, dass sich in diesem Fall der Fehler von der Unstetigkeit bei $x = 0.25$ aus in positive x -Richtung ausbreitet. Offensichtlich spielt die Unstetigkeit bei $x = 0.75$ keine große Rolle für die Entwicklung des Fehlers.

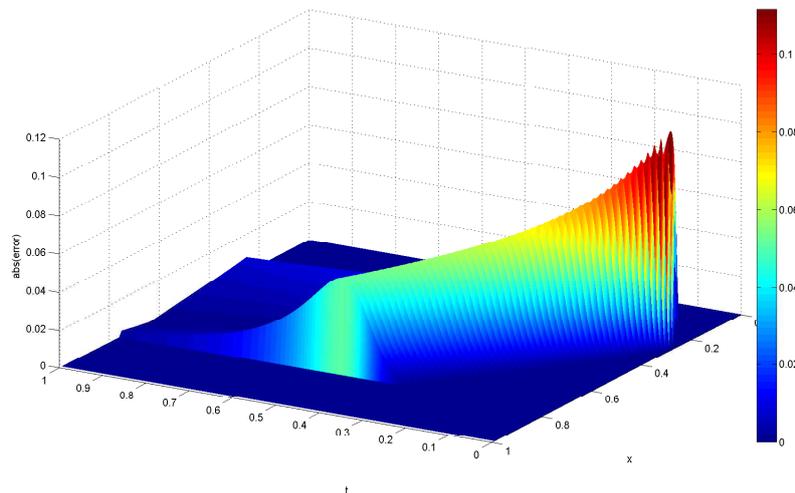


Abbildung 5.11: Fehlerentwicklung bei der Burgers-Gleichung für die un stetige Anfangsbedingung

Wie bei der ersten Differentialgleichung untersuchen wir als erstes die Konvergenzordnungen für festes $h = \frac{1}{10}$ wobei als Referenz $\tau = 10^{-5}$ verwendet wurde. Dabei wird der Fehler auf Grund der zu erwartenden Unstetigkeit der Lösung in der \mathcal{L}^2 -Norm gemessen.

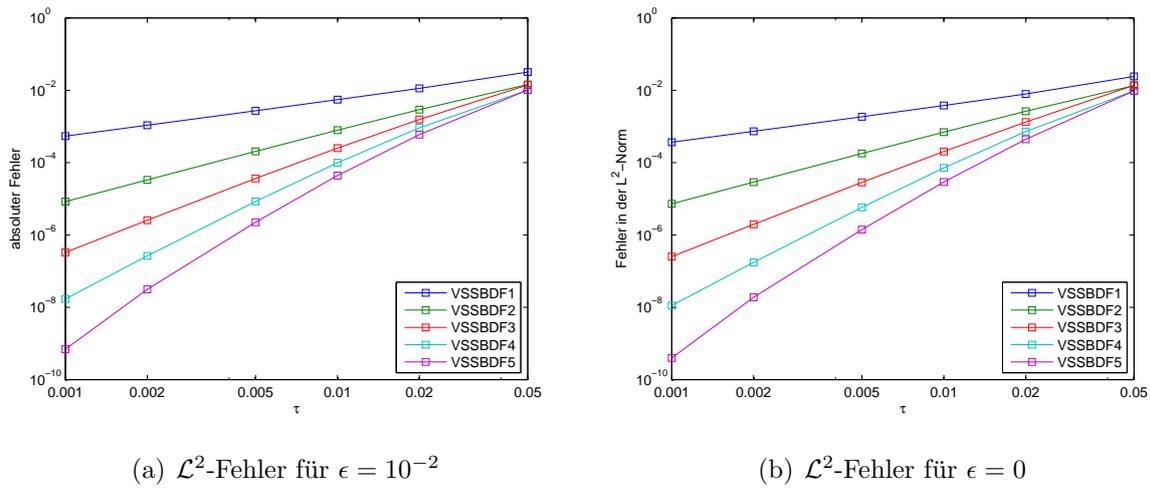


Abbildung 5.12: Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$

Aus der Abbildung 5.12 ist ersichtlich, dass die Konvergenzordnungen für kleine τ etwas ansteigen. Die Tabelle 5.6 zeigt die Konvergenzordnungen, die sich dann ergeben. Wie in den vorhergehenden Untersuchungen werden auch in diesem Fall die Konvergenzordnungen gut bestätigt.

Tabelle 5.5: Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $h = \frac{1}{10}$

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	1.0140	1.9823	2.9112	3.8082	4.8449
$\epsilon = 10^{-2}$	1.0083	1.9751	2.8872	3.7687	4.7830

Wie zuvor untersuchen wir nun den Fehler für feste CFL-Zahl $\tau/h = \frac{1}{10}$. Auf Grund der verwendeten Schemata für die Ortsdiskretisierung ist für $\epsilon = 0$ höchstens die Konvergenzordnung 1 und für $\epsilon = 0$ höchstens die Konvergenzordnung 3 zu erwarten. Wie schon bei der Untersuchung für festes h wird wegen der Unstetigkeit der sich ergebenden Lösungen der Fehler in der \mathcal{L}^2 -Norm gemessen. Als Referenz wird die Lösung des VSSBDF-Verfahrens 5. Ordnung mit $h = 10^{-3}$ und $\tau = 10^{-4}$ verwendet.

