

B-Konvergenz

Vortragender: Frederik Schnack
Dozent: Prof. Dr. Folkmar Bornemann

14.12.2017

WIEDERHOLUNG

Anmerkung. Darstellung einer Runge-Kutta Methode mit Butcher Schema $\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$.

$$\begin{aligned} k_i &= f\left(t + c_i h, x + h \underbrace{\sum_{j=1}^s a_{ij} k_j}_{=g_i}\right) & \iff & g_i = x + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t + c_i h, g_j) \\ \Psi^{t+h,t} x &= x + h \sum_{i=1}^s b_i k_i & & \Psi^{t+h,t} x = x + h \sum_{i=1}^s b_i f(t + c_i h, g_i) \end{aligned}$$

Theorem (Butcher 1964). Vereinfachte Bedingungen für die Konstruktion von Impliziten Runge-Kutta Methoden der maximalen Ordnung $p = 2s$ mit s Schritten.

$$\begin{aligned} B(p) : \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} &= \frac{1}{q} & q &= 1, \dots, p, \\ C(\eta) : \quad \sum_{i=1}^s a_{ij} c_i^{q-1} &= \frac{c_j^q}{q} & i &= 1, \dots, s, \quad q = 1, \dots, \eta, \\ D(\zeta) : \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} a_{ij} &= \frac{b_j}{q} (1 - c_i^q) & j &= 1, \dots, s, \quad q = 1, \dots, \eta. \end{aligned}$$

Falls $B(p), C(\eta), D(\zeta)$ erfüllt sind mit $p \leq 2\eta + 2$ und $p \leq \zeta + \eta + 1$, dann hat das Verfahren die Ordnung p .

1 BEISPIEL VON PROTHERO & ROBINSON

$$y' = \lambda(y - \varphi(x)) + \varphi'(x), \quad y(x_0) = \varphi(x_0), \quad \operatorname{Re} \lambda \leq 0. \quad (\text{PR})$$

Bei der Anwendung von Impliziten Runge-Kutta Verfahren auf das Problem (PR) können wir hier den lokalen und globalen Fehler direkt berechnen.

Mit der exakten Lösung $\varphi(x_0 + h)$ von y_1 bzw. $\varphi(x_0 + c_i h)$ von g_i erhält man:

$$\begin{aligned} \varphi(x_0 + c_i h) &= \varphi(x_0) + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \varphi'(x_0 + c_j h) + \Delta_{i,h}(x_0) \\ \varphi(x_0 + h) &= \varphi(x_0) + h \sum_{j=1}^s b_j \varphi'(x_0 + c_j h) + \Delta_{0,h}(x_0). \end{aligned}$$

Aus der Taylorentwicklung folgt nun:

$$\Delta_{0,h}(x_0) = \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad \Delta_{i,h}(x_0) = \mathcal{O}(h^{q+1}),$$

wobei p und q die größten Zahlen sind, sodass $B(p)$ und $C(q)$ erfüllt sind. Das Minimum der beiden wird **Stage Order** des Runge-Kutta Verfahrens genannt.

Hieraus lässt sich der lokale und globale Fehler herleiten. Betrachte dazu:

$$y_1 - \varphi(x_0 + h) = R(z)(y_0 - \varphi(x_0)) - zb^T(I - zA)^{-1}\Delta_h(x_0) - \Delta_{0,h}(x_0)$$

mit $z = \lambda h$, $R(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbb{1}$ und $\Delta_h(x) = (\Delta_{1,h}(x), \dots, \Delta_{s,h}(x))^T$.

Wobei zunächst die inneren Schritte $g_i - \varphi(x_0 + c_i h)$ berechnet und eingesetzt wurden.

