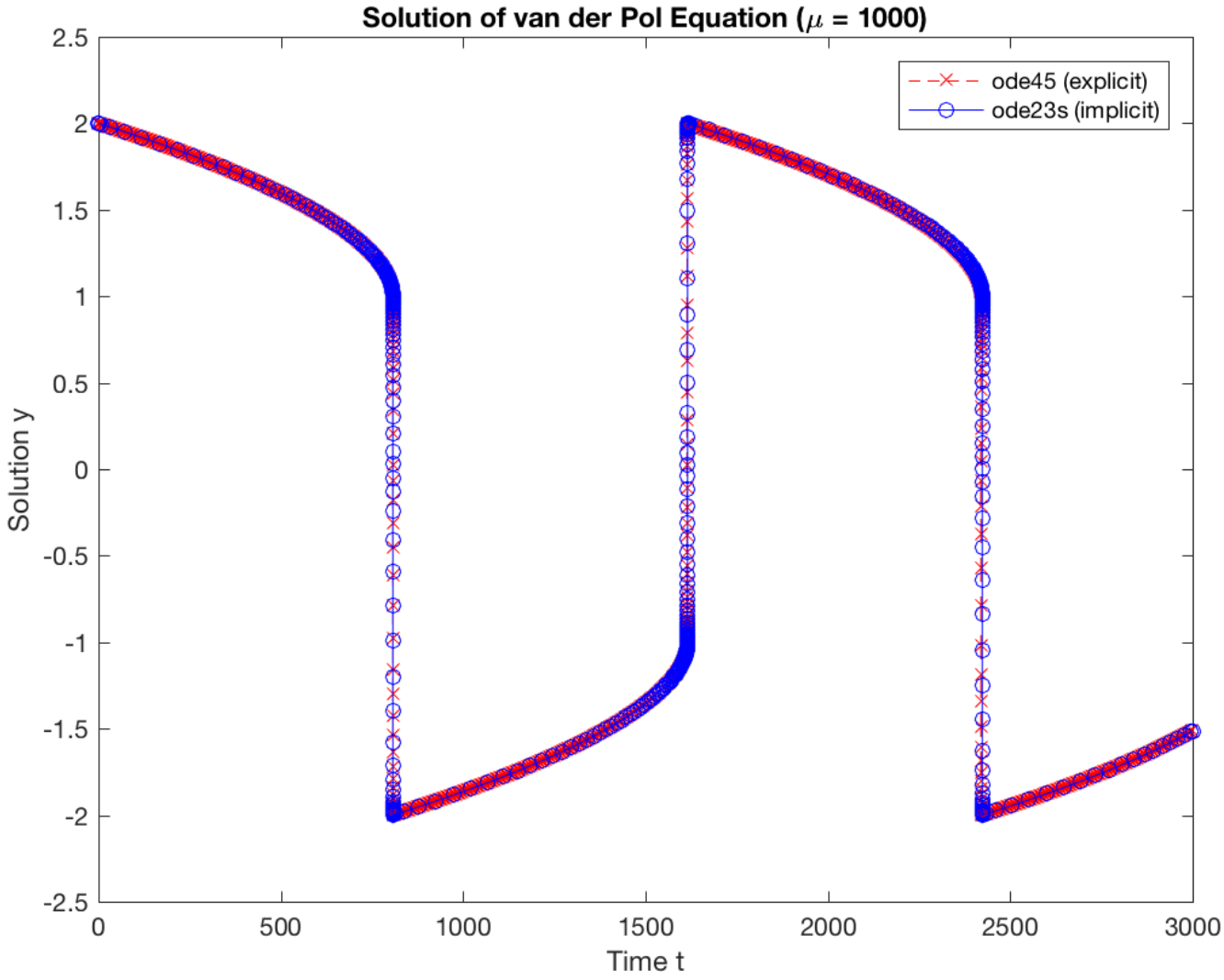
Motivation: Steifes Problem

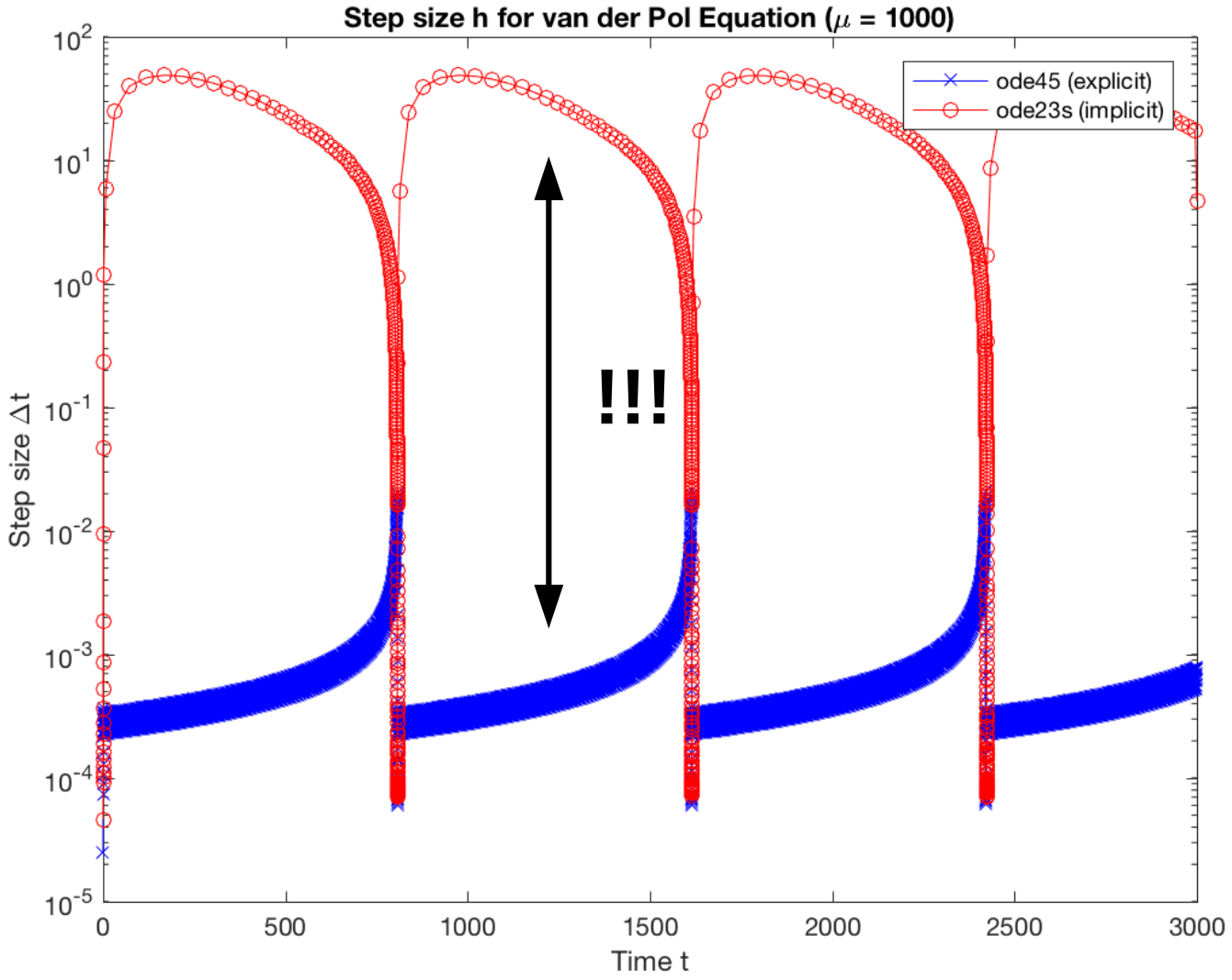
$$\dot{y}_1 = y_2$$
$$\dot{y}_2 = \mu(1 - y_1^2)y_2 - y_1 \qquad \mu = 1000 \qquad \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad t \in [0, 3000]$$

```
>> StiffVanDerPol
Loeser: ode45
Elapsed time is 73.490408 seconds.
Loser: ode23s
Elapsed time is 0.167961 seconds.
```

