V. Stabilitätsanalyse und implizite Verfahren

Ziel: - Stabilität, Stabilitätsgebiete, A-Stabilität
- Implizite RK-ESV
- Steife Probleme

Wozu: Steife Probleme treten oft in der Praxis auf (Schaltungen, Molekular-Dynamik, Zeitintegration von im Ort diskretisierten partielle Diff. Gl., z.B. Maxwell)

V.1 Stabilitätsgebiete und A-Stabilität

Betrachten wir (wieder einmal) das einfache AWP

$$\dot{y}(t) = \lambda y(t)$$

$$y(0) = y_0$$

mit $\lambda \in \mathbb{C}$. Im Kontext der Stabilität ist diese DGL auch bekannt als Dahlquist Test-Gleichung bzw. -Test-AWP.

Die Lösung ist einfach

$$y(t) = y_0 \cdot e^{\lambda t}$$

Wenden wir das (explizite) Euler-Verfahren auf obiges AWP an

$$\begin{aligned} y_{j+1} &= y_j + h \cdot f(t_j, y_j) \\ &= y_j + h\lambda y_j \\ &= (1 + h\lambda) y_j \qquad \searrow\ y_j = (1+h\lambda) y_{j-1} \\ &= (1 + h\lambda)^2 y_{j-1} \qquad \searrow\ y_{j-1} = (1+h\lambda) y_{j-2} \\ &\vdots \\ &= (1 + h\lambda)^{j+1} y_0 \end{aligned}$$

Nun wollen wir den qualitativen Verlauf der Lösung mit der Näherung vergleichen:

(i) $\lambda > 0$: $y(t)$ nimmt zu

y_j nimmt zu ✓

(ii) $\lambda < 0$: $y(t)$ nimmt ab

y_j ?

(oszillierende)

Dies erklärt das "explodieren" (präziser: das numerisch instabile Verhalten) des Euler-Verfahrens in Aufgabe 3, Serie 10.

Wenden wir nun das implizite Euler-Verfahren auf obiges AWP an:

$$y_{j+1} = y_j + h \cdot f(t_{j+1}, y_{j+1})$$

$$= y_j + h\lambda y_{j+1}$$ (auflösen nach y_{j+1} IMPLIZIT !)

$$\rightsquigarrow \quad y_{j+1} = \frac{1}{1-h\lambda} y_j$$

$$\vdots \qquad y_j = \frac{1}{1-h\lambda} y_{j-1}$$

$$= \left(\frac{1}{1-h\lambda}\right)^{j+1} y_0$$

Wie sieht es hier aus bei $\lambda < 0$?

$y(t)$ nimmt ab

y_j ?

Dies erklärt das Verhalten der impliziten Euler-Verfahren in Aufgabe 3, Serie 10.

Def.: ESV angewendet auf das Dahlquist AWP kann man in folgender Form schreiben

$$y_{j+1} = g(z)\, y_j$$

wobei $z = h\lambda$ und $g(z)$ heisst **Stabilitätsfunktion (SF)**.

Also: - expliziter Euler $\quad g(z) = 1 + z$

- impliziter Euler $\quad g(z) = \dfrac{1}{1-z}$

Die SF der bereits kennengelernten RK Verfahren sind

- verb. Euler-Verfahren $\quad g(z) = 1 + z + \frac{1}{2} z^2$
- Heun-Verfahren $\quad g(z) = 1 + z + \frac{1}{2} z^2$
- klassisches RK $\quad g(z) = 1 + z + \frac{1}{2} z^2 + \frac{1}{6} z^3 + \frac{1}{24} z^4$

(→ Übung!)

Was fällt auf?

(Beachte: exakte Lösung ist $y(t) = y_0 \cdot e^{\lambda t}$)

Man ist natürlich daran interessiert, dass die Näherungslösung den selben qualitativen Verlauf hat.

