

Kap. 11: Anfangswertaufgaben: Mehrschrittverfahren

- 11.1 Grundlagen und Beispiele
- 11.2 Konsistenz von Mehrschrittverfahren
- 11.3 Null-Stabilität und Konvergenz von Mehrschrittverfahren
- 11.4 Absolute und A-Stabilität von Mehrschrittverfahren
- 11.5 Praktische Aspekte

11.1 Grundlagen und Beispiele

11.1 Erläuterung:

- ▶ Die Zuwachsfunktion Φ bei *Einschrittverfahren* ist “gedächtnislos”, d.h. in jedem Schritt wird nur der aktuelle Punkt (x_k, y_k) zur Berechnung von Φ verwendet. Dabei fallen im Allgemeinen mehrere Auswertungen der Funktion f an vorgegebenen Zwischenstellen $x_k + a_r h$ an (z.B. beim expliziten R -stufigen Runge-Kutta-Verfahren).
- ▶ Bei *Mehrschrittverfahren* hingegen greift man für den Schritt von x_k nach $x_k + h$ auf mehrere bereits berechnete Werte von f über ein größeres Intervall $[x_k - mh, x_k]$ von Stützstellen zurück.

Das *allgemeine lineare Mehrschrittverfahren* wird als eine *lineare Differenzengleichung* formuliert. Man legt die Anzahl $m \in \mathbb{N}$ fest und wählt die Bezeichnungen

$$x_k, \dots, x_{k+m}, \quad y_k, \dots, y_{k+m}$$

zur festen Schrittweite $h > 0$ wie zuvor. Weiterhin setzen wir $f_{k+j} := f(x_{k+j}, y_{k+j})$.

11.2 Definition: Lineares Mehrschrittverfahren

Es sei $m \in \mathbb{N}$. Zu gegebenen reellen Zahlen $\alpha_0, \dots, \alpha_m$ mit $\alpha_m = 1$ und β_0, \dots, β_m heißt die Vorschrift

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

ein lineares m -Schritt Verfahren. (Hierbei wird $|\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0$ vorausgesetzt.)

Bemerkung: Falls $\beta_m = 0$ gilt, heißt das Verfahren *explizit*, andernfalls *implizit*.

11.3 Übersicht zu den Verfahren von Adams und Nyström

Wichtige Klassen von m -Schrittverfahren werden erzeugt, indem die AWA in die äquivalente Integralgleichung

$$y(x_m) = y(x_m - \delta) + \int_{x_m - \delta}^{x_m} f(t, y(t)) dt$$

überführt wird und das Integral mit einer Quadraturformel angenähert wird. Als Integrationslänge verwendet man

- ▶ $\delta = h$ für die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton,
- ▶ $\delta = 2h$ für die Verfahren von Nyström und Milne-Simpson.

Als Knoten der Quadraturformel verwendet man die äquidistanten Stellen

- ▶ x_k, \dots, x_{k+m-1} im expliziten Fall (*Adams-Bashforth* für $\delta = h$ und *Nyström* für $\delta = 2h$),
- ▶ x_k, \dots, x_{k+m} im impliziten Fall (*Adams-Moulton* für $\delta = h$ und *Milne-Simpson* für $\delta = 2h$).

Für $m > 1$ (bzw. $m > 2$ im Fall $\delta = 2h$) werden also auch Knoten außerhalb des Integrationsintervalls $[x_m - \delta, x_m]$ verwendet.

Die Gewichte der Quadraturformel werden so bestimmt, dass der maximale Exaktheitsgrad erreicht wird. Die Auswertung des Integranden erfolgt durch Einsetzen der Näherungen y_{k+j} anstelle von $y(x_{k+j})$, also durch Verwendung der Funktionswerte $f_{k+j} = f(x_{k+j}, y_{k+j})$.

11.4 Explizite m -Schrittverfahren: Adams-Bashforth-Verfahren

Es sei $m \in \mathbb{N}$. Das m -Schritt Adams-Bashforth-Verfahren lautet

$$y_{k+m} - y_{k+m-1} = h \sum_{j=0}^{m-1} \beta_j f_{k+j}$$

mit

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{x_{k+m-1}}^{x_{k+m}} L_j(x) dx = \int_{m-1}^m \tilde{L}_j(x) dx.$$

Hierbei sind L_j, \tilde{L}_j Lagrange-Grundpolynome vom Grad $m-1$ zu den Stützstellen x_k, \dots, x_{k+m-1} bzw. $0, 1, \dots, m-1$, also

$$L_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{m-1} \frac{x - x_{k+i}}{x_{k+j} - x_{k+i}}, \quad \tilde{L}_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{m-1} \frac{x - i}{j - i}.$$

Beispielsweise ergeben sich die folgenden Formeln:

$$m = 1: \quad y_{k+1} - y_k = hf_k \quad \text{Eulersche Polygonzugmethode}$$

$$m = 2: \quad y_{k+2} - y_{k+1} = \frac{h}{2}(-f_k + 3f_{k+1})$$

$$m = 3: \quad y_{k+3} - y_{k+2} = \frac{h}{12}(5f_k - 16f_{k+1} + 23f_{k+2})$$

$$m = 4: \quad y_{k+4} - y_{k+3} = \frac{h}{24}(-9f_k + 37f_{k+1} - 59f_{k+2} + 55f_{k+3})$$

$$m = 5: \quad y_{k+5} - y_{k+4} = \frac{h}{720}(251f_k - 1274f_{k+1} + 2616f_{k+2} - 2774f_{k+3} + 1901f_{k+4})$$

$$m = 6: \quad y_{k+6} - y_{k+5} = \frac{h}{1440}(-475f_k + 2877f_{k+1} - 7298f_{k+2} + 9982f_{k+3} - 7923f_{k+4} + 4277f_{k+5})$$

11.5 Implizite m -Schrittverfahren: Adams-Moulton-Verfahren

Es sei $m \in \mathbb{N}$. Das m -Schritt Adams-Moulton-Verfahren lautet

$$y_{k+m} - y_{k+m-1} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}$$

mit

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{x_{k+m-1}}^{x_{k+m}} \Lambda_j(x) dx = \int_{m-1}^m \tilde{\Lambda}_j(x) dx.$$

Hierbei sind $\Lambda_j, \tilde{\Lambda}_j$ Lagrange-Grundpolynome vom Grad m zu den Stützstellen x_k, \dots, x_{k+m} bzw. $0, 1, \dots, m$, also

$$\Lambda_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^m \frac{x - x_{k+i}}{x_{k+j} - x_{k+i}}, \quad \tilde{\Lambda}_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^m \frac{x - i}{j - i}.$$

Beispielsweise ergeben sich die folgenden Formeln:

$$m = 1: \quad y_{k+1} - y_k = \frac{h}{2}(f_k + f_{k+1}) \quad \text{implizites Trapez-Verfahren}$$

$$m = 2: \quad y_{k+2} - y_{k+1} = \frac{h}{12}(-f_k + 8f_{k+1} + 5f_{k+2})$$

$$m = 3: \quad y_{k+3} - y_{k+2} = \frac{h}{24}(f_k - 5f_{k+1} + 19f_{k+2} + 9f_{k+3})$$

$$m = 4: \quad y_{k+4} - y_{k+3} = \frac{h}{720}(-19f_k + 106f_{k+1} - 264f_{k+2} + 646f_{k+3} + 251f_{k+4})$$

$$m = 5: \quad y_{k+5} - y_{k+4} = \frac{h}{1440}(27f_k - 173f_{k+1} + 482f_{k+2} - 798f_{k+3} + 1427f_{k+4} + 475f_{k+5})$$

11.6 Explizite m -Schrittverfahren: Nyström-Verfahren

Es sei $m \in \mathbb{N}$. Das m -Schritt Nyström-Verfahren lautet

$$y_{k+m} - y_{k+m-2} = h \sum_{j=0}^{m-1} \beta_j f_{k+j}$$

mit

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{x_{k+m-2}}^{x_{k+m}} L_j(x) dx = \int_{m-2}^m \tilde{L}_j(x) dx$$

und den Lagrange-Grundpolynomen L_j, \tilde{L}_j aus 11.4.

Wir erhalten die folgenden Formeln:

$$m = 2 : \quad y_{k+2} - y_k = 2hf_{k+1}, \quad (\text{Mittelpunktregel})$$

$$m = 3 : \quad y_{k+3} - y_{k+1} = \frac{h}{3}(f_k - 2f_{k+1} + 7f_{k+2})$$

$$m = 4 : \quad y_{k+4} - y_{k+2} = \frac{h}{3}(-f_k + 4f_{k+1} - 5f_{k+2} + 8f_{k+3})$$

$$m = 5 : \quad y_{k+5} - y_{k+3} = \frac{h}{90}(29f_k - 146f_{k+1} + 294f_{k+2} - 266f_{k+3} + 269f_{k+4})$$

$$m = 6 : \quad y_{k+6} - y_{k+4} = \frac{h}{90}(-28f_k + 169f_{k+1} - 426f_{k+2} + 574f_{k+3} - 406f_{k+4} + 297f_{k+5})$$

11.7 Implizite m -Schrittverfahren: Milne-Simpson-Verfahren

Es sei $m \in \mathbb{N}$. Das m -Schritt Milne-Simpson-Verfahren lautet

$$y_{k+m} - y_{k+m-2} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}$$

mit

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{x_{k+m-2}}^{x_{k+m}} \Lambda_j(x) dx = \int_{m-2}^m \tilde{\Lambda}_j(x) dx$$

und den Lagrange-Grundpolynomen $\Lambda_j, \tilde{\Lambda}_j$ aus 11.5.

Wir erhalten die folgenden Formeln:

$$m = 2 : \quad y_{k+2} - y_k = \frac{h}{3}(f_k + 4f_{k+1} + f_{k+2}), \quad (\text{Simpsonregel})$$

$$m = 3 : \quad y_{k+3} - y_{k+1} = \frac{h}{3}(f_{k+1} + 4f_{k+2} + f_{k+3}) \quad (= \text{Simpsonregel bei } k+1)$$

$$m = 4 : \quad y_{k+4} - y_{k+2} = \frac{h}{90}(-f_k + 4f_{k+1} + 24f_{k+2} + 124f_{k+3} + 29f_{k+4})$$

$$m = 5 : \quad y_{k+5} - y_{k+3} = \frac{h}{90}(f_k - 6f_{k+1} + 14f_{k+2} - 14f_{k+3} + 129f_{k+4} + 28f_{k+5})$$

11.8 Implizite m -Schrittverfahren: BDF-Verfahren

Ein weiterer Ansatz für ein implizites m -Schritt-Verfahren, das alle $m + 1$ Koeffizienten $\alpha_j \neq 0$ setzt und nur $\beta_{k+m} \neq 0$ verwendet, bildet zuerst das Interpolationspolynom

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^m y_{k+j} \Lambda_j(x) \quad (\approx y(x))$$

und führt durch Differenzieren von p_m und Vergleich mit der Differentialgleichung zu

$$\sum_{j=0}^m y_{k+j} \Lambda'_j(x_{k+m}) = f_{k+m}.$$

Um $\alpha_m = 1$ zu erhalten, werden beide Seiten durch $\Lambda'_m(x_{k+m}) = \sum_{j=1}^m \frac{1}{jh}$ dividiert. Diese Verfahren heißen *backward difference formula* (BDF). Wir erhalten die folgenden Formeln:

$$m = 1 : \quad y_{k+1} - y_k = hf_{k+1} \quad \text{implizites Euler-Verfahren}$$

$$m = 2 : \quad y_{k+2} - \frac{4}{3}y_{k+1} + \frac{1}{3}y_k = \frac{2h}{3}f_{k+2}$$

$$m = 3 : \quad y_{k+3} - \frac{18}{11}y_{k+2} + \frac{9}{11}y_{k+1} - \frac{2}{11}y_k = \frac{6h}{11}f_{k+3}$$

$$m = 4 : \quad y_{k+4} - \frac{48}{25}y_{k+3} + \frac{36}{25}y_{k+2} - \frac{16}{25}y_{k+1} + \frac{3}{25}y_k = \frac{12h}{25}f_{k+4}$$

Bemerkung:

- ▶ Es ist klar, dass alle Verfahren direkt auf Systeme von Differentialgleichungen erster Ordnung übertragen werden können.
- ▶ Bei den impliziten Verfahren tritt $f_{k+m} = f(x_{k+m}, y_{k+m})$ auf der rechten Seite auf. Aus der Formel des Differenzenverfahrens wird y_{k+m} mit Hilfe der Fixpunkt- oder der (gedämpften) Newton-Iteration bestimmt.

