

Numerische Mathematik SS 2019

Dozent: Prof. Dr. ANDREAS FISCHER

15. April 2019

Inhaltsverzeichnis

I	Das gewöhnliche Iterationsverfahren	2
1	Fixpunkte	2
2	Der Fixpunktsatz von Banach	3
3	Gewöhnliche Iterationsverfahren	4
4	Das NEWTON-Verfahren als Fixpunktiteration	7
II	Iterative Verfahren für lineare Gleichungssysteme	9
1	Fixpunktiteration	9
1.1	Das JACOBI-Verfahren	11
1.2	Das GAUSS-SEIDEL-Verfahren	11
1.3	SOR-Verfahren	13
2	KRYLOV-Raum-basierte Verfahren	15
2.1	KRYLOV-Räume	15
2.2	Basisalgorithmen zur Lösung von $Ax = b$	15
2.3	Das CG-Verfahren	15
2.4	Fehlerverhalten des CG-Verfahrens	15
2.5	Vorkonditionierung	15
2.6	Ausblick und Anmerkungen	15
III	Numerische Behandlung von Anfangswertaufgaben	16
1	Aufgabe und Lösbarkeit	16
2	Einschrittverfahren	18
2.1	Grundlagen	18
2.2	Lokaler Diskretisierungsfehler und Konsistenz	19
2.3	Konvergenz von Einschrittverfahren	20
2.4	Stabilität gegenüber Rundungsfehlern	22
2.5	RUNGE-KUTTA-Verfahren	23
3	Mehrschrittverfahren	26
3.1	Grundlagen	26
3.2	Konsistenz- und Konvergenzordnung für lineare MSV	27
4	A-Stabilität	28
5	Einblick: Steife Probleme	29
6	Ausblick	30
	Anhang	32
	Index	33

Vorwort

Vorwort

Kapitel I

Das gewöhnliche Iterationsverfahren

1. Fixpunkte

Seien ein Vektorraum V , eine Menge $U \subseteq V$ und eine Abbildung $\Phi : U \rightarrow V$ gegeben. Dann heißt $x^* \in U$ Fixpunkt der Abbildung Φ , falls $\Phi(x^*) = x^*$ gilt. Die Aufgabe

$$\Phi(x) = x$$

(eigentlich die Aufgabe, diese Gleichung zu lösen) wird als Fixpunktaufgabe bezeichnet. Die Abbildung Φ heißt Fixpunktabbildung. Im Unterschied zur Fixpunktaufgabe heißt

$$F(x) = 0$$

Nullstellenaufgabe. Zu jeder Nullstellenaufgabe gibt es eine äquivalente Fixpunktaufgabe (z.B. $F(x) = 0 \Leftrightarrow \Phi(x) = x$ mit $\Phi(x) := F(x) + x$) und umgekehrt (z.B. $\Phi(x) = x \Leftrightarrow F(x) = 0$ mit $F(x) := \Phi(x) - x$).

2. Der Fixpunktsatz von Banach

Der folgende Satz gibt (unter gewissen Bedingungen) eine konstruktive Möglichkeit an, einen Fixpunkt näherungsweise zu ermitteln.

Satz 2.1 (Banach)

Seien $(V, \|\cdot\|)$ ein Banach-Raum, $U \subseteq V$ eine abgeschlossene Menge und $\Phi : U \rightarrow V$ eine Abbildung. Die Abbildung Φ sei selbstabbildend, d.h. es gilt

$$\Phi(U) \subseteq U.$$

Außerdem sei Φ kontraktiv, d.h. es gibt $\lambda \in [0, 1)$, so dass

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \lambda \|x - y\|, \text{ für alle } x, y \in U.$$

Dann besitzt Φ genau einen Fixpunkt $x^* \in U$. Weiterhin konvergiert die durch

$$x^{k+1} := \Phi(x^k) \tag{1}$$

erzeugte Folge $\{x^k\}$ für jeden Startwert $x^0 \in U$ gegen x^* und es gilt für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\lambda}{1 - \lambda} \|x^{k+1} - x^k\| \quad \text{a posteriori Fehlerabschätzung,} \tag{2}$$

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\lambda^{k+1}}{1 - \lambda} \|x^1 - x^0\| \quad \text{a priori Fehlerabschätzung,} \tag{3}$$

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \frac{\lambda}{1 - \lambda} \|x^k - x^*\| \quad \text{Q-lineare Konvergenz mit Ordnung } \lambda. \tag{4}$$

Beweis. Verlesung zur Analysis. □

Die in Satz 2.1 vorkommende Zahl $\lambda \in [0, 1)$ wird Kontraktionskonstante genannt.

3. Gewöhnliche Iterationsverfahren

Durch Gleichung (1) erklärte Verfahren heißt gewöhnliches Iterationsverfahren oder Fixpunktiteration. Kritisch ist dabei, ob die Voraussetzungen (Φ ist selbstabbildend und kontraktiv) erfüllt werden können. Dies wird in diesem Abschnitt im Fall $V = \mathbb{R}^n$ mit einer beliebigen aber festen Vektornorm $\|\cdot\|$ untersucht. Die zugeordnete Matrixnorm wurde mit $\|\cdot\|_*$ bezeichnet.

Lemma 3.1

Sei $S \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und konvex und $\Phi : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Falls $L > 0$ existiert mit

$$\|\Phi'(x)\|_* \leq L \text{ für alle } x \in D, \quad (1)$$

dann ist Φ Lipschitz-stetig in D mit der Lipschitz-Konstante L , d.h. es gilt

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq L\|x - y\| \text{ für alle } x \in D. \quad (2)$$

Die Umkehrung dieser Aussage ist ebenfalls richtig.

Beweis. 1. Sei Gleichung (1) erfüllt. Mit Satz 5.1 aus der Vorlesung ENM folgt

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\|_* = \left\| \int_0^1 \Phi'(y + t(x - y))(x - y) dt \right\| \leq \|x - y\| \sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(y + t(x - y))\|_* \quad (3)$$

für alle $x, y \in D$. Also liefert Gleichung (1) unter Beachtung der Konvexität von D die Behauptung.

2. Sei nun Gleichung (2) erfüllt. Angenommen es gibt $\hat{y} \in D$ mit

$$\|\Phi'(\hat{y})\|_* > L. \quad (4)$$

Unter Berücksichtigung der Definition der zugeordneten Matrixnorm $\|\cdot\|_*$ folgt, dass $d \in \mathbb{R}^n$ existiert mit $\|d\| = 1$ und $\|\Phi'(\hat{y})d\| = \|\Phi'(\hat{y})\|_*$. Wendet man nun ENM mit $x := \hat{y} + sd$ und $y := \hat{y}$ an, so folgt für alle $s > 0$ hinreichend klein

$$\|\Phi(\hat{y} + sd) - \Phi(\hat{y})\| \leq L\|sd\| = sL \quad (5)$$

und

$$\begin{aligned} \|\Phi(\hat{y} + sd) - \Phi(\hat{y})\| &= \left\| \int_0^1 \Phi'(\hat{y} + tsd)(sd) dt \right\| \\ &= \left\| \int_0^1 \Phi'(\hat{y} + tsd)(sd) dt + \int_0^1 \Phi'(\hat{y})(sd)(sd) dt - \int_0^1 \Phi'(\hat{y})(sd)(sd) dt \right\| \\ &\geq s \left\| \Phi'(\hat{y})d \right\| - s\|d\| \sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(\hat{y} + tsd) - \Phi'(\hat{y})\|_* \\ &= s(\|\Phi'(\hat{y})\|_* - \sup_{t \in [0,1]} \|\Phi'(\hat{y} + tsd) - \Phi'(\hat{y})\|_*) \\ &> sL, \end{aligned}$$

wobei sich die letzte Ungleichung wegen Gleichung (4) und der Stetigkeit von Φ' ergibt. Offenbar hat man damit einen Widerspruch, so dass die Annahme falsch ist. \square