Für den Fall $\lambda < 0$ verlangen wir, dass die Lösung betragsmässig abnimmt

$$|y_{j+1}| < |y_j| \qquad \text{(Absolute Stabilität)}$$

Also

$$|y_{j+1}| = |g(z)\, y_j| = |g(z)||y_j| < |y_j|$$

führt auf

$$|g(z)| < 1$$

Dies motiviert folgende Definition

Def.: Geg. ein ESV und zugehörige SF $g(z)$. Das Gebiet

$$SG = \{ z = h\lambda \in \mathbb{C} \mid |g(z)| < 1 \}$$

heisst **Stabilitätsgebiet** (SG) des Verfahrens. Für $\lambda \in \mathbb{R}$ spricht man analog vom **Stabilitäts-Intervall** (SI) des Verfahrens

$$SI = \{ x = h\lambda \in \mathbb{R} \mid |g(x)| < 1 \}$$

Bsp.: (1) SG von Euler
verbesserter Euler
Heun
klassisches RK

⇝ Slides

(2) Sei $\lambda = -200$ und wir verwenden das Euler-Verfahren. Wie müssen wir h wählen um absolut stabil zu sein?

$$g(z) = |1 + z| < 1$$

$$-1 < 1 + h\lambda < 1 \quad | -1$$

$$-2 < h\lambda < 0$$

$$-2 < -200h < 0 \quad | \times -\frac{1}{200}$$

$$\frac{2}{200} > h > 0$$

⇝ $0 < h < \frac{1}{100}$

Wie sieht es beim impliziten Euler Verfahren aus?

$$g(z) = \frac{1}{1-z}$$

⇝ SG auf Slides

Also keine Einschränkung des Zeitschritts aus Stabilitäts-Gründen!

Def.: Ein Verfahren heisst A-stabil, falls die gesamte linke komplexe Halbebene im SG enthalten ist

$$\{ z \in \mathbb{C} \mid Re(z) < 0 \} \subset SG$$

Also: das $\left\{ \begin{matrix} \text{explizite} \\ \text{implizite} \end{matrix} \right\}$ Euler Verfahren

$\left\{ \begin{matrix} \text{ist nicht} \\ \text{ist} \end{matrix} \right\}$ A-Stabil

13.05.19

Bsp.: (3) Studieren wir das SG der impliziten Mittelpunkts-Methode (IM) (Bsp. (1S) aus Kap. II):

$$k_1 = f\left(t_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2} k_1\right) = \lambda\left(y_j + \frac{h}{2} k_1\right)$$

auflösen ~> IMPLIZIT

$$k_1 = \frac{\lambda}{1 - h\lambda/2}\, \lambda y_j$$

$$y_{j+1} = y_j + h k_1$$

$$= y_j + \frac{h\lambda}{1 - h\lambda/2}\, y_j$$

$$= \left(1 + \frac{h\lambda}{1 - h\lambda/2}\right) y_j$$

$$\frac{1 - h\lambda/2}{1 - h\lambda/2}$$

$$= \frac{1 + h\lambda/2}{1 - h\lambda/2}\, y_j$$

$$\rightsquigarrow \quad g(z) = \frac{1 + z/2}{1 - z/2} \qquad \text{SF}$$

Frage: Ist die IM-Methode A-stabil?

~> Slides

Bem.: Für die exakte Lösung des Dahlquist Test-AWP gilt

$$\lim_{t \to \infty} y(t) = 0$$

Es wäre also wünschenswert, dass dies auf für ein Verfahren gilt. Dann hat man für die SF

$$\lim_{z \to -\infty} g(z) = 0$$

Man nennt ein Verfahren welches A-stabil ist und obige Bedingung erfüllt L-stabil.

z.B. das implizite Euler Verfahren ist L-stabil. Die implizite Mittelpunkts-Methode jedoch nicht (s. Bsp. 3).

V.2 Implizite Runge-Kutta Verfahren

Ein allgemeines RK ESV mit s Stufen ist gegeben durch folgendes Butcher Tableau:

c_1	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	$a_{1,s-1}$	a_{1s}
c_2	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	$a_{2,s-1}$	a_{2s}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
c_s	a_{s1}	a_{s2}	$\cdots$	$a_{s-1,s-1}$	a_{ss}
	b_1	b_2	$\cdots$	b_{s-1}	b_s

$\vec{c}$	A
	$\vec{b}^T$

Wenn A eine untere Dreiecksmatrix mit Nullen auf der Diagonalen ist, dann ist das RK Verfahren **explizit**.