11.9 Bemerkung: Der Ansatz aller Verfahren beruht auf der Polynom-Interpolation der Daten $f(x_{k+j}, y_{k+j})$. Eine rekursive Berechnung der Koeffizienten ergibt sich durch Verwendung der Newton-Form der Interpolation:

Für die expliziten Verfahren mit den äquidistanten Stützstellen x_k, \dots, x_{k+m-1} berechnet man die "Rückwärtsdifferenzen"

$$\nabla^0 f_n := f_n, \quad \nabla^\mu f_n := \nabla^{\mu-1} f_n - \nabla^{\mu-1} f_{n-1}, \quad \mu \geq 1,$$

rekursiv nach dem Dreiecksschema

$$\begin{array}{rcll}
 x_{k+m-1} & | & f_{k+m-1} = \nabla^0 f_{k+m-1} & \\
 & & & > \nabla^1 f_{k+m-1} \\
 x_{k+m-2} & | & f_{k+m-2} = \nabla^0 f_{k+m-2} & > \\
 & & & > \nabla^1 f_{k+m-2} & \ddots \\
 x_{k+m-3} & | & f_{k+m-3} = \nabla^0 f_{k+m-3} & > \nabla^{m-1} f_{k+m-1} \\
 \vdots & & & & \\
 \vdots & & & > \\
 \vdots & & & > \nabla^1 f_{k+1} \\
 x_k & | & f_k = \nabla^0 f_k &
 \end{array}$$

Das Interpolationspolynom in Newton-Form lautet dann

$$p_{m-1}(x) = \nabla^0 f_{k+m-1} + \frac{\nabla^1 f_{k+m-1}}{h} (x - x_{k+m-1}) + \dots + \frac{\nabla^{m-1} f_{k+m-1}}{(m-1)! h^{m-1}} \prod_{j=1}^{m-1} (x - x_{k+m-j}).$$

- Das explizite m -Schritt Adams-Bashforth Verfahren nimmt somit die Form

$$y_{k+m} - y_{k+m-1} = h \sum_{j=0}^{m-1} c_j \nabla^j f_{k+m-1}$$

an, wobei die Koeffizienten c_j , $j = 0, \dots, m-1$, gegeben sind durch $c_0 = 1$ und

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{1}{j! h^{j+1}} \int_{x_{k+m-1}}^{x_{k+m}} \prod_{\ell=1}^j (x - x_{k+m-\ell}) dx \\ &= \frac{1}{j!} \int_{m-1}^m \prod_{\ell=1}^j (t - m + \ell) dt = \frac{1}{j!} \int_0^1 \prod_{\ell=0}^{j-1} (t + \ell) dt \end{aligned}$$

für $j > 0$. Für diese Koeffizienten zeigt man die Formel

$$\sum_{i=0}^j \frac{c_{j-i}}{i+1} = 1, \quad j \geq 0,$$

aus der dann die c_j rekursiv berechnet werden können:

$$c_0 = 1, \quad c_1 = \frac{1}{2}, \quad c_2 = \frac{5}{12}, \quad c_3 = \frac{3}{8}, \quad c_4 = \frac{251}{720}, \quad c_5 = \frac{95}{288}, \quad \dots$$

- Die gleichen Überlegungen lassen sich auf die Verfahren von Adams-Moulton, Nyström und Milne-Simpson anwenden. Bei den impliziten Verfahren tritt der Knoten x_{k+m} an den Anfang der Knotenliste. Für Adams-Moulton ergibt sich

$$y_{k+m} - y_{k+m-1} = h \sum_{j=0}^m \gamma_j \nabla^j f_{k+m},$$

mit $\gamma_0 = 1$ und

$$\begin{aligned} \gamma_j &= \frac{1}{j! h^{j+1}} \int_{x_{k+m-1}}^{x_{k+m}} \prod_{\ell=0}^{j-1} (x - x_{k+m-\ell}) dx \\ &= \frac{1}{j!} \int_{m-1}^m \prod_{\ell=0}^{j-1} (t - m + \ell) dt = \frac{1}{j!} \int_{-1}^0 \prod_{\ell=0}^{j-1} (t + \ell) dt. \end{aligned}$$

Hieraus lässt sich die Formel

$$\gamma_j = c_j - c_{j-1}$$

ableiten,, so dass wir erhalten:

$$\gamma_0 = 1, \quad \gamma_1 = -\frac{1}{2}, \quad \gamma_2 = -\frac{1}{12}, \quad \gamma_3 = -\frac{1}{24}, \quad \gamma_4 = -\frac{19}{720}, \quad \gamma_5 = -\frac{3}{160}, \quad \dots$$

- Gleichmaßen ergeben sich die BDF-Formeln in der Form

$$\sum_{j=1}^m \sigma_j \nabla^j y_{k+m} = h f_{k+m}$$

mit

$$\sigma_j = \frac{1}{j! h^{j-1}} \left(\prod_{\ell=0}^{j-1} (\cdot - x_{k+m-\ell}) \right)' (x_{k+m}) = \frac{1}{j! h^{j-1}} \prod_{\ell=1}^{j-1} (x_{k+m} - x_{k+m-\ell}) = \frac{1}{j}.$$

11.2 Konsistenz und Konvergenz

Eine zentrale Rolle nimmt wieder der Begriff des *lokalen Diskretisierungsfehlers* ein.

11.10 Definition

Sei $m \in \mathbb{N}$ sowie ein lineares m -Schrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad \alpha_m = 1,$$

gegeben. Weiter seien $f \in C^1(I \times G)$ und $(x, y) \in I \times G$ gegeben.

- ▶ Mit z bezeichnen wir die Lösung der AWA $z' = f(t, z)$, $z(x) = y$.
- ▶ z_m sei der Wert, den das m -Schritt-Verfahren bei Verwendung der exakten Werte $\alpha_j z(x + jh)$ für $0 \leq j \leq m - 1$ sowie $\beta_j f(x + jh, z(x + jh)) = \beta_j z'(x + jh)$ für $0 \leq j \leq m$ liefert.

a) Der *exakte relative Zuwachs* beim m -Schritt-Verfahren ist

$$\Delta(f, x, y, h) = \frac{z(x + mh) - z(x + (m - 1)h)}{h}.$$

b) Die Zuwachsfunktion des m -Schrittverfahrens wird definiert als

$$\begin{aligned}\Phi(f, x, y, h) &= \frac{z_m - z(x + (m-1)h)}{h} \\ &= \frac{1}{h} \left(- \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j z(x + jh) + h \sum_{j=0}^m \beta_j z'(x + jh) \right) - \frac{z(x + (m-1)h)}{h}.\end{aligned}$$

c) Der *lokale Diskretisierungsfehler* des m -Schrittverfahrens ist (unter Berücksichtigung von $\alpha_m = 1$)

$$\begin{aligned}r(f, \Phi, x, y, h) &= \Delta(f, x, y, h) - \Phi(f, x, y, h) \\ &= \frac{1}{h} \sum_{j=0}^m \alpha_j z(x + jh) - \sum_{j=0}^m \beta_j z'(x + jh).\end{aligned}$$

11.11 Definition: Konsistenz, Konsistenzordnung

- a) Das m -Schrittverfahren heißt *konsistent*, wenn für alle $f \in C^1(I \times G)$ und alle $(x, y) \in I \times G$ gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} r(f, \Phi, x, y, h) = 0.$$

- b) Es hat die *Konsistenzordnung* $p \in \mathbb{N}$, wenn für alle $f \in C^{p+1}(I \times G)$ und alle $(x, y) \in I \times G$ gilt

$$r(f, \Phi, x, y, h) = \mathcal{O}(|h|^p) \quad \text{für } h \rightarrow 0.$$

Vorüberlegung: Die Konsistenzordnung von m -Schrittverfahren wird wieder durch eine Taylor-Entwicklung bestimmt. Hierfür benötigen wir nur die Taylor-Entwicklungen von z und z' . Dies führt auf einfache lineare Bedingungen an die Koeffizienten α_j und β_j . Aus den beiden Beziehungen

$$z(x + jh) = \sum_{\mu=0}^p \frac{z^{(\mu)}(x)}{\mu!} (jh)^\mu + \mathcal{O}(|h|^{p+1}) \quad \text{für } h \rightarrow 0,$$

$$z'(x + jh) = \sum_{\mu=1}^p \frac{z^{(\mu)}(x)}{(\mu-1)!} (jh)^{\mu-1} + \mathcal{O}(|h|^p) \quad \text{für } h \rightarrow 0,$$

folgt

$$r(f, \Phi, x, y, h) = \frac{z(x)}{h} \underbrace{\sum_{j=0}^m \alpha_j}_{=: c_0} + \sum_{\mu=1}^p z^{(\mu)}(x) h^{\mu-1} \sum_{j=0}^m \underbrace{\left[\alpha_j \frac{j^\mu}{\mu!} - \beta_j \frac{j^{\mu-1}}{(\mu-1)!} \right]}_{=: c_\mu} + \mathcal{O}(|h|^p).$$

Zusammenfassend:

11.12 Satz: Konsistenzordnung linearer Mehrschrittverfahren

Das m -Schrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

mit $\alpha_m = 1$ ist konsistent genau dann, wenn

$$c_0 := \sum_{j=0}^m \alpha_j = 0, \quad c_1 := \sum_{j=0}^m j \alpha_j - \sum_{j=0}^m \beta_j = 0$$

gilt. Weiterhin sind äquivalent:

- (i) Das Verfahren besitzt die Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$.
- (ii) Die Zahlen c_0, c_1 wie oben sowie

$$c_\mu := \sum_{j=0}^m \left[\alpha_j \frac{j^\mu}{\mu!} - \beta_j \frac{j^{\mu-1}}{(\mu-1)!} \right], \quad \mu = 2, \dots, p,$$

sind alle gleich Null.

- (iii) Für jedes Polynom z vom Grad $\leq p$ ist

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j z(x+j) - \sum_{j=0}^m \beta_j z'(x+j) \equiv 0.$$

Beweis: Aus der Vorüberlegung folgt bereits die Aussage zur Konsistenz und die Äquivalenz von (i) und (ii).

Wir zeigen die Äquivalenz von (ii) und (iii): für jedes Polynom z vom Grad $\leq p$ sind die Taylor-Entwicklungen der Vorüberlegung exakt, d.h.

$$z(x+j) = \sum_{\mu=0}^p \frac{z^{(\mu)}(x)}{\mu!} j^{\mu},$$
$$z'(x+j) = \sum_{\mu=1}^p \frac{z^{(\mu)}(x)}{(\mu-1)!} j^{\mu-1}.$$

Einsetzen ergibt

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j z(x+j) - \sum_{j=0}^m \beta_j z'(x+j) = \sum_{\mu=0}^p c_{\mu} z^{(\mu)}(x).$$

Die Äquivalenz von (ii) und (iii) ist hieraus direkt abzulesen.

Bemerkung: Eine wichtige Methode (von Euler) definiert zu den Koeffizienten c_{μ} die *erzeugende Funktion*

$$C(z) = \sum_{\mu=0}^{\infty} c_{\mu} z^{\mu} = \sum_{j=0}^m \left[\alpha_j \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(jz)^{\mu}}{\mu!} - z\beta_j \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{(jz)^{\mu-1}}{(\mu-1)!} \right] = \sum_{j=0}^m (\alpha_j - z\beta_j) e^{jz}.$$

Die Bedingung (ii) im Satz 11.12 ist äquivalent zur Bedingung

$$\frac{d^{\mu}}{dz^{\mu}} C(z)|_{z=0} = 0 \quad \text{für} \quad 0 \leq \mu \leq p.$$

11.13 Korollar

- ▶ Die expliziten m -Schritt Verfahren von Adams-Bashforth ($m \geq 1$) und Nyström ($m \geq 2$) haben die Konsistenzordnung m .
- ▶ Die impliziten m -Schritt Verfahren von Adams-Moulton ($m \geq 1$) und Milne-Simpson ($m \geq 2$) haben die Konsistenzordnung $m + 1$.
- ▶ Die impliziten m -Schritt BDF-Verfahren haben die Konsistenzordnung m .

Die angegebene Ordnung ist jeweils exakt, mit Ausnahme des Milne-Simpson Verfahrens mit $m = 2$, das die Konsistenzordnung 4 besitzt.

Beweis: Wir verwenden Teil (iii) aus Satz 11.12. Wir weisen die Aussage zur Konsistenzordnung der ersten 4 Verfahren nach.

Sei dazu $\ell = 1$ (für die Verfahren von Adams) oder $\ell = 2$ (Nyström, Milne-Simpson). Weiter sei q ein Polynom vom Grad m (expliziter Fall) bzw. $m + 1$ (impliziter Fall). Wir halten $x \in \mathbb{R}$ fest und wählen die Knoten $x, x + 1, \dots, x + m - 1$ (expliziter Fall) bzw. $x, x + 1, \dots, x + m$ (impliziter Fall). Dann besitzt q' die Darstellung mit Hilfe der Lagrange-Grundpolynome L_j bzw. Λ_j

$$q'(t) = \sum_{j=0}^{m-1} q'(x+j)L_j(t), \quad (\text{expliziter Fall}),$$

$$q'(t) = \sum_{j=0}^m q'(x+j)\Lambda_j(t), \quad (\text{impliziter Fall}).$$

Die Definition der β_j bei den 4 betrachteten Verfahren ergibt

$$q(x+m) - q(x+m-\ell) = \int_{x+m-\ell}^{x+m} q'(t) dt = \sum_{j=0}^{m(-1)} \beta_j q'(x+j).$$

Dies ist genau die Eigenschaft (iii) in Satz 11.12.

Um zu zeigen, dass die Konsistenzordnung nicht größer als angegeben ist, wählt man beim Adams-Bashforth und beim Nyström-Verfahren ein Polynom q vom Grad $m + 1$ mit

$$q'(x) = \prod_{j=0}^{m-1} (x - j).$$

Dann ist $q'(j) = 0$ für $0 \leq j \leq m - 1$, aber $q'(x) > 0$ für $x > m - 1$, also auch

$$q(m) - q(m - 1) = \int_{m-1}^m q'(x) dx > 0.$$

Also hat das Adams-Bashforth Verfahren nur die Konsistenzordnung m . Ebenso ist $q(m) - q(m - 2) =$

$$\int_{m-2}^m q'(x) dx = \int_{m-1}^m \left(\prod_{j=1}^m (x - j) + \prod_{j=0}^{m-1} (x - j) \right) dx = \int_{m-1}^m \underbrace{(2x - m)}_{\geq 0} \prod_{j=1}^{m-1} (x - j) dx > 0.$$

Also hat auch das Nyström Verfahren nur die Konsistenzordnung m .

Ebenso wählt man beim Adams-Moulton und Milne-Simpson-Verfahren ein Polynom q vom Grad $m + 2$ so, dass $q'(x) = \prod_{j=0}^m (x - j)$ gilt. Dann ist $q'(j) = 0$ für $0 \leq j \leq m$, aber $q'(x) < 0$ für $m - 1 < x < m$, also

$$q(m) - q(m - 1) = \int_{m-1}^m q'(x) dx < 0.$$

Also hat das Adams-Moulton Verfahren nur die Konsistenzordnung $m + 1$. Ebenso ist $q(m) - q(m - 2) =$

$$\int_{m-1}^m \left(\prod_{j=1}^{m+1} (x - j) + \prod_{j=0}^m (x - j) \right) dx = \int_{m-1}^m (2x - m - 1) \prod_{j=1}^m (x - j) dx \begin{cases} < 0 & \text{für } m \geq 3, \\ = 0 & \text{für } m = 2. \end{cases}$$

Also hat auch das Milne-Simpson-Verfahren für $m \geq 3$ nur die Konsistenzordnung $m + 1$. Für $m = 2$ erhält man die exakte Konsistenzordnung 4 direkt aus Teil (ii) von Satz 11.12.