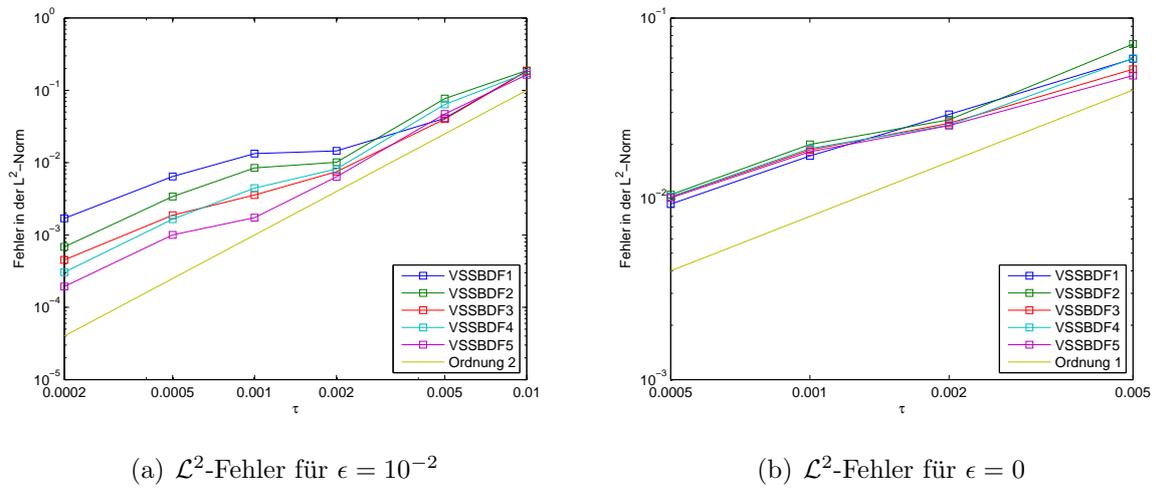


Abbildung 5.13: Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl

Tabelle 5.6: Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und feste CFL-Zahl

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	0.8231	0.6867	0.6766	0.6555	0.6638
$\epsilon = 10^{-2}$	1.0738	1.3928	1.4759	1.5990	1.7180

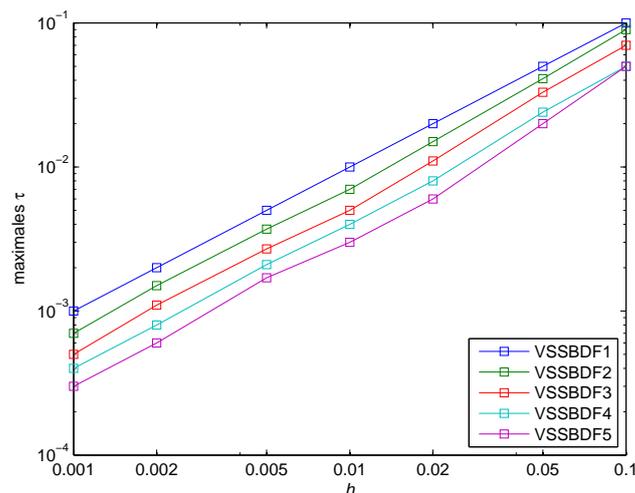
Abbildung 5.13 und Tabelle 5.6 zeigen, dass die fehlende Glattheit der Lösung in beiden Fällen zu einer deutlichen Ordnungsreduktion führt. Da für $\epsilon = 0$ Ortsdiskretisierungen der Ordnung 1 und 2 verwendet wurden, wäre eine Ordnung 1 wünschenswert gewesen. Im Fall $\epsilon = 10^{-2}$ wurden im Ort Diskretisierungen der Ordnung 3 und 2 verwendet. Aus diesem Grund kann für das Einschrittverfahren nicht mehr als die Konvergenzordnung 1 erwartet werden. Dies wurde auch gut eingehalten. Für die Verfahren höherer Ordnung hingegen wäre mindestens die Konvergenzordnung 2 zu erwarten gewesen.

Zuletzt betrachten wir eine Stabilitätsbedingung für dieses Beispiel. Wir untersuchen für $\epsilon = 0$, wie groß der Zeitschritt τ in Abhängigkeit von der Ortsschrittweite h gewählt werden darf, ohne dass die Lösung unbeschränkt wird.

Tabelle 5.7: Anforderungen an τ für Beschränktheit der Lösung

h	$\max \tau$				
	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
0.1	0.01	0.09	0.07	0.05	0.05
0.05	0.05	0.041	0.033	0.024	0.020
0.02	0.02	0.015	0.011	0.008	0.006
0.01	0.01	0.007	0.005	0.004	0.003
0.005	0.005	0.0037	0.0027	0.0021	0.0017
0.002	0.002	0.0015	0.0011	0.0008	0.0006
0.001	0.001	0.0007	0.0005	0.0004	0.0003

