

Übung 3.13 zeigt, daß man das Verhalten von RK-Verfahren für diagonalisierbare *Systeme* der Form (3.14) durch Analyse des RK-Verfahrens angewendet auf die *skalaren* Probleme (3.15) verstehen kann. Dies motiviert, das Verhalten von RK-Verfahren für die Modellgleichung

$$y' = \lambda y, \quad (3.16)$$

zu betrachten, wobei  $\lambda \in \mathbb{C}$  zugelassen wird. Mit dem Begriff der A-Stabilität wird nun gefaßt, für welche Kombinationen von  $h$  und  $\lambda$  mit  $\operatorname{Re} \lambda \leq 0$  ein RK-Verfahren Approximationen  $y_i$  liefert, die wenigstens beschränkt für  $i \rightarrow \infty$  bleiben.

**Bemerkung 3.14** Die Betrachtung des Problems (3.14) kann man motivieren, indem man qualitativ zu verstehen sucht, wie ein numerisches Verfahren mit Störungen von Anfangsdaten umgeht. Seien hierzu  $u$  und  $v$  zwei Lösungen der Differentialgleichung  $y' = f(t, y)$ . Schreibt man  $v = u + \delta$  für klein angenommene Störung  $\delta$  (d.h. man linearisiert um die Lösung  $u$ ), so ergibt sich durch Taylorentwicklung (‘‘Linearisierung’’)

$$\delta' = f(t, v) - f(t, u) = f(t, u + \delta) - f(t, u) = \partial_y f(t, u) \delta + \dots$$

Vereinfacht man weiter  $f(t, u(t)) \approx f(t_0, u(t_0))$  für kleine  $|t - t_0|$ , so erkennt man, daß die Störung  $\delta$  durch ein Differentialgleichungssystem der Form (3.14) mit  $A = \partial_y f(t_0, u(t_0))$  beschrieben wird mit (kleiner) Störung  $\delta(t_0)$ . Die Störungsanteile, die zu Eigenwerten  $\lambda_i$  mit  $\operatorname{Re} \lambda_i < 0$  gehören, werden schnell weggedämpft und bleiben klein. A-stabile numerische Verfahren teilen diese Eigenschaft mit dem kontinuierlichen Problem: die Störanteile, die zu Eigenwerten  $\lambda_i$  mit  $\operatorname{Re} \lambda_i < 0$  gehören, werden auch von dem numerischen Verfahren nicht verstärkt. ■

**Bemerkung 3.15** Wir haben oben für (3.14) und diagonalisierbares  $A$  herausgearbeitet, daß es aufgrund von Approximationseigenschaften unvermeidbare Schrittweitenbeschränkungen gibt, die mit den Eigenwerten  $\lambda_i$  mit  $\operatorname{Re} \lambda_i \geq 0$  zusammenhängen. Schrittweitenbeschränkungen, die mit den Eigenschaften (der sog. ‘‘Stabilität’’) des Verfahren zusammenhängen, hängen eng mit den Eigenwerten mit negativem Realteil zusammen. Typischerweise sind die Schrittweitenbeschränkungen, die sich aus ‘‘Stabilitätsbedingungen’’ ergeben, je stringenter, desto größer die Beträge der Eigenwerte  $\lambda_i$  mit  $\operatorname{Re} \lambda_i \leq 0$  sind (siehe unten). Es wird deshalb in der Literatur auch die *Steifigkeitsrate*

$$\kappa = \frac{\max\{|\operatorname{Re} \lambda_i| \mid \operatorname{Re} \lambda_i < 0\}}{\min\{|\operatorname{Re} \lambda_i| \mid \operatorname{Re} \lambda_i < 0\}}$$

eingeführt. Ist  $\kappa \gg 1$ , so spricht man von einem *steifen* Problem. Steifigkeitsraten  $\kappa \approx 10^6$  treten in der Praxis, z.B. der chemischen Reaktionskinetik durchaus auf. ■

### 3.2.2 Stabilitätsgebiete von RK-Verfahren

A-Stabilität von RK-Verfahren wird anhand des Modellproblems (3.16) untersucht. Aufgrund der einfachen Struktur der Differentialgleichung (3.16) sind geschlossene Formeln für die Approximationen  $y_i$  für ein gegebenes RK-Verfahren möglich, wie wir im folgenden zeigen. Zunächst beobachten wir, daß die Formeln (3.12), (3.13) die Darstellung

$$y_{i+1} = R(z)y_i, \quad z = \lambda h \quad (3.17)$$

für die Approximationen  $y_i$  erlauben. Damit ist offensichtlich  $y_i$  gegeben durch

$$y_i = (R(z))^i y_0, \quad i \in \mathbb{N}_0, \quad z = \lambda h. \quad (3.18)$$

Im Falle des expliziten Eulerverfahrens  $R$  ein Polynom (vom Grad 1) und im Falle des impliziten Eulerverfahrens  $R$  eine rationale Funktion ist. Ganz allgemein ist die entsprechende Funktion  $R$  für explizite RK-Verfahren ein Polynom während es für implizite Verfahren eine rationale Funktion ist, wie der folgende Satz zeigt:

**Satz 3.16** *Sei ein  $s$ -stufiges RK-Verfahren gegeben, das durch ein Tableau der Form*

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}$$

*beschrieben wird, wobei  $\mathbf{c}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^s$  und  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s \times s}$ . Dann hat ein Schritt mit Weite  $h$  dieses RK-Verfahrens angewandt auf die Differentialgleichung (3.16) die Form*

$$y_{i+1} = R(\lambda h)y_i,$$

*wobei  $R$  die in (3.19) angegebene rationale Funktion ist.<sup>9</sup> Zudem gilt:*