Nun wenden wir uns den BDF-Formeln zu. Sei q ein Polynom vom Grad $\leq m$. Wir halten $x \in \mathbb{R}$ fest und wählen die Knoten $x, x+1, \dots, x+m$ zur Darstellung mittels der zugehörigen Lagrange-Grundpolynome

$$q(t) = \sum_{j=0}^m q(x+j) \Lambda_j(t).$$

Hieraus ergibt sich sofort

$$\frac{q'(x+m)}{\Lambda'_m(x+m)} = \sum_{j=0}^m \frac{\Lambda'_j(x+m)}{\Lambda'_m(x+m)} q(x+j).$$

Dies ist die Eigenschaft (iii) in Satz 11.12, denn $\beta_m = 1/\Lambda'_m(x+m)$ und $\alpha_j = \Lambda'_j(x+m)/\Lambda'_m(x+m)$ ergaben sich in 11.8.

Dass keine höhere Konsistenzordnung vorliegt, wird mit dem Polynom $q(x) = \prod_{j=0}^m (x-j)$ vom Grad $m+1$ gezeigt: wir haben

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j q(j) = 0, \quad \text{aber} \quad \beta_m q'(m) \neq 0.$$

11.14 **Bemerkung:** Der erste von Null verschiedene Koeffizient

$$c_{p+1} := \sum_{j=0}^m \left[\frac{j^{p+1}}{(p+1)!} \alpha_j - \frac{j^p}{p!} \beta_j \right] \neq 0$$

wird als die “*Fehlerkonstante*” des Verfahrens der Ordnung p bezeichnet.

Die folgende Tabelle gibt die Fehlerkonstanten mehrerer Adams-Bashforth und Adams-Moulton-Verfahren an.

Adams-Bashforth (explizit)				
m	1	2	3	4
p	1	2	3	4
c_{p+1}	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$

Adams-Moulton (implizit)				
m	1	2	3	4
p	2	3	4	5
c_{p+1}	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$

11.15 Beispiel: Die allgemeine (implizite) lineare 2-Schrittmethode hat 6 Koeffizienten $\alpha_k, \beta_k, 0 \leq k \leq 2$, mit $\alpha_2 = 1$. Die Terme c_μ ergeben sich als

$$\begin{aligned} c_0 &= \alpha_0 + \alpha_1 + 1 \\ c_1 &= \alpha_1 + 2 - (\beta_0 + \beta_1 + \beta_2) \\ c_2 &= \frac{1}{2}(\alpha_1 + 4) - (\beta_1 + 2\beta_2) \\ c_3 &= \frac{1}{6}(\alpha_1 + 8) - \frac{1}{2}(\beta_1 + 4\beta_2) \\ c_4 &= \frac{1}{24}(\alpha_1 + 16) - \frac{1}{6}(\beta_1 + 8\beta_2) \\ c_5 &= \frac{1}{120}(\alpha_1 + 32) - \frac{1}{24}(\beta_1 + 16\beta_2) \\ &\dots \end{aligned}$$

Um die Konsistenzordnung 3 zu erzielen, muss $c_0 = c_1 = c_2 = c_3 = 0$ gelten. Dies wird mit $\alpha := \alpha_0$ erfüllt, falls wir

$$\alpha_1 = -1 - \alpha, \quad \beta_0 = -\frac{1}{12}(1 + 5\alpha), \quad \beta_1 = \frac{2}{3}(1 - \alpha), \quad \beta_2 = \frac{1}{12}(5 + \alpha)$$

setzen. Die allgemeine 2-Schrittmethode der Ordnung 3 hat also die Form (in Abhängigkeit vom Parameter α)

$$y_{k+2} - (1 + \alpha)y_{k+1} + \alpha y_k = \frac{h}{12} \left((5 + \alpha)f_{k+2} + 8(1 - \alpha)f_{k+1} - (1 + 5\alpha)f_k \right).$$

Aus den Gleichungen $c_4 = -(1 + \alpha)/24$ und $c_5 = -(17 + 13\alpha)/360$ folgt:

(i) Für $\alpha = -1$ ergibt sich das Simpson-Milne Verfahren

$$y_{k+2} - y_k = \frac{h}{3}(f_{k+2} + 4f_{k+1} + f_k)$$

der Konsistenzordnung 4. Ihre Fehlerkonstante ist $c_5 = -1/90$.

- (ii) Für $\alpha \neq -1$ ist die exakte Konsistenzordnung 3. Z.B. ergibt $\alpha = 0$ das implizite 2-Schrittverfahren von Adams-Moulton und $\alpha = -5$ ergibt das explizite Verfahren

$$y_{k+2} + 4y_{k+1} - 5y_k = h(4f_{k+1} + 2f_k).$$

Dieses Verfahren hat eine attraktive Form, da pro Schritt nur eine Auswertung von f erfolgt. Es ist jedoch praktisch unbrauchbar, da eine wichtige Eigenschaft der "Null-Stabilität" fehlt, die wir im Folgenden analysieren wollen: Kleine Rundungsfehler der Anfangswerte y_0, y_1 werden in jedem Schritt so verstärkt, dass nach wenigen Schritten vollkommen unbrauchbare Werte vorliegen (siehe Beispiel 11.16).

11.3 Null-Stabilität und Konvergenz von Mehrschrittverfahren

Das numerische Verhalten der Mehrschrittverfahren unter dem Einfluss von Rundungsfehlern wird durch die Analyse der linearen Differenzengleichungen vollständig erfasst.

11.16 Beispiel: Die (homogene) lineare Differenzengleichung

$$y_{k+2} + 4y_{k+1} - 5y_k = 0$$

mit den Anfangswerten $y_0 = 0$ und $y_1 = 0$ hat die triviale Lösung $y_k = 0$ für alle $k \in \mathbb{N}_0$. Eine kleine Störung der Anfangswerte $y_0 = \delta$, $y_1 = \epsilon$ liefert hingegen

$$y_2 = 5\delta - 4\epsilon, \quad y_3 = -20\delta + 21\epsilon, \quad y_4 = 105\delta - 104\epsilon, \quad \dots$$

und allgemein

$$y_k = \alpha(-5)^k + \beta \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{6}(\delta - \epsilon), \quad \beta = \frac{1}{6}(5\delta + \epsilon).$$

Diese Darstellung erhält man durch Berechnen der Nullstellen -5 und 1 des *charakteristischen Polynoms* $\rho(z) = z^2 + 4z - 5 = (z + 5)(z - 1)$ der Differenzengleichung. Sie zeigt, dass das Differenzenverfahren *numerisch instabil* ist, da Rundungsfehler sich sehr schnell verstärken.

11.17 Satz: Allgemeine Lösung der homogenen linearen Differenzengleichung

Gegeben sei die *homogene lineare Differenzengleichung*

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (\alpha_m = 1). \quad (*)$$

Wir bezeichnen mit $\rho(z) = \sum_{j=0}^m \alpha_j z^j$ das *charakteristische Polynom* der Differenzengleichung.

Dann ist *jede* Lösung $(y_k)_{k \geq 0}$ von $(*)$ eine Linearkombination der folgenden *m linear unabhängigen Fundamentallösungen*:

- Ist $\lambda \in \mathbb{C}$ eine *s-fache* Nullstelle von ρ , mit $s \in \mathbb{N}$, so setze

$$\begin{aligned} (y_k^{(1)})_{k \geq 0} &= (\lambda^k)_{k \geq 0}, \\ (y_k^{(2)})_{k \geq 0} &= (k \lambda^{k-1})_{k \geq 0}, \\ &\vdots \\ (y_k^{(s)})_{k \geq 0} &= \left(\frac{k!}{(k-s+1)!} \lambda^{k-s+1} \right)_{k \geq 0}. \end{aligned}$$

Beweis: Die Fundamentallösungen lösen die homogene Differenzengleichung:

$\lambda \in \mathbb{C}$ sei s -fache Nullstelle von ρ , es gelte also

$$\rho(\lambda) = \rho'(\lambda) = \dots = \rho^{(s-1)}(\lambda) = 0$$

und $\rho^{(s)}(\lambda) \neq 0$. Die Folge $(y_k^{(1)})_{k \geq 0}$ erfüllt die Beziehung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j}^{(1)} = \sum_{j=0}^m \alpha_j \lambda^{k+j} = \lambda^k \rho(\lambda) = 0, \quad k \geq 0.$$

Analog folgt für $\nu = 2, \dots, s$

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j}^{(\nu)} = \sum_{j=0}^m \alpha_j \frac{(k+j)!}{(k+j-\nu+1)!} \lambda^{k+j-\nu+1} = \frac{d^{\nu-1}}{dz^{\nu-1}} (z^k \rho(z))|_{z=\lambda}.$$

Mit der Leibniz-Regel der Differentiation folgt, dass der letzte Ausdruck 0 ergibt, also löst auch $(y_k^{(\nu)})_{k \geq 0}$ die homogene Differenzengleichung.

Die Fundamentallösungen sind linear unabhängige Folgen:

Seien $\lambda_1, \dots, \lambda_r$ die paarweise verschiedenen Nullstellen von ρ mit der jeweiligen Ordnung s_μ , $1 \leq \mu \leq r$. (Dann gilt $s_1 + \dots + s_r = m$.) Weiter seien $(y_k^{(\mu, \nu)})_{k \geq 0}$ mit $1 \leq \mu \leq r$, $1 \leq \nu \leq s_\mu$, die Fundamentallösungen. Es genügt zu zeigen, dass die "Anfangsstücke" der Länge m dieser Folgen linear unabhängig sind. Dazu betrachten wir die quadratische Matrix

$$A = \begin{bmatrix} y_0^{(1,1)} & y_1^{(1,1)} & \dots & y_{m-1}^{(1,1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_0^{(1,s_1)} & y_1^{(1,s_1)} & \dots & y_{m-1}^{(1,s_1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_0^{(r,1)} & y_1^{(r,1)} & \dots & y_{m-1}^{(r,1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_0^{(r,s_r)} & y_1^{(r,s_r)} & \dots & y_{m-1}^{(r,s_r)} \end{bmatrix}.$$

Im Fall $s_\mu = 1$ für alle $1 \leq \mu \leq r (= m)$ ist

$$A = \begin{bmatrix} y_0^{(1,1)} & y_1^{(1,1)} & \dots & y_{m-1}^{(1,1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_0^{(m,1)} & y_1^{(m,1)} & \dots & y_{m-1}^{(m,1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \lambda_1 & \dots & \lambda_1^{m-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & \lambda_m & \dots & \lambda_m^{m-1} \end{bmatrix}$$

die Vandermonde-Matrix zu den paarweise verschiedenen Nullstellen $\lambda_\mu \in \mathbb{C}$, $1 \leq \mu \leq m$. Diese Matrix ist regulär, vgl. Satz 4.3.5 (Numerik I).

Im allgemeinen Fall mehrfacher Nullstellen ergibt sich die Matrix des folgenden Hermite-Interpolationsproblems:

Bestimme das Polynom p vom Grad $\leq m-1$ zu den paarweise verschiedenen Knoten $\lambda_1, \dots, \lambda_r \in \mathbb{C}$, das die Bedingungen

$$p^{(\nu)}(\lambda_\mu) = c_\mu^{(\nu)} \in \mathbb{C}, \quad 1 \leq \mu \leq r, \quad 0 \leq \nu \leq s_\mu,$$

erfüllt. Hierbei ist $\sum_{\mu=1}^r s_\mu = m$.

Die zur Basis der Monome gebildete Matrix ist

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & \lambda_1^{s_1-1} & \cdots & \cdots & \lambda_1^{m-1} \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & (s_1-1)! & \cdots & \cdots & \frac{(m-1)!}{(m-s_1)!} \lambda_1^{m-s_1} \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 1 & \cdots & \cdots & \lambda_r^{s_r-1} & \cdots & \lambda_r^{m-1} \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & (s_r-1)! & \cdots & \frac{(m-1)!}{(m-s_r)!} \lambda_r^{m-s_r} \end{bmatrix}.$$

Sie ist regulär, siehe 4.3.13.

Die allgemeine Lösung ist Linearkombination der Fundamentallösungen:

Sei $(y_k)_{k \geq 0}$ eine Lösung der homogenen Differenzengleichung. Wir nennen die Fundamentallösungen der Einfachheit halber $(\xi_k^{(\mu)})_{k \geq 0}$ mit $1 \leq \mu \leq m$.

Weil die Anfangsstücke dieser Folgen eine Basis des \mathbb{C}^m bilden, gibt es eindeutig bestimmte Koeffizienten $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{C}$ mit

$$y_k = \sum_{\mu=1}^m c_\mu \xi_k^{(\mu)}, \quad 0 \leq k \leq m-1. \quad (**)$$

Wegen $\alpha_m = 1$ lässt sich die Differenzengleichung in der Form

$$y_{k+m} = - \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j y_{k+j}, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

schreiben. Insbesondere erfüllt jede Fundamentallösung

$$\xi_{k+m}^{(\mu)} = - \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j \xi_{k+j}^{(\mu)}, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Aufgrund der Linearität überträgt sich mittels vollständiger Induktion die Beziehung $(**)$ auch auf jedes $k \geq m$. \square

11.18 Bemerkung:

- (i) Die Koeffizienten c_μ der einzelnen Fundamentallösungen sind durch die Angabe von Anfangswerten y_0, \dots, y_{m-1} eindeutig bestimmt; hierzu ist ein lineares Gleichungssystem mit der Transponierten der regulären Matrix A im Beweis zu lösen.

Beispiel: Die homogene Differenzengleichung

$$y_{k+2} + 4y_{k+1} - 5y_k = 0$$

in Beispiel 11.16 hat das charakteristische Polynom $\rho(z) = z^2 + 4z - 5$ mit den einfachen Nullstellen $\lambda_1 = -5$, $\lambda_2 = 1$. Die allgemeine Lösung der homogenen Differenzengleichung lautet also

$$y_k = c_1(-5)^k + c_2, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

mit Koeffizienten $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Zu den Anfangswerten $y_0 = \delta$, $y_1 = \epsilon$ ist

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -5 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \delta \\ \epsilon \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \delta - \epsilon \\ 5\delta + \epsilon \end{bmatrix}.$$

(ii) Die *inhomogene Differenzengleichung*

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = \gamma_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (\alpha_m = 1, \gamma_k \in \mathbb{C})$$

besitzt bei vorgegebenen Startwerten y_0, y_1, \dots, y_{m-1} eine eindeutige Lösung $(y_k)_{k \geq 0}$. Diese erhält man als *Superposition*

$$y_k = \hat{y}_k + \tilde{y}_k, \quad k = 0, 1, \dots,$$

wobei $(\hat{y}_k)_{k \geq 0}$ eine spezielle Lösung der inhomogenen Differenzengleichung (mit beliebigen Startwerten $\hat{y}_0, \dots, \hat{y}_{m-1}$) ist und $(\tilde{y}_k)_{k \geq 0}$ die eindeutige Lösung der homogenen Differenzengleichung mit den Startwerten

$$\tilde{y}_\ell = y_\ell - \hat{y}_\ell, \quad 0 \leq \ell \leq m-1,$$

ist.