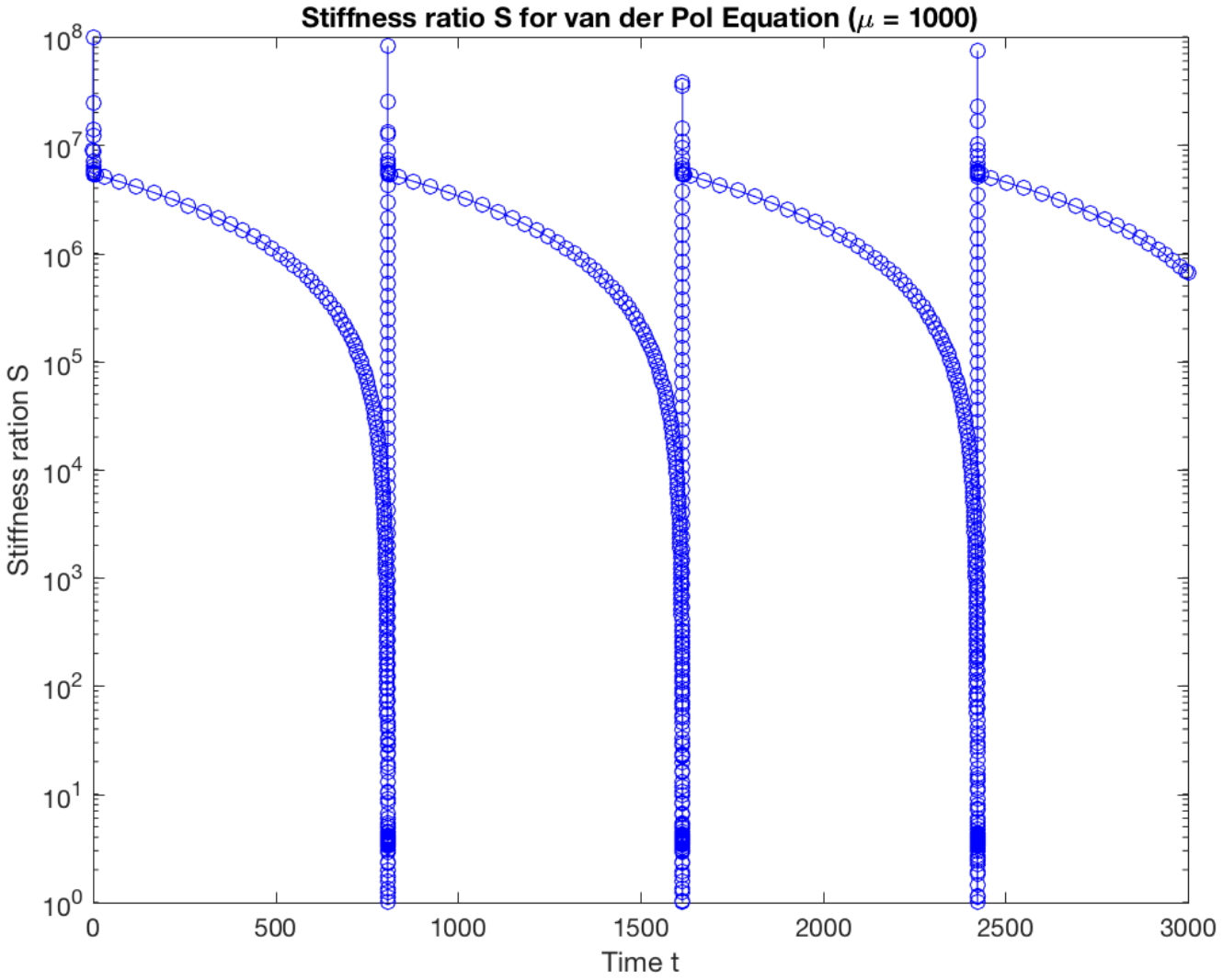
Motivation: Steifes Problem



Motivation: Steifes Problem

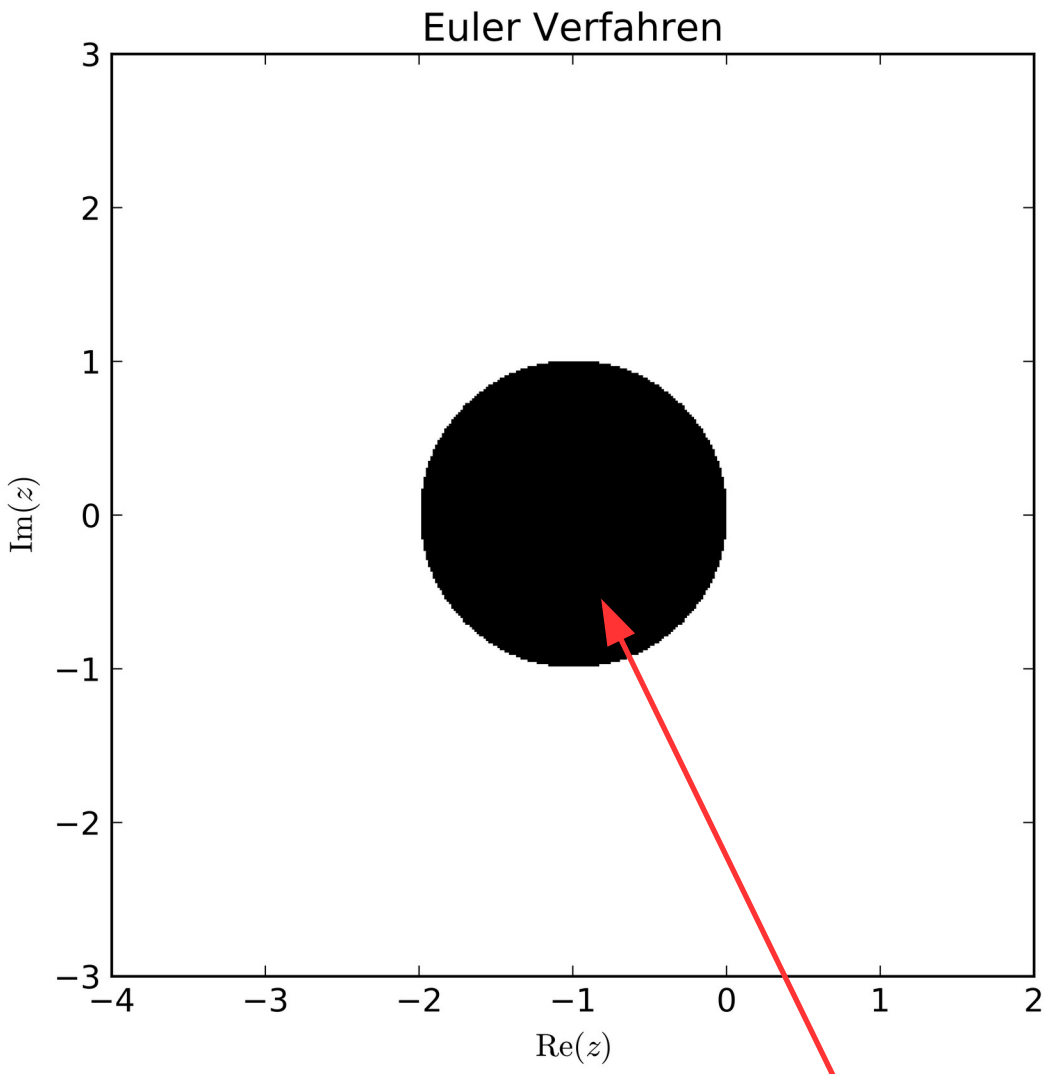


Motivation: Steifes Problem



Bsp. (1)