(i) *Sei  $\sigma(\mathbf{A}) \subset \mathbb{C}$  die Menge der Eigenwerte von  $\mathbf{A}$ . Dann gilt für  $\mathbf{e} := (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^s$ :*

$$R(z) = 1 + z\mathbf{b}^\top (\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} \mathbf{e}, \quad z \in \{\zeta \in \mathbb{C} \mid 1/\zeta \notin \sigma(\mathbf{A})\} \quad (3.19)$$

(ii) *Für  $s$ -stufige explizite Runge-Kutta-Verfahren ist  $R$  ein Polynom vom Grad  $\leq s$ .*

(iii)  *$R$  ist stetig bei  $z = 0$ , und es gilt  $R(z) = 1 + z + O(|z|^2)$ ,  $z \rightarrow 0$ .*

(iv) *Ist das Runge-Kutta-Verfahren ein Verfahren mit Konsistenzordnung  $p \in \mathbb{N}$ , so ist*

$$R(z) = e^z + O(|z|^{p+1}), \quad z \rightarrow 0.$$

**Beweis:** Betrachte die Inkrementfunktion  $\Phi(t, y, h)$ , die vom RK-Verfahren definiert wird. Die Stufen  $k_i$  erfüllen das Gleichungssystem

$$k_i = f(t + c_i h, y + \sum_{j=1}^s a_{ij} h k_j), \quad i = 1, \dots, s.$$

Im vorliegenden Fall  $f(t, y) = \lambda y$  ergibt sich durch Multiplikation der Gleichungen mit  $h$  das lineare Gleichungssystem

$$h k_i = \lambda h y + \sum_{j=1}^s a_{ij} (\lambda h) h k_j, \quad i = 1, \dots, s.$$

Wir setzen nun  $\tilde{k}_i := h k_i$  und schreiben  $\tilde{\underline{k}} \in \mathbb{R}^s$  für den Vektor mit Komponenten  $\tilde{k}_i$ ,  $i = 1, \dots, s$ . Mit  $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^s$  sowie  $z = \lambda h$  ist dann das lineare Gleichungssystem gegeben durch

$$(\text{Id}_s - z\mathbf{A}) \tilde{\underline{k}} = y z \mathbf{e}.$$

Somit ergibt sich

$$\tilde{\underline{k}} = y z (\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} \mathbf{e}.$$

---

<sup>9</sup> $R$  ist eine rationale Funktion, falls es Polynome  $P, Q$  gibt, so daß  $R(z) = P(z)/Q(z)$ .

Ein Schritt des RK-Verfahrens

$$\hat{y} = y + h\Phi(t, y, h) = y + \sum_{i=1}^s b_i \tilde{k}_i$$

kann damit geschrieben werden als

$$\hat{y} = y + yz\mathbf{b}^\top (\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} \mathbf{e} = (1 + z\mathbf{b}^\top (\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} \mathbf{e}) y,$$

falls  $1/z$  nicht einer der Eigenwerte von  $\mathbf{A}$  ist. Somit hat  $R$  die in (3.19) angegebene Form. Die Funktion  $R$  ist eine rationale Funktion, was mithilfe der Cramerschen<sup>10</sup> Regel eingesehen werden kann (Übung).

Wir beweisen nun die weiteren Aussagen des Lemmas:

*Beweis von (ii):* Für den Fall von expliziten RK-Verfahren kann man einfacher durch Induktion sehen, daß die Funktion  $R$  ein Polynom vom Grad  $s$  ist (Übung).

*Beweis von (iii):* Die Stetigkeit von  $R$  bei  $z = 0$  folgt aus der Darstellung. Für die Beziehung  $R(z) = 1 + z + O(|z|^2)$  nutzen wir die Neumannsche Reihe für hinreichend kleine  $|z|$  aus: Ist  $|z|$  so klein, daß  $\|z\mathbf{A}\|_2 \leq q < 1$ , so gilt

$$(\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (z\mathbf{A})^i = \text{Id}_s + \sum_{i=1}^{\infty} (z\mathbf{A})^i =: \text{Id}_s + \mathbf{B}(z),$$

und wir können  $\mathbf{B}(z)$  abschätzen durch

$$\|\mathbf{B}(z)\|_2 = \left\| \sum_{i=1}^{\infty} (z\mathbf{A})^i \right\|_2 \leq \sum_{i=1}^{\infty} \|z\mathbf{A}\|_2^i \leq |z| \frac{\|\mathbf{A}\|_2}{1 - \|z\mathbf{A}\|_2} \leq |z| \frac{\|\mathbf{A}\|_2}{1 - q}.$$

Damit ergibt sich

$$R(z) = 1 + z\mathbf{b}^\top (\text{Id}_s - z\mathbf{A})^{-1} \mathbf{e} = 1 + z\mathbf{b}^\top (\text{Id}_s + \mathbf{B}(z)) \mathbf{e} = 1 + z\mathbf{b}^\top \mathbf{e} + z\mathbf{b}^\top \mathbf{B}(z) \mathbf{e};$$

nutzen wir nun  $1 = \sum_{i=1}^s b_i = \mathbf{b}^\top \mathbf{e}$  und  $|\mathbf{b}^\top \mathbf{B}(z) \mathbf{e}| \leq \|\mathbf{b}\|_2 \|\mathbf{B}(z)\|_2 \|\mathbf{e}\|_2$  aus, so erhalten wir

$$R(z) = 1 + z + z\mathbf{b}^\top \mathbf{B}(z) \mathbf{e}, \quad |\mathbf{b}^\top \mathbf{B}(z) \mathbf{e}| \leq \|\mathbf{b}\|_2 \|\mathbf{e}\|_2 \frac{\|\mathbf{A}\|_2}{1 - q} |z| \quad \text{für } |z| \leq q/\|\mathbf{A}\|_2.$$