Zur weiteren Untersuchung von Mehrschrittverfahren werden zwei charakteristische Polynome eingeführt.

11.19 Definition

Zu einem m -Schritt Verfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

mit $\alpha_m = 1$ definieren wir

- (i) das *erste charakteristische Polynom* $\rho(z) := \sum_{j=0}^m \alpha_j z^j$,
- (ii) das *zweite charakteristische Polynom* $\sigma(z) := \sum_{j=0}^m \beta_j z^j$.

11.20 Folgerung

Das Mehrschrittverfahren ist genau dann konsistent, wenn $\rho(1) = 0$ und $\rho'(1) = \sigma(1)$ gilt.

Im Beispiel 11.16 sieht man, dass kleine Störungen der Anfangswerte “explodieren”, wenn die Differenzengleichung unbeschränkte Fundamentallösungen besitzt. Wir wollen nun einen entsprechenden Stabilitätsbegriff einführen.

11.21 Definition: Null-Stabilität

Das lineare Mehrschrittverfahren heißt *Null-stabil*, wenn alle Fundamentallösungen der homogenen Differenzengleichung $\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = 0$, $k \geq 0$, beschränkte Folgen sind.

Als direkte Folgerung von Satz 11.17 ergibt sich die folgende Charakterisierung.

11.22 Satz: Wurzelbedingung

Das Mehrschrittverfahren ist genau dann Null-stabil, wenn keine Nullstelle des ersten charakteristischen Polynoms ρ einen Betrag größer als 1 hat und wenn alle Nullstellen vom Betrag 1 einfach sind.

Für die bereits vorgestellten Verfahren erhalten wir:

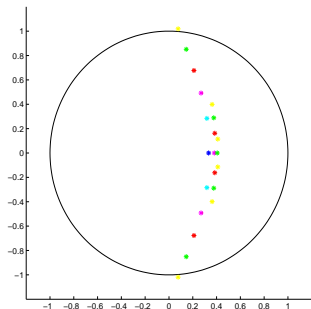
11.23 Korollar:

Die Adams-Bashforth, Adams-Moulton, Nyström und Milne-Simpson Verfahren sind Null-stabil. Die BDF-Verfahren sind Null-stabil nur für $1 \leq m \leq 6$.

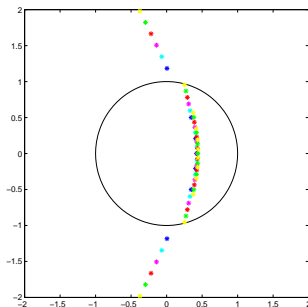
Beweis:

- ▶ Für die m -Schritt Verfahren von Adams ist $\rho(z) = z^{m-1}(z - 1)$, also $\lambda_1 = 0$ eine Nullstelle der Vielfachheit $m - 1$ und $\lambda_2 = 1$ eine einfache Nullstelle.
- ▶ Für die Nyström und Milne-Simpson Verfahren ist $\rho(z) = z^{m-2}(z^2 - 1)$, also $\lambda_1 = 0$ eine Nullstelle der Vielfachheit $m - 2$ und $\lambda_{2,3} = \pm 1$ jeweils einfache Nullstellen.

- Die BDF-Verfahren für $m \leq 6$ erfüllen die Wurzelbedingung. Jedoch ist für jedes $m > 6$ die Wurzelbedingung verletzt. Die untenstehenden Grafiken zeigen die Nullstellen für $2 \leq m \leq 7$ (links) und $8 \leq m \leq 13$ (rechts). Für jedes $m \in \mathbb{N}$ ist $z = 1$ einfache Nullstelle, sie ist in beiden Grafiken nicht eingezeichnet.



Wurzeln für BDF mit $m = 2$ (blau), 3 (cyan), 4 (magenta), 5 (rot), 6 (grün), 7 (gelb).



Wurzeln für BDF mit $m = 8$ (blau), 9 (cyan), 10 (magenta), 11 (rot), 12 (grün), 13 (gelb)

Der Konvergenzbegriff wird wie bei den Einschrittverfahren definiert. Wir verwenden wieder die Bezeichnungen $y_k^{(h)}$, $h_{n,x} = \frac{x-x_0}{n}$, und definieren den *globalen Diskretisierungsfehler*

$$E_n(x) := y(x) - y_n^{(h_{n,x})}.$$

11.24 Definition: Konvergenz, Konvergenzordnung

Ein m -Schrittverfahren heißt *konvergent* in einem Rechteck $I \times G$, wenn für alle Anfangswertaufgaben

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad \text{mit } x_0 \in I,$$

mit $f \in C^1(I \times G)$, deren Lösung $y : I \rightarrow \mathbb{R}$ global existiert, aus der Bedingung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_k^{(h_{n,x})} = y_0 \quad \text{für } 0 \leq j \leq m-1$$

die Konvergenz des globalen Diskretisierungsfehlers

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_n(x) = 0$$

für alle $x \in I$ folgt.

Das Verfahren hat die *Konvergenzordnung* $p \in \mathbb{N}$, wenn für $f \in C^p(I \times G)$ aus der Bedingung

$$y(x_0 + kh_{n,x}) - y_k^{(h_{n,x})} = \mathcal{O}(|h_{n,x}|^p)$$

für $n \rightarrow \infty$ auch

$$E_n(x) = y(x) - y_n^{(h_{n,x})} = \mathcal{O}(|h_{n,x}|^p)$$

für alle $x \in I$ folgt.

Ziel dieses Abschnittes ist es, die folgende Äquivalenz zu zeigen, die als *Konvergenzsatz von Dahlquist* (1956) bekannt ist.

11.25 Konvergenzsatz von Dahlquist

Ein lineares m -Schritt Verfahren ist genau dann konvergent, wenn es konsistent und Null-stabil ist.

Der **Beweis** wird in drei Teilen erbracht.

1. Schritt: Konvergenz \implies Null-Stabilität

Betrachte die AWA

$$y' = 0, \quad y(x_0) = 0,$$

mit der eindeutigen Lösung $y \equiv 0$. Das m -Schritt Verfahren lautet

$$y_{k+m}^{(h)} + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j y_{k+j}^{(h)} = 0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (11.25a)$$

Dies ist eine homogene lineare Differenzengleichung.

Es sei $\lambda \in \mathbb{C}$ eine Nullstelle von ρ der Vielfachheit s . Als Startwerte wählen wir ein Vielfaches des Anfangsstücks der Fundamentallösung $y^{(s)}$ in Satz 11.17, also

$$y_k^{(h)} := \sqrt{|h|} \frac{k!}{(k-s+1)!} \lambda^{k-s+1}, \quad (11.25b)$$

für $0 \leq k \leq m-1$ (mit $y_k^{(h)} = 0$ für $k < s-1$). Bei festem $x > x_0$ und für $n \rightarrow \infty$ konvergiert $h = h_{n,x}$ gegen Null, also sind diese Werte konsistent mit dem Anfangswert $y(x_0) = 0$. Aus der Differenzengleichung (11.25a) erhalten wir (11.25b) für alle $k \in \mathbb{N}_0$. Dies ergibt

$$|E_n(x)| = \sqrt{\frac{x-x_0}{n}} \frac{n!}{(n-s+1)!} \lambda^{n-s+1}.$$

Diese Folge ist unbeschränkt in den beiden Fällen

- ▶ $|\lambda| > 1$ und $s \geq 1$,
- ▶ $|\lambda| = 1$ und $s \geq 2$.

Also ist in diesen Fällen das Verfahren nicht konvergent, was zu zeigen war.

2. Schritt: Konvergenz \implies Konsistenz

Wir zeigen die beiden Beziehungen $\rho(1) = 0$ und $\rho'(1) = \sigma(1)$.

$\rho(1) = 0$: Betrachte nun die AWA

$$y' = 0, \quad y(x_0) = 1,$$

mit der eindeutigen Lösung $y \equiv 1$. Das m -Schritt Verfahren lautet wieder wie die homogene lineare Differenzengleichung (11.25a). Wir wählen die (exakten) Startwerte $y_k^{(h)} := 1$, $0 \leq k \leq m-1$. Da die Startwerte unabhängig von der Schrittweite h sind, sind alle Folgenglieder $(y_k)_{k \geq 0} := (y_k^{(h)})_{k \geq 0}$, die mit (11.25a) berechnet werden, ebenfalls unabhängig von h . Falls das m -Schritt Verfahren konvergent ist, ergibt sich bei beliebiger Vorgabe von $x \neq x_0$ hieraus

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n^{(h_n, x)} = y(x) = 1.$$

Setzen wir den Grenzwert in die Differenzengleichung (11.25a) ein, erhalten wir

$$0 = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(y_{k+m} + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j y_{k+j} \right) = 1 + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j.$$

Damit gilt $\rho(1) = 0$. Man beachte, dass $\rho'(1) \neq 0$ gelten muss, weil aus der Konvergenz ja die Null-Stabilität folgt, wie vorher gezeigt.

$\rho'(1) = \sigma(1)$: Wir betrachten nun die AWA

$$y' = 1, \quad y(x_0) = 0,$$

mit der eindeutigen Lösung $y(x) = (x - x_0)$. Das m -Schritt Verfahren lautet nun

$$y_{k+m}^{(h)} + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j y_{k+j}^{(h)} = h \sum_{j=0}^m \beta_j, \quad k = 0, 1, \dots \quad (11.25c)$$

Dies ist eine inhomogene lineare Differenzengleichung mit der konstanten rechten Seite $h\sigma(1)$. Wir setzen $\gamma := \frac{\sigma(1)}{\rho'(1)}$ (beachte $\rho'(1) \neq 0$ wie oben) und wählen die Startwerte $y_k^{(h)} := h\gamma k$, $0 \leq k \leq m-1$. Diese sind mit dem Anfangswert $y(x_0) = 0$ konsistent. Die eindeutige Lösung der Differenzengleichung (11.25c) zu diesen Startwerten ist

$$y_k^{(h)} = h\gamma k \quad \text{für alle } k \geq 0,$$

wie wir durch Einsetzen in die Differenzengleichung leicht überprüfen: Verwendung der Gleichung $\rho(1) = 0$ und der Definition von γ ergibt

$$h\gamma(k+m) + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j h\gamma(k+j) = \underbrace{\rho(1)h\gamma k}_{=0} + h\gamma m + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j h\gamma j = h\gamma \rho'(1) = h\sigma(1).$$

Andererseits folgt aus der Konvergenz des Verfahrens

$$x - x_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} y_n^{(h_{n,x})} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x - x_0}{n} \gamma n = (x - x_0) \gamma.$$

Also erhalten wir $\gamma = 1$, was der Behauptung $\rho'(1) = \sigma(1)$ entspricht.

Der **3. Schritt: Konsistenz+Null-Stabilität \implies Konvergenz** wird unter Einbeziehung der Konvergenzordnung neu formuliert.

Satz 11.26

Ist das m -Schritt Verfahren konsistent und Null-stabil, so ist es auch konvergent. Ist seine Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$, so ist auch die Konvergenzordnung p .

Beweis: **Schritt 3a.** Wir betrachten eine feste AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

sowie ein Null-stabiles m -Schritt Verfahren der Konsistenzordnung p ,

$$y_{k+m} + \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}$$

(mit $\alpha_m = 1$). Die Schrittweite h und die Startwerte $y_0^{(h)}, \dots, y_{m-1}^{(h)}$ seien gegeben. (Wir lassen von nun an den oberen Index (h) weg.) Für die globalen Diskretisierungsfehler

$$E_k := y(x_k) - y_k, \quad k = m, m+1, \dots$$

leiten wir zunächst eine Rekursion her. Verwendung des lokalen Diskretisierungsfehlers $r(x_k, y(x_k), h)$ aus Definition 11.10 einerseits und Umstellen der Differenzengleichung andererseits ergibt

$$\begin{aligned} hr(x_k, y(x_k), h) &= \sum_{j=0}^m \alpha_j y(x_{k+j}) - h \sum_{j=0}^m \beta_j f(x_{k+j}, y(x_{k+j})), \\ 0 &= \sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} - h \sum_{j=0}^m \beta_j f(x_{k+j}, y_{k+j}). \end{aligned}$$

Subtraktion beider Gleichungen führt auf

$$hr(x_k, y(x_k), h) = \sum_{j=0}^m \alpha_j E_{k+j} - h \sum_{j=0}^m \beta_j \left[f(x_{k+j}, y(x_{k+j})) - f(x_{k+j}, y_{k+j}) \right].$$

Wegen $\alpha_m = 1$ können wir diese Gleichung mit Hilfe einer "Übergangsmatrix" schreiben als

$$\begin{bmatrix} E_{k+1} \\ E_{k+2} \\ \vdots \\ E_{k+m-1} \\ E_{k+m} \end{bmatrix} = B_\rho \begin{bmatrix} E_k \\ E_{k+1} \\ \vdots \\ E_{k+m-2} \\ E_{k+m-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ h\gamma_k \end{bmatrix}, \quad (11.25d)$$

wobei wir

$$B_\rho := \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ -\alpha_0 & -\alpha_1 & \cdots & \cdots & -\alpha_{m-1} \end{bmatrix}$$

und

$$\gamma_k := \sum_{j=0}^m \beta_j \left[f(x_{k+j}, y(x_{k+j})) - f(x_{k+j}, y_{k+j}) \right] + r(x_k, y(x_k), h)$$

setzen.