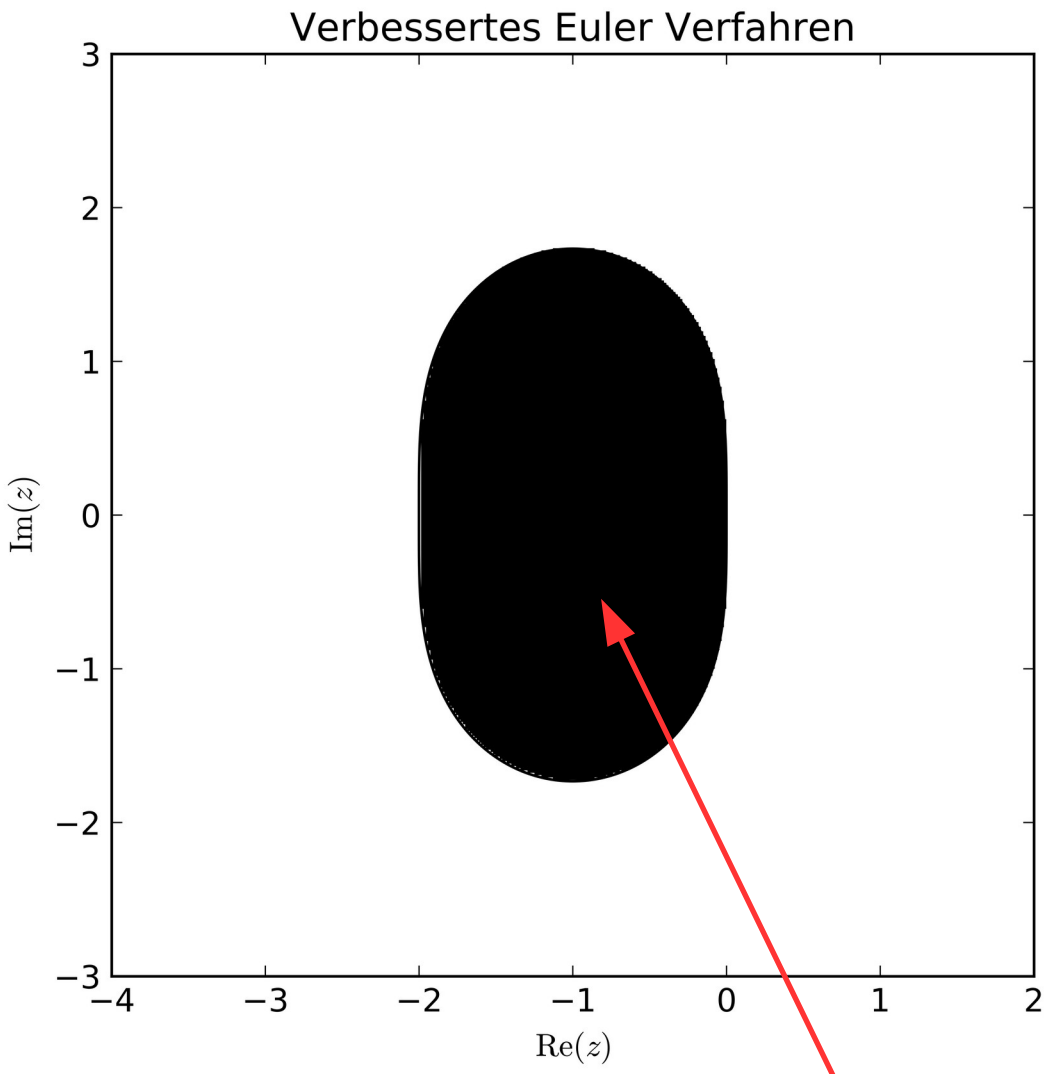
Stabilitätsgebiete



Stabilitätsgebiet

Bsp. (1)

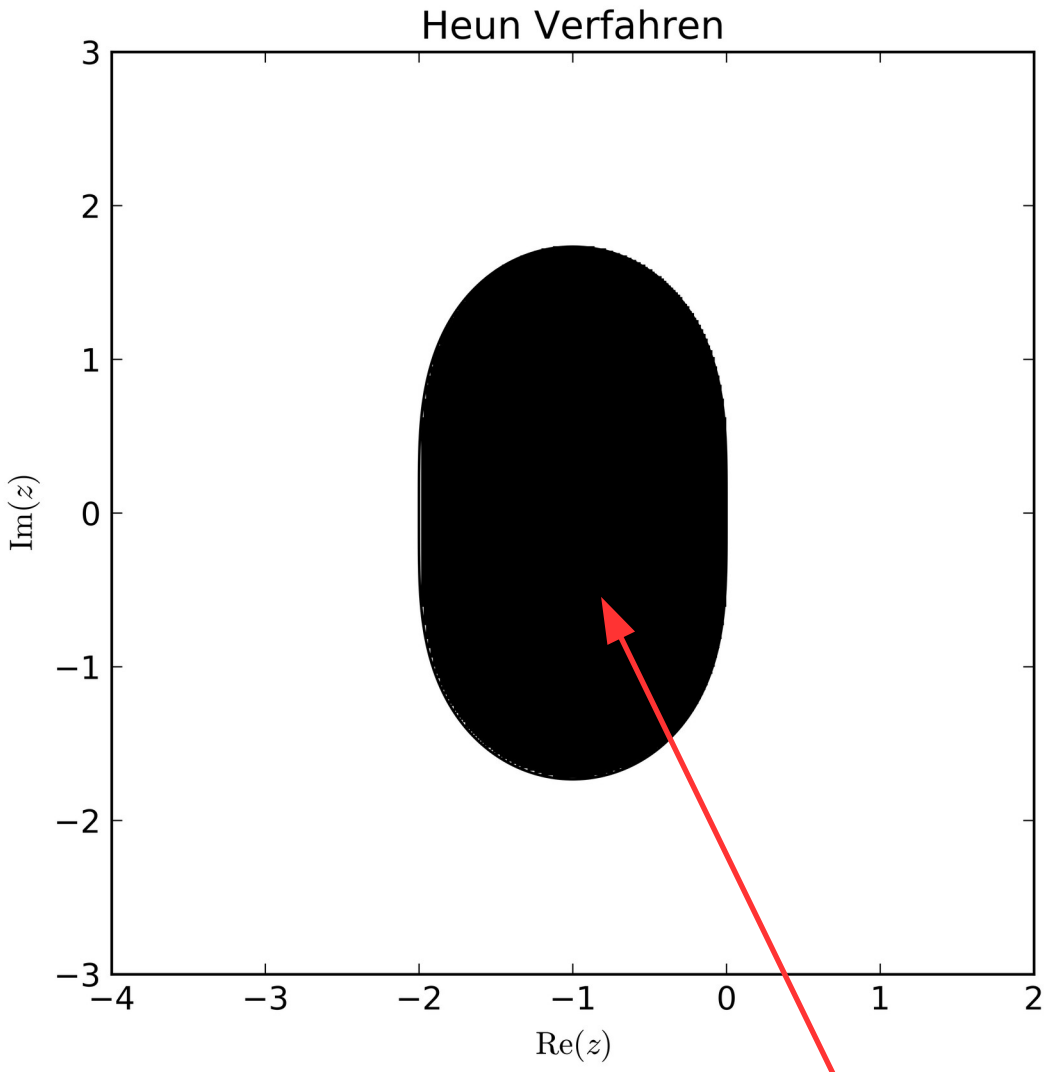
Stabilitätsgebiete



Stabilitätsgebiet

Bsp. (1)