Dies ist gerade die gewünschte Aussage.

finis 8.DS

*Beweis von (iv):* Nach Annahme ist das RK-Verfahren ein Verfahren der Ordnung  $p$ . Damit folgt insbesondere für die Wahl  $\lambda = -1$ ,  $t_0 = 0$ ,  $y_0 = 1$ , daß es ein  $C > 0$  gibt, so daß der Konsistenzfehler  $\tau(h)$  beschränkt ist durch  $|\tau(h)| \leq Ch^{p+1}$ . Weiter folgt aus der Definition von  $\tau$  und  $z = -h$ , daß  $\tau(h) = e^{-h} - R(-h)$ . Damit erhalten wir für  $z < 0$  hinreichend klein

$$|e^z - R(z)| = |\tau(-z)| \leq C|z|^{p+1}. \quad (3.20)$$

Wir wollen nun aus dieser Abschätzung die Bedingung  $z < 0$  entfernen. Hierzu beobachten wir, daß die Funktion

$$f(z) := e^z - R(z)$$

bei  $z = 0$  eine Taylorentwicklung bis zur Ordnung  $p$  hat:

$$f(z) = \sum_{n=0}^p f_n z^n + R_p(z), \quad f_n := \frac{1}{n!} f^{(n)}(0),$$

wobei  $|R_p(z)| \leq C_{R,p} |z|^{p+1}$  für alle  $z \in \mathbb{R}$  hinreichend nahe bei 0; die Konstante  $C_{R,p} > 0$  hängt nur von  $R$  und  $p$  ab. Die Aussage (3.20) gilt für alle  $z$  hinreichend klein (unabhängig vom Vorzeichen von  $z$ ), falls wir  $f_n = 0$

<sup>10</sup>Gabriel Cramer, 1704-1752, Genfer Mathematiker

für  $0 \leq n \leq p$  zeigen können. Wir zeigen dies durch Widerspruch. Sei  $n \in \{0, \dots, p\}$  der *kleinste* Index mit  $f_n \neq 0$ . Dann ergibt sich nun aus der Abschätzung für  $R$  und (3.20) für  $z < 0$ :

$$\begin{aligned} C|z|^{p+1} &\geq |e^z - R(z)| = |f(z)| = |f_n z^n + \sum_{\nu=n+1}^p f_\nu z^\nu + R_p(z)| \geq |f_n| |z|^n - \sum_{\nu=n+1}^p |f_\nu| |z|^\nu + C_{R,p} |z|^{p+1} \\ &\geq |f_n| |z|^n - C|z|^{n+1} \end{aligned}$$

für geeignetes  $C > 0$ . Division durch  $|z|^n$  ergibt

$$C|z|^{p+1-n} \geq |f_n| - C|z|$$

für alle hinreichend kleine  $|z|$ . Läßt man nun  $z \rightarrow 0-$ , so ergibt sich für  $0 \leq n \leq p$  ein Widerspruch, denn  $|f_n| > 0$  nach Annahme. Also gilt  $f_n = 0$  für  $0 \leq n \leq p$ .  $\square$

Für konstante Schrittweite  $h$  ist damit bei RK-Verfahren für (3.16) die Lösung  $y_i$  wie bereits in (3.18) gesagt geschlossen darstellbar und hat die Form

$$y_i = (R(z))^i y_0, \quad i = 0, 1, \dots$$

Für  $\operatorname{Re} \lambda < 0$  gilt für die exakte Lösung  $y(t) = e^{\lambda t} y_0$ , daß  $y(t) \rightarrow 0$  für  $t \rightarrow \infty$ . Man fordert deshalb von einem *stabilen* Verfahren, daß diese qualitative Eigenschaft ebenfalls erfüllt ist. Offensichtlich ist das nur gegeben, wenn  $|R(z)| < 1$  gilt. Wir definieren deshalb mit Dahlquist<sup>11</sup>:

**Definition 3.17 (Stabilitätsgebiet von Einschrittverfahren, A-Stabilität)** Die in (3.19) definierte Funktion  $R$  heißt die zu dem RK-Verfahren gehörige Stabilitätsfunktion. Sie ist eine rationale Funktion, die auf  $\mathbb{C}$  (mit Ausnahme höchstens endlich vieler Pole) definiert ist. Die Menge

$$S := \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$$

heißt das Stabilitätsgebiet des Runge-Kutta-Verfahrens. Setzt man

$$\mathbb{C}^- := \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re} z \leq 0\}, \quad (3.21)$$

so heißt ein RK-Verfahren A-stabil, falls sein Stabilitätsgebiet  $S$  die Bedingung  $\mathbb{C}^- \subset S$  erfüllt.

Der folgende Satz zeigt, daß kein explizites RK-Verfahren A-stabil sein kann; um A-Stabilität zu erhalten, müssen deshalb implizite Verfahren eingesetzt werden.

**Satz 3.18** Es gilt:

- (i) Kein explizites RK-Verfahren ist A-stabil.
- (ii) Für jedes RK-Verfahren ist  $0 \in \partial S$ .
- (iii) Sei ein implizites  $s$ -stufiges RK-Verfahren gegeben mit Tableau

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}$$

---

<sup>11</sup>Dahlquist, Germund, 1925–2005

für  $\mathbf{c}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^s$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s \times s}$ . Falls  $\mathbf{A}$  invertierbar ist und der Koeffizientenvektor  $\mathbf{b}^\top$  gleich einer Zeile von  $\mathbf{A}$  ist (d.h. für ein  $j \in \{1, \dots, s\}$  gilt  $b_i = a_{ji}$ ,  $i = 1, \dots, s$ ), dann erfüllt die Stabilitätsfunktion  $R$  des Verfahrens die Abschätzung

$$|R(z)| \leq C \frac{1}{|z| + 1}, \quad \forall z \in \mathbb{C} \text{ mit } |z| \geq r_0,$$

für ein  $C$  und ein  $r_0 \geq 0$ , welche nur von  $\mathbf{A}^{-1}$ ,  $\mathbf{b}$  abhängen.