Schritt 3.b Die Matrix B_ρ ist die Frobenius-Begleitmatrix von ρ (man beachte wieder $\alpha_m = 1$). Entwicklung der Determinante nach der letzten Zeile ergibt nämlich

$$\det(zI - B_\rho) = \sum_{j=0}^{m-2} \alpha_j z^j + (z + \alpha_{m-1})z^{m-1} = \rho(z).$$

Nach der Voraussetzung der Null-Stabilität gilt also für jeden Eigenwert λ von B_ρ

$$|\lambda| < 1 \quad \text{oder} \quad (|\lambda| = 1 \text{ und } \lambda \text{ ist einfacher Eigenwert von } A).$$

Außerdem ist $\rho(1) = 0$, also ist der Spektralradius von B_ρ genau 1. Mit einer leichten Verschärfung von Hilfssatz 8.1.8 folgern wir, dass dann eine Vektornorm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{C}^m und eine zugehörige (Operator-)Norm $|||\cdot|||$ auf $\mathbb{C}^{m \times m}$ existieren mit

$$|||B_\rho||| = 1 = \inf\{\rho(B_\rho); \rho \text{ natürliche Matrixnorm}\}.$$

D.h. das Infimum aus Hilfssatz 8.1.8 wird unter der Zusatzannahme einfacher Eigenwerte vom Betrag $\text{spr}(B_\rho)$ angenommen.

Schritt 3.c Mit dem Vektor $\vec{E}_k := [E_k, E_{k+1}, \dots, E_{k+m-1}]^T$ lautet die Übergangs-Relation (11.25d)

$$\vec{E}_{k+1} = B_\rho \vec{E}_k + h\gamma_k [0, 0, \dots, 0, 1]^T.$$

Mit der soeben eingeführten Vektor- und Matrixnorm gilt dann

$$\|E_{k+1}\| \leq \|E_k\| + h|\gamma_k|c, \quad c := \|[0, 0, \dots, 0, 1]^T\|. \quad (11.25e)$$

Wir wollen das diskrete Gronwall-Lemma anwenden. Dazu müssen wir die Abhängigkeit von k beim zweiten Term der rechten Seite aufheben. Bezeichne L wieder die Lipschitz-Konstante von f . Die Definition von γ_k ergibt

$$|\gamma_k| \leq L \sum_{j=0}^m |\beta_j| |E_{k+j}| + |r(x_k, y(x_k), h)|.$$

Setzen wir noch $\beta := \max_{0 \leq j \leq m} |\beta_j|$, ergibt sich

$$|\gamma_k| \leq L\beta \sum_{j=0}^m |E_{k+j}| + |r(x_k, y(x_k), h)|.$$

Wir wollen hier die Summe durch Anteile der Form $K\|\vec{E}_k\|$ bzw. $K\|\vec{E}_{k+1}\|$ in der konstruierten Vektornorm abschätzen. Dazu verwenden wir, dass auf \mathbb{C}^m alle Normen äquivalent sind, also eine Konstante $K > 0$ existiert mit

$$\sum_{j=0}^{m-1} |E_{k+j}| \leq K\|\vec{E}_k\|, \quad \sum_{j=1}^m |E_{k+j}| \leq K\|\vec{E}_{k+1}\|.$$

Hieraus folgt $\sum_{j=0}^m |E_{k+j}| \leq K\|\vec{E}_k\| + K\|\vec{E}_{k+1}\|$, und aus (11.25e) wird die Abschätzung

$$\underbrace{(1 - hcKL\beta)}_{=:(1-h\mu)} \|\vec{E}_{k+1}\| \leq \underbrace{(1 + hcKL\beta)}_{=:(1+h\mu)} \|\vec{E}_k\| + hc|r(x_k, y(x_k), h)|.$$

Wird die Schrittweite $h > 0$ klein genug gewählt, so ist $1 - h\mu > 0$, und wir erhalten nach Division

$$\|\vec{E}_{k+1}\| \leq \frac{1 + h\mu}{1 - h\mu} \|\vec{E}_k\| + \frac{hc}{1 - h\mu} |r(x_k, y(x_k), h)|.$$

Schritt 3.d Das diskrete Gronwall-Lemma führt nun zum Abschluss des Beweises: Sei $f \in C^p(I \times G)$ und $y \in C^{p+1}(I)$ globale Lösung. Falls das Verfahren die Konsistenzordnung p besitzt, so gilt

$$\frac{hc}{1 - h\mu} |r(x_k, y(x_k), h)| = \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad h \rightarrow 0.$$

Wir setzen noch

$$\frac{1 + h\mu}{1 - h\mu} =: 1 + \delta(h)$$

und beachten, dass $\delta(h) = \mathcal{O}(h)$ für $h \rightarrow 0$ gilt. Für festes h liefert das Gronwall-Lemma 9.43 die Abschätzung

$$\|\vec{E}_k\| \leq \underbrace{e^{k\delta(h)}}_{\leq M_1 \text{ für } h \rightarrow 0} \|\vec{E}_0\| + \underbrace{\frac{(e^{k\delta(h)} - 1)h}{\delta(h)}}_{\leq M_2 \text{ für } h \rightarrow 0} \mathcal{O}(h^p), \quad h \rightarrow 0.$$

Wenn nun die Startwerte die Konsistenzbedingung in Definition 11.24 erfüllen, so ist durch die Normäquivalenz auch $\|\vec{E}_0\| = \mathcal{O}(h^p)$ für $h \rightarrow 0$. Damit folgt schließlich und endlich die Aussage von Satz 11.26. \square

11.27 Korollar

- ▶ Die expliziten m -Schritt Adams-Bashforth ($m \geq 1$) und Nyström-Verfahren ($m \geq 2$) haben die Konvergenzordnung m .
- ▶ Die impliziten Adams-Moulton ($m \geq 1$) und Milne-Simpson-Verfahren ($m \geq 3$) haben die Konvergenzordnung $m + 1$, das Milne-Simpson-Verfahren mit $m = 2$ sogar die Konvergenzordnung 4.
- ▶ Die impliziten BDF-Verfahren mit $m \leq 6$ haben die Konvergenzordnung m .

11.28 Bemerkung:

- (a) Der Beweis des Satzes 11.26 gibt sogar die a-priori Fehlerabschätzung

$$|y(x_n) - y_n| \leq K e^{\Gamma(x_n - x_0)} \left(\|E_0\|_\infty + (x_n - x_0) \max_k |r(x_k, y(x_k), h)| \right),$$

wobei die Konstanten K und Γ nur von der Lipschitz-Konstanten L von f sowie den Koeffizienten α_j, β_j abhängen.

- (b) Dahlquist (Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations, Math. Scand. 4 (1956) 33-53) hat gezeigt, dass die maximal erreichbare Konsistenzordnung von Null-stabilen m -Schritt-Verfahren gegeben ist durch $m + 1$, falls m ungerade, und $m + 2$, falls m gerade ist. Demnach sind die impliziten Verfahren von Adams-Moulton und Milne-Simpson mit ungeradem m optimal. Weiterhin ist die Simpson Regel ($m = 2$) optimal.

Mit ganz ähnlichem Beweis wie zu Satz 11.26 lässt sich auch wieder ein Stabilitätssatz bzgl. der Störung der Startwerte sowie der rechten Seite f zeigen.

11.29 Störungssatz:

Die Folge $(y_k)_{k \geq 0}$ sei Lösung der Differenzengleichung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k \geq 0,$$

zu den Anfangswerten y_0, \dots, y_{m-1} . Weiter sei die Folge $(\tilde{y}_k)_{k \geq 0}$ Lösung der Differenzengleichung

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j \tilde{y}_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j \tilde{f}_{k+j}, \quad k \geq 0,$$

zu gestörten Anfangswerten $\tilde{y}_k = y_k + \delta_k$, $0 \leq k \leq m-1$, und zur gestörten rechten Seite $\tilde{f}_j = f(x_j, \tilde{y}_j) + \epsilon_j$. Dann gilt

$$|\tilde{y}_n - y_n| \leq K e^{\Gamma(x_n - x_0)} \left(\max_{0 \leq i \leq m-1} |\delta_i| + \sum_{j=0}^{n-m} |\epsilon_j| \right).$$

Hierbei sind die Konstanten K und Γ bestimmt durch die Lipschitz-Konstante von f und die Koeffizienten α_j, β_j .

11.30 Lemma:

Für jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt nach Lemma 8.1.8

$$\operatorname{spr}(A) = \inf \{ \|A\| : \|\cdot\| \text{ ist eine natürliche Matrixnorm} \}.$$

Falls darüberhinaus für jeden Eigenwert λ von A mit $|\lambda| = \operatorname{spr}(A)$ die algebraische Vielfachheit mit seiner geometrischen Vielfachheit übereinstimmt, so wird dieses Infimum angenommen, d.h. es existiert eine natürliche Matrixnorm $\|\cdot\|$ mit

$$\|A\| = \operatorname{spr}(A).$$

Beweis: Genau wie in 8.1.8 wird eine entsprechende Matrixnorm konstruiert. Hierbei wird ausgenutzt, dass die Blöcke der Jordan-Normalform von A , die zu den betragsgrößten Eigenwerten gehören, Diagonalgestalt haben. \square

11.31 Erweiterung auf sog. A-Verfahren

Die im Beweis von Satz 11.26 verwendete Iteration mit der Übergangsmatrix B_ρ (=Frobenius-Begleitmatrix des Polynoms ρ) lässt sofort eine Verallgemeinerung zu: mit einer "allgemeinen" Matrix $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ definieren wir das vektor-wertige Verfahren

$$Z_{k+1} = AZ_k + h\Phi_k$$

mit Vektoren $Z_k \in \mathbb{R}^m$, $k \geq 0$, die in irgendeiner Weise den Bezug zur Lösung der Differentialgleichung in der Nähe von x_k beinhalten, also z.B.

- ▶ ein "Päckchen" von Werten der Lösung $Z_k = [y_k, y_{k+1}, \dots, y_{k+m-1}]^T$ wie in 11.26,
- ▶ Werte der Lösung und ihrer Ableitungen $Z_k = [y_k, hy'_k, \dots, \frac{h^{m-1}}{(m-1)!} y_k^{(m-1)}]$.

Zur Verträglichkeit beider Seiten setzen wir voraus, dass beim Auftreten der exakt gleichen Komponente, z.B. $y_{(k+1)+j}$ auf der linken und $y_{k+(j+1)}$ auf der rechten Seite, eine triviale Gleichung wie etwa bei der ersten Zeile der Frobenius-Begleitmatrix vorliegt.

Der Vektor $\Phi_k = \Phi_k(x_k, Z_k, Z_{k+1}, h)$ übernimmt die Rolle einer Zuwachsfunktion.

Viele Untersuchungen zu linearen Mehrschrittverfahren lassen sich auf diese allgemeineren *A-Verfahren* ausdehnen.

11.32 Beispiel: Zu $Z_k = [y_{2k}, y_{2k+1}, y_{2k+2}]^T$ (hier also verbunden mit der Stelle x_{2k} anstatt x_k) setzen wir

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 & 1 \end{bmatrix} Z_{k+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\alpha_0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 \\ 0 & -\gamma_0 & -\gamma_1 \end{bmatrix} Z_k + h \begin{bmatrix} 0 \\ \beta_0 f_{2k} + \beta_1 f_{2k+1} + \beta_2 f_{2k+2} + \beta_3 f_{2k+3} \\ \delta_0 f_{2k+1} + \delta_1 f_{2k+2} + \delta_2 f_{2k+3} + \delta_3 f_{2k+4} \end{bmatrix}.$$

Dies lässt sich sofort in die Form eines A-Verfahrens bringen. Die erste Zeile ist nur die Verträglichkeitsbedingung zwischen Z_k und Z_{k+1} . Die 2. und 3. Zeile beschreiben die abwechselnde Ausführung der beiden 3-Schritt-Verfahren

$$\begin{cases} y_{2k+3} + \alpha_2 y_{2k+2} + \alpha_1 y_{2k+1} + \alpha_0 y_{2k} & = & h(\beta_0 f_{2k} + \beta_1 f_{2k+1} + \beta_2 f_{2k+2} + \beta_3 f_{2k+3}) \\ y_{2k+4} + \gamma_2 y_{2k+3} + \gamma_1 y_{2k+2} + \gamma_0 y_{2k+1} & = & h(\delta_0 f_{2k+1} + \delta_1 f_{2k+2} + \delta_2 f_{2k+3} + \delta_3 f_{2k+4}). \end{cases}$$

Diesen zyklischen Wechsel zwischen verschiedenen Mehrschrittverfahren nennt man *lineare zyklische Verfahren*. Die Analyse von A-Verfahren liefert also auch Ergebnisse für solche verallgemeinerten Mehrschrittverfahren.

11.33 Beispiel: Das allgemeine R -stufige Runge-Kutta-Verfahren (Abschnitt 9.5) kann auch als lineares A -Verfahren geschrieben werden:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1+a_1} \\ y_{k+1+a_2} \\ \vdots \\ y_{k+1+a_R} \\ y_{k+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{k+a_1} \\ y_{k+a_2} \\ \vdots \\ y_{k+a_R} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^R b_{1j} f(x_{k+1} + a_j h, y_{k+1+a_j}) \\ \sum_{j=1}^R b_{2j} f(x_{k+1} + a_j h, y_{k+1+a_j}) \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^R b_{Rj} f(x_{k+1} + a_j h, y_{k+1+a_j}) \\ \sum_{j=1}^R c_j f(x_{k+1} + a_j h, y_{k+1+a_j}) \end{bmatrix}.$$

Diese Darstellung dient zur Untersuchung der Konsistenzordnung von Runge-Kutta Verfahren und zur Herleitung linearer Bedingungen an die Koeffizienten a_i , b_{ij} und c_i , vgl. die Bemerkung am Ende von Abschnitt 9.4.

Man beachte: diese Beschreibung ist selbst dann implizit, wenn das Runge-Kutta Verfahren explizit ist.

Die Stabilität der A-Verfahren wird durch eine entsprechende Bedingung gesichert.

11.34 Definition: Null-Stabilität von A-Verfahren

Das A-Verfahren heißt *Null-stabil*, wenn A die folgende *Wurzelbedingung* erfüllt: A besitzt keine Eigenwerte vom Betrag größer als Eins und für alle Eigenwerte von A vom Betrag 1 stimmt die algebraische Vielfachheit mit der geometrischen Vielfachheit überein.