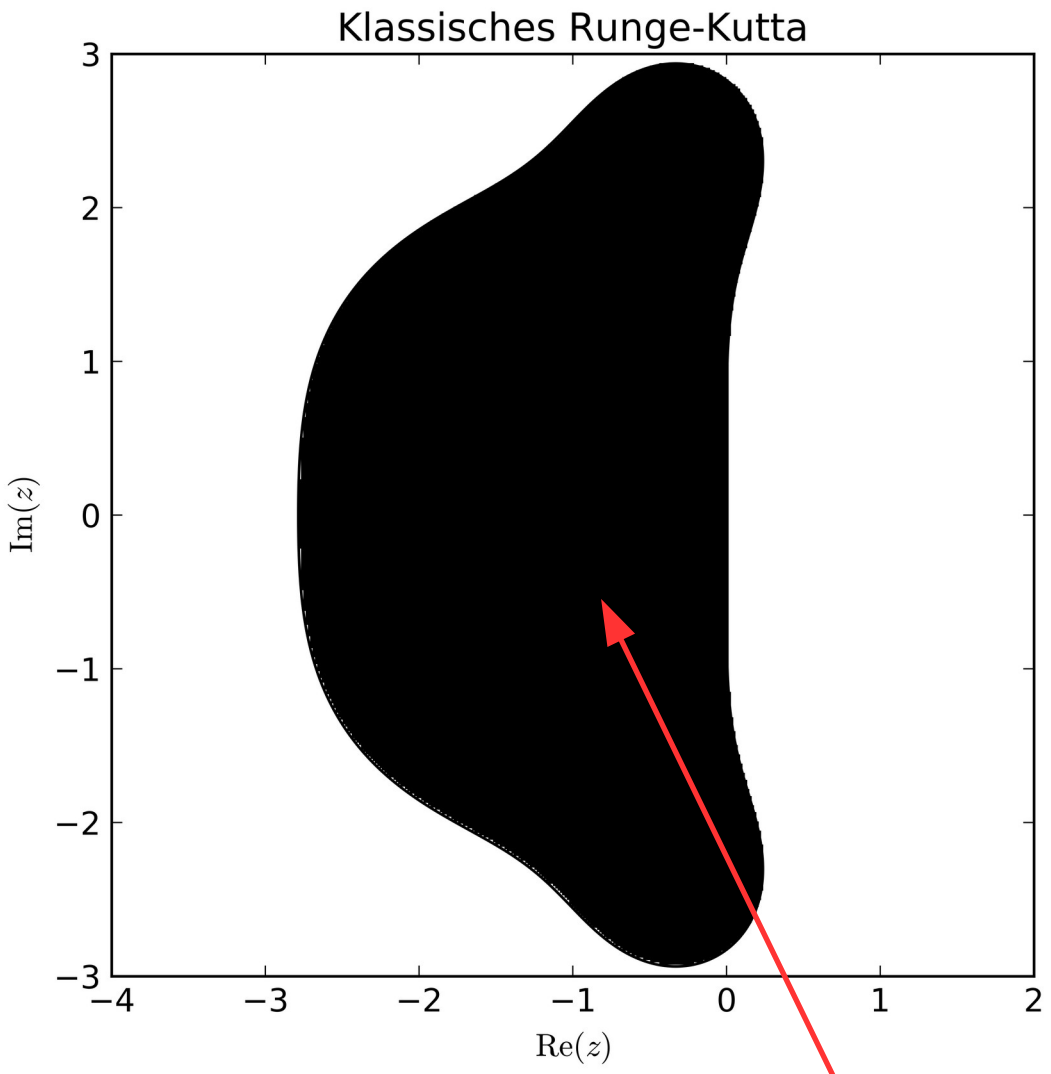
Stabilitätsgebiete



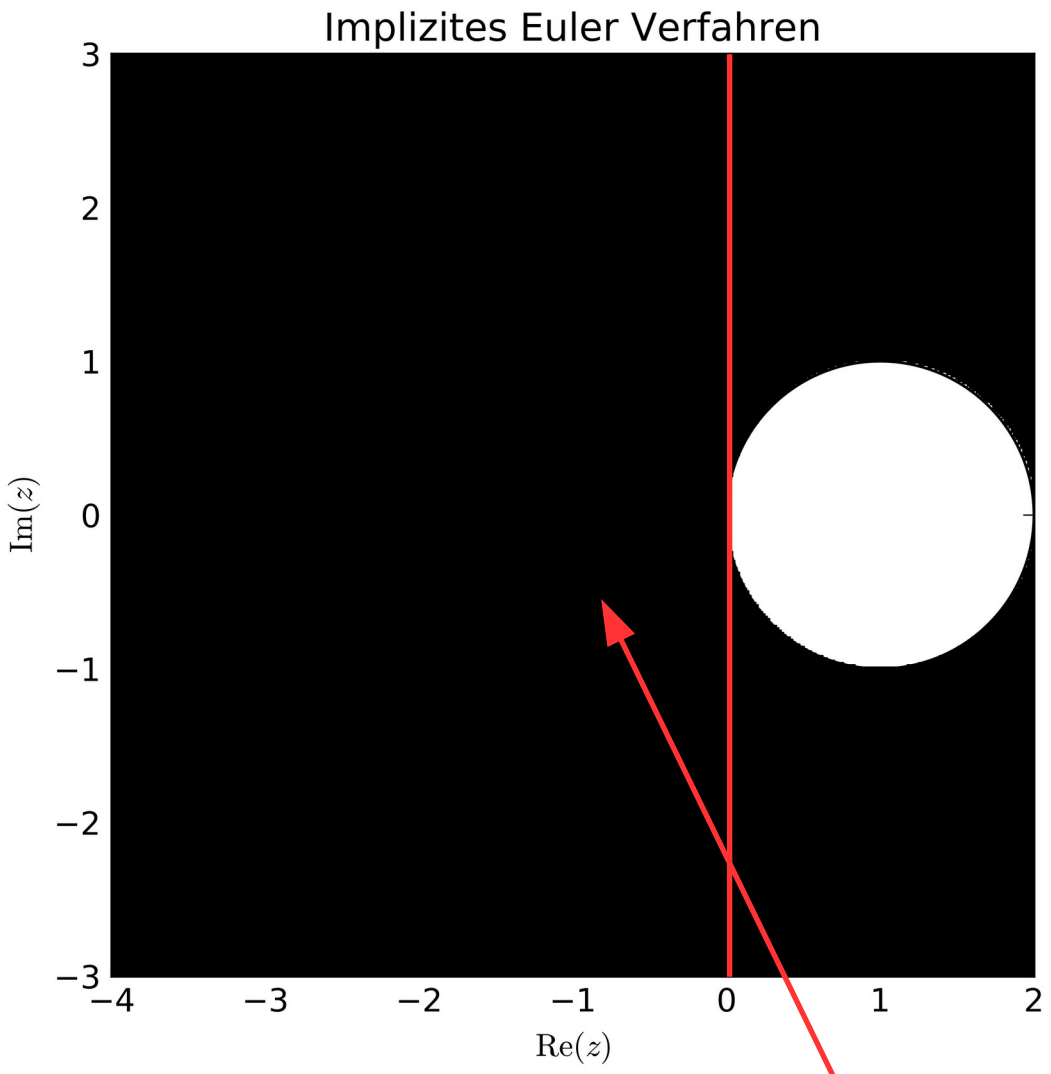
Stabilitätsgebiet

Bsp. (1)