**Beweis:** *Beweis von (i):* In Satz 3.16 haben wir gesehen, daß die Stabilitätsfunktion jedes expliziten  $s$ -stufigen RK-Verfahrens ein Polynom vom Grad  $\leq s$  ist. Nehmen wir an, daß das Verfahren A-stabil ist. Dann folgt

$$\limsup_{z \rightarrow -\infty} |R(z)| \leq 1.$$

Weil  $R$  ein Polynom ist, impliziert dies, daß  $R$  konstant ist. Aus Satz 3.16, (iii) folgt  $R(z) = 1 + z + O(|z|^2)$  für  $z \rightarrow 0$ . Damit kann aber  $R$  nicht die konstante Funktion sein.

*Beweis von (ii):* Nach Satz 3.16, (iii) gilt für RK-Verfahren  $R(z) = 1 + z + O(|z|^2)$ . Damit ist für  $\varepsilon > 0$  hinreichend klein  $|R(\varepsilon)| > 1$  und  $|R(-\varepsilon)| < 1$ . Mithin ist  $0 \in \partial S$ .

*Beweis von (iii):* Die Annahme, daß  $\mathbf{b}$  mit einer Zeile (sagen wir: der  $j$ -ten) von  $\mathbf{A}$  übereinstimmt, impliziert

$$\mathbf{b}^\top = e_j^\top \mathbf{A}, \quad (3.22)$$

wobei  $e_j \in \mathbb{R}^s$  der  $j$ -te Einheitsvektor ist. Weiter verwenden wir wieder die Darstellung von  $R$  aus (3.19) sowie die Neumannsche Reihe:

$$\begin{aligned} R(z) &= 1 + z \mathbf{b}^\top (\text{Id}_s - z \mathbf{A})^{-1} \mathbf{e} = 1 + \mathbf{b}^\top \left( \frac{1}{z} \text{Id}_s - \mathbf{A} \right)^{-1} \mathbf{e} = 1 - \mathbf{b}^\top \mathbf{A}^{-1} \left( \text{Id}_s - \frac{1}{z} \mathbf{A} \right)^{-1} \mathbf{e} \\ &= 1 - \mathbf{b}^\top \mathbf{A}^{-1} \left( \text{Id}_s - \frac{1}{z} \mathbf{A} \right)^{-1} \mathbf{e} = 1 - \mathbf{b}^\top \mathbf{A}^{-1} \left( \text{Id}_s + \frac{1}{z} \mathbf{A}^{-1} + \dots \right) \mathbf{e} \\ &= 1 - \mathbf{b}^\top \mathbf{A}^{-1} \mathbf{e} + O(1/|z|), \quad z \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

(Übung: Überlegen Sie sich eine explizite Abschätzung für die Funktion, die sich hinter der  $O(\cdot)$ -Notation verbirgt—vgl. den Beweis von Satz 3.16, (iii)). Weiter erhalten wir wegen (3.22)  $\mathbf{b}^\top \mathbf{A}^{-1} \mathbf{e} = e_j^\top \mathbf{e} = 1$  und somit die gewünschte Aussage

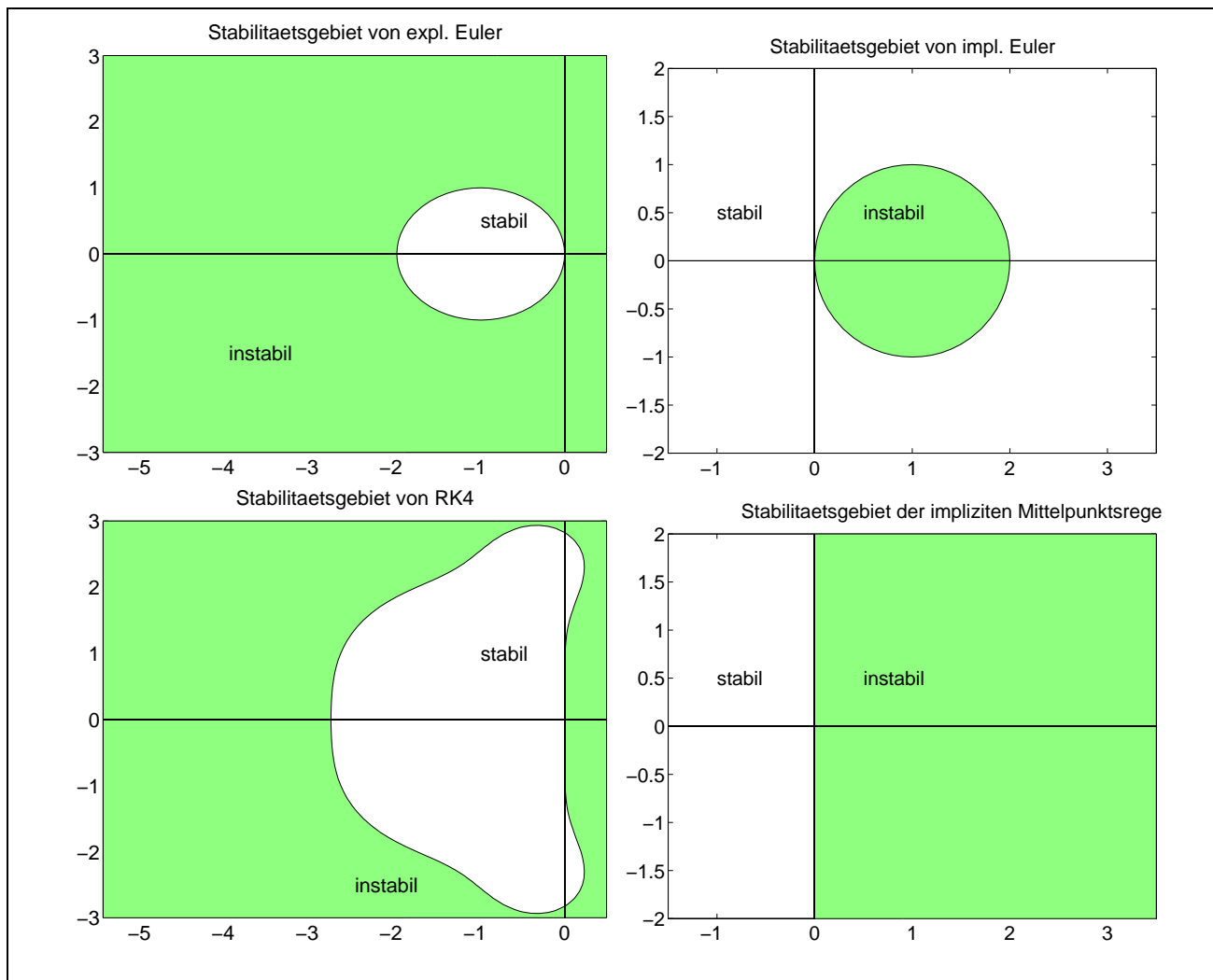
$$R(z) = O(1/|z|), \quad z \rightarrow \infty.$$