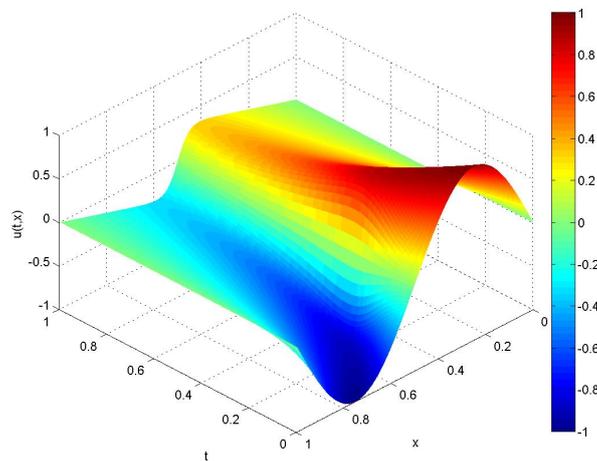
Die Tabelle 5.7 zeigt, dass wir für das VSSBDF1-Verfahren die volle CFL-Bedingung zurückgewinnen. Die Lösung ist also beschränkt, wenn $\tau/h \leq 1$. Für die Verfahren höherer Ordnung verschärfen sich die Anforderungen an den Quotienten. So muss für das VSSBDF4-Verfahren der Zeitschritt schon halb so groß wie der Ortsschritt sein und für das VSSBDF5-Verfahren verkleinert sich der benötigte Quotient auf etwa Drittel. Die doppellogarithmische Darstellung 5.14 verdeutlicht, dass ein linearer Zusammenhang zwischen τ und h für alle Verfahren die Beschränktheit der Lösung garantiert. Es zeigt sich weiterhin, dass die Wahl $\tau/h = \frac{1}{10}$ in der vorherigen Konvergenzbetrachtung schon sehr stark war.

Abbildung 5.14: Beschränktheitsanforderung an τ

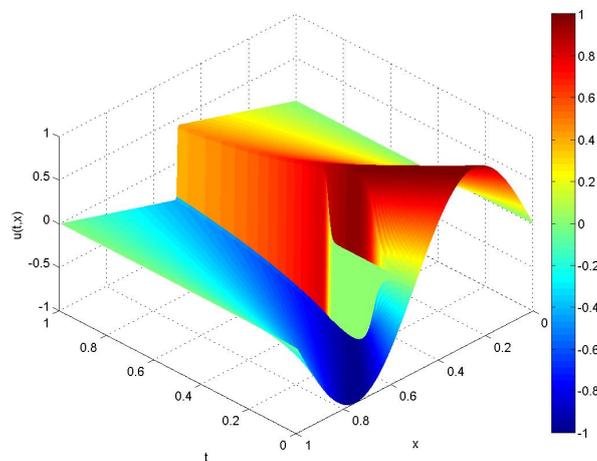
Als Nächstes wird der Fall einer stetigen Anfangsfunktion $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ betrachtet. In diesem Fall sind sowohl positive als auch negative Komponenten in der Anfangsfunktion

enthalten. Aus diesem Grund ist es nicht sinnvoll eine UPWIND-Diskretisierung, die ausschließlich in eine Richtung wirkt, zu benutzen. Stattdessen passen wir die UPWIND-Diskretisierung so an, dass für jede Lösungskomponente das UPWIND-Verfahren entsprechend dem Vorzeichen gewählt wird. Erst diese Vorgehensweise ermöglicht es sinnvolle Lösungen für diesen Anfangswert darzustellen. Die verwendete Idee ist dieselbe, die beim Godunov-Schemas benutzt wird.

Wie oben sind die Ergebnisse des VSSBDF5-Verfahrens mit $h = 2 \cdot 10^{-3}$, $\tau = 10^{-4}$ für die Fälle $\epsilon \in \{10^{-2}, 10^{-4}, 0\}$ dargestellt. Dabei wird wie zuvor bei der unstetigen Anfangsbedingung für $\epsilon \neq 0$ das UPWIND-Verfahren dritter Ordnung für $\epsilon = 0$ die Diskretisierung erster Ordnung benutzt.