■ **Beispiel 3.2**

Die Nullstellenaufgabe $\cos x - 2x = 0$ sei zu lösen. Eine mögliche Formulierung als Fixpunktaufgabe ist

$$\Phi(x) = x \text{ mit } \Phi(x) := -x + \cos x$$

Offenbar ist $\Phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ selbstabbildend. Weiter ergibt sich

$$\Phi'(x) = -1 - \sin x$$

Für $x \in D := (0, 1)$ gilt daher $|\Phi'(x)| > 1$. Mit Lemma 3.1 folgt $|\Phi(x) - \Phi(y)| \geq |x - y|$ für mindestens ein Paar $(x, y) \in D \times D$. Somit ist Φ in D nicht kontrahierend. Definiert man Φ aber durch $\Phi(x) := \frac{1}{2} \cos x$, so ist die Fixpunktaufgabe $\frac{1}{2} \cos x = x$ wiederum zur Nullstellenaufgabe äquivalent und es folgt

$$\Phi'(x) = -\frac{1}{2} \sin x.$$

Damit hat man $|\Phi'(x)| \leq \frac{1}{2}$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Also ist die zuletzt definierte Abbildung Φ kontrahierend auf \mathbb{R} (und dort natürlich selbstabbildend), so dass die Voraussetzungen des Banachschen Fixpunktsatzes erfüllt sind. Die Fixpunktiteration mit $\Phi(x) = \frac{1}{2} \cos x$ und $x^0 := 1$ ergibt:

$$x^1 = 0.270 \dots$$

$$x^2 = 0.481 \dots$$

$$x^3 = 0.433 \dots$$

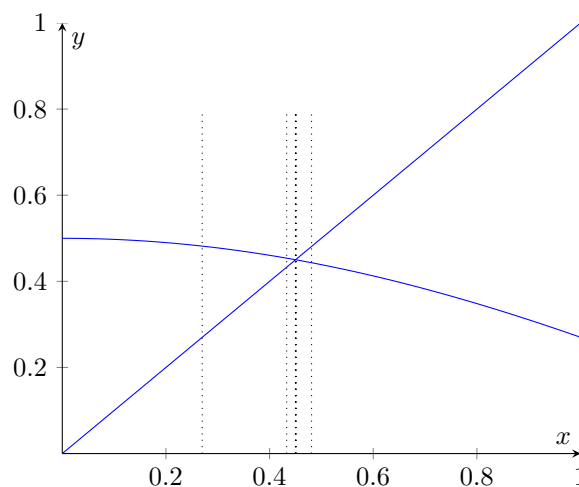
$$x^4 = 0.4517 \dots$$

$$x^5 = 0.4498 \dots$$

$$x^6 = 0.45025 \dots$$

$$x^7 = 0.450167 \dots$$

$$x^8 = 0.450187 \dots$$



Nehmen wir an, die Voraussetzungen des Banachschen Fixpunktsatzes seien gegeben. Dann hängt die Konvergenzgeschwindigkeit der Fixpunktiteration offenbar von der Kontraktionskonstanten $\lambda \in [0, 1)$ ab. Je kleiner λ ist, desto schneller ist die Konvergenzgeschwindigkeit. Unter Umständen kann die Umformulierung einer Fixpunktaufgabe mit Hilfe einer anderen Fixpunktabbildung helfen, die Konvergenzgeschwindigkeit zu verbessern (ggf. auf Kosten der Größe der Menge U , in der die Voraussetzungen des Banachschen Fixpunktsatzes erfüllt sind.) Ein Beispiel zur Konstruktion einer Fixpunktabbildung mit lokal beliebig kleiner Kontraktionskonstante gibt Abschnitt 1.4. In Abschnitt 2.1 wird gezeigt, wie Fixpunktabbildungen zur iterativen Lösung von linearen Gleichungssystemen eingesetzt werden können. Im Weiteren bezeichne $B(x^*, r) :=$ die abgeschlossene Kugel um x^* mit Radius r (bzgl. einer passenden Norm).

Satz 3.3 (Ostrowski)

Seien $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $\Phi : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Die Abbildung Φ besitze einen Fixpunkt $x^* \in D$ mit $\|\Phi'(x^*)\|_* < 1$. Dann existiert $r > 0$, so dass das gewöhnliche Iterationsverfahren für jeden Startpunkt $x^0 \in B(x^*, r)$ gegen x^* konvergiert.

Beweis. Da Φ stetig differenzierbar ist und $\|\Phi'(x^*)\|_* < 1$, gibt es $\lambda \in [0, 1]$ und $r > 0$, sodass

$$\|\Phi'(x)\|_* \leq \lambda \quad \text{für alle } x \in B(x^*, r).$$

Nach Lemma 3.1 gilt daher

$$\|\Phi(x) - \Phi(y)\| \leq \lambda \|x - y\| \quad \text{für alle } x, y \in B(x^*, r). \quad (6)$$

Insbesondere folgt hieraus

$$\|\Phi(x) - \Phi(x^*)\| = \|\Phi(x) - x^*\| \leq \lambda \|x - x^*\| \quad \text{für alle } x \in B(x^*, r) \quad (7)$$

und damit $\Phi(x) \in B(x^*, r)$ für alle $x \in B(x^*, r)$. Also ist Φ bzgl. $B(x^*, r)$ selbstabbildend und kontraktiv. Daher liefert Satz 2.1 die gewünschte Aussage. \square

4. Das Newton-Verfahren als Fixpunktiteration

Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $F : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Die Nullstellenaufgabe

$$F(x) = 0$$

wird nun in eine äquivalente Fixpunktaufgabe überführt. Dazu nehmen wir an, dass x^* eine reguläre Nullstelle von F ist. Wegen der vorausgesetzten Stetigkeit von F' gibt es $r > 0$ hinreichend klein, so dass $F'(x)$ für $x \in B(x^*, r)$ regulär ist. Damit erhält man

$$F(x) = 0 \Leftrightarrow 0 = -F'(x)^{-1}F(x) \Leftrightarrow x = x - F'(x)^{-1}F(x).$$

für $x \in B(x^*, r)$. Definiert man $\Phi : B(x^*, r) \rightarrow \mathbb{R}^n$ durch

$$\Phi(x) := x - F'(x)^{-1}F(x). \quad (1)$$

so kann das Newton-Verfahren als Fixpunktverfahren mit Φ als Fixpunktabbildung interpretiert werden. Ob Φ selbstabbildend und kontrahierend ist, müsste noch untersucht werden. Hier soll nur die Kontraktionseigenschaft in $B(x^*, r)$ für $r > 1$ hinreichend klein betrachtet werden. Die Eigenschaft der Selbstabbildung ergibt sich dann wie im Beweis zu Satz 3.3.

Lemma 4.1

Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $F : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar. Weiter sei $x^* \in D$ eine reguläre Nullstelle von F . Dann ist Φ in x^* differenzierbar mit $\Phi'(x^*) = 0$.

Beweis. Wie zuvor gezeigt wurde, ist die durch Gleichung (1) definierte Abbildung Φ in $B(x^*, r) \subset D$ hinreichend kleines $r > 0$ wohldefiniert. Falls

$$\lim_{x \rightarrow x^*} \frac{\|\Phi(x) - \Phi(x^*) - G(x - x^*)\|}{\|x - x^*\|} \quad (2)$$

mit $G = 0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt, folgt die Behauptung des Lemmas aus der Definition der Fréchet-Differenzierbarkeit. Unter Beachtung von $\Phi(x^*) = x^*$ ergibt sich

$$\Phi(x) - \Phi(x^*) = x - F'(x)^{-1}F(x) - x^* = -F'(x)^{-1}(F'(x)(x^* - x) + F(x))$$

und mit Satz 5.1 aus der Vorlesung ENM folgt weiter

$$\Phi(x) - \Phi(x^*) = F'(x)^{-1} \left(-F(x^*) + \int_0^1 (F'(x + t(x^* - x)) - F'(x))(x^* - x) dt \right) \quad (3)$$

für alle $x \in B(x^*, r)$. Die Stetigkeit von F' auf der kompakten Menge $B(x^*, r)$ impliziert, dass F' dort auch gleichmäßig stetig ist. Also gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\delta(\varepsilon) > 0$, so dass auch

$$\|x + t(x^* - x) - x\| \leq \delta(\varepsilon) \quad \text{die Beziehung} \quad \|F'(x + t(x^* - x)) - F'(x)\|_* \leq \varepsilon$$

für beliebige $x \in B(x^*, r)$ und $t \in [0, 1]$ folgt. Damit hat man

$$\lim_{x \rightarrow x^*} \max_{t \in [0, 1]} \|F'(x + t(x^* - x)) - F'(x)\|_* = 0$$

und

$$\lim_{x \rightarrow x^*} \frac{\left\| \int_0^1 (F'(x + t(x^* - x)) - F'(x))(x^* - x) dt \right\|_*}{\|x - x^*\|} = 0$$

Somit erhält man aus Gleichung (3) unter Beachtung von $F(x^*) = 0$ und der Regularität von $F'(x)$

$$\lim_{x \rightarrow x^*} \frac{\|\Phi(x) - \Phi(x^*)\|}{\|x - x^*\| O(x - x^*)} = 0,$$

d.h. Gleichung (2) ist für $G = 0$ erfüllt. □

► **Bemerkung 4.2**

Falls F in einer Umgebung von x^* sogar zweimal stetig differenzierbar und damit Φ dort stetig differenzierbar ist, zeigt Lemma 3.1, dass $\|\Phi'(x)\|_* \leq L$ für alle $x \in D \cap B(x^*, r(L))$ gilt. D.h. die Kontraktionskonstante der Fixpunktabbildung Φ in Gleichung (1) in einer Kugel $B(x^*, r)$ konvergiert gegen 0, wenn man den Radius r gegen 0 gehen lässt. Ferner gibt es Sätze, bei denen unter geeigneten Voraussetzungen eine bestimmte lokale Konvergenzgeschwindigkeit (Q-Ordnung) gezeigt wird (etwa die Q Ordnung 2, wenn insbesondere Φ' stetig ist und $\Phi'(x^*) = 0$ gilt).