Stabilitätsgebiete

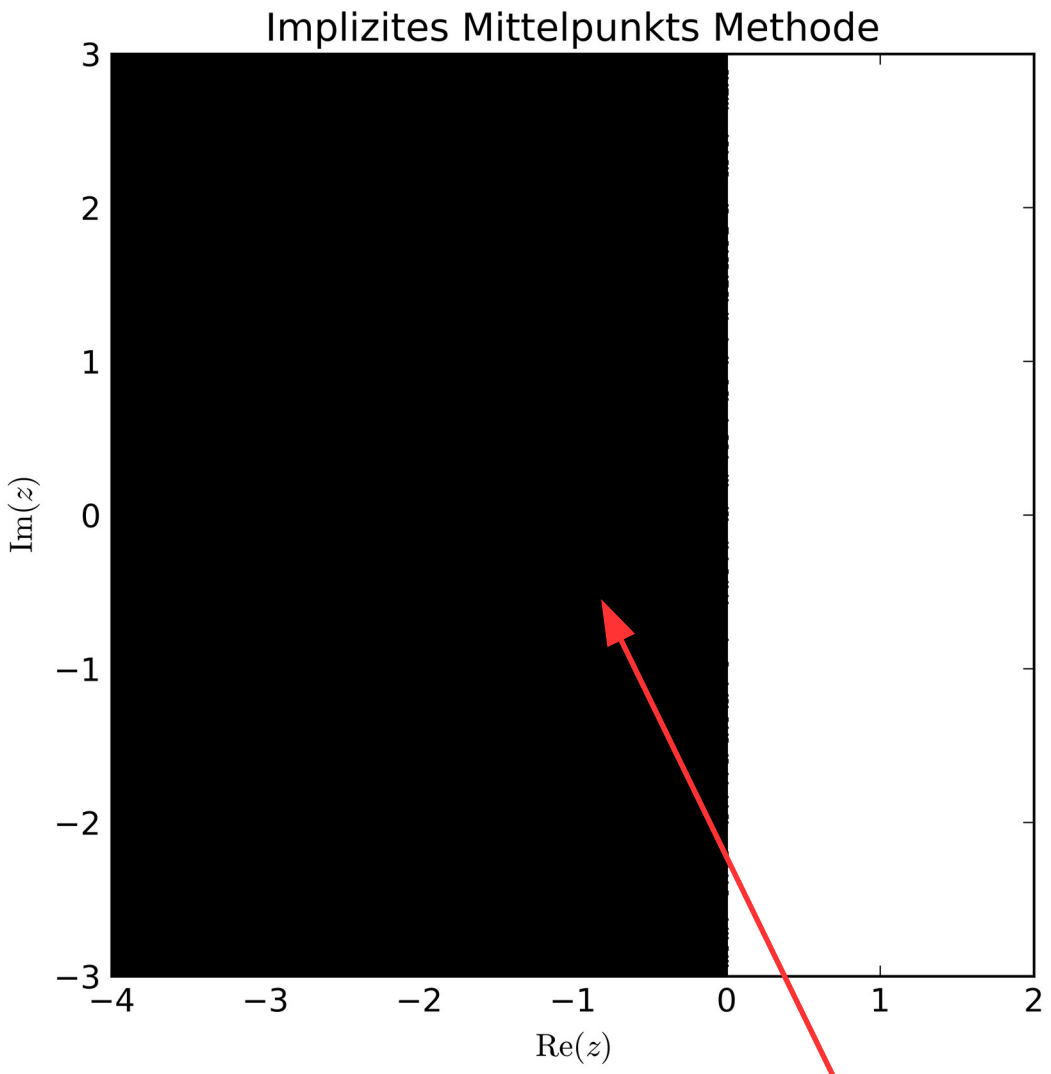


Stabilitätsgebiete



Bsp. (3)

Stabilitätsgebiete



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 ⇝ i.A. muss ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden!

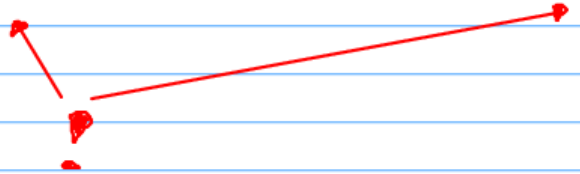
Ausgeschrieben

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

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

$$\vdots$$

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



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)

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

(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?

Konvergenz impliziter RK-ESV

Schreiben wir die RK-ESV Stufen so:

RK-Matrix

$$\vec{v} = \vec{y}_j \vec{1} + h A \vec{F}(t_j, \vec{v})$$

$$\begin{pmatrix} \vec{v}^{(1)} \\ \vdots \\ \vec{v}^{(s)} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \vec{f}(t_j + c_1 h, \vec{v}^{(1)}) \\ \vdots \\ \vec{f}(t_j + c_s h, \vec{v}^{(s)}) \end{pmatrix}$$

Damit

$$\vec{y}_{j+1} = \vec{y}_j + h \vec{b}^T \vec{F}(t_j, \vec{v})$$

Man muss also in jedem Schritt ein

i.A. nicht-lineares $s \cdot n$ System lösen

Anzahl Stufen, Lösungskomponenten

$$\vec{G}(\vec{v}) = \vec{v} - \vec{y}_j \vec{1} - h A \vec{F}(t_j, \vec{v}) \stackrel{!}{=} 0$$

Konvergenz impliziter RK-ESV

In der Praxis verwendet man deshalb Newton-Methoden. Die Jacobi-Matrix hat die Form

$$J(\vec{v}) = \left(\delta_{il} - h\, a_{il} \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}\left(t_j + c_i h, \vec{v}^{(i)}\right) \right)_{i,l=1}^{s}$$

Dies ist immer noch aufwendig !

Deshalb verwendet man oft sog. "vereinfachte" Newton Verfahren welche die Jacobi-Matrix nur einmal auswerten $J(\vec{y}_j)$ und einfrieren (d.h. die LU/LR-Zerlegung von J muss man nur einmal machen).

sog. linearen Mehrschrittmethoden von der Form:

$$\sum_{\ell=0}^{k} \alpha_\ell \cdot y_{j+1-\ell} = h \cdot \sum_{\ell=0}^{k} \beta_\ell \cdot f_{j+1-\ell}$$

wobei $f_{j+1-\ell} = f(t_{j+1-\ell}, y_{j+1-\ell})$ 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-Moulton: $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$ 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

(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

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

BDF1 entspricht dem impliziten Euler-Verfahren

(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

Konvergenz von linearen Mehrschrittverfahren

Die Konsistenzordnung wird wie bei ESV über den LDF definiert

$$e_{j+k} = y(t_{j+k}) - \frac{1}{\alpha_0}\left(-\sum_{l=1}^{k} \alpha_l \, y(t_{j+k-l}) + \sum_{l=0}^{k} \beta_l \, f(t_{j+k-l}, y(t_{j+k-l})) \right)$$

Also "einfach" um wieviel die exakte Lösung die diskrete bzw. approximierte Diff.-Gleichung nicht erfüllt. (Taylor-Entwicklung ...)

Der Konsistenzfehler ist

$$\tau_{j+k} = \frac{e_{j+k}}{h}$$

und die Konsistenzordnung $\tilde{p}$ wie bei ESV $\tau = \mathcal{O}(h^{\tilde{p}})$. (↝ s. Übung SOSAO4)

Aber: Im Gegensatz zu ESV impliziert Konsistenz noch nicht Konvergenz.
(s. z.B. Dahmen & Reusken (2006))

Steifes lineares AWP

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = A\mathbf{y}(t)$$

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{869}{10} & \frac{1521}{5} \\ 0 & -\frac{227}{2} & \frac{591}{2} \\ 0 & \frac{591}{2} & -\frac{1803}{2} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 6 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad 0 \leq t \leq 2$$

Steifes lineares AWP

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = A\mathbf{y}(t)$$

$$= PDP^{-1}\mathbf{y}(t) \quad \Big| \times P^{-1}$$

D.h. „von Links“

Diagonal!

$$\mathrm{P}^{-1}\dot{\mathbf{y}}(t) = D\underbrace{P^{-1}\mathbf{y}(t)}_{\mathbf{z}(t)}$$

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = D\mathbf{z}(t)$$

ENTKOPPELT!!!

Steifes lineares AWP

Durch rechnen (z.B. mit einem CAS!):

$$D = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -15 & 0 \\ 0 & 0 & -1000 \end{pmatrix}$$