(a) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 10^{-2}$



(b) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 10^{-4}$

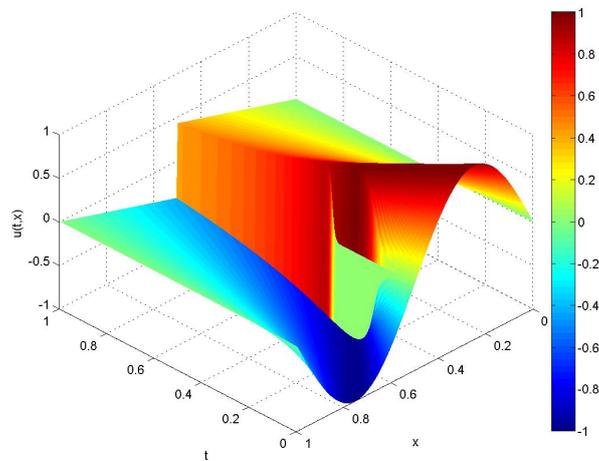
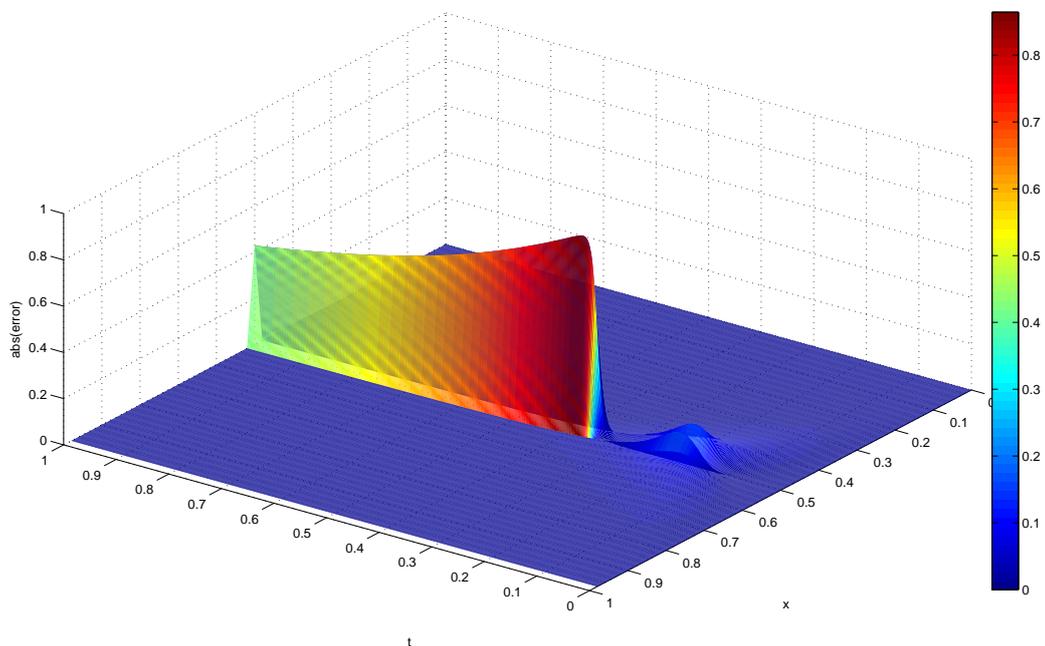
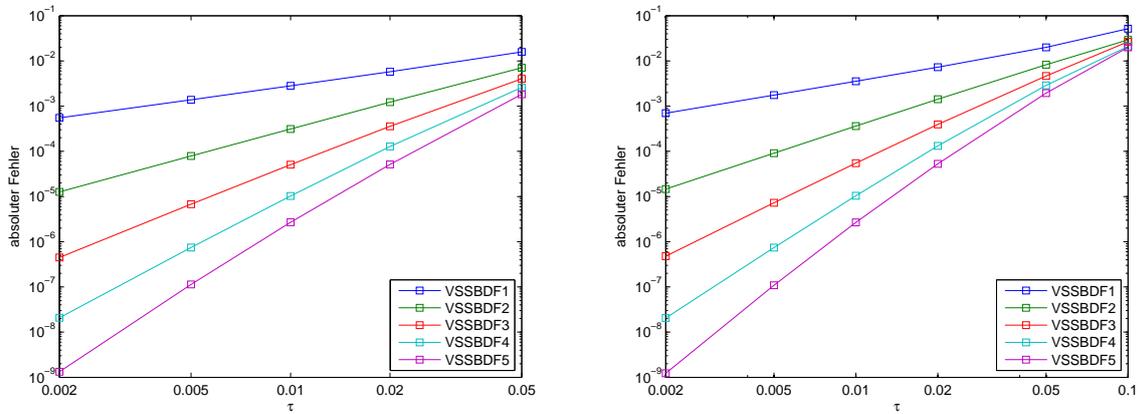
(c) Lösung der Burgers-Gleichung für $\epsilon = 0$ Abbildung 5.15: Lösung Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ 

Abbildung 5.16: Fehlerentwicklung bei der Burgers-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung

Die Grafik 5.16 zeigt die Form der Entwicklung des absoluten Fehlers, der sich bei der Anwendung eines VSSBDF-Verfahrens ergibt. Bei der Lösung der betrachteten Differentialgleichung breitet sich eine Unstetigkeit bei $x = 0.5$ aus. Der Fehler breitet sich entlang

dieser Geraden aus und zeigt noch einmal, dass es nicht sinnvoll ist, den Fehler in der Maximumsnorm zu betrachten.

Zunächst wird wieder für festes $h = \frac{1}{10}$ untersucht, ob die vollen Konvergenzordnungen erzielt werden. Dazu berechnen wir die Differenz zur Referenzlösung mit $\tau = 10^{-5}$ in der \mathcal{L}^2 -Norm. Die Abbildung 5.17 und die Tabelle 5.8 bestätigen wieder die theoretisch gefundenen Konvergenzordnungen.



(a) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 10^{-2}$

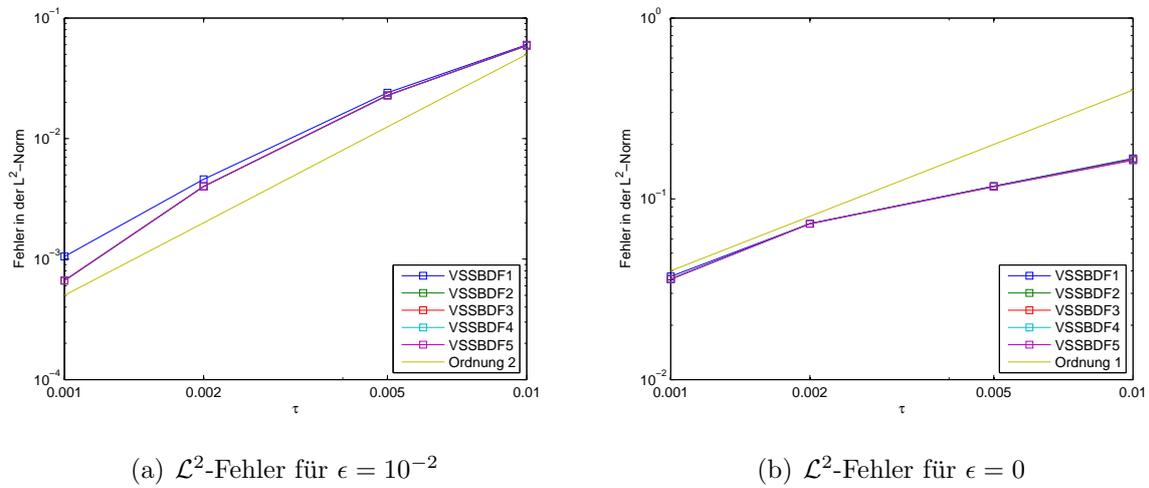
(b) Fehler in der Maximumsnorm für $\epsilon = 0$