Kapitel II

Iterative Verfahren für lineare Gleichungssysteme

Seien eine reguläre Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$ gegeben. In diesem Kapitel werden iterative Verfahren zur Lösung des linearen Gleichungssystems

$$Ax = b \tag{1}$$

betrachtet.

1. Fixpunktiteration

Grundidee dieser Verfahren ist die geeignete Umformulierung des System $Ax = b$ als Fixpunktaufgabe und die Anwendung des gewöhnlichen Iterationsverfahrens. Die hier betrachtete (zu Gleichung (1) äquivalente) Fixpunktaufgabe lautet

$$x = x - B^{-1}(Ax - b),$$

wobei $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine noch zu wählende reguläre Matrix ist. Bei Wahl eines Startpunktes $x^0 \in \mathbb{R}^n$ ergibt sich das gewöhnliche Iterationsverfahren damit zu

$$x^{k+1} := x^k - B^{-1}(Ax^k - b) = (I - B^{-1}A)x^k + B^{-1}b, \quad k = 0, 1, 2, \dots \tag{1}$$

Mit den Bezeichnung $M := I - B^{-1}A$ und $c := B^{-1}b$ untersuchen wir deshalb die Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} := Mx^k + c. \tag{2}$$

Die zugehörige Fixpunktabbildung $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist damit offenbar gegeben durch

$$\Phi(x) := Mx + c.$$

Satz 1.1

Es sei $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär und mit $M := I - B^{-1}A$ gelte

$$\lambda := \|M\|_* < 1 \quad (3)$$

wobei $\|\cdot\|_*$ die einer Vektornorm $\|\cdot\|$ zugeordnete Matrixnorm bezeichnet. Dann gilt:

1. Die für eine beliebiges $x^0 \in \mathbb{R}^n$ durch Gleichung (2) erzeugte Folge $\{x^k\}$ konvergiert gegen die eindeutige Lösung x^* des linearen Gleichungssystems Gleichung (1).
2. Die Abschätzungen Gleichung (2) - Gleichung (4) sind für alle $k \in \mathbb{N}$ erfüllt.

Beweis. Direkte Folgerung aus dem Banachschen Fixpunktsatz (Satz 1.2.1) □

► Bemerkung 1.2

In Satz 1.1a) kann die Folgerung Gleichung (3) durch die Bedingung

$$\rho(M) < 1 \quad (4)$$

ersetzt werden. Da

$$\rho(C) \leq \|C\|_* \quad \text{für alle } C \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

für jede beliebige zugeordnete Matrixnorm $\|\cdot\|_*$ gilt (vgl. Übungsaufgabe), ist Gleichung (4) eine schwächere Forderung als Gleichung (3). Andererseits gibt es zu jedem Paar $(C, \varepsilon) \in \mathbb{R}^{n \times n} \times (0, \infty)$ eine zugeordnete Matrixnorm $\|\cdot\|_{(C, \varepsilon)}$, so dass

$$\|C\|_{(C, \varepsilon)} \leq \rho(C) + \varepsilon.$$

Dabei ist $\rho(C)$ der Spektralradius der Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$, d.h.

$$\rho(C) := \max_{i=1, \dots, n} |\lambda_i|,$$

wobei $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ die Eigenwerte der Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ bezeichnen. Man kann weiter zeigen, dass Gleichung (4) auch notwendig dafür ist, dass die durch Gleichung (1) erzeugte Folge $\{x^k\}$ für jedes x^0 gegen x^* konvergiert.

Um eine Matrix B zu finden, so dass einerseits der Aufwand pro Iteration Gleichung (1) niedrig und andererseits die Bedingung Gleichung (3) bzw. Gleichung (4) erfüllt ist, betrachten wir die folgende Zerlegung

$$A = L + D + R$$

der Matrix A , wobei $D := \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$ die aus den Diagonalelementen von A bestehende Diagonalmatrix bezeichnet und L bzw. R eine untere bzw. obere Dreiecksmatrix ist mit

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ a_{21} & 0 & & & \\ a_{31} & a_{32} & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad R = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & a_{n-1,n} \\ & & & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

1.1. Das Jacobi-Verfahren

Wir setzen hier voraus, dass D regulär ist und wählen

$$B := D \tag{5}$$

Damit ergibt sich die Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} = x^k - D^{-1}(Ax^k - b) = -D^{-1}(L + R)x^k + D^{-1}b. \tag{6}$$

In Gleichung (2) ist entsprechend

$$M := M_J := -D^{-1}(L + R) \text{ und } c := c_J := D^{-1}b$$

zu wählen. Dieses Verfahren heißt Gesamtschrittverfahren oder Jacobi-Verfahren. Der Aufwand pro Schritt (Berechnung von x^{k+1} aus x^k) beträgt $\mathcal{O}(n^2)$ bei voll besetzter Matrix A und mindestens $\mathcal{O}(n)$, falls A schwach besetzt ist.

Satz 1.3

Die Matrix A sei streng diagonaldominant (vgl. Definition 3.1 der Vorlesung ENM). Dann ist die Matrix B aus Gleichung (5) regulär und es gilt

$$\|M_J\|_\infty \leq \lambda_{SD} := \max_{i=1,\dots,n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < 1.$$

Beweis. Die Regularität von B ergibt sich sofort aus der strengen Diagonaldominanz von A . Nutzt man die Definition der Zeilensummennorm $\|\cdot\|_\infty$ erhält man sofort

$$\|M_J\|_\infty = \|D^{-1}(L + R)\|_\infty = \max_{i=1,\dots,n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| = \lambda_{SD}.$$

Die vorausgesetzte strenge Diagonaldominanz von A sichert $\lambda_{SD} < 1$. □

1.2. Das Gauss-Seidel-Verfahren

Wir setzen hier voraus, dass $L + D$ regulär ist und wählen

$$B := L + D \quad (7)$$

Damit ergibt sich die Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} = x^k - (L + D)^{-1}(Ax^k - b) = -(L + D)^{-1}Rx^k + (L + D)^{-1}b. \quad (8)$$

In Gleichung (2) ist entsprechend

$$M := MGS := -(L + D)^{-1}R \text{ und } c := c_{GS} := (L + D)^{-1}b$$

zu wählen. Dieses Verfahren heißt Einzelschrittverfahren oder Gauß-Seidel-Verfahren. Der Aufwand pro Schritt beträgt im ungünstigsten Fall $\mathcal{O}(n^2)$. Verbesserungen sind möglich, wenn eine Sparse-Struktur in A ausgenutzt werden kann.

Satz 1.4

Die Matrix A sei streng diagonaldominant (\nearrow Definition 3.1 der Vorlesung ENM). Dann ist die Matrix B aus Gleichung (7) regulär und es gilt

$$\|M_{GS}\|_{\infty} \leq \lambda_{SD} < 1.$$

Beweis. Die Regularität von B folgt sofort aus der strengen Diagonaldominanz von A . Weiter ergibt sich

$$\|M_{GS}\|_{\infty} = \|(L + D)^{-1}R\|_{\infty} = \sup_{\|y\|_{\infty}=1} \|(L + D)^{-1}Ry\|_{\infty}.$$

Um für einen festen Vektor y mit $\|y\|_{\infty} = 1$ eine Abschätzung für die rechte Seite zu erhalten, setzen wir $z := (L + D)^{-1}Ry$. Damit gilt

$$(D + L)z = Ry \quad (9)$$

und

$$z_1 = \frac{1}{a_{11}} \sum_{j=1}^n a_{1j}y_j.$$

Daraus folgt (da $\lambda_{SD} < 1$ wegen der strengen Diagonaldominanz von A)

$$|z_1| \leq \frac{1}{|a_{11}|} \sum_{j=2}^n |a_{1j}||y_j| \leq \sum_{j=2}^n |a_{1j}| \leq \lambda_{SD} < 1.$$

Nehmen wir nun an, dass

$$|z_1| \leq \text{für } i = 1, \dots, k-1,$$

für ein $k \in \{2, \dots, n\}$ gilt. Dann folgt wegen Gleichung (9) und $\|y\|_\infty = 1$

$$|z_k| = \frac{1}{|a_{kk}|} \left| - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} z_i + \sum_{i=k+1}^n a_{ki} y_i \right| \leq \frac{1}{|a_{kk}|} \left(\sum_{i=1}^{k-1} |a_{ki}| + \sum_{i=k+1}^n |a_{ki}| \right) \leq \lambda_{SD}.$$