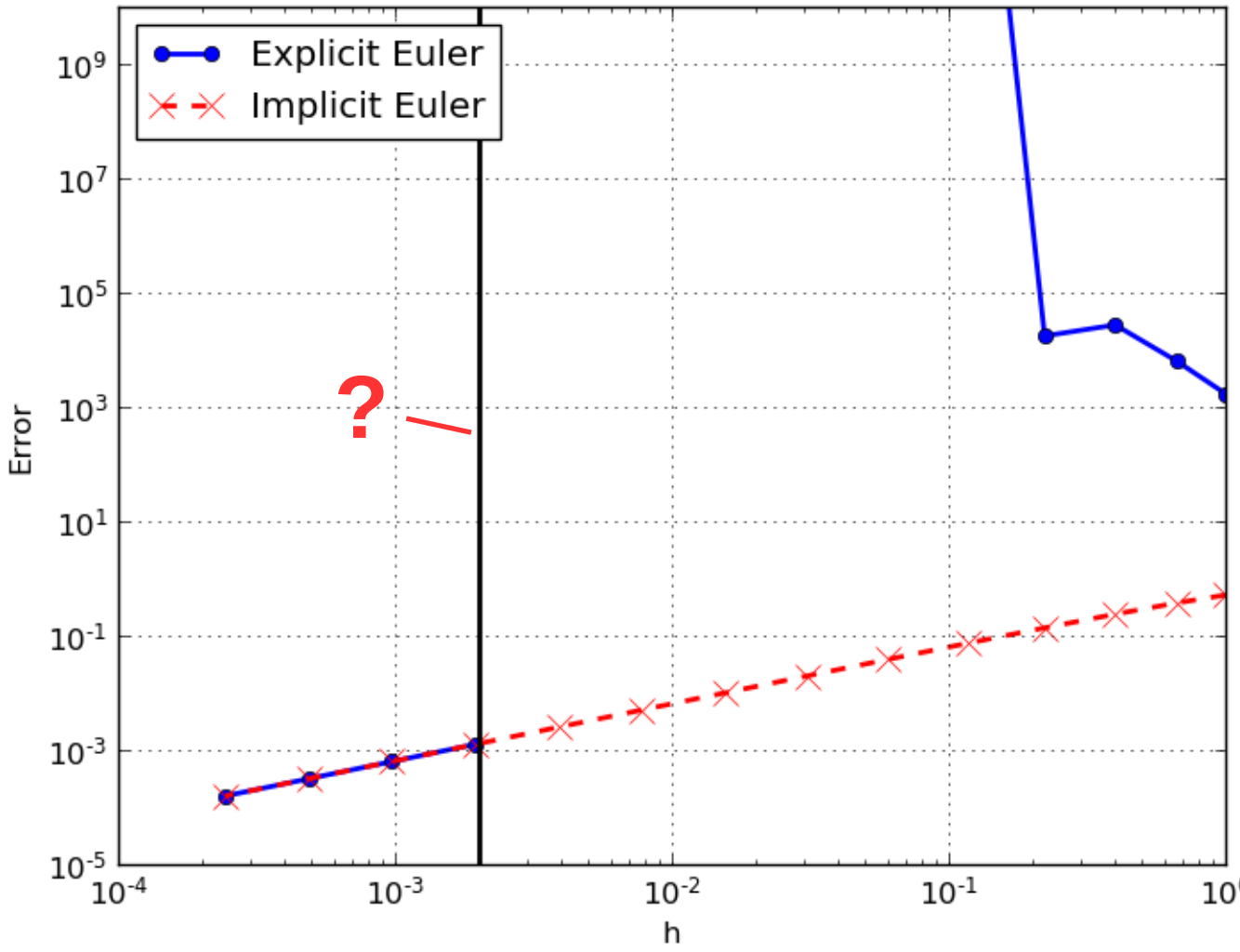
$$P = \begin{pmatrix} 15 & -12 & 1 \\ 0 & 12 & 1 \\ 0 & 4 & -3 \end{pmatrix} \qquad P^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{15} & \frac{4}{75} & \frac{1}{25} \\ 0 & \frac{3}{40} & \frac{1}{40} \\ 0 & \frac{1}{10} & -\frac{3}{10} \end{pmatrix}$$

Durch einsetzen der AW:

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} 7e^{-\frac{1}{2}t} - 6e^{-15t} \\ 6e^{-15t} \\ 2e^{-15t} \end{pmatrix}$$

Beachte: der schnellste ablingende Mode ist nicht Teil der exakten Lösung!

Steifes lineares AWP



Errinerung: Aus Bsp. (2) wissen wir für den expliziten Euler $0 < h < \frac{2}{\lambda}$

Steifigkeit tritt auch oft bei nichtlinearen DGLen auf

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

$\vec{f}$: nichtlineare Vektorwertige Fkt.

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

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

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

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

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

Ist die Linearisierung steif, so nennt man das nichtlineare System von DGLen lokal steif

Steifes nichtlineares AWP

$$
\begin{aligned}
\dot{y}_A &= -0.1 y_A + 100 y_B y_C \\
\dot{y}_B &= +0.1 y_A - 100 y_B y_C - 500 y_B^2 \\
\dot{y}_C &= + 500 y_B^2 - 0.5 y_C
\end{aligned}
$$

$$y_A(0) = 0.5 \; y_B(0) = 0.5 \; y_C(0) = 0.5$$

$$0 \leq t \leq 1$$

Steifes nichtlineares AWP

$$
\begin{aligned}
\dot{y}_A &= -0.1y_A + 100y_By_C \\
\dot{y}_B &= +0.1y_A - 100y_By_C - 500y_B^2 \\
\dot{y}_C &= +500y_B^2 - 0.5y_C
\end{aligned}
$$

NICHTLINEAR!!!

$$
\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_A \\ y_B \\ y_C \end{pmatrix} \qquad \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} -0.1y_A + 100y_By_C \\ +0.1y_A - 100y_By_C - 500y_B^2 \\ +500y_B^2 - 0.5y_C \end{pmatrix}
$$

$$
y_A(0) = 0.5 \; y_B(0) = 0.5 \; y_C(0) = 0.5 \qquad \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}
$$

Steifes nichtlineares AWP

Steif?

Linearisieren wir die rechte Seite der DGL:

$$\mathbf{f}(t,\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} -0.1y_A + 100y_By_C \\ +0.1y_A - 100y_By_C - 500y_B^2 \\ +500y_B^2 - 0.5y_C \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f}(t,\mathbf{y}) \approx \mathbf{f}(t_1,\mathbf{y}_1) + \underbrace{\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(t_1,\mathbf{y}_1)}_{0} + \underbrace{\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t_1,\mathbf{y}_1)}$$

$$J(t,\mathbf{y}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t,\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} -0.1 & 100y_C & 100y_B \\ +0.1 & -1000y_B - 100y_C & -100y_B \\ 0 & 1000y_B & -0.5 \end{pmatrix}$$

Steifes nichtlineares AWP

Lokal Steif?

Linearisieren wir um den AW: $t_0 = 0 \quad \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}$

$$J(t_0, \mathbf{y}_0) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) = \begin{pmatrix} -0.1 & 50 & 50 \\ +0.1 & -550 & -50 \\ 0 & 500 & -0.5 \end{pmatrix}$$

MATLAB: eig ⟶

$$\lambda_1 \approx -5.00 \times 10^2$$
$$\lambda_2 \approx -9.87 \times 10^{-4}$$
$$\lambda_3 \approx -5.07 \times 10^1$$

$$S = \frac{\max_j |\operatorname{Re}(\lambda_j)|}{\min_j |\operatorname{Re}(\lambda_j)|} \approx 5.06 \times 10^5$$

JA!!!