Sonst ist es **implizit** $\rightsquigarrow$ i.A. muss ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden!

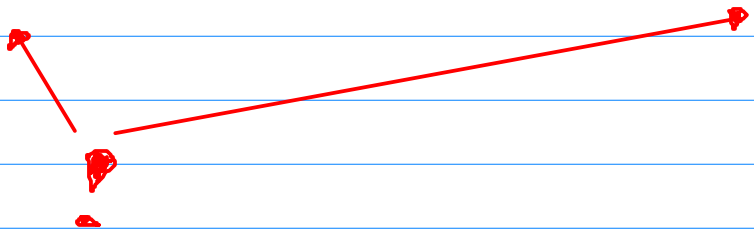
Ausgeschrieben

$$k_1 = f\left(t_j + c_1 \cdot h,\ y_j + h \cdot \left(a_{11} \cdot k_1 + a_{12} \cdot k_2 + \ldots + a_{1s} \cdot k_s\right)\right)$$

$$k_2 = f\left(t_j + c_2 \cdot h,\ y_j + h \cdot \left(a_{21} \cdot k_1 + a_{22} \cdot k_2 + \ldots + a_{2s} \cdot k_s\right)\right)$$

$$\vdots$$

$$k_s = f\left(t_j + c_s \cdot h,\ y_j + h \cdot \left(a_{s1} \cdot k_1 + a_{s2} \cdot k_2 + \ldots + a_{ss} \cdot k_s\right)\right)$$



Für skalare DGL sind dies s i.A. nichtlineare Gleichungen für s Unbekannte $(k_1, k_2, \ldots, k_s)$.
Für ein System von n DGLen sind dies ? i.A. nicht lineare Gleichungen für ? Unbekannte $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \ldots, \vec{k}_s)$.

Dies ist natürlich sehr aufwendig und deshalb nutzt man implizite Verfahren nur wenn es sich lohnt!

→ Steife Probleme

Bsp.: (4) Impliziter Euler

1	1
	1

(5) Implizite Mittelpunkts-Methode (KO $p=2$)

$1/2$	$1/2$
	1

(6) Implizite Trapez-Methode (KO $p=2$)

0		
1	$1/2$	$1/2$
	$1/2$	$1/2$

Ausgeschrieben

$$k_1 = f(t_j, y_j)$$

$$k_2 = f\left(t_j + h, y_j + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)\right)$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

Oft wird sie geschrieben als

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\left(f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1})\right)$$

(7) RK-Gauss Verfahren (KO $p=4$)

	$1/2 - \sqrt{3}/6$	$1/4$	$1/4 - \sqrt{3}/6$
Knoten →	$1/2 + \sqrt{3}/6$	$1/4 + \sqrt{3}/6$	$1/4$
		$1/2$	$1/2$
Gauss-Legendre Gewichte →			

(8) SDIRK (KO $p=3$)

Singly Diagonal Implicit RK

γ	γ	
$1-\gamma$	$1-2\gamma$	γ
	$1/2$	$1/2$

$$\gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}$$

Hier muss man auch nichtlineare Gleichungen lösen... Aber was ist ein Vorteil von SDIRK Methoden?

Bem.: Nicht alle impliziten RK ESV sind A-stabil ($\rightsquigarrow$ Übung)

V.3 Rückwärtsdifferenzenmethoden

In den Übungen haben wir uns mit Mehrschrittmethoden von Adams-Bashforth und Adams-Moulten befasst. Diese Verfahren sind Teil einer Familie von Verfahren: der sog. linearen Mehrschrittmethoden von der Form:

$$\sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell \cdot y_{j+\lambda-\ell} = h \cdot \sum_{\ell=0}^{k} \beta_\ell \cdot f_{j+\lambda-\ell}$$

wobei $f_{j+\lambda-\ell} = f(t_{j+\lambda-\ell}, y_{j+\lambda-\ell})$ und α_ℓ, β_ℓ Koeffizienten sind.