□

**Bemerkung 3.19 ( $A(\alpha)$ -Stabilität)** Der Begriff der A-Stabilität kann zum Begriff der  $A(\alpha)$ -Stabilität verallgemeinert werden. Für  $\alpha > 0$  heißt ein RK-Verfahren  $A(\alpha)$  stabil, wenn sein Stabilitätsgebiet  $S$  die Bedingung

$$C(\alpha) \subset S, \quad C(\alpha) = \{re^{i\varphi} \in \mathbb{C} \mid r > 0, \quad \varphi \in (\pi - \alpha, \pi + \alpha)\}$$

erfüllt. Genau wie im Satz 3.18 kann man beweisen, daß es für jedes  $\alpha \in (0, \pi/2)$  kein explizites RK-Verfahren gibt, das  $A(\alpha)$ -stabil ist. ■



**Figur 3.4:** Stabilitätsgebiete für explizites Eulerverfahren, implizites Eulerverfahren, RK4 und implizite Mittelpunktsregel.

**Beispiel 3.20 (Stabilitätsgebiete von Euler- und RK4-Verfahren)** Die Stabilitätsfunktionen  $R_{eE}$ ,  $R_{iE}$ ,  $R_{RK4}$  des expliziten, des impliziten Eulerverfahren, sowie der impliziten Mittelpunktsregel  $R_{iM}$  und des RK4-Verfahrens sind gegeben durch (Übung: man rechne dies nach!)

$$\begin{aligned}
 R_{eE}(z) &= 1 + z, & R_{iE}(z) &= \frac{1}{1 - z}, \\
 R_{iM}(z) &= \frac{1 + z/2}{1 - z/2}, & R_{RK4}(z) &= 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{6}z^3 + \frac{1}{24}z^4.
 \end{aligned}$$

Die entsprechenden Stabilitätsgebiete sind in Fig. 3.4 angegeben. Man sieht, daß das implizite Eulerverfahren und der impliziten Mittelpunktsregel A-stabil sind. Man sieht an den Stabilitätsfunktionen auch die Eigenschaft (iv), welche besagt, daß die Stabilitätsfunktion für  $z \rightarrow 0$  eine gute Approximation an die Exponentialfunktion liefern muß. Weiter sieht man, daß stets — wie in Satz 3.18, (ii) gezeigt — der Ursprung am Rand des Stabilitätsgebietes liegt, d.h.  $0 \in \partial S$ . ■

### 3.2.3 Stabilität: weitere Beispiele

Numerische Schwierigkeiten mit expliziten Verfahren treten auch bei komplizierteren Differentialgleichungen auf als bei der Modelgleichung (3.16). Wir wollen die Leistungsfähigkeit selbst eines so einfachen Verfahrens wie des impliziten Eulerverfahrens anhand der folgenden beiden Beispiele demonstrieren:

**Beispiel 3.21** Zur numerischen Berechnung der Lösung des Anfangswertproblems

$$y'(t) = \lambda(y - \cos t), \quad y(0) = 0, \quad \lambda = -20,$$

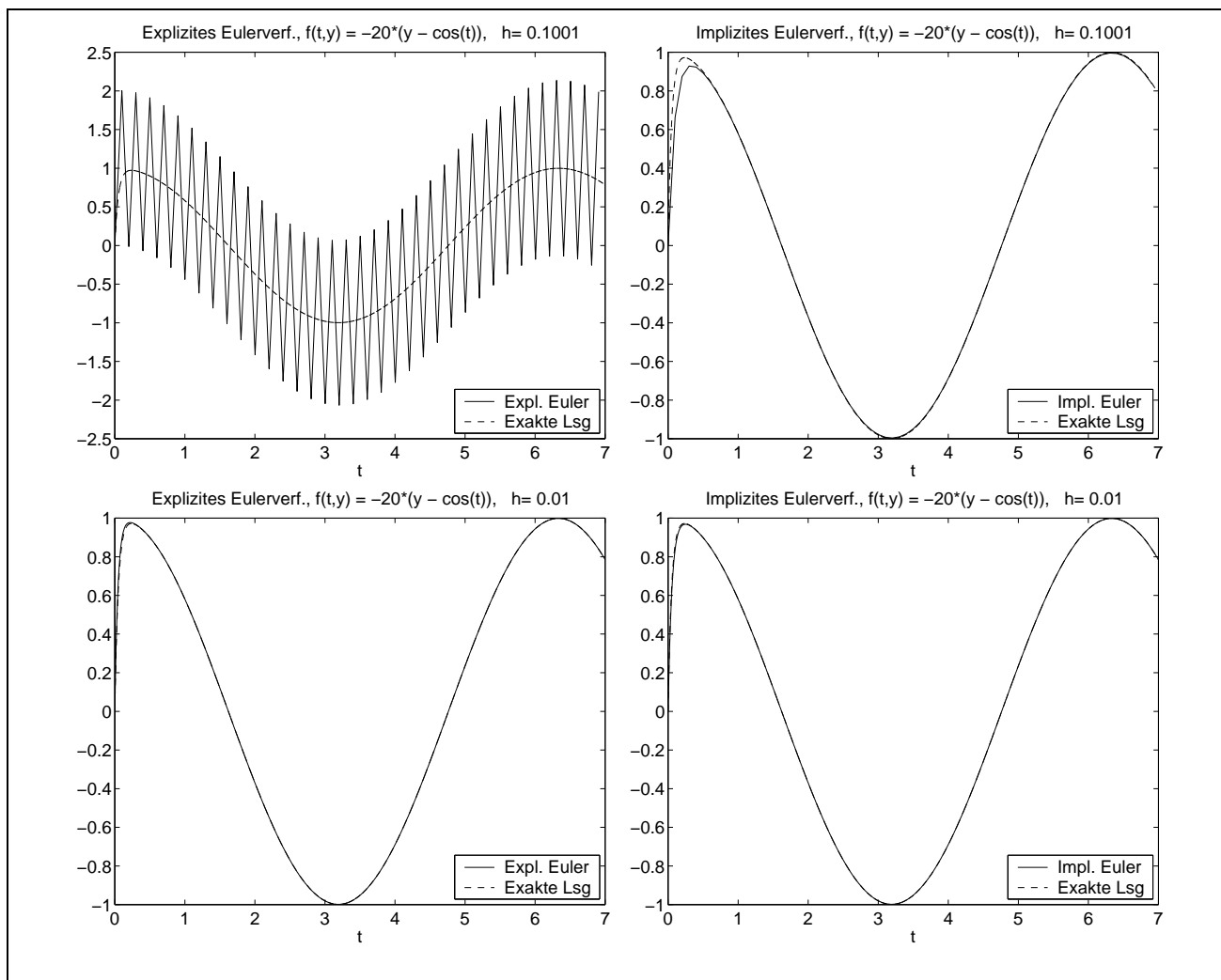
wird das implizite mit dem expliziten Eulerverfahren verglichen. In Fig. 3.5 wird die numerische Lösung für  $h = 0.1001$  und  $h = 0.01$  gezeigt. Während bereits für  $h = 0.1001$  das implizite Eulerverfahren die gesuchte Lösung (bis auf eine kleine Umgebung von  $t = 0$ ) gut approximiert, versagt das explizite Eulerverfahren völlig (beachte:  $|\lambda h| > 2$ ). Erst für  $h = 0.01$  ist  $z = \lambda h$  im Stabilitätsbereich des expliziten Eulerverfahrens, und die numerische Lösung approximiert die gesuchte exakte Lösung gut. ■

**Beispiel 3.22 (Robertson's Beispiel)** Ein oft studiertes Beispiel ist die folgende System von drei Differentialgleichungen, welches gekoppelte chemische Reaktionen simuliert:

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3 \\ y_2' &= 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \\ y_3' &= 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

mit den Anfangsbedingungen  $y_1(0) = 1.0$ ,  $y_2(0) = y_3(0) = 0$ . Wir betrachten die Komponente  $y_2$  der Lösung. Sie wächst bei  $t = 0$  extrem schnell auf den Wert  $\approx 3.7 \cdot 10^{-5}$  (vgl. den Lösungsplot in Fig. 3.7 unten links) und klingt dann langsam wieder ab. Bei  $t = 0.3$  ist der "exakte" Wert  $y_2(0.3) = 3.074626578578934 \cdot 10^{-5}$ .

Wir vergleichen zuerst das Verhalten des expliziten mit dem des impliziten Eulerverfahrens. In Tabelle 3.1 wird der relative Fehler der beiden Eulerverfahren bei  $T = 0.3$  für verschiedene Werte von (uniformen) Schrittweiten  $h$  gezeigt. Während das implizite Eulerverfahren auch für "große" Werte von  $h$  bereits gute Ergebnisse liefert ( $h = 0.1$  entspricht 3 Schritten!), liefert das explizite Eulerverfahren erst gute Ergebnisse, wenn die Schrittweite sehr klein ist (für  $h = 0.1$  und  $h = 0.01$  versagt es vollständig). In Fig. 3.6 wird ein Funktionsplot von implizitem und expliziten Eulerverfahren gezeigt, der das Versagen des expliziten Eulerverfahrens illustriert. In Fig. 3.7 wird auch das Verhalten des adaptiven Algorithmus 2.23 für dieses Anfangswertproblem gezeigt. Die Inkrementfunktion  $\Phi$  ist das klassische RK4-Verfahren (weitere Parameter:  $h_{\min} = 0.0$ ,  $\rho = 0.8$ ). In Fig. 3.7 wird für die Toleranzen  $\tau = 10^{-2}$  und  $\tau = 10^{-5}$  ein Funktionsplot von  $y_2$  sowie die gewählten Schrittweiten gezeigt. Man erkennt, daß für  $\tau = 10^{-2}$  der Fehler groß bleibt, obwohl bereits 129 Schritte gemacht werden mußten. Mit der stringenteren Toleranz  $\tau = 10^{-5}$  ist eine Verbesserung eingetreten, die in erster Linie darauf beruht, daß der "transiente" Teil (der Bereich für sehr kleine  $t$ ) durch einige extrem kleine Schritte besser aufgelöst wurde. Wir beobachten in Fig. 3.7 auch, daß die Schrittweiten "oszillieren", was auf zahlreiche *step rejects* und damit Ineffizienz (unnötige Funktionsauswertungen) hinweist. ■