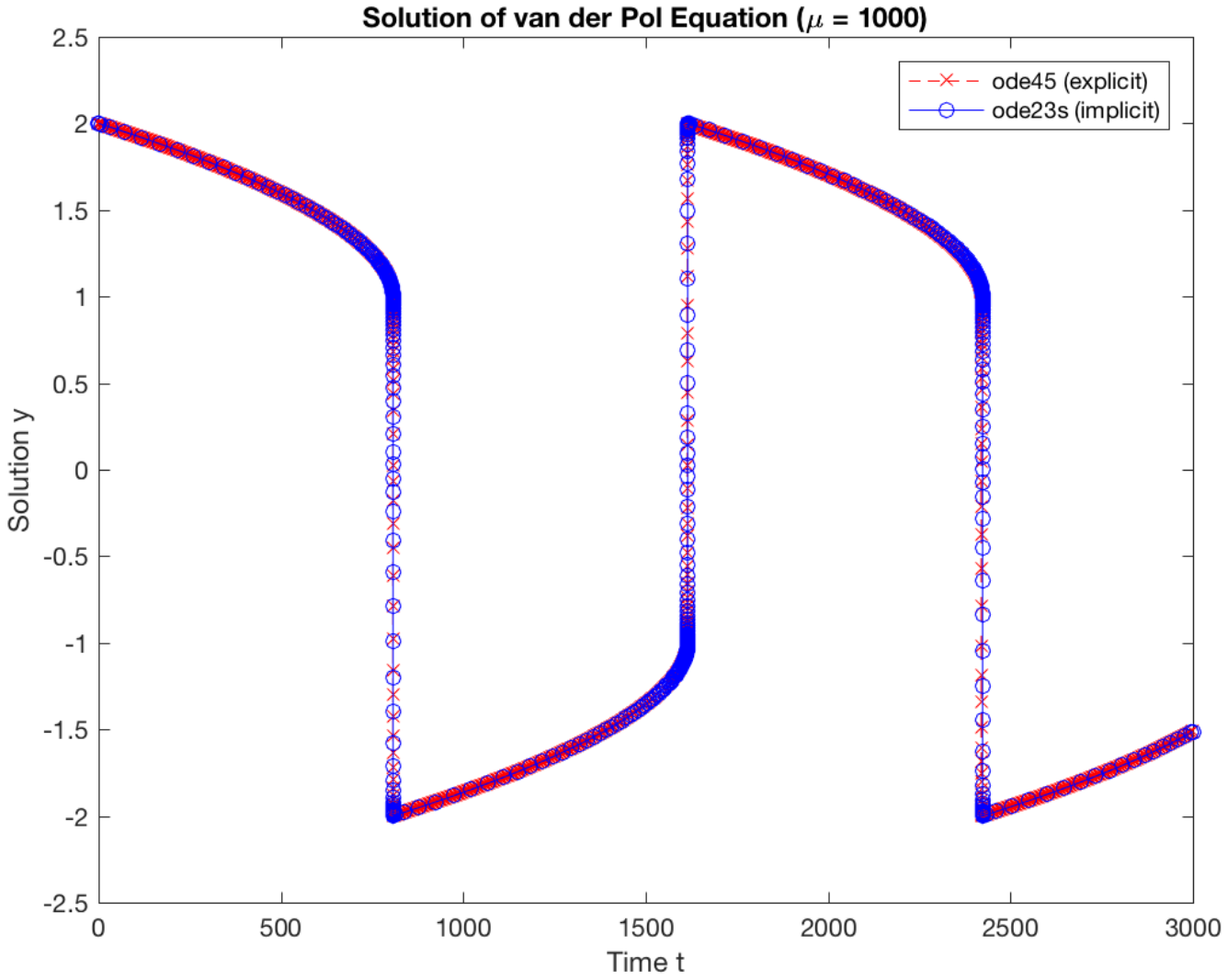
Van der Pol Oszillator

$$\dot{y}_1 = y_2$$
$$\dot{y}_2 = \mu(1 - y_1^2)y_2 - y_1 \qquad \mu = 1000 \qquad \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad t \in [0, 3000]$$

```
>> StiffVanDerPol
Loeser: ode45
Elapsed time is 73.490408 seconds.
Loser: ode23s
Elapsed time is 0.167961 seconds.
```

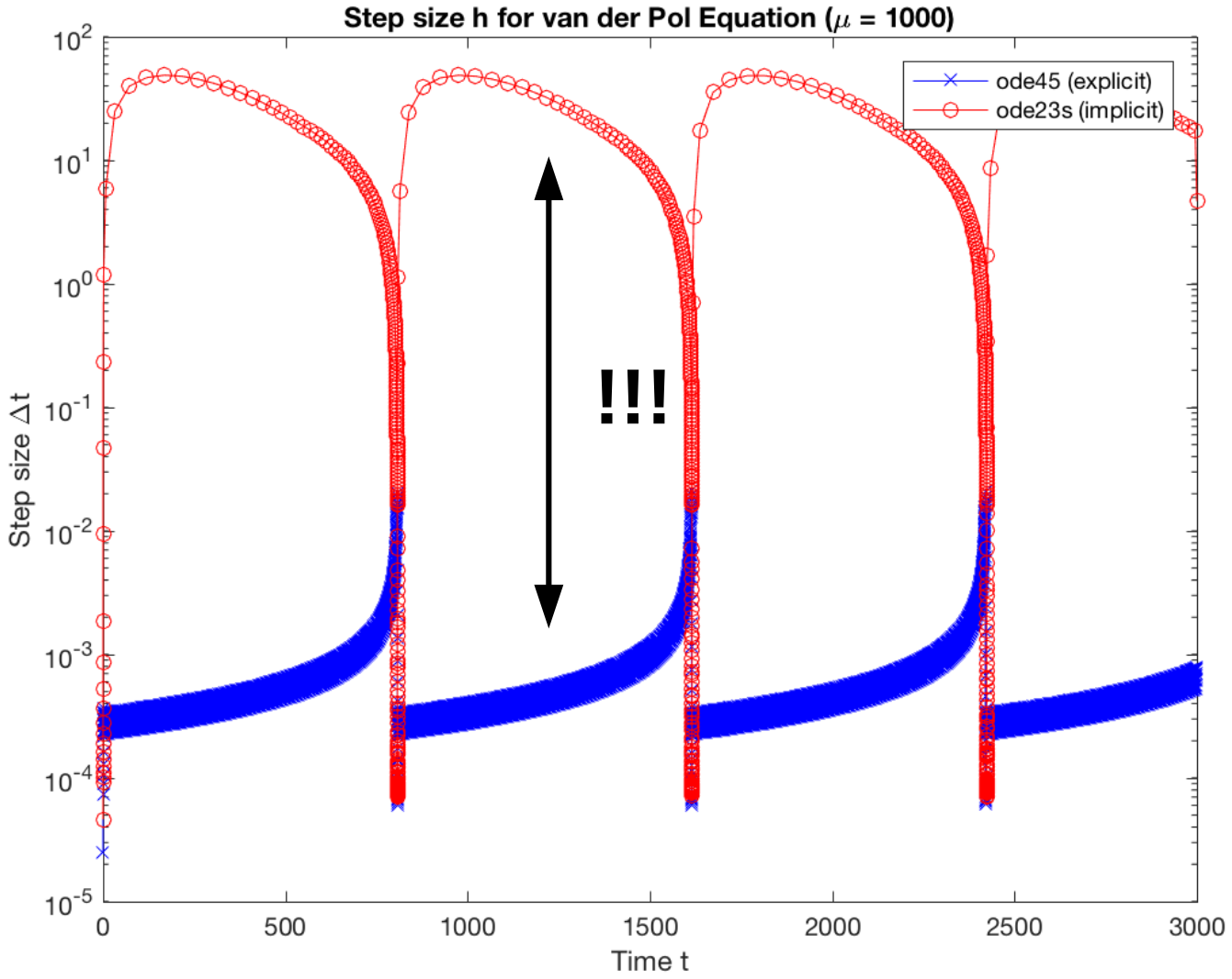
Bsp. (13)

Van der Pol Oszillator



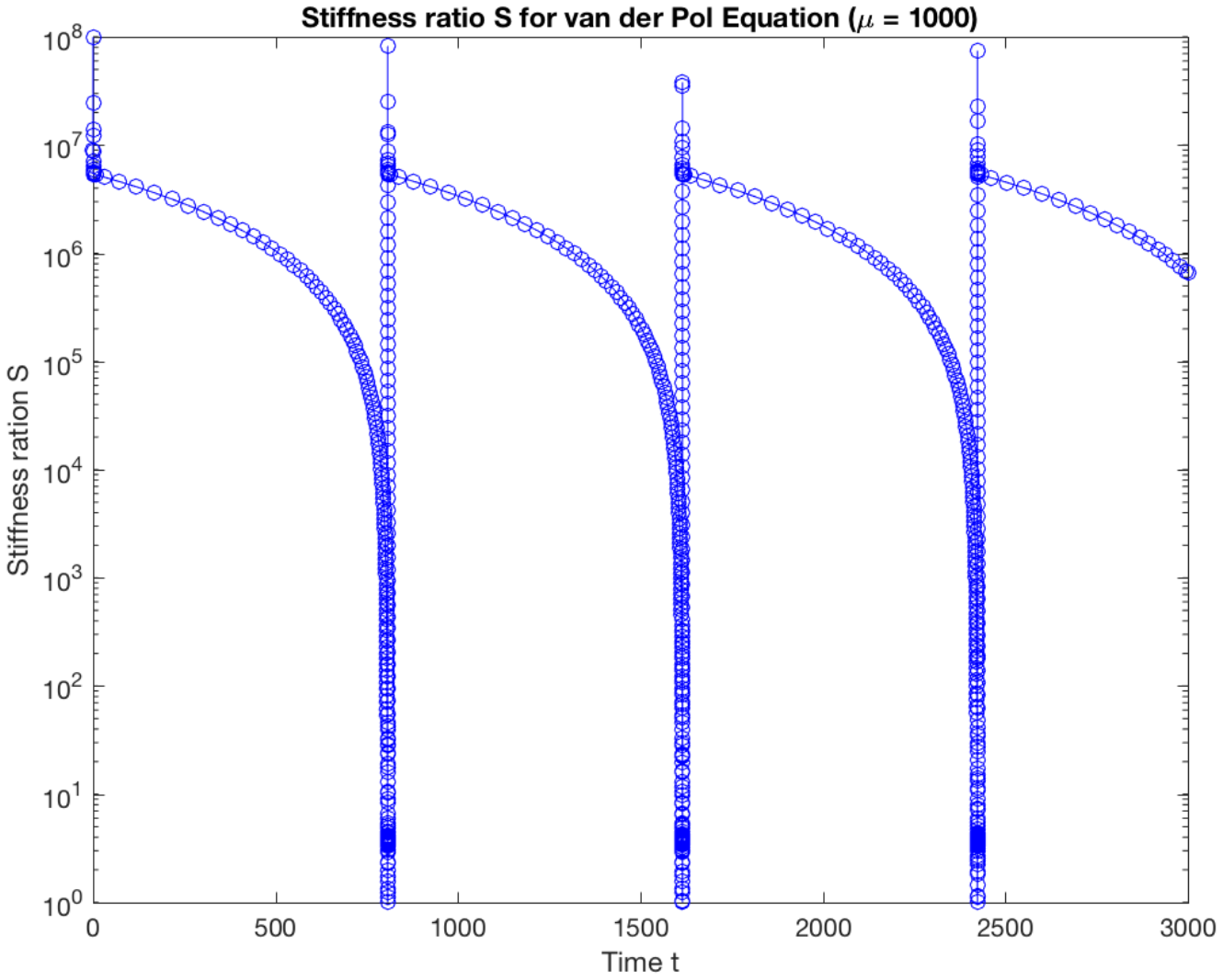
Bsp. (13)