Abbildung 5.17: Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$

Tabelle 5.8: Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $h = \frac{1}{10}$

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	1.0118	1.9933	2.9456	3.8702	4.78420
$\epsilon = 10^{-2}$	1.0123	1.9908	2.9370	3.8574	4.7354

Wie schon zuvor wird auch der Fall einer festen CFL-Zahl $\tau/h = \frac{1}{10}$ untersucht. Dazu verwenden wir als Referenzlösung die Lösung des VSSBDF5-Verfahrens mit $h = 5 \cdot 10^{-3}$ und $\tau = 10^{-4}$ und messen den Fehler in der \mathcal{L}^2 -Norm.

Abbildung 5.18: Fehler Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und fester CFL-ZahlTabelle 5.9: Konvergenzordnungen Burgers-Gleichung für $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und fester CFL-Zahl

	VSSBDF1	VSSBDF2	VSSBDF3	VSSBDF4	VSSBDF5
$\epsilon = 0$	0.6353	0.6428	0.6418	0.6399	0.6381
$\epsilon = 10^{-2}$	1.7642	1.9417	1.9435	1.9438	1.9440

Aus Tabelle 5.9 und Abbildung 5.18 wird ersichtlich, dass auch hier die sich ausbildende Unstetigkeit Einfluss auf die Konvergenz hat. Für den Fall $\epsilon = 0$ reduziert sich die gewünschte Ordnung 1 für alle Verfahren auf etwa 0.6. Wählt man $\epsilon = 10^{-2}$, so erhält man für alle Verfahren die Konvergenzordnung 2. Da eine Diskretisierung der Ordnung 3 für den Gradienten und eine Diskretisierung der Ordnung 2 für den Laplace-Operator verwendet wurde, bedeutet dies auch eine Reduktion der erwünschenswerten Ordnung.

5.4 Anwendung des adaptiven Verfahrens

Betrachten wir die Ergebnisse aus der Diskussion der Konvergenz von Mehrschrittverfahren, so werden zum einen Restriktionen an die Schrittweite durch die Stabilität und zum anderen durch die Stabilität gestellt. Diese rühren daher, dass beliebige Gitter für beliebige Probleme betrachtet werden.

Ein adaptives Verfahren sollte nun aber so gebaut sein, dass ein problemangepasstes Gitter erzeugt wird. Aus diesem Grund werden wir bei der Implementation untersuchen, ob man diese Restriktionen fallen lassen kann. Auf Grund des Konvergenzresultats für äquidistante

Gitter wissen wir zumindest, dass es eine Möglichkeit gibt die Schrittweiten so zu wählen, dass Konvergenz erzielt wird.

Im Folgenden wird exemplarisch für das Zweischrittverfahren untersucht, welche Einsparungen die vorgeschlagenen adaptiven Verfahren ergeben können. Dafür wenden wir das Verfahren auf jedes der vier Testprobleme an und vergleichen dann den Fehler des adaptiven Verfahrens mit dem Fehler, der sich im äquidistanten Fall bei der gleichen Anzahl an Zeitschritten ergibt. Um tatsächlich Vergleiche anstellen zu können, ist es nötig auch hier $h = \frac{1}{10}$ festzusetzen und den Fehler für den äquidistanten Fall linear zu interpolieren.

Wir wenden die Verfahren zunächst auf die Konvektions-Diffusions-Gleichung mit stetiger Anfangsbedingung an. Dabei beschränken wir das maximale Schrittweitenverhältnis durch 3. Dies ist noch recht nah an der Schranke $1 + \sqrt{2}$, die für das VSSBDF-Verfahren die Stabilität auf beliebigen Gittern garantiert.

Tabelle 5.10: Untersuchung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $\epsilon = 0$

Toleranz	Zeitschritte	Fehler adaptiv	Fehler äquidistant	$\min \omega$	$\max \omega$	$\max \tau$
10^{-1}	27	$5.4704 \cdot 10^{-1}$	$2.1236 \cdot 10^{-1}$	0.9852	3	$6.1318 \cdot 10^{-2}$
10^{-2}	60	$5.6249 \cdot 10^{-2}$	$3.9441 \cdot 10^{-2}$	0.9941	3	$2.0602 \cdot 10^{-2}$
10^{-3}	166	$5.7232 \cdot 10^{-3}$	$5.1897 \cdot 10^{-3}$	0.9961	3	$6.5892 \cdot 10^{-3}$
10^{-4}	506	$5.7913 \cdot 10^{-4}$	$5.6228 \cdot 10^{-4}$	0.9983	3	$2.0942 \cdot 10^{-3}$

Vergleicht man diese Ergebnisse mit den Resultaten für konstante Schrittweite, so zeigt sich dass das adaptive Verfahren nicht weniger Schritte benötigt und somit auch keine Verbesserung darstellt. Es zeigt sich allerdings, dass das adaptive Verfahren auch die Konvergenzordnung 2 besitzt, wenn man einen durchschnittlichen Zeitschritt zugrunde legt (siehe dazu auch Abbildung 19(a)).