Somit hat man induktiv $|z_k| \leq \lambda_{SD}$ für $k = 1, \dots, n$ und damit

$$\|(L + D)^{-1} R y\|_\infty = \|z\|_\infty \leq \lambda_{SD}$$

für beliebige y mit $\|y\|_\infty = 1$. □

1.3. SOR-Verfahren

Um dieses verfahren zu beschreiben, nehmen wir an, dass für ein $\omega \neq 0$ die Matrix

$$B := L + \frac{1}{\omega} D \tag{10}$$

regulär ist. Damit ergibt sich die Iterationsvorschrift

$$x^{k+1} := x^k - \left(L + \frac{1}{\omega} D \right)^{-1} (A x^k - b) = M(\omega) x^k + c(\omega)$$

$$M(\omega) := I - \left(L + \frac{1}{\omega} D^{-1} A \right) = \left(L + \frac{1}{\omega} D \right)^{-1} \tag{11}$$

und

$$c(\omega) := \left(L + \frac{1}{\omega} D \right)^{-1} b. \tag{12}$$

Für $\omega = 1$ erhält man offenbar als Spezialfall das Gauß-Seidel-Verfahren, so dass der folgende Satz auch dafür Anwendung finden kann. Man beachte dazu Bemerkung 1.2.

Satz 1.5

Die Matrix A sei symmetrisch und positiv definit. Dann ist die Matrix B aus Gleichung (10) regulär (für jedes $\omega \neq 0$). Falls $\omega \in (0, 2)$, dann gilt

$$\rho(M(\omega)) < 1$$

und umgekehrt.

Beweis. Da A positiv definit ist, gilt $e_i^T A e_i = a_{ii} > 0$ für $i = 1, \dots, n$. Also ist D positiv definit und damit B regulär für alle $\omega \neq 0$.

Sei $\lambda \in \mathbb{C}$ ein Eigenwert von $M(\omega)$ und $z \in \mathbb{C}^n$ ein zugehöriger Eigenvektor. Mit

$$A = A - M(\omega)^T AM(\omega) + M(\omega)^T AM(\omega)$$

sowie (unter Berücksichtigung der Definition von M und von $A = A^T$ und $R = L^T$)

$$\begin{aligned} A - M(\omega)^T AM(\omega) &= A - (I - B^{-1}A)^T A (I - B^{-1}A) \\ &= AB^T A + AB^{-1}A - AB^{T-1}AB^{-1}A \\ &= (B^{-1}A)^T (B + B^T - A)(B^{-1}A) \\ &= (B^{-1}A)^T \left(L + \frac{1}{\omega}D + L^T + \frac{1}{\omega}D - L - D - L^T \right) (B^{-1}A) \\ &= (B^{-1}A)^T \left(\frac{2-\omega}{\omega}D \right) (B^{-1}A) \end{aligned}$$

ergibt sich daher

$$z^H Az = (AB^{T-1}z)^H \left(\frac{2-\omega}{\omega}D \right) (B^{-1}Az) + z^H M(\omega)^T AM(\omega)z.$$

Da die Diagonalmatrix D positiv-definit ist, besitzt $\frac{2-\omega}{\omega}D$ dieselbe Eigenschaft für $\omega \in (0, 2)$. Es folgt

$$(AB^{T-1}z)^H \left(\frac{2-\omega}{\omega}D \right) (B^{-1}Az) > 0$$

und damit

$$|\lambda| < 1. \tag{13}$$

Also gilt $\rho(M(\omega)) = \max_{i=1, \dots, n} |\lambda_i| < 1$, sofern $\omega \in (0, 2)$. Die Umkehrung der Aussage ergibt sich aus dem Satz von KAHAN (\nearrow Übungsaufgabe). \square

Es ist nun naheliegend, dass man $\omega \in (0, 2)$ so wählen möchte, dass $\rho(\omega)$ möglichst klein ist. Dies ist in bestimmten Fällen näherungsweise möglich, ansonsten beschränkt man sich auf geeignete Heuristiken zur Wahl von ω . Auf der Fixpunktiteration Gleichung (2) beruhende Verfahren werden häufig auch Splitting-Methoden genannt. Es gibt noch weitere solche Verfahren, auf die hier nicht eingegangen wird.

2. Krylov-Raum-basierte Verfahren

2.1. Krylov-Räume

2.2. Basisalgorithmen zur Lösung von $Ax = b$

2.3. Das CG-Verfahren

2.4. Fehlerverhalten des CG-Verfahrens

2.5. Vorkonditionierung

2.6. Ausblick und Anmerkungen

Kapitel III

Numerische Behandlung von Anfangswertaufgaben

1. Aufgabe und Lösbarkeit

Es seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, eine stetige Funktion $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $y^0 \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Unter Anfangswertaufgabe (AWA) 1. Ordnung versteht man das Problem, eine stetige Funktion $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ zu ermitteln, so dass y auf (a, b) stetig differenzierbar ist und

$$y'(x) = f(x, y(x)) \quad \text{mit} \quad y(a) = y^0$$

für alle $x \in [a, b]$ gilt. Eine solche Funktion wollen wir Lösung der AWA nennen. Kürzer schreibt man für die AWA auch

$$y' = f(x, y) \quad \text{mit} \quad y(a) = y^0 \tag{1}$$

Die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung einer AWA hängen von den Eingangsinformationen a, b, f und y^0 ab. Es gilt folgender Satz zur (globalen) Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung auf $[a, b]$:

Satz 1.1 (Picard-Lindelöf: eine globale Version)

Es sein $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig und es existiere $L > 0$, so dass

$$\|f(x, y) - f(x, z)\| \leq L\|y - z\| \quad \forall (x, y), (x, z) \in [a, b] \times \mathbb{R}^m \tag{2}$$

Dann besitzt Gleichung (1) für jedes $y^0 \in \mathbb{R}^m$ eine eindeutige Lösung.

Die Bedingung Gleichung (2) ist eine globale Lipschitz-Bedingung an f bezüglich der zweiten Veränderlichen. Es ist leicht, AWA anzugeben, in denen diese Bedingung nicht erfüllt ist und keine Lösung in ganz $[a, b]$ existiert, zum Beispiel

$$y' = y^2 \quad \text{mit} \quad y(0) = 1$$

Dafür erhält man für beliebige $x, y, z \in \mathbb{R}$

$$|f(x, y) - f(x, z)| = |y^2 - z^2| = |y + z||y - z|$$

das heißt die Bedingung Gleichung (2) kann in diesem Beispiel (global) nicht gelten. Die Lösung der AWA lautet $y(x) = -1/x - 1$ für $x \in [0, 1)$. Für Intervalle $[0, b]$ mit $b \geq 1$ existiert keine Lösung. Eine Abschwächung der Lipschitz-Bedingung Gleichung (2) gestattet folgender

Satz 1.2 (Picard-Lindelöf: eine lokale Version)

Es sei $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig und zu jeder kompakten Menge $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^m$ existiere $L_Y > 0$, so dass

$$\|f(x, y) - f(x, z)\| \leq L_Y \|y - z\| \quad \forall (x, y), (x, z) \in [a, b] \times \mathcal{Y}$$

Dann gibt es für jedes $y^0 \in \mathbb{R}^m$ ein Teilintervall $\mathcal{I} \subseteq [a, b]$ mit $a \in \mathcal{I}$, so dass die AWA Gleichung (1) auf \mathcal{I} eine eindeutige Lösung besitzt.

Seien $g: [a, b] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und $\eta \in \mathbb{R}^n$. Jede explizite Differentialgleichung n -ter Ordnung

$$y^{(n)} = g(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)})$$

mit den Anfangsbedingungen

$$y(a) = \eta_1, \quad y'(a) = \eta_2, \quad y''(a) = \eta_3, \quad \dots \quad y^{(n-1)}(a) = \eta_n$$

kann mittels Substitution

$$y_1 = y, \quad y_2 = y', \quad y_3 = y'', \quad \dots \quad y_n = y^{(n-1)}$$

in eine AWA 1. Ordnung überführt werden:

$$\begin{pmatrix} y_1' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ \vdots \\ y_n \\ g(x, y_1, \dots, y_n) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} y_1(a) \\ \vdots \\ y_n(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix}$$

2. Einschrittverfahren

2.1. Grundlagen

Anstelle der gesuchten Lösungsfunktion $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ einer AWA ist man an möglichst guten Näherungen $y^k \in \mathbb{R}^m$ ($k = 0, 1, 2, \dots, N$) für die Funktionswerte $y(x_k) \in \mathbb{R}^m$ der Funktion y an Gitterpunkten $x_k \in [a, b]$ interessiert. Auf Grundlage der Paare (x_k, y^k) ($k = 0, 1, \dots, N - 1$) ist es auch möglich, eine Näherungsfunktion y zu erzeugen (etwa durch Interpolation).