Wir definieren $\delta_h(x)$ als den **lokalen Fehler** durch:

$$\delta_h(x) = -zb^T(I - zA)^{-1}\Delta_h(x) - \Delta_{0,h}(x).$$

Rekursiv aus der obigen Rechnung erhalten wir den **globalen Fehler** als:

$$y_{n+1} - \varphi(x_n + 1) = R(z)^{n+1}(y_0 - \varphi(x_0)) + \sum_{j=0}^n R(z)^{n-j}\delta_h(x_j).$$

Nun wollen wir die Früchte unserer Arbeit ernten und die Konvergenzen von verschiedenen Verfahren überprüfen. Man beachte dass λ hier eine direkte Messgröße der Steifigkeit des Problems darstellt. Wir sind nur an Schrittgrößen h interessiert die viel größer als $|\lambda|^{-1}$ sind. Deshalb betrachten wir den Grenzwert $h \rightarrow 0$ und somit $z = \lambda h \rightarrow \infty$.

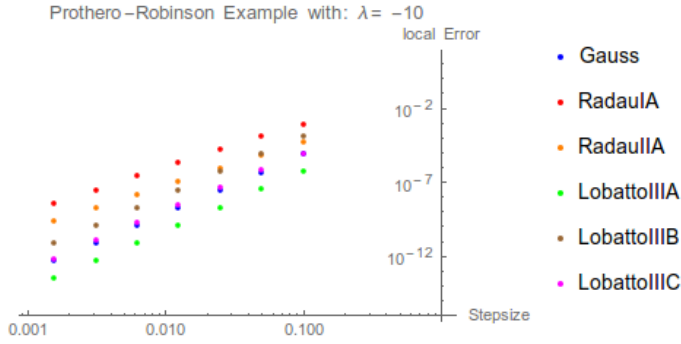


Abbildung 1: Konvergenzplot für $\lambda = -10$.

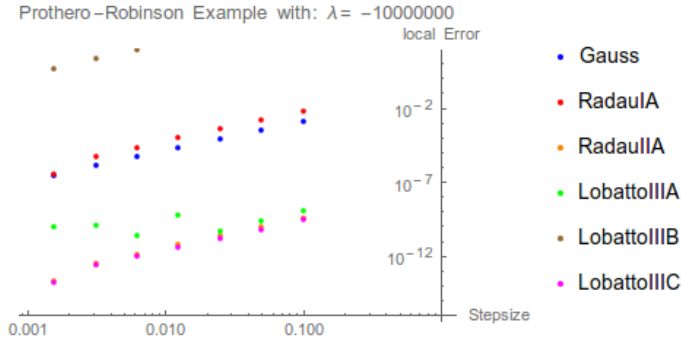


Abbildung 2: Konvergenzplot für $\lambda = -10^7$.

Wir betrachten die Situation aus (PR) mit $\varphi(x) = 10 - (10 + x)e^{-x}$ für $x_0 = 0$ und lösen das System für verschiedene λ zum Zeitpunkt $T = 1$ mit Verfahren der Ordnung 4. Wir erkennen dass für großes λ die bisherigen Vorhersagen für Ordnung und Stabilität nichtmehr halten. Wir suchen im Folgenden also ein von **Steifheit invariantes** Konzept für die Konvergenzanalyse von Impliziten Runge-Kutta Verfahren. Verfahren die sich im Grenzwert $\lambda \rightarrow \infty$ stabil verhalten und ein korrektes Ergebnis liefern nennt man **stiffly accurate**. Im Folgenden wollen wir nun das Konzept der B-Stabilität aufgreifen und ein verallgemeinerndes Konvergenzresultat herleiten.

Verfahren	kl. Ordnung	lok. Fehler	glob. Fehler	stiffly accurate	Stabilität
Gauss	$2s$	h^{s+1}	h^s		A
Radau IA	$2s - 1$	h^s	h^s		L
Radau IIA	$2s - 1$	$z^{-1}h^{s+1}$	$z^{-1}h^{s+1}$	✓	L
Lobatto IIIA	$2s - 2$	$z^{-1}h^{s+1}$	$z^{-1}h^s$	✓	A
Lobatto IIIB	$2s - 2$	zh^{s-1}	zh^{s-2}		A
Lobatto IIIC	$2s - 2$	$z^{-1}h^{s+1}$	$z^{-1}h^s$	✓	L

Tabelle 1: Konvergenzresultate der Verfahren mit Stufenanzahl s für (PR).