Bei der Anwendung auf die Gleichung mit unstetiger Anfangsbedingung versuchen wir nun die Beschränkung der Schrittweitenverhältnisse ganz fallen zu lassen.

Tabelle 5.11: Untersuchung der Konvektions-Diffusions-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $\epsilon = 0$

Toleranz	Zeitschritte	Fehler adaptiv	Fehler äquidistant	min ω	max ω	max τ
10^{-1}	18	$1.3832 \cdot 10^{-1}$	$2.9604 \cdot 10^{-1}$	1	279.65	$1.0000 \cdot 10^{-1}$
10^{-2}	38	$2.0558 \cdot 10^{-2}$	$6.4415 \cdot 10^{-2}$	1	129.80	$5.3504 \cdot 10^{-2}$
10^{-3}	103	$2.3996 \cdot 10^{-3}$	$8.6858 \cdot 10^{-3}$	1	60.25	$1.8854 \cdot 10^{-2}$
10^{-4}	307	$2.5108 \cdot 10^{-4}$	$9.7356 \cdot 10^{-4}$	1	27.97	$6.1621 \cdot 10^{-3}$

Für dieses Beispiel zeigt sich, dass sich bei Anwendung eines adaptiven Verfahrens die Anzahl der benötigten Schritte bei gleichem Fehler in etwa halbiert. Die Ergebnisse bestätigen wieder die Konvergenzordnung 2 im Bezug auf einen Durchschnittschritt (siehe dazu auch Abbildung 19(a)). Weiterhin zeigt sich, dass der Versuch die Beschränkung an die Schrittweitenverhältnisse fallen zu lassen erfolgreich war. Trotz sehr großer Abweichungen von dem maximalen Verhältnis, das Stabilität garantiert, zeigen sich keine Probleme. Aus diesem Grund werden wir auch in den verbleibenden Beispielen diese Schranke fallen lassen.

Wie schon für den Fall eines äquidistanten Gitters wenden wir uns bei der Burgers-Gleichung zunächst dem Fall einer unstetigen Anfangsbedingung zu.

Tabelle 5.12: Untersuchung der Burgers-Gleichung für die unstetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \chi_{[0.25, 0.75]}(x)$ und $\epsilon = 0$

Toleranz	Zeitschritte	Fehler adaptiv	Fehler äquidistant	min ω	max ω	max τ
10^{-1}	16	$2.0397 \cdot 10^{-2}$	$1.9852 \cdot 10^{-2}$	1	313.90	$1.0000 \cdot 10^{-1}$
10^{-2}	23	$5.6509 \cdot 10^{-3}$	$1.0575 \cdot 10^{-2}$	1	145.70	$1.0000 \cdot 10^{-1}$
10^{-3}	50	$9.0567 \cdot 10^{-4}$	$2.6389 \cdot 10^{-3}$	1	67.63	$5.4294 \cdot 10^{-2}$
10^{-4}	136	$1.1235 \cdot 10^{-4}$	$3.8163 \cdot 10^{-4}$	1	31.39	$2.0657 \cdot 10^{-2}$
10^{-5}	404	$1.2117 \cdot 10^{-5}$	$4.4295 \cdot 10^{-5}$	1	14.57	$6.9136 \cdot 10^{-3}$

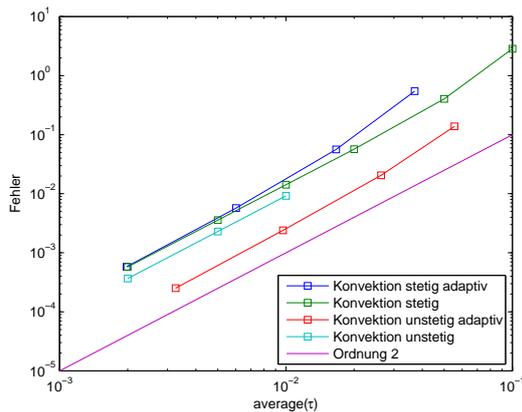
Damit zeigt sich wieder eine Halbierung der Anzahl der Schritte im Vergleich zum äquidistanten Fall. Das bestätigt wieder, dass das adaptive Verfahren von zweiter Ordnung konvergiert (siehe dazu auch Abbildung 19(b)).

Schließlich betrachten wir die Burgers-Gleichung für eine stetige Anfangsbedingung.