Einschrittverfahren bilden eine Klasse von Verfahren, die Näherungen y^k zu erzeugen. Das Gitter $\{x_0, \dots, x_N\}$ ist so gewählt, dass

$$x_0 = a < x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = b$$

Außerdem setzen wir

$$h_k = x_{k+1} - x_k \quad \text{für } k = 0, \dots, N - 1$$

und bezeichnen h_k als Schrittweite. Falls $h = h_0 = \dots = h_{N-1}$, so heißen die Gitterpunkte bzw. das Gitter gleichabständig oder äquidistant.

Ein Verfahren zur Erzeugung einer Folge y^0, \dots, y^N heißt Einschrittverfahren für das AWA Gleichung (1), wenn

$$y^{k+1} = y_k + h_k \Phi(x_k, y_k, y^{k+1}, h_k) \quad \text{für } k = 0, \dots, N - 1 \quad (1)$$

Dabei bezeichnet $\Phi(x, y, z, h)$ den Funktionswert einer Verfahrensfunktion

$$\Phi : [a, b] \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \times (0, b - a] \rightarrow \mathbb{R}^m$$

die das jeweilige Einschrittverfahren definiert. Man beachte, dass y^0 bereits durch die Anfangsbedingung in Gleichung (1) gegeben ist. Ein Einschrittverfahren heißt implizit, falls Φ tatsächlich von z abhängt. Dann ist zur Bestimmung von y^{k+1} aus Gleichung (1) die Lösung eines im Allgemeinen nichtlinearen Gleichungssystems erforderlich. Falls Φ nicht von z abhängt, heißt das Einschrittverfahren explizit. Das explizite EULER-Verfahren (auch Polygonzugverfahren genannt) ist gegeben durch

$$\Phi(x, y, z, h) = f(x, y) \quad (2)$$

das heißt

$$y^{k+1} = y^k + h_k f(x_k, y^k)$$

Für das implizite EULER-Verfahren gilt die Vorschrift

$$y^{k+1} = y^k + h_k f(x_k + h_k, y^{k+1})$$

Um die Güte der Näherungen y^k zu beurteilen, untersuchen wir zunächst den lokalen Diskretisierungsfehler eines Einschrittverfahrens.

2.2. Lokaler Diskretisierungsfehler und Konsistenz

Definition 2.1 (lokaler Diskretisierungsfehler)

Seien $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ Lösung der Differentialgleichung $y' = f(x, y)$ und Φ die Verfahrensfunktion eines Einschrittverfahrens. Für $x \in [a, b)$ und $h > 0$ mit $x + h \leq b$ heißt

$$\Delta(x, h) = y(x + h) - \left(y(x) + h\Phi(x, y(x), y(x + h), h) \right) \quad (3)$$

lokaler Diskretisierungsfehler und

$$\frac{\Delta(x, h)}{h} = \frac{y(x + h) - y(x)}{h} - \Phi(x, y(x), y(x + h), h) \quad (4)$$

relativer lokaler Diskretisierungsfehler des Einschrittverfahrens.

Der lokale Diskretisierungsfehler gibt also die Abweichung zwischen exakter Lösung $y(x + h)$ an der Stelle $x + h$ und der Näherung an dieser Stelle an, wobei angenommen wird, dass die Näherung unter Verwendung der exakten Lösung $y(x)$ (und ggf. $y(x + h)$) berechnet wird. Die Bezeichnung relativer Diskretisierungsfehler ist bezüglich der Schrittweite h zu verstehen.

Definition 2.2 (konsistent, Konsistenzordnung)

Ein Einschrittverfahren heißt konsistent zur Differentialgleichung $y' = f(x, y)$, wenn

$$\lim_{h \downarrow 0} \left\| \frac{\Delta(x, h)}{h} \right\| = 0 \quad \forall x \in [a, b)$$

für jede Lösung $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ der Differentialgleichung gilt. Gibt es außerdem $p \geq 1$, $M > 0$, $\tilde{h} > 0$, so dass

$$\left\| \frac{\Delta(x, h)}{h} \right\| \leq Mh^p \quad \forall (x, h) \in [a, b) \times (0, \tilde{h}) \text{ mit } x + h \leq b$$

für jede Lösung $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ der Differentialgleichung gilt, so hat das Einschrittverfahren (für diese Differentialgleichung) die Konsistenzordnung p .

Satz 2.3

Sei $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar. Dann hat das explizite EULER-Verfahren die Konsistenzordnung 1.

Beweis. Mit Gleichung (2) folgt

$$\Delta(x, h) = y(x + h) - y(x) - hf(x, y(x))$$

Da y die Differentialgleichung $y' = f(x, y)$ löst und f stetig differenzierbar ist, muss y zweimal stetig differenzierbar sein. Aus der TAYLOR-Formel erhält man für $i \in \{1, \dots, m\}$

$$\begin{aligned} \Delta(x, h)_i &= y'_i(x)h + \frac{1}{2}y''_i(\xi_i(x, h))h^2 - hf_i(x, y(x)) \\ &= \frac{1}{2}y''_i(\xi_i(x, h))h^2 \end{aligned}$$

für ein $\xi_i(x, h) \in (x, x + h)$. Die Stetigkeit von y'' auf $[a, b]$ und Division durch h liefert die Behauptung mit $M = \frac{1}{2} \max_{1 \leq i \leq m} \max_{\xi \in [a, b]} \|y''_i(\xi)\|$ und $\tilde{h} = b - a$. \square

2.3. Konvergenz von Einschrittverfahren

Zum Gitter $G = \{x_0, \dots, x_N\} \subset [a, b]$ mit $x_0 = a$ und $x_N = b$ seien $y^0, \dots, y^N \in \mathbb{R}^m$ durch ein Einschrittverfahren erzeugt. Weiter bezeichne $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ die eindeutige Lösung der AWA Gleichung (1). Dann seien

$$e(x_k) = y(x_k) - y^k$$

$$e(G) = \max_{x \in G} \|e(x)\|$$

sowie

$$h_{\max}(G) = \max_{k=0, \dots, N-1} h_k$$

definiert.

Definition 2.4 (konvergent)

Die AWA Gleichung (1) besitzt die eindeutige Lösung $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$. Ein Einschrittverfahren für diese AWA heißt dann konvergent, falls

$$\lim_{l \rightarrow \infty} e(G_l) = 0$$

für alle Gitterfolgen $\{G_t\}$ gilt, für die $\lim_{t \rightarrow \infty} h_{\max}(G_t) = 0$. Gibt es außerdem $p \geq 1$, $C > 0$, $\tilde{h} > 0$, so dass

$$e(G) \leq C \cdot h_{\max}(G)^p$$

für jedes Gitter mit $h_{\max}(G) \leq \tilde{h}$, so hat das Einschrittverfahren für die gegebene AWA die Konvergenzordnung p .

Lemma 2.5 (diskretes Grönwall'sches Lemma)

Falls die Zahlenfolgen $\{\alpha_k\}$, $\{\beta_k\}$, $\{v_k\} \subset [0, \infty)$ den Bedingungen

$$v_0 = 0 \quad \text{und} \quad v_{k+1} = (1 + \alpha_k)v_k + \beta_k \quad \forall k = 0, \dots, N-1$$

genügen, dann folgt

$$v_{k+1} \leq \sum_{i=0}^k \beta_i \cdot \exp\left(\sum_{j=i+1}^k \alpha_j\right) \quad \text{für } k = 0, \dots, N-1$$

gilt zusätzlich $\alpha_k = \alpha > 0$ und $\beta_k = \beta > 0$ für jedes $k = 0, \dots, N-1$, dann folgt

$$v_k \leq \frac{\beta}{\alpha} (\exp(k\alpha) - 1) \quad \text{für } k = 0, \dots, N-1$$

Beweis. Zum Beispiel durch vollständige Induktion (vgl. Übungsaufgabe). □

In der Literatur findet man für vorstehende und ähnliche Aussagen die Bezeichnung *diskretes GRÖNWALL'sches Lemma*.

Satz 2.6

Die AWA Gleichung (1) besitze die eindeutige Lösung $y: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^m$. Ein Einschrittverfahren mit der Verfahrensfunktion Φ habe für die Differentialgleichung $y' = f(x, y)$ die Konsistenzordnung p . Es gebe ferner $L_\Phi > 0$ und $H > 0$, so dass die Lipschitz-Bedingung

$$\|\Phi(x, y, z, h) - \Phi(x, \tilde{y}, \tilde{z}, h)\| \leq L_\Phi(\|y - \tilde{y}\| + \|z - \tilde{z}\|) \quad (5)$$

für alle $(x, y, z, h), (x, \tilde{y}, \tilde{z}, h) \in [a, b] \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \times (0, H]$ gilt. Dann besitzt das Einschrittverfahren die Konvergenzordnung p .