2 DER LOKALE FEHLER

Definition 2.1 (Einseitige Lipschitz Bedingung). Für eine nicht lineare Differentialgleichung $y' = f(x, y)$ sei folgende Ungleichung erfüllt:

$$\langle f(x, y) - f(x, z), y - z \rangle \leq \nu \|y - z\|^2 \quad (2.1)$$

So nennt man ν die **einseitige Lipschitz Konstante** von f .

Anmerkung. Wir bezeichnen den lokalen Fehler weiterhin mit $\delta_h(x) = y_1 - y(x+h)$, wobei y_1 die numerische Lösung zum Anfangswert $y_0 = y(x)$ ist.

Definition 2.2. Für das Produkt $\langle u, v \rangle_D = u^T D v$, wobei $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_s)$ mit $d_i > 0$. Bezeichnen wir mit $\alpha_D(A^{-1})$ die größte Zahl α , sodass:

$$\langle u, A^{-1}u \rangle_D \geq \alpha \langle u, u \rangle_D \quad \text{für alle } u \in \mathbb{R}^s$$

Weiter setzen wir:

$$\alpha_0(A^{-1}) = \sup_{D>0} \alpha_D(A^{-1}).$$

Anmerkung. Diese Definition spielt eine wichtige Rolle im Existenzbeweis für die Lösungen von Runge-Kutta Verfahren. Wir werden sie jedoch nur als eine Art Kenngröße für die Runge-Kutta Matrix behandeln.

Proposition 2.3. Die Differentialgleichung erfülle (2.1). Desweiteren sei die Runge-Kutta Matrix A invertierbar, $\alpha_0(A^{-1}) \geq 0$ und das Verfahren habe stage order q .

a) Falls $\alpha_0(A^{-1}) > 0$, dann:

$$\|\delta_h(x)\| \leq Ch^{q+1} \max_{\xi \in [x, x+h]} \|y^{(q+1)}(\xi)\| \quad \text{für } h\nu \leq \alpha < \alpha_0(A^{-1}).$$

b) Falls $\alpha_D(A^{-1}) = 0$ für eine positive Diagonalmatrix D und $\nu < 0$, dann:

$$\|\delta_h(x)\| \leq C \left(h + \frac{1}{|\nu|} \right) h^q \max_{\xi \in [x, x+h]} \|y^{(q+1)}(\xi)\|.$$

Anmerkung. Die Abschätzung hängt nur von der Differenzierbarkeit des Problems ab und nicht von dessen Steifheit. Die Konstante C hängt nur vom Verfahren ab.

3 FEHLER FORTPFLANZUNG

Definition 3.1. (Butcher 1975) Man nennt ein Runge-Kutta Verfahren **B-Stabil** falls:

$$\langle f(x, y) - f(x, z), y - z \rangle \leq 0 \quad \text{impliziert für alle } h \geq 0: \quad \|y_1 - \hat{y}_1\| \leq \|y_0 - \hat{y}_0\|.$$

Anmerkung. y_1, \hat{y}_1 sind die numerischen Lösungen von $y' = f(x, y)$ nach einem Schritt zum Anfangswert y_0, \hat{y}_0 .

Definition 3.2. Man nennt ein Runge-Kutta Verfahren **algebraisch stabil** falls:

- i) $b_i \geq 0$ für $i \in \{1, \dots, s\}$,
- ii) $M = (m_{ij}) = (b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j)_{i,j=1}^s$ ist positiv semidefinit.

Theorem 3.3 (Hundsdoerfer & Spijker 1981). Algebraische Stabilität ist äquivalent zu B-Stabilität.