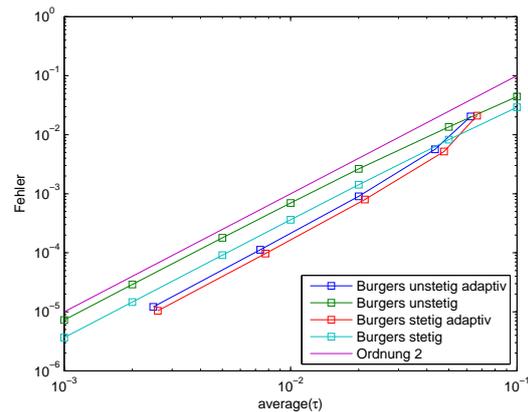
Tabelle 5.13: Untersuchung der Burgers-Gleichung für die stetige Anfangsbedingung $u_0(x) = \sin(2\pi x)$ und $\epsilon = 0$

Toleranz	Zeitschritte	Fehler adaptiv	Fehler äquidistant	min ω	max ω	max τ
10^{-1}	15	$2.1024 \cdot 10^{-2}$	$1.3943 \cdot 10^{-2}$	1	449.23	$1.0000 \cdot 10^{-1}$
10^{-2}	21	$5.1897 \cdot 10^{-3}$	$7.5143 \cdot 10^{-3}$	1	208.52	$1.0000 \cdot 10^{-1}$
10^{-3}	47	$7.9803 \cdot 10^{-4}$	$1.6016 \cdot 10^{-3}$	1	96.78	$5.4776 \cdot 10^{-2}$
10^{-4}	129	$9.6920 \cdot 10^{-5}$	$2.1822 \cdot 10^{-4}$	1	44.92	$2.0927 \cdot 10^{-2}$
10^{-5}	386	$1.0390 \cdot 10^{-5}$	$2.4549 \cdot 10^{-5}$	1	20.85	$7.0837 \cdot 10^{-3}$

Auch hier wird die Anzahl der benötigten Schritte im Vergleich zum äquidistanten Fall halbiert. Man erhält folglich auch in diesem Fall eine Konvergenzordnung 2 des Verfahrens (siehe dazu auch Abbildung 19(b)).



(a) Konvektions-Diffusions-Gleichung



(b) Burgers-Gleichung

Abbildung 5.19: Vergleich VSSBDF2 äquidistant und adaptiv für $\epsilon = 0$

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich mit dem einfachen adaptiven Verfahren für einige Fälle Einsparungen erzielen lassen. Diese treten aber nicht in dem Umfang auf wie es für ein adaptives Verfahren wünschenswert wäre. Weiterhin zeigt sich in den Beispielen, dass die Aufgabe der Beschränkung an die Schrittweitenverhältnisse zu keinen wesentlichen Problemen führt. Mit Hilfe des Fehlerschätzers ist es also möglich ein stabiles Gitter zu konstruieren, bei welchem die Schrittweitenverhältnisse deutlich über der Beschränkung liegen, die Stabilität garantiert. Schließlich bestätigt sich in den Beispielen die zuvor hergeleitete Konvergenzordnung.

Die exemplarische Betrachtung dieses adaptiven Zweisrittverfahrens zeigt, dass sich aus der behandelten Theorie ein adaptives Verfahren entwickeln lässt. Allerdings wird auch deutlich, dass für ein effizientes Verfahren noch mehr Arbeit in die Entwicklung eines lokalen

Fehlerschätzers gesteckt werden muss. Um schließlich partielle Differentialgleichungen mit Hilfe von VSSBDF-Verfahren numerisch lösen zu können, ist es weiterhin notwendig auch eine Anpassung der Ortsschrittweite zuzulassen. Eine solche Betrachtung würde den Umfang dieser Arbeit aber deutlich sprengen.

6 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

Die Arbeit gibt einen Überblick über die Theorie linearer Mehrschrittverfahren mit variabler Schrittweite. Aufbauend darauf wurde eine IMEX-Variante linearer Mehrschrittverfahren eingeführt, die in Abschnitt 3 gründlich untersucht wurde. Dabei hat sich herausgestellt, dass für Konsistenz und Konvergenz dieser Verfahren ähnliche Bedingungen gelten müssen wie für lineare Mehrschrittverfahren. Insbesondere hat sich gezeigt, dass ein VSIMEX-Verfahren genau dann konvergiert, wenn es konsistent und stabil ist.

Als ein Beispiel für solche VSIMEX-Verfahren wurden Verallgemeinerungen der BDF-Verfahren, VSSBDF-Verfahren, bis zur Ordnung 5 hergeleitet und die Konvergenzbedingungen untersucht.

Nach einer kurzen Einführung von adaptiven Verfahren in Abschnitt 4 wurde die Anwendung dieser VSSBDF-Verfahren auf zwei Konvektions-Diffusions-Gleichungen in Abschnitt 5 untersucht. Dabei wurde jeweils eine stetige und eine unstetige Anfangsbedingung betrachtet.

Es wurde weiterhin untersucht, welche Ortsdiskretisierungen verwendet werden müssen um mit Hilfe der Verfahren auf eine sinnvolle Lösung zu kommen. Gerade bei der Anwendung auf ein Problem mit unstetiger Startlösung ist die Anwendung eines UPWIND-Verfahrens niedriger Ordnung notwendig. Weiterhin wurde für alle vier betrachteten Fälle die Entwicklung des Fehlers untersucht. Diese Darstellungen zeigen, in welchen Fällen es sinnvoll ist die Maximumsnorm zu betrachten und wann erst die \mathcal{L}^2 -Norm eine sinnvolle Aussage über den Fehler ermöglicht.