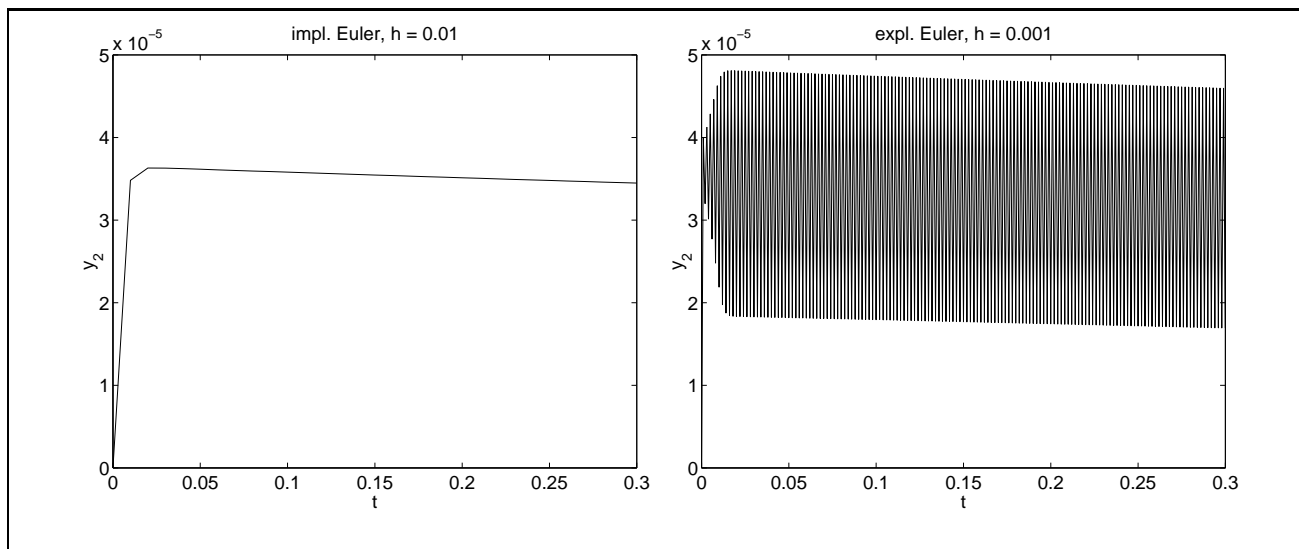


**Figur 3.5:** (vgl. Beispiel 3.21)



$h$	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$
expl. Euler	2.0E+14	NaN	5.E-1	1.1E-6	1.1E-7
impl. Euler	1.0E-3	1.0E-4	1.0E-5	1.1E-6	1.1E-7

**Tabelle 3.1:** (vgl. Beispiel 3.22) Relative Fehler von explizitem und implizitem Eulerverfahren bei Bestimmung von  $y_2(0.3)$ .



**Figure 3.6:** (vgl. Beispiel 3.22) Funktionsplots für implizites ( $h = 0.01$ ) und explizites ( $h = 0.001$ ) Eulerverfahren.

### 3.2.4 Weitere Stabilitätsbegriffe

Der Begriff der A-Stabilität ist faßt die Forderung, die Eigenschaft, daß Lösungen des Modellproblems (3.16) für  $\operatorname{Re} \lambda < 0$  beschränkt bleiben (für  $t \rightarrow \infty$ ), vom numerischen Verfahren erfüllt werden. Für  $\operatorname{Re} \lambda < 0$  gilt sogar, daß die Lösung gegen Null strebt für  $t \rightarrow \infty$ . Will man diese Eigenschaft für ein numerisches Verfahren vererben, so wird man sinnvollerweise fordern, daß für  $\operatorname{Re} \lambda < 0$  und *große* Schritte  $h$  die numerische Approximation klein ist, daß also für  $h \rightarrow \infty$  die numerische Approximation gegen Null konvergiert. Dies bedeutet für RK-Verfahren, daß die Stabilitätsfunktion  $R$  die Bedingung  $\lim_{z \rightarrow -\infty} R(z) = 0$  erfüllen soll. Da die Stabilitätsfunktionen  $R$  nach Satz 3.16 rationale Funktionen sind, ist diese Forderung gleichbedeutend mit  $\lim_{|z| \rightarrow \infty} R(z) = 0$ .