Beweis. Entsprechend Gleichung (1) und Gleichung (3) gilt

$$y^{k+1} = y^k + h_k \Phi(x_k, y^k, y^{k+1}, h_k)$$

und

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + h_k \Phi(x_k, y(x_k), y(x_k + h_k), h_k) + \Delta(x_k, h_k)$$

also folgt

$$\begin{aligned} e(x_{k+1}) &= y(x_{k+1}) - y^{k+1} \\ &= y(x_k) - y^k + h_k (\Phi(x_k, y(x_k), y(x_k + h_k), h_k) - \Phi(x_k, y^k, y^{k+1}, h_k)) + \Delta(x_k, h_k) \end{aligned}$$

und weiter mit Gleichung (5) für $0 < h_k \leq \tilde{h} = \min\{H, \frac{1}{2L_\Phi}\}$

$$\|e(x_{k+1})\| \leq \|e(x_k)\| + \|\Delta(x_k, h_k)\| + h_k L_\Phi (\|e(x_k)\| + \|e(x_{k+1})\|)$$

Durch Umstellen und Beachtung der Konsistenzordnung ergibt sich

$$\|e(x_{k+1})\| \leq \frac{1 + h_k L_\Phi}{1 - h_k L_\Phi} \|e(x_k)\| + \frac{M}{1 - h_k L_\Phi} h_k^{p+1} \quad (6)$$

Mit $\alpha_k = 4h_k L_\Phi$ hat man (wegen $2h_k L_\Phi \leq 1$)

$$\frac{1 + h_k L_\Phi}{1 - h_k L_\Phi} = 1 + \frac{2h_k L_\Phi}{1 - h_k L_\Phi} \leq 1 + \alpha_k$$

Setzt man weiter $v_k = \|e(x_k)\|$ und $\beta_k = 2Mh_k^{p+1}$, so erhält man aus Gleichung (6)

$$v_{k+1} \leq (1 + \alpha_k)v_k + \beta_k \quad k = 0, \dots, N-1$$

Nach Lemma 2.5 folgt daraus (beachte $v_0 = \|e(x_0)\| = \|y(x_0) - y^0\| = 0$)

$$v_{k+1} \leq \left(\sum_{i=0}^k \beta_i \right) \exp \left(\sum_{i=0}^k \alpha_i \right) \quad \text{für } k = 0, \dots, N-1$$

und damit

$$\begin{aligned} \|e(x_{k+1})\| &= v_{k+1} \leq 2M \left(\sum_{i=0}^k h_i^{p+1} \right) \exp \left(4L_\Phi \sum_{i=0}^k h_i \right) \\ &\leq 2M h_{\max}(G)^p (x_{k+1} - x_0) \exp(4L_\Phi (x_{k+1} - x_0)) \end{aligned}$$

für $k = 0, \dots, N - 1$ sowie

$$e(G) \leq 2M(b - a) \exp(4L_\Phi(b - a))h_{\max}(G)^p$$

Also besitzt das Einschrittverfahren die Konvergenzordnung p . □

2.4. Stabilität gegenüber Rundungsfehlern

Wir betrachten das Einschrittverfahren Gleichung (1) für ein gleichabständiges Gitter ($h_k = h$) bei exakter Rechnung, das heißt

$$y^{k+1} = y^k + h\Phi(x_k, y^k, y^{k+1}, h) \quad \text{für } k = 0, \dots, N - 1 \quad (7)$$

Weiter beschreibe

$$\tilde{y}^0 = y^0 \quad \text{und} \quad \tilde{y}^{k+1} = \tilde{y}^k + h\Phi(x_k, \tilde{y}^k, \tilde{y}^{k+1}, h) + \varepsilon_k \quad \text{für } k = 0, \dots, N - 1 \quad (8)$$

ein gestörtes Verfahren, das heißt $\tilde{y}^1, \dots, \tilde{y}^N$ sind die tatsächlich im Computer berechneten Größen.

Satz 2.7

Sei $y^0 \in \mathbb{R}^m$ gegeben und y^1, \dots, y^N sowie $\tilde{y}^1, \dots, \tilde{y}^N$ entsprechend Gleichung (7) und Gleichung (8) berechnet, wobei $\|\varepsilon_k\| < \varepsilon$ für alle $k = 0, \dots, N - 1$ mit einem $\varepsilon > 0$ gelte. Außerdem sei für gewisse $L_\Phi, H > 0$ die Lipschitz-Bedingung Gleichung (5) für alle $(x, y, z, h), (x, \tilde{y}, \tilde{z}, h) \in [a, b] \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \times (0, H]$ erfüllt. Dann gibt es $\tilde{h} > 0$, so dass

$$\|y^k - \tilde{y}^k\| \leq \frac{\varepsilon}{2hL_\Phi} (\exp(4L_\Phi(x_k - a)) - 1) \quad \text{für } k = 0, \dots, N$$

falls $0 > h < \tilde{h}$.

Beweis. Für $z^k = y^k - \tilde{y}^k$ folgt

$$\begin{aligned} z^{k+1} &= y^{k+1} - \tilde{y}^{k+1} \\ &= y^k - \tilde{y}^k + h(\Phi(x_k, y^k, y^{k+1}, h) - \Phi(x_k, \tilde{y}^k, \tilde{y}^{k+1}, h)) - \varepsilon_k \end{aligned}$$

und weiter

$$\|z^{k+1}\| \leq \|z^k\| + hL_\Phi(\|z^k\| + \|z^{k+1}\|) + \varepsilon$$

Mit $v_k = \|z^k\|$, $\alpha = 4hL_\Phi$ und $\beta = 2\varepsilon$ hat man für $0 < h \leq \tilde{h} = \min H, \frac{1}{2L_\Phi}$ die Differenzenungleichung

$$v_{k+1} \leq (1 + \alpha)v_k + \beta$$

für $k = 0, \dots, N - 1$. Lemma 2.5 liefert

$$\begin{aligned} \|y^k - \tilde{y}^k\| &= \|z^k\| = v_k \\ &\leq \frac{\varepsilon}{2hL_\Phi} (\exp(k4hL_\Phi) - 1) \\ &= \frac{\varepsilon}{2hL_\Phi} (\exp(4L_\Phi(x_k - a)) - 1) \end{aligned} \quad \square$$

Selbst wenn die Abschätzung in Satz 2.7 nicht scharf ist, muss man damit rechnen, dass der Rundungs-

fehler wie $1/h$ wächst. Der Gesamtfehler eines Einschrittverfahrens an einer Stelle x_k setzt sich aus dem Verfahrensfehler $\|y(x_k) - y^k\|$ und dem Rundungsfehler $\|y^k - \tilde{y}^k\|$ zusammen. Für ein Verfahren der Konvergenzordnung p ergibt sich also (bei äquidistantem Gitter) für den Gesamtfehler

$$\begin{aligned}\|y(x_k) - \tilde{y}^k\| &\leq \|y(x_k) - y^k\| + \|y^k - \tilde{y}^k\| \\ &\leq Ch^p + \tilde{C} \frac{\varepsilon}{h}\end{aligned}$$

Minimiert man die rechte Seite der Abschätzung in Abhängigkeit von h , so folgt, dass man h nicht kleiner als $\sim \sqrt[p+1]{\varepsilon}$ wählen sollte. Setzt man speziell $h = \sqrt[p+1]{\varepsilon}$, dann folgt

$$Ch^p + \tilde{C} \frac{\varepsilon}{h} = C \exp\left(\frac{p}{p+1}\right) + \tilde{C} \exp\left(\frac{p}{p+1}\right)$$

Durch Erhöhung der Konvergenzordnung p kann man also versuchen, mit einer größeren Schrittweite einen kleineren Gesamtfehler zu erreichen. Ein weiterer Grund für das Interesse an Verfahren mit höherer Konvergenzordnung liegt in der Möglichkeit, die Gesamtzahl der erforderlichen Funktionswertbestimmungen der Funktion f zu verringern.

2.5. Runge-Kutta-Verfahren

Die Klasse der RUNGE-KUTTA-Verfahren (RKV) ist eine Möglichkeit, Einschrittverfahren mit höheren Konsistenz- bzw. Konvergenzordnungen zu konstruieren. Betrachten wir folgende Idee, eine Näherung y^{k+1} für $y(x_{k+1})$ aus einer Näherung y^k für $y(x_k)$ zu erzeugen.