Bemerkung: Eine Frobenius-Begleitmatrix B_ρ ist genau dann Null-stabil nach Definition 11.33, wenn das Polynom ρ Null-stabil nach Definition 11.21 ist.

Diese Tatsache ist nicht offensichtlich. Sie ergibt sich durch die spezielle Form der Frobenius-Begleitmatrix:

- ▶ Jeder Eigenwert λ der Frobenius-Begleitmatrix besitzt die algebraische Vielfachheit s , wobei s die Vielfachheit der Nullstelle λ zum Polynom ρ ist.
- ▶ Jeder Eigenwert λ der Frobenius-Begleitmatrix besitzt die geometrische Vielfachheit 1.

Die Behandlung der A-Verfahren verrät also, dass der Begriff der Null-Stabilität genau diese Eigenschaft der Frobenius-Begleitmatrix ausdrückt.

11.35 Bemerkung: Die Stabilität und Konsistenz von A -Verfahren kann wieder mit der Konvergenz in Zusammenhang gebracht werden. In der Regel ist die Konsistenzordnung eine untere Schranke für die Konvergenzordnung stabiler A -Verfahren. Jedoch kann die Konvergenzordnung auch höher sein als die Konsistenzordnung.

11.4 Absolute und A-Stabilität von Mehrschrittverfahren

Wie in Abschnitt 11.6 betrachten wir das Beispiel der monotonen und autonomen AWA

$$y' = \lambda y, \quad y(x_0) = y_0 \neq 0,$$

mit $\lambda \in \mathbb{C}$. Ihre Lösung ist $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $y(x) = y_0 e^{\lambda(x-x_0)}$, ihr Betrag fällt im Fall $\operatorname{Re} \lambda < 0$ exponentiell gegen 0 für $x \rightarrow \infty$.

11.36 Betrachtung der numerischen Stabilität

Das lineare Mehrschrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

(mit $\alpha_m = 1$) ergibt für die obige AWA die Rekursion

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h\lambda \sum_{j=0}^m \beta_j y_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Dies lässt sich auch schreiben als eine homogene lineare Differenzengleichung

$$\sum_{j=0}^m (\alpha_j - h\lambda\beta_j) y_{k+j} = 0, \quad k = 0, 1, \dots$$

Die Beschränktheit der Folge (y_k) bei beliebigen Anfangswerten y_0, \dots, y_{m-1} ist dasselbe wie die Null-Stabilität dieser neuen Differenzengleichung, also nach Satz 11.22 auch äquivalent zur Wurzelbedingung an das Polynom

$$\sum_{j=0}^m (\alpha_j - h\lambda\beta_j) z^j = \rho(z) - h\lambda\sigma(z).$$

11.37 Beispiel: Das 2-Schritt Adams-Bashforth-Verfahren

11.38 Definition: Absolute Stabilität und A-Stabilität

- a) Ein Mehrschrittverfahren heißt *absolut-stabil* für ein $\xi \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, wenn zu jeder AWA $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0$ mit $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ und zur Schrittweite $h \neq 0$ mit $h\lambda = \xi$ die Folge $(y_k)_{k \geq 0}$ beschränkt ist (bei beliebig gegebenen Startwerten y_0, \dots, y_{m-1}). Die Menge

$$\text{SG} := \{\xi \in \mathbb{C} \setminus \{0\}; \text{Verfahren ist stabil für } \xi\}$$

heißt das *Stabilitätsgebiet* des Mehrschrittverfahrens.

- b) Ein Mehrschrittverfahren heißt *A-stabil*, wenn es für alle $\xi \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ mit $\text{Re } \xi \leq 0$ absolut-stabil ist, d.h. wenn

$$\{\xi \in \mathbb{C} \setminus \{0\}; \text{Re } \xi \leq 0\} \subset \text{SG}$$

gilt.

Als Folgerung von Satz 11.22 und der Vorüberlegung 11.36 erhalten wir die folgende Charakterisierung.

11.39 Satz:

Wie in 11.19 seien ρ und σ das 1. bzw. 2. charakteristische Polynom des Mehrschrittverfahrens. Es gilt $\xi \in \text{SG}$ genau dann, wenn keine Nullstelle des *Stabilitätspolynoms*

$$S_\xi(z) := \rho(z) - \xi\sigma(z)$$

den Betrag größer als 1 hat und wenn alle Nullstellen vom Betrag 1 einfach sind, wenn also S_ξ die Wurzelbedingung 11.22 erfüllt.

11.40 Stabilitätsgebiete der Adams-Verfahren:

Das einzige A-stabile Verfahren ist die implizite Trapezregel (Adams-Moulton mit $m = 1$). Mit wachsendem m verkleinert sich das reelle Stabilitätsintervall $SI = SG \cap \mathbb{R}$ sowohl bei den expliziten als auch bei den impliziten Verfahren. Eine Methode, um das Stabilitätsgebiet zu erhalten, ist die folgende:

1. Gesucht sind zunächst alle $\xi \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, für die die Gleichung

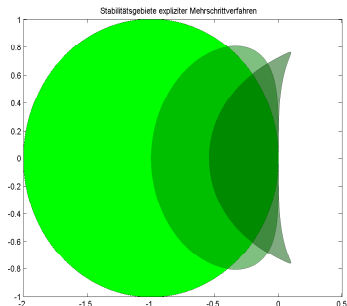
$$S_{\xi}(z) = \rho(z) - \xi\sigma(z) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad T(z) := \frac{\rho(z)}{\sigma(z)} = \xi$$

keine Lösung $z \in \mathbb{C}$ mit $|z| > 1$ besitzt (dies ist der "wesentliche Teil" der Wurzelbedingung). T ist eine rationale Funktion in \mathbb{C} .

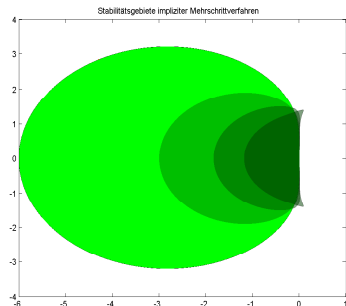
- 1.a Hierfür zeichnen wir die Kurve aller Punkte $T(z)$ mit $|z| = 1$. Falls $\sigma(z) \neq 0$ für diese z , erhalten wir eine geschlossene Kurve in \mathbb{C} .
 - 1.b Für kleines m (und zwar $m = 1, 2, 3$ bei Adams-Bashforth und $m = 2, 3, 4, 5$ bei Adams-Moulton) ist SG das Innere dieser Kurve.
 - 1.c Für größere m zeichnen wir mehrere Kurven $T(z)$ mit festen Radien $|z| = r_j > 1$ und streichen die Teile des Inneren, die von den neuen Kurven durchlaufen werden.
2. Für die Punkte ξ der Kurve in 1.a muss noch überprüft werden, ob sie einfache Nullstellen von S_{ξ} sind. Für eine mehrfache Nullstelle ist (im Fall $\sigma'(z) \neq 0$)

$$S'_{\xi}(z) = 0 \Leftrightarrow \frac{\rho'(z)}{\sigma'(z)} = \frac{\rho(z)}{\sigma(z)} = \xi \Leftrightarrow \rho'(z)\sigma(z) - \rho(z)\sigma'(z) = 0 \Leftrightarrow T'(z) = 0.$$

Der Punkt $\xi = T(z)$ mit $|z| = 1$ gehört also zu SG , falls $T'(z) \neq 0$ gilt.



Stabilitätsgebiete der Adams-Bashforth-Verfahren für $m = 1$ (hellgrün) und $m = 2, 3$ (dunkler schattiert)



Stabilitätsgebiete der Adams-Moulton-Verfahren für $m = 2$ (hellgrün) und $m = 2, 3, 4, 5$ (dunkler schattiert). Für $m = 1$ ist SG die linke Halbebene, siehe 9.58(ii).

11.41 Stabilitätsgebiete der Nyström-Verfahren:

Bei den Nyström- und Milne-Simpson Verfahren enthält das Stabilitätsgebiet nur Punkte der imaginären Achse. Diese Verfahren sind also für steife AWA'n ungeeignet.

Beispiel: Die Mittelpunkregel (Nyström mit $m = 2$) ergibt

$$S_{\xi}(z) = z^2 - 1 - 2\xi z$$

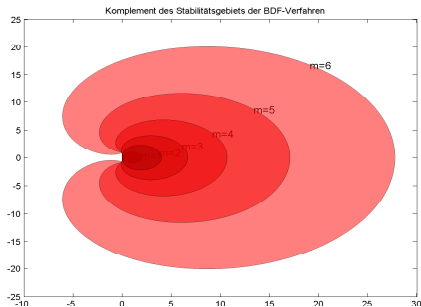
mit 2 komplexen Nullstellen $z_{1,2}$. Wegen $z_1 z_2 = -1$ ist in der Regel eine der Nullstellen vom Betrag größer als 1, ausgenommen beide Nullstellen haben den Betrag 1 und erfüllen $z_1 = -\overline{z_2}$. Dies sind doppelte Nullstellen im Fall $z_1 = z_2 = \pm i$. Einfache Nullstellen $z_1 = e^{i\phi}$, $z_2 = -e^{-i\phi}$ vom Betrag 1 ergeben den Wert $\xi = \frac{z_1 + z_2}{2} = i \sin \phi$, also ist

$$\text{SG} = \{it \mid t \in (-1, 1)\}.$$

11.42 Stabilitätsgebiete der BDF-Verfahren:

Das implizite Euler-Verfahren ($m = 1$) ist A-stabil. Die BDF-Verfahren mit $2 \leq m \leq 6$ sind zwar nicht A-stabil, ihr Stabilitätsgebiet enthält aber das Intervall $(-\infty, 0)$, d.h. für reelle λ in der Modellgleichung gibt es keine Beschränkung der Schrittweite.

Mit Hilfe der Methode in 11.40 zeichnen wir jeweils das **Komplement** von SG in den Fällen $1 \leq m \leq 6$ (von innen nach außen).



11.5 Praktische Aspekte

In diesem Abschnitt sollen vier der wichtigsten Gesichtspunkte der praktischen Durchführung von Mehrschrittverfahren behandelt werden.

- 11.4.1 Berechnung der Startwerte
- 11.4.2 Lösung der impliziten Gleichungen
- 11.4.3 Prädiktor-Korrektor-Methode
- 11.4.4 Automatische Schrittweitensteuerung
- 11.4.5 Schrittweitenwechsel und Nordsieck-Formeln

11.5.1 Berechnung der Startwerte

Gegeben sei ein Mehrschrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

(mit $\alpha_m = 1$) der Konvergenzordnung $p \in \mathbb{N}$. Um die Differenzengleichung rekursiv zur Berechnung von y_{k+m} , $k \geq 0$, anwenden zu können, müssen die Startwerte $y_0^{(h)}, \dots, y_{m-1}^{(h)}$ vorausberechnet werden. Hierzu verwendet man in der Regel eines der Einschrittverfahren aus Kapitel 9.

- ▶ Damit die Startwerte mindestens die Genauigkeit $\mathcal{O}(|h|^p)$ erzielen, genügt es, ein Einschrittverfahren der Konsistenzordnung $p - 1$ zu benutzen. (Beachte: der “globale” Fehler für die ersten $m - 1$ Schritte zur Schrittweite h ist nach dem Gronwall-Lemma beschränkt durch $c_1 \|y(x_0) - y_0\| + c_2 |h|^{p+1}$, wenn der lokale Diskretisierungsfehler des Einschrittverfahrens die Ordnung $\mathcal{O}(|h|^p)$ besitzt.)
- ▶ Dennoch wird man zur Sicherstellung höherer Genauigkeit der Startwerte ein Einschrittverfahren der Konsistenzordnung $\tilde{p} \geq p$ verwenden. Für die Adams-Bashforth und Adams-Moulton Verfahren der Ordnung 4 wird häufig das klassische Runge-Kutta-Verfahren für die Berechnung der Startwerte herangezogen.

11.5.2 Lösung der impliziten Gleichungen

Wir betrachten nun ein implizites m -Schrittverfahren

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j f_{k+j}, \quad k = 0, 1, \dots$$

(mit $\alpha_m = 1$, $\beta_m \neq 0$) der Konvergenzordnung p . Beispiele sind die Adams-Moulton und die Milne-Simpson Verfahren.

Die Differenzengleichung kann in die Form einer Fixpunktgleichung

$$y_{k+m} = h\beta_m f(x_{k+m}, y_{k+m}) + \underbrace{\sum_{j=0}^{m-1} [h\beta_j f_{k+j} - \alpha_j y_{k+j}]}_{=: r_k}$$

umgeformt werden.

- ▶ Ist f Lipschitz-beschränkt mit Lipschitz-Konstante L , so folgt die Kontraktionsbedingung

$$q := h\beta_m L < 1$$

direkt aus der Wahl von $h < \frac{1}{\beta_m L}$. Unter geeigneten Voraussetzungen an den Definitionsbereich von f konvergiert die Fixpunktiteration

$$y_{k+m}^{[t+1]} = h\beta_m f(x_{k+m}, y_{k+m}^{[t]}) + r_k$$

mindestens linear gegen y_{k+m} . Es gilt die *a-priori* Fehlerabschätzung

$$\|y_{k+m}^{[t]} - y_{k+m}\| \leq q^k \|y_{k+m}^{[0]} - y_{k+m}\|.$$

- ▶ Ist die Konstante $L\beta_m$ moderat (nahe bei 1), so erhöht sich die Genauigkeit der Iterierten $y_{k+m}^{[t]}$ in jedem Schritt um den Faktor h der Schrittweite (wegen $q = hL\beta_m$). Führt man $p + 1$ Iterationsschritte durch, so wird

$$\|y_{k+m}^{[p+1]} - y(x_{k+m})\| \leq \|y_{k+m}^{[p+1]} - y_{k+m}\| + \|y_{k+m} - y(x_{k+m})\| = E_{k+m} + \mathcal{O}(h^{p+1})$$

mit dem globalen Diskretisierungsfehler $E_{k+m} \leq C_p h^p$ des (exakten) impliziten Verfahrens. Um die Konvergenzgüte des Verfahrens nicht nennenswert zu stören, wird man also $p + 1$ Schritte der Fixpunktiteration durchführen.