Bei der Untersuchung der Konvergenz der VSSBDF-Verfahren konnten für den Fall einer festen Ortsschrittweite in allen betrachteten Fällen die in Abschnitt 3 hergeleitete Konvergenzordnung beobachtet werden. Hält man hingegen statt der Ortsschrittweite den Quotienten τ/h fest, so ergeben sich nicht in allen Fällen die erstrebenswerten Konvergenzordnungen. Besonders im Fall unstetiger Anfangswerte findet eine Reduktion von etwa einer halben Ordnung statt. Da für diesen Fall häufig auch eine Diskretisierung erster Ordnung für den Gradienten benutzt werden musste, lagen die beobachteten Konvergenzordnungen zum Teil unterhalb von 1. Für hinreichend glatte Lösungen und Anfangsbedingungen konnten jedoch zufriedenstellende Konvergenzraten beobachtet werden. Weiterhin konnte in einem Beispiel Beschränktheitsbedingung an τ in Abhängigkeit von h gefunden werden. Im Anschluss an die Betrachtungen für feste Zeitschrittweiten wurde die Anwendung der in Abschnitt 4 besprochenen adaptiven Verfahren auf die Testprobleme exemplarisch am Beispiel des Zweischrittverfahrens untersucht. Dabei hat sich gezeigt, dass auch mit dem einfachen vorgestellten adaptiven Verfahren teilweise Einsparungen an Funktionsauswertungen erreicht werden konnten. Weiterhin konnten in den betrachteten Beispielen die

Schrittweitenverhältnisse beliebig gewählt werden, ohne dass es zu Problemen mit der Stabilität kam.

In dieser Arbeit wurden für die VSSBDF-Verfahren nur hinreichende Bedingungen für die Konvergenz untersucht. Eine weitere Untersuchung der Stabilität wurde noch mehr Aufschluss über sinnvoll verwendbare Zeitschrittweiten geben.

Interessant wäre auch eine Anwendung der betrachteten VSSBDF-Verfahren auf andere partielle Differentialgleichungen insbesondere in höheren Dimensionen. Um dies zu gewährleisten ist eine sorgfältige Untersuchung von passenden Ortsdiskretisierungen notwendig. Mit den hier verwendeten einfachen Ortsdiskretisierungen zeigen sich für unstetige Probleme keine befriedigenden Konvergenzresultate.

Bei der numerischen Untersuchung des adaptiven Schemas hat sich gezeigt, dass die Einsparungen im Vergleich zum äquidistanten Gitter noch nicht zufriedenstellend sind. Aus diesem Grund wäre eine neue Untersuchung geeigneter lokaler Fehlerschätzer sinnvoll. Um mit Hilfe adaptiver VSSBDF-Verfahren effiziente numerische Lösungen für partielle Differentialgleichungen zu finden, sollte neben der variablen Zeitschrittweite auch eine Anpassung der Ortsschrittweite im Verfahren zugelassen werden. In diesem Zusammenhang wäre es auch sinnvoll ein adaptives Verfahren zu entwickeln, dass auch mit Unstetigkeiten in der Lösung gut zurechtkommt.

Literatur

- [BH02] BUTCHER, J.C. ; HEARD, A.D.: Stability of numerical methods for ordinary differential equations. In: *Numer. Algorithms* 31 (2002), Nr. 1-4, S. 59–73. <http://dx.doi.org/10.1023/A:1021108006254>. – DOI 10.1023/A:1021108006254
- [CGG90] CALVO, M. ; GRANDE, T. ; GRIGORIEFF, R.D.: On the zero stability of the variable order variable stepsize BDF- formulas. In: *Numer. Math.* 57 (1990), Nr. 1, S. 39–50. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01386395>. – DOI 10.1007/BF01386395
- [Dah56] DAHLQUIST, Germund: Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations. In: *Math. Scand.* Vol. 4 (1956), S. 33–53. – ISSN 0025–5521
- [DB08] DEUFLHARD, Peter ; BORNEMANN, Folkmar: *Numerische Mathematik 2*. Berlin : Walter de Gruyter & Co., 2008 (de Gruyter Lehrbuch.). – ISBN 978–3–11–020356–1
- [Gri83] GRIGORIEFF, Rolf D.: Stability of multistep-methods on variable grids. In: *Numer. Math.* 42 (1983), S. 359–377. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01389580>. – DOI 10.1007/BF01389580
- [HNW93] HAIRER, E. ; NØRSETT, S. P. ; WANNER, G.: *Springer Series in Computational Mathematics*. Bd. 8: *Solving ordinary differential equations. I Nonstiff problems*. Second edition. Berlin : Springer-Verlag, 1993. – ISBN 3–540–56670–8
- [HV03] HUNSDORFER, W. ; VERWER, J.G.: *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*. Springer-Verlag, 2003
- [HW83] HAIRER, E. ; WANNER, G.: On the instability of the BDF formulas. In: *Computing* 20 (1983), S. 1206–1209
- [J.R93] J.RUUTH, Steven: *Implicit-Explicit Methods for time-dependent PDEs*. University of British Columbia, master’s thesis, 1993
- [Wan05] WANG, Dong: *Variable Step-Size Implicit-Explicit Linear Multistep Methods for Time-Dependent PDEs*. Simon Fraser University, master’s thesis, 2005