Wegen $y' = f(x, y)$ liefert der Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx \quad (9)$$

Approximiert man das Integral durch eine gewichtet Summe von Funktionswerten (vgl. NEWTON-COTES Formeln), so ergibt sich die folgende Verfahrensidee

$$y^{k+1} = y^k + h_k \sum_{i=1}^s c_i f(s_i, y(s_i)) \quad (10)$$

wobei c_1, \dots, c_s die Gewichte und s_1, \dots, s_s Stützstellen bezeichnen. Zur Darstellung der Stützstellen sei

$$s_i = x_k + \alpha_i h_k \quad \text{für } i = 1, \dots, s$$

mit $\alpha_1 = 0$ und den Parametern $\alpha_2, \dots, \alpha_s$. Da $y(s_i)$ unbekannt ist, ersetzt man $f(s_i, y(s_i))$ zunächst durch einen Parameter k^i , wobei $k^1 = f(x_k, y^k) \approx f(x_k, y(x_k))$ gesetzt wird. Um $y(s_i)$ und damit $f(s_i, y(s_i))$ zu approximieren, verwendet man (bei expliziten RKV) den Ansatz

$$y(s_i) \approx y^k + h_k \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k^j$$

mit Parametern β_{ij} . Bei sogenannten impliziten RKV läuft die Summation von $j = 1$ bis $j = s$ (und mindestens ein β_{ij} mit $j \geq 1$ ist ungleich 0). Für die Parameter α_i , k^i , β_{ij} ergibt sich (im expliziten

Fall) somit das folgende Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
k^1 &= f(x_k, y^k) \\
k^2 &= f(x_k + \alpha_2 h_k, y^k + h_k \beta_{21} k^1) \\
k^3 &= f(x_k + \alpha_3 h_k, y_k + h_k (\beta_{31} k^1 + \beta_{32} k^2)) \\
&\vdots \\
k^s &= f(x_k + \alpha_s h_k, y^k + h_k (\beta_{s1} k^1 + \dots + \beta_{s,s-1} k^{s-1}))
\end{aligned} \tag{11}$$

Ersetzt man in Gleichung (10) die unbekannten Vektoren $f(s_i, y(s_i))$ durch die Näherungen k^i , so hat man das s -stufige RUNGE-KUTTA-Verfahren

$$y^{k+1} = y^k + h_k \sum_{i=1}^s c_i k^i \tag{12}$$

mit den Parametern c_1, \dots, c_s . Die Verfahrensfunktion eines expliziten RKV ist damit gegeben durch

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^s c_i f \left(x + \alpha_i h_i y + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k^j(x, y, h) \right)$$

wobei $k^i = k^i(x, y, h)$ entsprechend Gleichung (11) verwendet wird (die bei expliziten Verfahren nicht vorhandene Abhängigkeit der Funktion Φ von z wurde weggelassen). Zum Beispiel ist das explizite EULER-Verfahren $y^{k+1} = y^k + h_k f(x_k, y^k)$ ein einstufiges RKV mit $c_1 = 1$.

Satz 2.8

Sei $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetig differenzierbar. Ein explizites RKV Gleichung (12) mit

$$\sum_{i=1}^s c_i = 1 \tag{13}$$

hat dann (mindestens) die Konsistenzordnung 1.

Beweis. Sei $x \in \mathbb{R}$ fest gegeben. Weiter sei $\eta = y(x)$. Da f stetig differenzierbar ist, gibt es $L_f > 0$, so dass

$$\|f(x, \eta) - f(x + \delta x, \eta + \delta \eta)\| \leq L_f (|\delta x| + \|\delta \eta\|)$$

für alle $(\delta x, \delta \eta) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m$ mit $|\delta x| + \|\delta \eta\| \leq 1$. Induktiv folgt damit, dass $\tilde{h} > 0$ existiert, so dass

$$\|k^i(x, \eta, h) - f(x, \eta)\| = \mathcal{O}(h) \quad \forall h \in [0, \tilde{h}]$$

für alle $i = 1, \dots, s$. Also gilt wegen Gleichung (13)

$$\|\Phi(x, \eta, h) - f(x, \eta)\| = \mathcal{O}(h) \quad \forall h \in [0, \tilde{h}]$$

Daraus erhält man (da f in $[a, b]$ stetig differenzierbar und somit y zweimal stetig differenzierbar ist, vgl. Beweis

zu Satz 2.3)

$$\left\| \frac{\Delta(x, h)}{h} \right\| = \left\| \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - f(x, y(x)) + f(x, y(x)) - \Phi(x, y(x), h) \right\| \leq \mathcal{O}(h) \quad \square$$

Satz 2.9

Sei $f: [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ zweimal stetig differenzierbar. Ein explizites RKV Gleichung (12) mit Gleichung (13),

$$\sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} = \alpha_i \quad \text{für } i = 2, \dots, s \quad (14)$$

und

$$\sum_{i=2}^s c_i \alpha_i = \frac{1}{2} \quad (15)$$

hat dann (mindestens) die Konvergenzordnung 2.

Beweis. Übungsaufgabe □

Verwendet man zur Approximation des bestimmten Integrals in Gleichung (9) die Trapezregel, das heißt

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) \, dx \approx \frac{1}{2} \left(f(x_k, y(x_k)) + f(x_k + h_k, y(x_k + h_k)) \right)$$

und ersetzt man $f(x_k, y(x_k))$ und $f(x_k + h_k, y(x_k + h_k))$ im RKV durch $k^1 = f(x_k, y^k)$ bzw. $k^2 = f(x_k + h_k, y^k + h_k k^1)$, dann ergibt sich ein 2-stufiges RKV mit

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_2 = 1, \quad \beta_{21} = 1$$

das heißt die Bedingungen Gleichung (13), Gleichung (14) und Gleichung (15) sind erfüllt. Also besitzt dieses explizite RKV die Konsistenzordnung 2. es ist als Verfahren von HEUN bekannt.

Verwendet man zur Quadratur des Integrals in Gleichung (9) die SIMPSON-Regel, das erhält man ein 4-stufiges RKV mit folgenden Parametern (im sogenannten BUTCHER-Schema)

0		0			
α_2	β_{21}	$1/2$	$1/2$		
α_3	$\beta_{31} \quad \beta_{32}$	$1/2$	$0 \quad 1/2$		
α_4	$\beta_{41} \quad \beta_{42} \quad \beta_{43}$	1	$0 \quad 0 \quad 1$		
	$c_1 \quad c_2 \quad c_3 \quad c_4$		$1/6 \quad 1/3 \quad 1/3 \quad 1/6$		

Dieses Verfahren hat die Konsistenzordnung 4 (sofern f hinreichend glatt).

3. Mehrschrittverfahren

3.1. Grundlagen

Bei Mehrschrittverfahren (MSV) wird eine Näherung y^{k+l} für $y(x_{k+l})$ in bestimmter Weise aus l vorhergehenden Näherungen $y^k, y^{k+1}, \dots, y^{k+l-1}$ bestimmt. Um dies genau zu beschreiben, seien zusätzlich zu y^0 (aus AWA) die Startwerte $y^1, \dots, y^{l-1} \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Im Folgenden wollen wir von einem äquidistanten Gitter $G_h = \{x_0, \dots, x_N\}$ mit Schrittweite $h = \frac{b-a}{N}$ ausgehen. Ein lineares Mehrschrittverfahren mit l Schritten erzeugt dann für $k = 0, \dots, N-l$ die Iterierte y^{k+l} aus $y^k, y^{k+1}, \dots, y^{k+l-1}$ entsprechend

$$\sum_{\nu=0}^l \alpha_\nu y^{k+\nu} = h \sum_{\nu=0}^l \beta_\nu f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu}) \quad (1)$$

wobei α_ν, β_ν ($\nu = 0, \dots, l$) reelle Parameter sind mit $\alpha_l \neq 0$ und $|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0$. Falls $\beta_l = 0$, dann spricht man von einem expliziten (sonst impliziten) linearen MSV. Die MSV Gleichung (1) heißen linear, da die rechte Seite von Gleichung (1) linear von den Funktionswerten $f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu})$ abhängt. Einem linearen MSV ordnet man sein erstes und zweites charakteristisches Polynom $\rho : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ und $\sigma : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ zu durch

$$\rho(z) = \sum_{\nu=0}^l \alpha_\nu z^\nu \quad \text{und} \quad \sigma(z) = \sum_{\nu=0}^l \beta_\nu z^\nu \quad \forall z \in \mathbb{C} \quad (2)$$

Das lineare MSV nach ADAMS-BASHFORD (1883) geht von

$$y(x_{k+l}) - y(x_{k+l-1}) = \int_{x_{k+l-1}}^{x_{k+l}} f(x, y(x)) \, dx \quad (3)$$

aus und approximiert den Integranden $f(x, y(x))$ durch ein Interpolationspolynom, nämlich

$$\sum_{\nu=0}^{l-1} L_\nu(x) f(x_{k+\nu}, y(x_{k+\nu})) \quad (4)$$

Dabei bezeichnen $L_\nu : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ für $\nu = 0, \dots, l-1$ die LAGRANGE-Polynome mit

$$L_\nu(x) = \prod_{\substack{i=k \\ i \neq k+\nu}}^{k+l-1} \frac{x - x_i}{x_{k+\nu} - x_i} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}$$

Definiert man β_ν durch

$$\int_{x_{k+l-1}}^{x_{k+l}} L_\nu(x) \, dx = h \beta_\nu \quad (5)$$

so liefert die Approximation von Gleichung (3) die Näherungsformel

$$\begin{aligned} y^{k+l} - y^{k+l-1} &= \sum_{\nu=0}^{l-1} \left(\int_{x_{k+l-1}}^{x_{k+l}} L_\nu(x) \, dx \right) f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu}) \\ &= h \sum_{\nu=0}^{l-1} \beta_\nu f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu}) \end{aligned}$$

also ein explizites l -schrittiges lineares MSV mit $\alpha_l = 1$, $\alpha_{l-1} = -1$ und den durch Gleichung (5) definierten $\beta_0, \dots, \beta_{l-1}$ sowie $\beta_l = 0$.