- ▶ Natürlich kann auch auf andere Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungen zurückgegriffen werden, etwa das Newton-Verfahren. Dies ist insbesondere dann sinnvoll, wenn die Lipschitzkonstante L von f groß ist und trotzdem mit großen Schrittweiten gerechnet werden soll (z.B. bei steifen Problemen, siehe Beispiel 9.59).

11.5.3 Prädiktor-Korrektor-Methode

Eine Verbesserung der Methode in 11.4.2 wird erzielt, wenn für die a-priori-Fehlerabschätzung der Fixpunktiteration bereits ein Startwert $y_{k+m}^{[0]}$ mit

$$y_{k+m}^{[0]} - y_{k+m} = \mathcal{O}(h^{p_1})$$

und großem Exponenten p_1 gewählt wird. Dies wird mit einer expliziten Mehrschrittverfahren der Konsistenzordnung $p_1 - 1$ erreicht, dem sog. “Prädiktor” (P). Die Fixpunktiteration der impliziten Mehrschrittverfahren wird als “Korrektor” (C) bezeichnet. Die so entstehenden Verfahren heißen *Prädiktor-Korrektor-Methoden*. Bezeichnet man die Auswertung von f_{k+m} noch mit (E) (für evaluation), so lassen sich die Prädiktor-Korrektor-Methoden mit fester Schrittzahl N der Fixpunktiteration kurz als

$$P(EC)^N \quad \text{oder} \quad P(EC)^N E$$

angeben. Der Algorithmus der ersten Form lautet wie folgt.

11.43 Prädiktor-Korrektor-Methode $P(EC)^N$

Gegeben sei die AWA $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$, die Schrittweite h sowie ein explizites m -Schritt-Verfahren (P) und ein implizites \tilde{m} -Schritt-Verfahren (C). Aus Effizienzgründen gelte $\tilde{m} \leq m$.

1. Berechne y_1, \dots, y_{m-1} mit einem Einschrittverfahren und berechne die Werte f_k , $0 \leq k \leq m-1$.
2. Für $k = 0, 1, \dots$

Berechne

$$y_{k+m}^{[0]} := \sum_{j=0}^{m-1} \left[h\beta_j^{(P)} f_{k+j} - \alpha_j^{(P)} y_{k+j} \right]. \quad (P)$$

Für $\ell = 1, \dots, N$ berechne

$$f_{k+m}^{[\ell-1]} := f(x_{k+m}, y_{k+m}^{[\ell-1]}), \quad (E)$$

$$y_{k+m}^{[\ell]} := h\beta_m^{(C)} f_{k+m}^{[\ell-1]} + \sum_{j=0}^{m-1} \left[h\beta_j^{(C)} f_{k+j} - \alpha_j^{(C)} y_{k+j} \right]. \quad (C)$$

Setze $y_{k+m} := y_{k+m}^{[N]}$ und $f_{k+m} := f_{k+m}^{[N-1]}$.

Bei der Variante der Form $P(EC)^N E$ wird zusätzlich noch $f_{k+m} = f_{k+m}^{[N]}$ berechnet.

Durch geeignete Wahl zweier Verfahren (P) und (C) passender Konvergenzordnung kann die Anzahl N der Iterationsschritte (und der Auswertungen von f) gering gehalten werden. Die Begründung im letzten Abschnitt ergibt folgendes Resultat.

11.44 Konvergenzordnung des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens

Mit $p^{(P)}$ und $p^{(C)}$ bezeichnen wir die Konvergenzordnungen des Prädiktors bzw. Korrektors. Dann ist die Konvergenzordnung p des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens in der $P(EC)^N$ bzw. $P(EC)^N E$ -Form mindestens

$$p = \min\{p^{(C)}, p^{(P)} + N\}.$$

Im Fall $p^{(C)} < p^{(P)} + N$ ist die Fehlerkonstante des kombinierten Verfahrens gleich der Fehlerkonstante des Korrektors.

In der Praxis verwendet man häufig die Adams-Bashforth (P) und Adams-Moulton Verfahren (C) der gleichen Konvergenzordnung und führt nur $N = 1$ Iterationsschritt durch. Damit schlägt die deutlich kleinere Fehlerkonstante c_{p+1} in 11.14 der Adams-Moulton-Verfahren auf die Konvergenz durch.

Beispiel: Die Fehlerkonstante des 4-Schritt Adams-Bashforth Verfahrens ist $C_5^{(P)} = \frac{251}{720}$. Kombiniert mit dem 3-Schritt Adams-Moulton Verfahren in der Form PEC (also nur 1 Schritt des Korrektors) ergibt sich die Fehlerkonstante $C_5^{(C)} = \frac{-19}{720}$. In jedem Schritt sind nur zwei Auswertungen von f erforderlich.

11.45 Bemerkung:

- ▶ Scheinbar sind die Prädiktor-Korrektor-Verfahren (mit $N = 1$) den expliziten Einschrittverfahren überlegen, da pro Schritt zur Schrittweite h mit nur 2 Auswertungen von f eine “beliebig” hohe Konvergenzordnung erzielt werden kann. Die genaue Fehleranalyse zeigt jedoch, dass zur Erzielung gleicher Genauigkeit die Mehrschrittverfahren mit deutlich kleinerer Schrittweite operieren müssen als z.B. das klassische Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 4.
- ▶ Durch die Festlegung der Schrittzahl N ist ein $P(EC)^N$ -Verfahren *explizit*.
 - ▶ Seine Null-Stabilität erhält es vom Korrektor, denn im letzten Schritt der Fixpunktiteration ist

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j^{(C)} y_{k+j} = h \sum_{j=0}^m \beta_j^{(C)} f(x_{k+j}, y_{k+j}^{[N-1]}).$$

- ▶ Das Stabilitätsgebiet wird wieder durch Betrachtung der AWA $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0 \neq 0$, ermittelt, siehe 11.46.

11.46 Stabilitätsgebiet der Prädiktor-Korrektor-Methoden:

Wir betrachten die lineare Modellgleichung $y' = \lambda y$, $y(x_0) = y_0 \neq 0$ und setzen $\xi = \lambda h$. Das Stabilitätsgebiet der $P(EC)^N$ -Methode lässt sich mit Satz 11.34 finden, indem das Verfahren als A-Verfahren 11.31 dargestellt wird. Wir betrachten nur den Fall $m^{(P)} - 1 = m^{(C)} =: m$, der allgemeine Fall lässt sich durch Anpassen erzielen. Sei

$$Z_k = [y_{k-1}, y_k, \dots, y_{k+m-1}, hf_{k-1}, hf_k, \dots, hf_{k+m-1}]^T \in \mathbb{R}^{2m+2}, \quad k \geq 1.$$

- Der Prädiktor (ohne die Auswertung E für f_{k+m}) liefert dann den Startvektor der Fixpunktiteration

$$Z_{k+1}^{[0]} = \begin{bmatrix} y_k \\ \vdots \\ y_{k+m-1} \\ \hline y_{k+m}^{[0]} \\ \hline hf_k \\ \vdots \\ hf_{k+m-1} \\ \hline hf_{k+m}^{[-1]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & & & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & I_m & & 0 \\ \hline -\alpha_0^{(P)} & \dots & \dots & -\alpha_m^{(P)} & \beta_0^{(P)} & \dots & \dots & \beta_m^{(P)} \\ \hline 0 & & & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & & I_m \\ \hline 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} Z_k.$$

- Jeder Korrektor-Schritt (*EC*) (mit der “nachgeholten” Auswertung von f_{k+m}) für $0 \leq t \leq N-1$ ist gegeben durch

$$Z_{k+1}^{[t+1]} = \begin{bmatrix} y_k \\ \vdots \\ y_{k+m-1} \\ \hline y_{k+m}^{[t+1]} \\ hf_k \\ \vdots \\ hf_{k+m-1} \\ \hline hf_{k+m}^{[t]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & 0 & & & 0 \\ & & & \vdots & & & \vdots \\ & I_m & & 0 & & \mathbf{0} & 0 \\ \hline -\alpha_0^{(C)} & \dots & -\alpha_{m-1}^{(C)} & \xi\beta_m^{(C)} & \beta_0^{(C)} & \dots & \beta_{m-1}^{(C)} & 0 \\ \hline & & & 0 & & & 0 \\ & \mathbf{0} & & \vdots & & I_m & \vdots \\ & & & 0 & & & 0 \\ \hline 0 & \dots & 0 & \xi & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix} Z_{k+1}^{[t]}$$

- N Schritte $(EC)^N$ besitzen als Übergangsmatrix die N -te Potenz der Matrix zu (EC) . Wir verwenden die Abkürzung $\beta = \beta_m^{(C)}$ und

$$\tau_N = 1 + \xi\beta + \cdots (\xi\beta)^{N-1}, \quad \tau_0 = 0,$$

und schreiben in den wichtigen Zeilen den Index j anstatt der Aufzählung der Einträge für $0 \leq j \leq m-1$. Man erhält per Induktion (spaltenweise Berechnung der einzelnen Blöcke bietet sich an)

$$Z_{k+1}^{[N]} = \left[\begin{array}{c|c|c|c} I_m & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \mathbf{0} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \hline -\alpha_j^{(C)} \tau_N & (\xi\beta)^N & \beta_j^{(C)} \tau_N & 0 \\ \hline \mathbf{0} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & I_m & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \hline -\alpha_j^{(C)} \xi \tau_{N-1} & \xi (\xi\beta)^{N-1} & \beta_j^{(C)} \xi \tau_{N-1} & 0 \end{array} \right] Z_{k+1}^{[0]}.$$

- Das $P(EC)^N$ -Verfahren für die Modellgleichung $y' = \lambda y$ (mit $\xi = h\lambda$) ergibt also

$$Z_{k+1} = \begin{bmatrix} 0 & & 0 & \\ \vdots & I_m & \vdots & \\ 0 & & 0 & 0 \\ -\alpha_0^{(P)}(\xi\beta)^N & -\alpha_j^{(C)}\tau_N - \alpha_{j+1}^{(P)}(\xi\beta)^N & \beta_0^{(P)}(\xi\beta)^N & \beta_j^{(C)}\tau_N + \beta_{j+1}^{(P)}(\xi\beta)^N \\ 0 & & 0 & \\ \vdots & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & I_m \\ -\alpha_0^{(P)}\xi(\xi\beta)^{N-1} & -\alpha_j^{(C)}\xi\tau_{N-1} - \alpha_{j+1}^{(P)}\xi(\xi\beta)^{N-1} & \beta_0^{(P)}\xi(\xi\beta)^{N-1} & \beta_j^{(C)}\xi\tau_{N-1} + \beta_{j+1}^{(P)}\xi(\xi\beta)^{N-1} \end{bmatrix} Z_k.$$

- Das *Stabilitätspolynom* dieses A-Verfahrens ist das charakteristische Polynom dieser Matrix. Wir nennen die Einträge der $m+1$ -ten Zeile kurz $-a_j$ bzw. b_j und die der letzten Zeile $-c_j$ bzw. d_j . Dann ergibt die Entwicklung nach der $(m+1)$ -ten Zeile

$$S_\xi(z) = \left(z^{m+1} + \sum_{j=0}^m a_j z^j \right) \left(z^{m+1} - \sum_{j=0}^m d_j z^j \right) + \sum_{j=0}^m b_j z^j \sum_{j=0}^m c_j z^j.$$

Setzen wir die Werte a_j etc. ein und vereinfachen, so erhalten wir

$$S_\xi(z) = z^{m+2}\tau_N \left(\rho^{(C)}(z) - \xi\sigma^{(C)}(z) \right) + z\xi(\xi\beta)^{N-1} \left(\rho^{(P)}(z)\sigma^{(C)}(z) - \rho^{(C)}(z)\sigma^{(P)}(z) \right).$$

Der wesentliche Teil (d.h. bis auf Nullstellen in $z = 0$) ist also für kleine Werte von $|\xi|$ nur eine geringe Störung des Stabilitätspolynoms des Korrektors.

Für die Matrix B_N in $P(EC)^N$ erhalten wir mittels Subtraktion des β -fachen der letzten Zeile von der mittleren Zeile (zusammen mit $\tau_N - (\xi\beta)\tau_{N-1} = 1$) den Ausdruck $\det(zI - B_N) =$

z	-1	0	
\vdots	z	\ddots	
0		-1	
0	$\alpha_0^{(C)}$	\dots	$z + \alpha_{m-1}^{(C)}$
0			
\vdots	0		
0			
$\alpha_0^{(P)} \xi(\xi\beta)^{N-1}$	$\alpha_j^{(C)} \xi\tau_{N-1} + \alpha_{j+1}^{(P)} \xi(\xi\beta)^{N-1}$	$-\beta_0^{(P)} \xi(\xi\beta)^{N-1}$	$-\beta_j^{(C)} \xi\tau_{N-1} - \beta_{j+1}^{(P)} \xi(\xi\beta)^{N-1} ((+z))$

wobei $((+z))$ nur im letzten Diagonalelement hinzukommt. Wir erhalten hieraus

$$\begin{aligned}
\det(zI - B_N) &= z\rho^{(C)}(z) \left[z^{m+1} - \xi(\xi\beta)^{N-1} \sigma^{(P)}(z) - \xi\tau_{N-1}(z\sigma^{(C)}(z) - \beta z^{m+1}) \right] \\
&\quad + z\sigma^{(C)}(z) \left[\xi(\xi\beta)^{N-1} (\rho^{(P)}(z) - z^{m+1}) + \xi\tau_{N-1}(z\rho^{(C)}(z) - z^{m+1}) \right] \\
&= z\rho^{(C)}(z) \left[\tau_N z^{m+1} - \xi(\xi\beta)^{N-1} \sigma^{(P)}(z) - \xi\tau_{N-1} z\sigma^{(C)}(z) \right] \\
&\quad + \xi z\sigma^{(C)}(z) \left[-\tau_N z^{m+1} + (\xi\beta)^{N-1} \rho^{(P)}(z) + \tau_{N-1} z\rho^{(C)}(z) \right] \\
&= z^{m+2} \tau_N \left(\rho^{(C)}(z) - \xi\sigma^{(C)}(z) \right) + z\xi(\xi\beta)^{N-1} \left(\rho^{(P)}(z)\sigma^{(C)}(z) - \rho^{(C)}(z)\sigma^{(P)}(z) \right).
\end{aligned}$$