Spezialfälle beschreiben folgende Verfahren:

- Adams-Bashforth: $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$ und $\alpha_\ell = 0$ für $\ell > 1$
  ↳ Übungen
  $\beta_0 = 0$ ← explizit
- Adams-Moulten: $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$ und $\alpha_\ell = 0$ für $\ell > 1$
  ↳ Übungen
  $\beta_0 \neq 0$ ← implizit
- Rückwärtsdifferenzenmethoden (Backward Differencing Methods BDF): $\beta_0 \neq 0$ und $\beta_\ell = 0$ für $\ell \geq 1$
  ↖ implizit

Die Idee eines k-Schritt BDF Verfahren ist die rechte Seite funktion f nur am neuen Zeitschritt, (t_{j+1}, y_{j+1}), zu evaluieren. Dies wird gleichgesetzt mit einer Approximation der Ableitung zur Zeit t_{j+1} welche man mittels Interpolation von $y_{j+1}, y_j, \dots, y_{j+1-k}$ bestimmt.

Bsp.: (a) **BDF1: $k=1$**

Bestimme das Interpolationspolynom durch y_{j+1}, y_j:

$$p_1(t) = y_{j+1} \cdot \frac{t - t_j}{h} - y_j \cdot \frac{t - t_{j+1}}{h}$$

Die Ableitung zur Zeit t_{j+1} ist dann

$$\frac{d}{dt} p_1(t) \Big|_{t=t_{j+1}} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h} \approx \dot{y}(t)$$

Und damit

$$\frac{y_{j+1} - y_j}{h} = f(t_{j+1}, y_{j+1})$$

Oder

$$y_{j+1} - y_j = h \cdot f(t_{j+1}, y_{j+1})$$

Also $\beta_0 = 1$, $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$.

(10) **BDF2: $k=2$**

Bestimme das Interpolationspolynom durch y_{j+1}, y_j, y_{j-1}:

$$p_2(t) = y_{j-1} \cdot \frac{1}{2h^2}(t-t_j)(t-t_{j+1}) - y_j \cdot \frac{1}{h^2}(t-t_{j-1})(t-t_{j+1}) + y_{j+1} \cdot \frac{1}{2h^2}(t-t_{j-1})(t-t_j)$$

Die Ableitung zur Zeit t_{j+1} ist

$$\frac{d}{dt} p_2(t)\Big|_{t=t_{j+1}} = y_{j-1} \cdot \frac{1}{2h} - y_j \cdot \frac{2}{h} + y_{j+1} \frac{3}{2h} \approx \dot{y}(t)$$

Und damit

$$\frac{1}{h}\left(\frac{1}{2} y_{j-1} - 2y_j + \frac{3}{2} y_{j+1}\right) = f(t_{j+1}, y_{j+1})$$

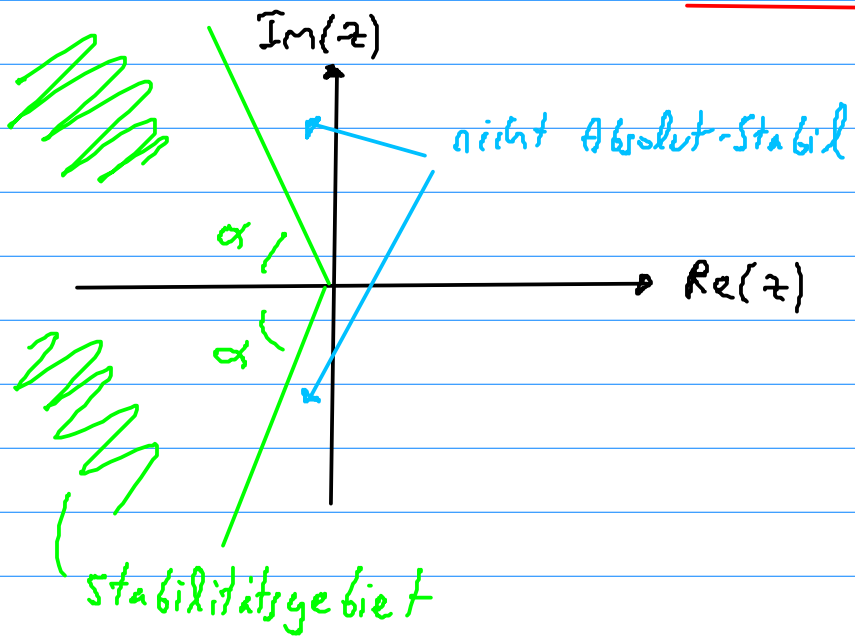
Oder

$$y_{j+1} - \frac{4}{3} y_j + \frac{1}{3} y_{j-1} = \frac{2}{3} h f(t_{j+1}, y_{j+1})$$