Beim linearen MSV nach ADAMS-MOULTON (1926) wird die Summation in Gleichung (4) von $\nu = 0$ bis $\nu = l$ erstreckt und dann analog vorgegangen. Dies ergibt das implizite lineare MSV

$$y^{k+l} - y^{k+l-1} = h \sum_{\nu=0}^l \beta_\nu f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu}) \quad (6)$$

Es erfolgt die (ggf. näherungsweise) Lösung eines im Allgemeinen nichtlinearen Gleichungssystems für y^{k+l} und kann mit Hilfe des Prädiktor-Korrektor-Prinzips erfolgen. Dabei ermittelt man mit Hilfe eines expliziten linearen MSV (Prädiktor) eine erste Näherung ζ^0 für y^{k+l} und verbessert diese dann mit einem (näherungsweisen) Schritt eines impliziten linearen MSV (Korrektor). Zum Beispiel bestimme man ζ^0 mit ADAMS-BASHFORD, das heißt

$$\zeta^0 = y^{k+l} + h \sum_{\nu=0}^{l-1} \beta_\nu f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu})$$

Danach wird eine Näherungslösung von Gleichung (6) (ADAMS-MOULTON) etwa mittels Fixpunktiteration ermittelt

$$\zeta^j = y^{k+l-1} + h\beta_l^C f(x_{k+l}, \zeta^{j-1}) + h \sum_{\nu=0}^{l-1} \beta_\nu^C f(x_{k+\nu}, y^{k+\nu})$$

die für ein vorgegebenes $j \geq 1$ abgebrochen wird. Die Bezeichnung β_ν^C dient der Unterscheidung von den im Prädiktor verwendeten Parametern β_ν . Für $j = 1$ ergibt sich ein nichtlineares MSV (ADAMS-BASHFORD-MOULTON-Verfahren). Für $j \rightarrow \infty$ kann unter bestimmten Voraussetzungen für hinreichend kleine $h > 0$ die Konvergenz der Folge $\{\zeta^j\}$ gegen den eindeutigen Fixpunkt y^{k+l} gezeigt werden.

Eine Klasse von impliziten linearen MSV (sogenannte Backward Differentiation Formulas bzw. BDF-Verfahren) erhält man aus der Idee $y'(x_{k+l}) = f(x_{k+l}, y(x_{k+l}))$ durch $1/h \sum_{\nu=0}^l \alpha_\nu y(x_{k+\nu})$ (verallgemeinerte Sekantensteigung) zu approximieren. Man hat dann ein lineares MSV der Form

$$\sum_{\nu=0}^l \alpha_\nu y^{k+\nu} = hf(x_{k+l}, y^{k+l})$$

3.2. Konsistenz- und Konvergenzordnung für lineare MSV

4. A-Stabilität

5. Einblick: Steife Probleme

6. Ausblick

Anhang

Literaturverzeichnis

- [1] BIERBAUM, F., PREUSS, W., AND WENISCH, G. Lehr- und Übungsbuch numerische Mathematik. Fachbuchverlag Leipzig im Carl Hanser Verlag, 2001.
- [2] BOLLHÖFER, M., AND MEHRMANN, V. Numerische Mathematik, 1 ed. Vieweg Teubner Verlag, 2004.
- [3] BÄRWOLFF, G. Numerik für Ingenieure, Physiker und Informatiker. Springer Spektrum, 2016.
- [4] FREUND, R. W., AND HOPPE, R. H. Stoer, Bulirsch: Numerische Mathematik 1. Springer, 2007.
- [5] HANKE-BOURGEOIS, M. Grundlagen der numerischen Mathematik und des wissenschaftlichen Rechnens. Vieweg Teubner, 2009.
- [6] HESTENES, M. R., AND STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. NBS, 1952.
- [7] KANZOW, C. Numerik linearer Gleichungssysteme: direkte und iterative Verfahren. Springer, 2005.
- [8] KNORRENSCHILD, M. Numerische Mathematik. Fachbuchverlag Leipzig im Carl Hanser Verlag, 2017.
- [9] LANCZOS, C. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. Journal of Research of the National Bureau of Standards 49, 1 (1952), 33–53.
- [10] LIN, C.-J., AND MORÉ, J. J. Incomplete cholesky factorizations with limited memory. SIAM Journal on Scientific Computing 21, 1 (1999), 24–45.
- [11] MEISTER, A. Numerik linearer Gleichungssysteme: eine Einführung in moderne Verfahren; mit MATLAB-Implementierungen von C. Vömel. Springer Spektrum, 2015.
- [12] PAIGE, C. C., AND SAUNDERS, M. A. Solution of sparse indefinite systems of linear equations. SIAM Journal on Numerical Analysis 12, 4 (1975), 617–629.
- [13] QUARTERONI, A., SACCO, R., AND SALERI, F. Numerische Mathematik 1. Springer, 2002.
- [14] ROOS, H.-G., AND SCHWETLICK, H. Numerische Mathematik. Teubner, 1999.
- [15] SAAD, Y., AND SCHULTZ, M. Gmres: A generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing 7, 3 (1986), 856–869.
- [16] SCHABACK, R., AND WENDLAND, H. Numerische Mathematik. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [17] SCHWARZ, H. R. Numerische Mathematik. Teubner, 1997.
- [18] STEINBACH, O. Losungsverfahren für lineare Gleichungssysteme: Algorithmen und Anwendungen. Friedrich Vieweg und Son, 2005.
- [19] STOER, J., AND BULIRSCH, R. Numerische Mathematik 2. Springer, 2005.
- [20] STREHMEL, K., WEINER, R., AND PODHAISKY, H. Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen. Vieweg und Teubner, 2012.

Index

- BUTCHER-Schema, [25](#)
- EULER-Verfahren, [18](#)
- RUNGE-KUTTA-Verfahren, [24](#)

- Anfangswertaufgabe, [16](#)
 - Lösung, [16](#)

- Backward Differentiation Formulas, [27](#)
- BDF-Verfahren, [27](#)

- Einschrittverfahren, [18](#)
 - explizit, [18](#)
 - implizit, [18](#)
 - konvergent, [20](#)
 - Konvergenzordnung, [20](#)
- Einzelschrittverfahren, [12](#)

- Fixpunkt, [2](#)
- Fixpunktabbildung, [2](#)
- Fixpunktaufgabe, [2](#)
- Fixpunktiteration, [4](#)

- Gauß-Seidel-Verfahren, [12](#)
- Gesamtschrittverfahren, [11](#)
- gewöhnliches Iterationsverfahren, [4](#)
- Gitter, [18](#)
 - äquidistant, [18](#)
 - gleichabständig, [18](#)
- Gitterpunkten, [18](#)

- Jacobi-Verfahren, [11](#)

- konsistent, [19](#)
- Konsistenzordnung, [19](#)
- Kontraktionskonstante, [3](#)
- kontraktiv, [3](#)

- lineares Mehrschrittverfahren, [26](#)
 - charakteristisches Polynom, [26](#)
 - expliziten, [26](#)
 - impliziten, [26](#)
- lokaler Diskretisierungsfehler, [19](#)

- Nullstellenaufgabe, [2](#)

- Polygonzugverfahren, [18](#)
- Prädiktor-Korrektor-Prinzips, [27](#)

- Schrittweite, [18](#)
- selbstabbildend, [3](#)
- Spektralradius, [10](#)
- Splitting-Methoden, [14](#)

- Verfahren von HEUN, [25](#)
- Verfahrensfunktion, [18](#)