Proposition 3.4 (Dekker & Verwer 1984). Die Differentialgleichung erfülle (2.1). Das Runge-Kutta Verfahren sei algebraisch stabil mit invertierbarer Runge-Kutta Matrix A und $\alpha_0(A^{-1}) > 0$. Dann existiert eine Konstante $C > 0$ für ein beliebiges α mit $0 < \alpha < \alpha_0(A^{-1})$, sodass:

$$\|\hat{y}_1 - y_1\| \leq (1 + Ch\nu) \|\hat{y}_0 - y_0\| \quad \text{für } 0 \leq h\nu \leq \alpha.$$

4 B-KONVERGENZ

Theorem 4.1. *Betrachte ein algebraisch stabiles Runge-Kutta Verfahren mit invertierbarer Runge-Kutta Matrix A und stage order $q \leq p$. Das Problem erfülle (2.1).*

a) *Falls $0 < \alpha < \alpha_0(A^{-1})$ und $\nu > 0$ dann erfüllt der globale Fehler:*

$$\|y_n - y(x_n)\| \leq h^q \frac{(e^{C_1 \nu(x_n - x_0)} - 1)}{C_1 \nu} \max_{x \in [x_0, x_n]} \|y^{(q+1)}(x)\| \quad \text{für } h\nu \leq \alpha.$$

b) *Falls $\alpha_0(A^{-1}) > 0$ und $\nu \leq 0$ dann:*

$$\|y_n - y(x_n)\| \leq h^q (x_n - x_0) C_2 \max_{x \in [x_0, x_n]} \|y^{(q+1)}(x)\| \quad \text{für alle } h > 0.$$

c) *Falls $\alpha_D(A^{-1}) = 0$ für eine positive Diagonalmatrix D und $\nu < 0$ dann:*

$$\|y_n - y(x_n)\| \leq h^{q-1} C \left(h + \frac{1}{|\nu|} \right) (x_n - x_0) \max_{x \in [x_0, x_n]} \|y^{(q+1)}(x)\|.$$

Anmerkung. Die Konstanten C, C_1, C_2 hängen nur von den Koeffizienten der Runge-Kutta Matrix ab. Falls die Schrittweite h variabel ist, so ist $h = \max h_i$ zu lesen.

Definition 4.2 (Frank, Schneid & Ueberhuber 1981). Ein Runge-Kutta Verfahren wird **B-Konvergent der Ordnung r** genannt falls für Probleme $y' = f(x, y)$, die (2.1) erfüllen, folgende globale Fehlerabschätzung gilt:

$$\|y_n - y(x_n)\| \leq h^r \gamma(x_n - x_0, \nu) \max_{j=1, \dots, r} \max_{x \in [x_0, x_n]} \|y^{(j)}(x)\| \quad \text{für } h\nu \leq \alpha,$$

Hierbei ist $h = \max h_i$ und γ eine nur vom Verfahren abhängige Funktion. Ebenso hängt α auch nur vom Verfahren ab.

Theorem 4.3. *Die Gauss und Radau IIA Verfahren sind B-Konvergent der Ordnung s , wobei s die Schrittzahl ist. Das Radau IA Verfahren ist B-Konvergent der Ordnung $s-1$. Das 2-Schritt Lobatto IIIC Verfahren ist B-Konvergent der Ordnung 1.*

VERWEISE

[PR] A. Prothero, A. Robinson: On the Stability and Accuracy of One-Step Methods for Solving Stiff Systems of Ordinary Differential Equations, 1974.

[HW-I] E. Hairer, S. P. Nørsett, G. Wanner: Solving Ordinary Differential Equations I - Nonstiff Problems, 2. Auflage, Springer, 2000.

[HW-II] E. Hairer, G. Wanner: Solving Ordinary Differential Equations II - Stiff and Differential-Algebraic Problems, 2. Auflage, Springer 2002.

[Code] Ein von mir erstelltes Mathematica Notebook zur Konvergenzanalyse und zur Durchführung einiger Taylorentwicklungen.

(<https://github.com/FrederikSchnack/NumSeminarB-Convergence>)