$\alpha_0 = 1$ $\quad$ α_1 $\quad$ α_2 $\quad$ β_0

Bem.: (i) BDF1 ist das implizite Euler Verfahren

(ii) BDF Verfahren werden oft bei steifen Problemen verwendet ($\rightsquigarrow$ IV.4).
BDF1 und BDF2 sind A-stabil.
BDF3 bis BDF6 sind A(α)-stabil



(iii) Wie bei allen Mehrschrittverfahren muss man die ersten k Schritte z.B. mit einem geeigneten ESV berechnen

V.4 Steife Probleme

Steife Probleme begegnet man bei Systemen von Diff.-Gl. welche Prozesse mit stark unterschiedlichen Abklingzeiten modellieren. D.h. die Prozesse laufen auf sehr unterschiedlichen (sehr schnell / langsam) Zeitskalen ab.

Bsp.: (AA) Steifes lineares AWP ~~ Slides
(Übung Serie 12)

Ein lineares inhomogenes System

$$\dot{\vec{y}}(t) = A\,\vec{y}(t) + \vec{b}(t) \quad , A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \mathbb{C}^{n\times n}$$

bezeichnet man als steif wenn für die Eigenwerte (EW) von A $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ gilt

$$Re(\lambda_i) < 0$$

und

$$S = \frac{\max\limits_{i=1,\dots,n} |Re(\lambda_i)|}{\min\limits_{i=1,\dots,n} |Re(\lambda_i)|}$$

gross ist, d.h. $S \gg 1$

In Bsp. (9) ist $\lambda_1 = -1\text{h}$, $\lambda_2 = -1\text{s}$, $\lambda_3 = -1000$:

$S = ?$

Steifigkeit tritt auch oft bei nichtlinearen DGLen auf

$$\dot{\vec{y}}(t) = \vec{f}(t, \vec{y}(t)) \quad , \quad \vec{y} \in \mathbb{R}^n$$

↖ nichtlineare Vektorwertige Fkt.

Hier definiert man ein <u>lokales</u> Mass der Steifheit durch linearisieren an einem (interessanten) Punkt $t_n, \vec{y}_n$:

$$\vec{f}(t, \vec{y}(t)) = \vec{f}(t_n, \vec{y}_n) + \frac{\partial \vec{f}}{\partial t}(t_n, \vec{y}_n) \cdot (t - t_n) + J(t_n, \vec{y}_n) \cdot (\vec{y} - \vec{y}_n)$$

Jacobi-Matrix $\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}$

Durch rearrangieren der Terme, erhält man ein inhom. lin. System

$$\dot{\vec{y}}(t) = \underbrace{J(t_n, \vec{y}_n)}_{A} \vec{y}(t) + \underbrace{\left(\vec{f}(t_n, \vec{y}_n) + \frac{\partial \vec{f}}{\partial t}(t_n, y_n)(t - t_n) - J(t_n, y_n)\, \vec{y}_n \right)}_{\vec{c}}$$

Ist obige Linearisierung steif, so nennt man das nichtlineare System von DGLen lokal steif um den Punkt $(t_n, \vec{y}_n)$

Bsp.: (12) Steifes nichtlineares System
⇝ Slides

Zur numerischen Behandlung steifer Probleme folgern wir aus Bsp. (9) und (10), dass explizite Verfahren ungeeignet sind.

D.h. ineffizient da die Schrittweite aus Stabilität- und NICHT Genauigkeits-Gründen gewählt werden muss

explizit	implizit
günstig pro Schritt	teuer pro Schritt
Schrittweite limitiert durch schnellste abfallende Komponente	Schrittweite nur durch gewünschte Genauigkeit limitiert