Van der Pol Oszillator



Bsp. (13)

Van der Pol Oszillator



Zur numerischen Behandlung steifer Probleme folgern wir aus Bsp. (11)–(14), dass explizite Verfahren ungeeignet sind.

s. nächste Seite

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

Bsp. (14)

Bsp.: (14) Die Wärmeleitungsgleichung (in ihrer einfachsten Form) in 2D für die Temperatur $u(x,y,t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

wobei $(x,y) \in [0,1]^2$ und Zeit $t \geq 0$.

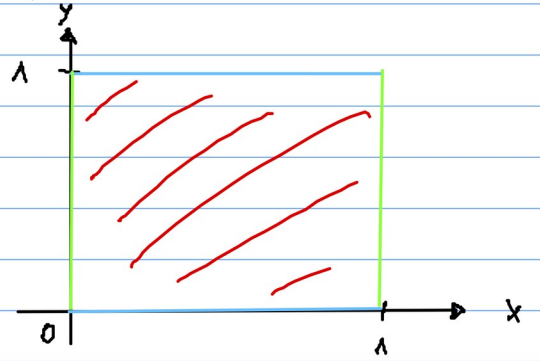
Die Anfangswerte seien

$$u(x,y,0) = \mathring{u}(x,y)$$

und die Randwerte

$$u(x,0/1,t) = u(0/1,y,t) = 0$$

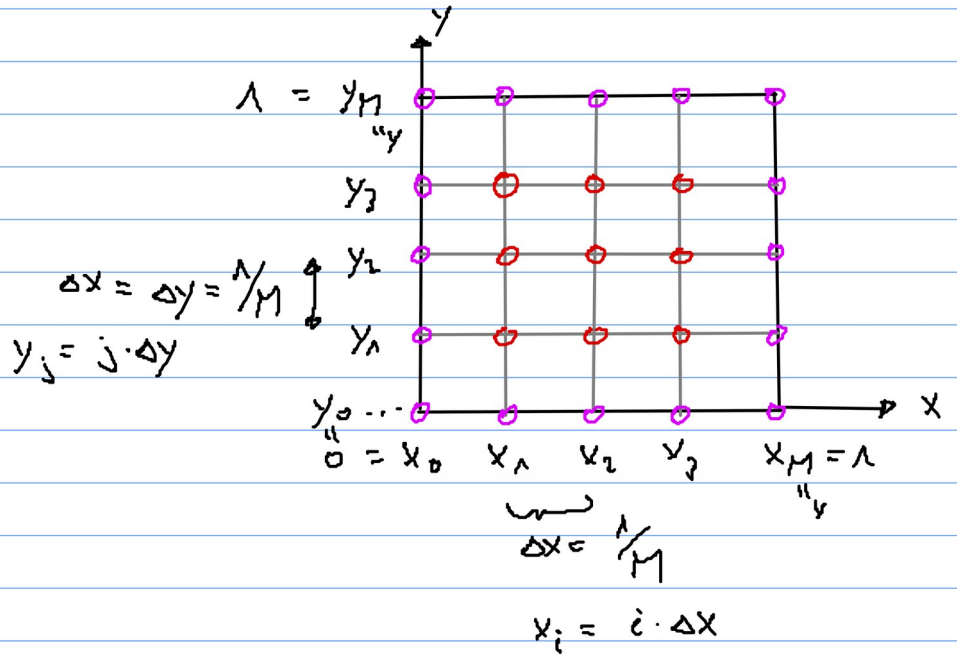
Graphisch



Also ein AnfangsRandWertProblem.

Bsp. (14)

Verwenden wir die sog. Linien-Methode (method of lines) und diskretisieren das Problem zuerst in den Ortsvariablen. Dazu führen wir ein $(n+1)\times(n+1)$ Gitter (grid/mesh) ein:



Die Temperatur an den Gitter-Knoten wollen wir approximieren:

$$u(x_i, y_j, t) \approx u_{i,j}(t)$$

Bsp. (14)

Dazu müssen wir die PDE approximieren:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}} + \underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}}_{\approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2}} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \frac{du_{i,j}}{dt}$$

Finite Differenzen ~ Kap. 1

für $1 \leq i, j \leq M-1$ (0-Knoten)

$u_{i,j} = 0$ am Rand (0-Knoten)

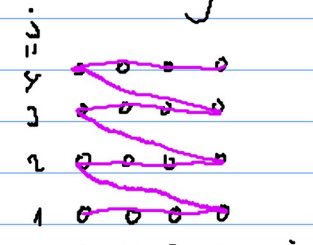
Dies ist ein lineares System von $(M-1) \times (M-1)$ DGlen mit AW

$$u_{i,j}(t=0) = \mathring{u}(x_i, y_j) \quad \text{für } 1 \leq i,j \leq M-1.$$

Die Temperaturen an den Gitter-Knoten packen wir in einen Lösungvektor

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ \vdots \\ u_{M-1,M-1} \end{pmatrix}$$

$(M-1)^2$ Komponenten



Bsp. (14)

und schreiben das DGL System wie folgt

$$\dot{\vec{y}} = A\,\vec{y}$$

wobei die (Block-) Matrix

$$A = \begin{pmatrix} J & -I & & 0 \\ -I & J & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ 0 & & -I & J \end{pmatrix}$$

$(M-1)^2 \times (M-1)^2$ Matrix

und

$$J = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & 0 \\ -1 & 4 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

$(M-1) \times (M-1)$ Matrix

$$I = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

$(M-1) \times (M-1)$ Einheitsmatrix

Die Matrix A ist dünn besetzt (sparse, viele Nulle!).

Bsp. (14)

Für $n = 100$ ($\Delta x = 0.01$) ergibt sich bereits ein System von $99^2 = 9801$ DGLen!
(Man stellt sich leicht vor, dass in der Praxis viel grössere Systeme gibt.)

Nun müssen wir dieses AWP noch lösen. Um das lösen eines grossen LGS zu vermeiden ist man versucht einen expliziten Löser zu verwenden, z.B. das explizite Euler Verfahren

$$\vec{y}^{n+1} = \vec{y}^n + h A \vec{y}^n \qquad n = 0, 1, \ldots$$

(Zeitindex)

Aber man merkt schnell, dass dies eine schlechte Idee ist.
Das DGL System ist nämlich sehr steif. Man kann zeigen, dass die Eigenwerte von A mit $\frac{1}{\Delta x^2}$ skalieren.

Bsp. (14)

Für $\Delta x = 0.01$ $(n = 100)$ ergeben sich so ungefähr 12'000 Zeit-Schritte bis zu $t = 0.1$.