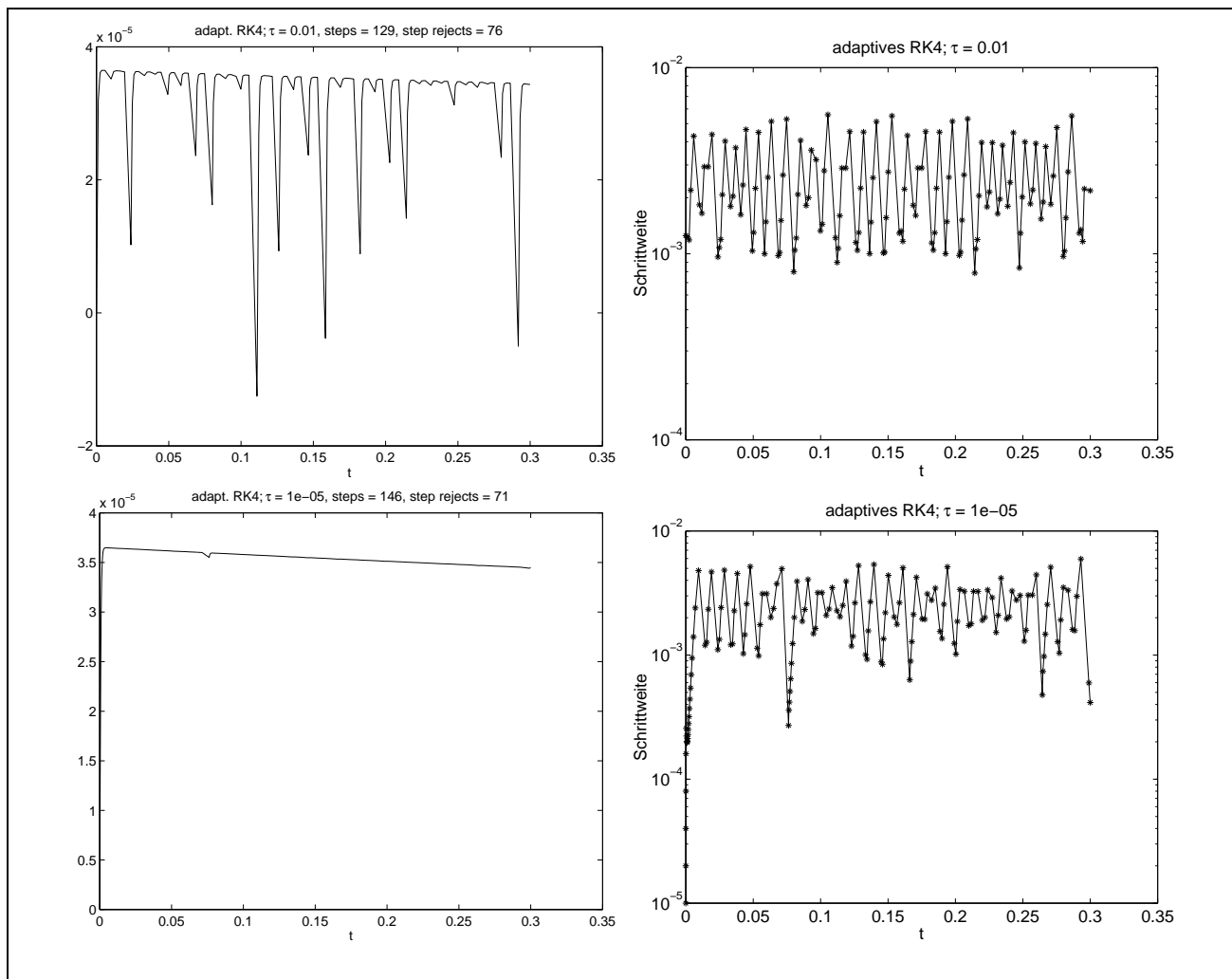
Diese Bedingungen stellen wir im Begriff der L-Stabilität zusammen:

**Definition 3.23 (L-Stabilität)** Ein A-stabiles RK-Verfahren heißt L-stabil, falls die Stabilitätsfunktion  $R$  die Bedingung  $\lim_{|z| \rightarrow \infty} R(z) = 0$  erfüllt.

**Bemerkung 3.24** Analog zum Begriff der  $A(\alpha)$ -Stabilität kann man  $L(\alpha)$ -Stabilität einführen: Ein  $A(\alpha)$ -stabiles RK-Verfahren heißt  $L(\alpha)$ -stabil, wenn  $\lim_{|z| \rightarrow \infty} R(z) = 0$ . ■

Viele wichtige implizite RK-Verfahren sind A- und L-stabil:

**Satz 3.25 (Stabilität von Gauß- und Radau-Verfahren)** Die Gaußverfahren sind A-stabil. Die Radau-Verfahren bei denen  $c_s = 1$  sind L-stabil.



**Figur 3.7:** (vgl. Beispiel 3.22) RK4-Verfahren mit Schrittweitensteuerung für  $\tau = 10^{-2}$  (oben) und  $\tau = 10^{-5}$  (unten). Gezeigt wird der Funktionsplot für  $y_2$  (links) und die Schrittweitenwahl (rechts).

**Beweis:** Siehe z.B. [2, Abschnitt 6.3.2]. □

Das implizite Eulerverfahren ist ein einstufiges Radau-Verfahren und somit L-stabil. Die implizite Mittelpunktsregel ist das einstufige Gauß-Verfahren und somit A-stabil. Diese Aussage erhalten wir natürlich auch durch direkte Betrachtung der Stabilitätsfunktionen (vgl. Beispiel 3.20).

**Bemerkung 3.26 (B-Stabilität)** Ein weiterer Stabilitätsbegriff ist der der B-Stabilität. Nichtexpansive ODEs haben die Eigenschaft, daß

$$|y_{t_0, y_0}(t) - y_{t_0, y'_0}(t)| \leq |y_0 - y'_0| \quad \forall t > t_0.$$

RK-Verfahren, die diese Eigenschaft mit ODE teilen, heißt B-stabil. Man kann zeigen, daß die Gauß- und Radau-Verfahren (mit  $c_s = 1$ ) B-stabil sind und daß B-stabile RK-Verfahren A-stabil sind. Für weiteres verweisen wir auf [2, Abschnitt 6.3.2].