- Das $P(EC)^N E$ -Verfahren mit zusätzlicher Auswertung von $f_{k+m} = f(x_{k+m}, y_{k+m}^{[N]})$ am Ende der Fixpunktiteration hat das Stabilitätspolynom

$$S_{\xi}(z) = z\tau_N \left(\rho^{(C)}(z) - \xi\sigma^{(C)}(z) \right) + (\xi\beta)^N \left(\rho^{(P)}(z) - \xi\sigma^{(P)}(z) \right).$$

Für die Matrix \tilde{B}_N in $P(EC)^N E$ erhalten wir mittels Subtraktion des ξ -fachen der mittleren Zeile von der letzten Zeile den Ausdruck $\det(zI - \tilde{B}_N) =$

$$\begin{vmatrix}
 z & -1 & 0 & \\
 \vdots & z & \ddots & \\
 0 & & \ddots & -1 \\
 \alpha_0^{(P)}(\xi\beta)^N & \alpha_j^{(C)}\tau_N + \alpha_{j+1}^{(P)}(\xi\beta)^N & -\beta_0^{(P)}(\xi\beta)^N & -\beta_j^{(C)}\tau_N - \beta_{j+1}^{(P)}(\xi\beta)^N \\
 0 & & z & -1 \\
 \vdots & & \vdots & z \\
 0 & & 0 & \ddots \\
 0 & \dots & 0 & -\xi z
 \end{vmatrix}$$

wobei $((+z))$ nur im mittleren Diagonalelement hinzukommt. Wir erhalten hieraus

$$\begin{aligned}
 \det(zI - \tilde{B}_N) &= z^{m+1} \left[z^{m+1} + (\xi\beta)^N (\rho^{(P)}(z) - z^{m+1}) + \tau_N (z\rho^{(C)}(z) - z^{m+1}) \right] \\
 &\quad - \xi z^{m+1} \left[(\xi\beta)^N \sigma^{(P)}(z) + \tau_N (z\sigma^{(C)}(z) - \beta z^{m+1}) \right] \\
 &= z^{m+1} \left[-\xi\beta\tau_N z^{m+1} + (\xi\beta)^N \rho^{(P)}(z) + \tau_N z\rho^{(C)}(z) \right] \\
 &\quad - z^{m+1} \left[-\xi\beta\tau_N z^{m+1} + \xi(\xi\beta)^N \sigma^{(P)}(z) + \xi\tau_N z\sigma^{(C)}(z) \right] \\
 &= z^{m+2}\tau_N \left(\rho^{(C)}(z) - \xi\sigma^{(C)}(z) \right) + z^{m+1}(\xi\beta)^N \left(\rho^{(P)}(z) - \xi\sigma^{(P)}(z) \right).
 \end{aligned}$$

11.5.4. Automatische Schrittweitensteuerung

Auch bei den Mehrschrittverfahren ist die Anpassung der Schrittweite h bei der laufenden Rechnung von Bedeutung. Allerdings führt dies zu größerem Aufwand, da mit jeder Änderung der Schrittweite (etwa mit Faktor 2 oder $\frac{1}{2}$) zusätzliche Werte y_k und f_k erforderlich werden.

- ▶ Falls die Schrittweite verdoppelt wird, so benötigt man bereits berechnete Werte, die evtl. nicht mehr im Speicher sind.
- ▶ Bei der Verkleinerung der Schrittweite treten neue x -Werte hinzu, für die keine Funktionswerte vorliegen.

Der Aufwand beim Schrittweitenwechsel ist daher vergleichbar mit dem zur Berechnung der Startwerte (siehe Abschnitt 11.4.1).

11.47 Diskussion: Milne's-Device zur Schrittweitensteuerung

Die Methode zur Steuerung der Schrittweite erfolgt (wie bei Einschrittverfahren) durch Schätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers:

- ▶ Wir betrachten hier das Prädiktor-Korrektor-Verfahren $P(EC)^N$ bzw. $P(EC)^NE$ zu den Adams-Bashforth und Adams-Moulton Verfahren der Konsistenzordnung $p = 4$ (also Adams-Bashforth mit $m = 4$ und Adams-Moulton mit $m = 3$). Die so gefundene Schrittweitensteuerung trägt den Namen "Milne's device".
- ▶ Bisher liege die Schrittweite h vor. Die neue Schrittweite \tilde{h} soll so gewählt werden, dass bei exakten Werten y_{k+j} und f_{k+j} , $0 \leq j \leq m-1$, der relative Fehler von y_{k+m} etwa gleich der Maschinengenauigkeit eps ist (hier $\text{eps} = 10^{-17}$), also

$$r(x_k, y(x_k), \tilde{h}) \approx \text{eps} \frac{|y_{k+m-1}|}{\tilde{h}}.$$

Diese Forderung führt meist zu besseren Ergebnissen als die Kontrolle TOL des absoluten Fehlers in 9.63.

1. Für den lokalen Diskretisierungsfehler der Prädiktor-Korrektor Methode erhalten wir aus Satz 11.44

$$r(x_k, y(x_k), h) = \tau_k h^4 + \mathcal{O}(h^5), \quad \tau_k = c_5^{(C)} \frac{d^5 y}{dx^5}(x_k).$$

$c_5^{(C)} = -\frac{19}{720}$ ist die Fehlerkonstante des Korrektors. Hier wird vorausgesetzt, dass die Lösung y mindestens 5-mal stetig differenzierbar ist.

2. Einen Schätzwert für $\frac{d^5 y}{dx^5}(x_k)$ erhalten wir aus den beiden Fehler-Darstellungen des Prädiktors und des Korrektors

$$\begin{aligned} y(x_{k+m}) - y_{k+m}^{[0]} &= c_5^{(P)} h^5 \frac{d^5 y}{dx^5}(x_k) + \mathcal{O}(h^6), \\ y(x_{k+m}) - y_{k+m}^{[N]} &= c_5^{(C)} h^5 \frac{d^5 y}{dx^5}(x_k) + \mathcal{O}(h^6) \end{aligned}$$

mit den Fehlerkonstanten $c_5^{(P)} = \frac{251}{720}$ und $c_5^{(C)} = -\frac{19}{720}$. Auflösen nach $\frac{d^5 y}{dx^5}(x_k)$ ergibt

$$\frac{d^5 y}{dx^5}(x_k) = \frac{y_{k+m}^{[N]} - y_{k+m}^{[0]}}{h^5 (c_5^{(P)} - c_5^{(C)})} + \mathcal{O}(h).$$

3. Dies liefert die Schätzwerte (vgl. 9.63)

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_k &= \frac{c_5^{(C)}}{c_5^{(P)} - c_5^{(C)}} \frac{y_{k+m}^{[N]} - y_{k+m}^{[0]}}{h^5} \simeq 0.07 \frac{y_{k+m}^{[N]} - y_{k+m}^{[0]}}{h^5} \\ \tilde{r}_h &= 0.07 \frac{y_{k+m}^{[N]} - y_{k+m}^{[0]}}{h} \approx r(x_k, y(x_k), h) \end{aligned}$$

zur gegebenen Schrittweite h .

4. Um für die gesuchte Schrittweite \tilde{h} die Beziehung

$$r(x_k, y(x_k), \tilde{h}) \approx \tilde{\tau}_k \tilde{h}^4 \approx \text{eps} \frac{|y_{k+m-1}|}{\tilde{h}}$$

zu erzielen, setzt man daher zunächst

$$\tilde{h} := h \cdot \underbrace{\left(\frac{\text{eps} |y_{k+m-1}|}{0.07 |y_{k+m}^{[N]} - y_{k+m}^{[0]}|} \right)^{1/5}}_{=:\alpha_k}$$

Dann verfährt man wie folgt:

- a) Gilt $\alpha_k < 0.5$ (und ist $|y_{k+m-1}|$ mindestens $c \cdot \text{eps}$ mit geeignetem c , z.B. $c \geq 10^2$), so ist die Schrittweite zu halbieren oder das Verfahren bei zu kleiner Schrittweite abubrechen.
- b) Gilt in mehreren aufeinanderfolgenden Schritten (etwa 2-3 Schritte) $\alpha_k > 2$, so ist die Schrittweite zu verdoppeln.

11.5.5 Schrittweitenwechsel und Nordsieck-Formeln

Beim Schrittweitenwechsel können “fehlende” y -Werte durch

- ▶ Einsatz eines Einschrittverfahrens der Ordnung $\geq p - 1$,
- ▶ Interpolation zwischen den vorhandenen Werten y_{k+j} mit der Fehlerordnung $\geq p - 1$

beschafft werden. Eine elegantere Methode besteht in der Modifikation des Mehrschrittverfahrens zu den sogenannten Nordsieck-Formeln.

11.48 Nordsieck-Formel zu den Adams-Moulton-Verfahren

Die Entstehung dieser Formeln soll anhand der Adams-Moulton Verfahren verdeutlicht werden. Grob gesagt ist die Nordsieck-Formel ein A-Verfahren, das alle Informationen des Mehrschrittverfahrens auf den einzigen Punkt x_{k+m-1} "konzentriert" und die gleiche Konsistenzordnung beibehält.

1. Das Adams-Moulton-Verfahren besitzt die folgende Darstellung als A-Verfahren. Wir setzen

$$Z_k = [hf_k, \dots, hf_{k+m-2}, hf_{k+m-1}, y_{k+m-1}] \in \mathbb{R}^{m+1},$$

und erhalten

$$Z_{k+1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_0 & \beta_1 & \cdots & \beta_{m-1} & 1 \end{bmatrix} Z_k + hf_{k+m} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \beta_m \end{bmatrix}.$$

Im Folgenden bezeichne B die angegebene Übergangsmatrix und $a := [0, \dots, 0, 1, \beta_m]^T$.

2. Mit $\ell = k + m - 1$ definieren wir den Vektor

$$V_k = V_k(h) := \left[\frac{h^m}{m!} y^{(m)}(x_\ell), \dots, \frac{h^2}{2} y''(x_\ell), h y'(x_\ell), y(x_\ell) \right]$$

der Funktions- und Ableitungswerte von y an der Stelle $x_\ell = x_{k+m-1}$. Durch Taylor-Entwicklung und Berücksichtigung der Konsistenzordnung $m + 1$ erkennt man

$$\begin{aligned} h f_{k+j} &= h f(x_{k+j}, y(x_{k+j})) + \mathcal{O}(h^{m+2}) = h y'(x_{k+j}) + \mathcal{O}(h^{m+2}) \\ &= \sum_{\nu=1}^m \frac{h^\nu y^{(\nu)}(x_{k+m-1})}{(\nu-1)!} (j-m+1)^{\nu-1} + \mathcal{O}(h^{m+1}). \end{aligned}$$

für $0 \leq j \leq m-1$ sowie $y_{k+m-1} = y(x_{k+m-1}) + \mathcal{O}(h^{m+1})$. Setzen wir

$$T := \begin{bmatrix} t_{1,1} & \cdots & t_{1,m} & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ t_{m,1} & \cdots & t_{m,m} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

mit $t_{j,\nu} = (m-\nu+1)(j-m)^{m-\nu}$ für $1 \leq j, \nu \leq m$, so ist

$$Z_k = T V_k + \mathcal{O}(h^{m+1}).$$

3. Die Matrix T ist regulär (bis auf Multiplikation der Spalten und Vertauschung der Spalten ist der obere Block von T die Vandermonde-Matrix zu den Knoten $-m+1, \dots, 0$). Wir ersetzen nun V_k durch den Berechnungs-Vektor

$$W_k = W_k(h) = \left[\frac{h^m}{m!} y_\ell^{(m)}, \dots, \frac{h^2}{2} y_\ell'', h y_\ell', y_\ell \right]$$

mit Näherungswerten an die Funktions- und Ableitungswerte. Als Ersatz für die Adams-Moulton Formel $Z_{k+1} = BZ_k + hf_{k+m}a$ verwenden wir das A-Verfahren

$$W_{k+1}(h) = T^{-1}BTW_k(h) + hf_{k+m}T^{-1}a, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Dieses A-Verfahren besitzt (mindestens) die gleiche Konvergenzordnung wie das Adams-Moulton-Verfahren.

4. Der Schrittweitenwechsel ist bei diesem A-Verfahren sehr einfach zu realisieren: Entscheidet man sich bei Kenntnis von $W_k(h)$ für eine neue Schrittweite $\tilde{h} = \tau h$, so lautet der nächste Schritt

$$W_{k+1}(\tilde{h}) = T^{-1}BTW_k(\tilde{h}) + \tilde{h}f_{k+m}T^{-1}a, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Den erforderlichen Vektor $W_k(\tilde{h})$ erhält man sofort durch

$$W_k(\tilde{h}) = \begin{bmatrix} \tau^m & & & \\ & \ddots & & \\ & & \tau & \\ & & & 1 \end{bmatrix} W_k(h).$$

Es sind also keine weiteren Rechnungen zum Schrittweitenwechsel durchzuführen. Die Nordsieck Formeln sind deshalb weit verbreitete Modifikationen der Adams-Verfahren.

11.49 Beispiel: Adams-Moulton-Nordsieck Formel mit $m = 3$

Wir erhalten die Matrizen

$$T = \begin{bmatrix} 12 & -4 & 1 & 0 \\ 3 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad T^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ \frac{1}{4} & -1 & \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Die Matrix-Form des Adams-Moulton-Verfahrens für $m = 3$ ist

$$\begin{bmatrix} hf_{k+1} \\ hf_{k+2} \\ hf_{k+3} \\ y_{k+3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{24} & -\frac{5}{24} & \frac{19}{24} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} hf_k \\ hf_{k+1} \\ hf_{k+2} \\ y_{k+2} \end{bmatrix} + hf_{k+3} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{3}{8} \end{bmatrix}.$$

Also ergibt sich die Nordsieck-Formel als

$$\begin{bmatrix} \frac{h^3}{6} y_\ell''' \\ \frac{h^2}{2} y_\ell'' \\ hy_\ell' \\ y_\ell \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{6} & 0 \\ \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{8} & \frac{1}{4} & \frac{5}{8} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{h^3}{6} y_{\ell-1}''' \\ \frac{h^2}{2} y_{\ell-1}'' \\ hy_{\ell-1}' \\ y_{\ell-1} \end{bmatrix} + hf_{k+3} \begin{bmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{3}{4} \\ 1 \\ \frac{3}{8} \end{bmatrix}.$$