SUPPLEMENT TO SESSION 14

ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 69 (1989) 4, T 273 – T 274

AUZINGER, W.; FRANK, R.

Asymptotische Fehlerentwicklungen bei steifen Differentialgleichungen: Ergebnisse und numerische Verifikation

Es ist bekannt (vgl. z. B. [5]), daß der globale Diskretisierungsfehler der *impliziten Mittelpunktsregel* (IMR) und der *impliziten Trapezregel* (ITR), angewendet auf Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungssysteme, eine Entwicklung nach geraden Potenzen der Schrittweite h besitzt:

$$\eta_\nu - y(t_\nu) = h^2 e_2(t_\nu) + h^4 e_4(t_\nu) + \dots + h^{2q} e_{2q}(t_\nu) + R_\nu \tag{1}$$

$\big(y(t)$ bezeichne die exakte Lösung des gegebenen Anfangswertproblems und η_ν die numerische Approximation an der Stelle $t_\nu = \nu h.\big)$ Diese Entwicklung ist im klassischen, nichtsteifen Fall asymptotisch korrekt, d. h. es gilt

$$\|R_\nu\| \leqq \text{moderater Ausdruck} \cdot h^{2q+2} . \tag{2}$$

In der vorliegenden Arbeit wird diskutiert, ob bzw. unter welchen Voraussetzungen diese Aussage auch für steife Probleme aufrechterhalten werden kann. Weiters wird für diejenigen Fälle, in denen (1) nicht asymptotisch korrekt ist, die genaue Struktur des Restgliedes R_ν angegeben. (Bezüglich einer analogen Diskussion des impliziten Euler-Verfahrens vgl. [1] bzw. die dort zitierte Literatur.)

Wie in [1] betrachten wir steife Probleme der Form

$$y'(t) = A(t)\, y(t) + \varphi\big(t, y(t)\big) , \qquad y(0) = y_0 , \tag{3}$$

wobei die Matrix $A(t)$ ein steifes Spektrum besitzt, d. h. es gelte

$$A(t) = T(t)\, \Lambda(t)\, T^{-1}(t) , \qquad \Lambda(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) & 0 \\ 0 & -c_2(t)/\varepsilon \end{pmatrix} \tag{4}$$

mit glatten Funktionen $T(t)$, $T^{-1}(t)$, $c_1(t)$ und $c_2(t)$ (deren Ableitungen als moderat angenommen werden). Weiters setzen wir voraus

$$\operatorname{Re}\big(c_2(t)\big) \geqq \varkappa > 0 , \tag{5}$$

$\varepsilon > 0$ ist ein kleiner Parameter, der die Steifheit des Problems charakterisiert. $\varphi(t, y)$ sei eine glatte Funktion.

Um (3) der Behandlung durch Methoden der *Singulären Störungstheorie* zugänglich zu machen, transformieren wir das Problem gemäß $\bar{y}(t) := T^{-1}(t)\, y(t)$ in die Gestalt

$$\bar{y}'(t) = \Lambda(t)\, \bar{y}(t) + D(t)\, \bar{y}(t) + T^{-1}(t)\, \varphi\big(t, T(t)\, \bar{y}(t)\big) \tag{6}$$

mit

$$D(t) := -T^{-1}(t)\, T'(t) = \begin{pmatrix} d_{11}(t) & d_{12}(t) \\ d_{21}(t) & d_{22}(t) \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Existenz asymptotisch korrekter Entwicklungen

Als entscheidend für die asymptotische Korrektheit von (1) erweist sich die Gestalt der Matrix $D(t)$.

Satz 1: *Im „stark steifen" Fall $\varepsilon \leqq Ch^{2q}$ ist die Entwicklung (1) für die implizite Mittelpunktsregel asymptotisch korrekt, falls gilt*

$$d_{21}(t) = O(\varepsilon) . \tag{8}$$

Die in (1) auftretenden Funktionen $e_{2i}(t)$ sind glatte Lösungen der „Variationsgleichungen"

$$\left.\begin{aligned} e_2'(t) &= \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, e_2(t) - \tfrac{1}{24}\, y'''(t) + \tfrac{1}{8}\, \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, y''(t) , \\ e_4'(t) &= \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, e_4(t) - \tfrac{1}{1920}\, y^{\mathrm{V}}(t) + \tfrac{1}{384}\, \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, y^{\mathrm{IV}}(t) - \\ &\quad - \tfrac{1}{24}\, e_2'''(t) + \tfrac{1}{8}\, \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, e_2''(t) + \tfrac{1}{2}\, \varphi_{yy}(t, y(t))\, \tfrac{1}{8}\, \big(y''(t) + e_2(t)\big)^2 , \\ &\;\vdots\; . \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

Satz 2: *Im stark steifen Fall $\varepsilon \leqq Ch^{2q}$ ist die Entwicklung (1) für die implizite Trapezregel asymptotisch korrekt, falls gilt*

$$d_{12}(t) = O(\varepsilon) \quad \textit{oder} \quad d_{21}(t) = O(\varepsilon) . \tag{10}$$

Die in (1) auftretenden Funktionen $e_{2i}(t)$ sind glatte Lösungen der Variationsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} e_2'(t) &= \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, e_2(t) + \tfrac{1}{12}\, y'''(t) , \\ e_4'(t) &= \big(A(t) + \varphi_y(t, y(t))\big)\, e_4(t) - \tfrac{1}{120}\, y^{\mathrm{V}}(t) + \tfrac{1}{12}\, e_2'''(t) + \tfrac{1}{2}\, \varphi_{yy}(t, y(t))\, e_2^2(t) \\ &\;\vdots \end{aligned}\right\} . \tag{11}$$

Für $q = 1$ (Entwicklung mit h^4-Restglied) gilt diese Aussage ohne Voraussetzung (10), *d. h. für jedes Problem der Gestalt* (3)—(5).

Beweise dieser Ergebnisse finden sich in [2] (Theorem 3.1, 3.2, 3.3 und 3.5). Bezüglich der obigen Sätze gelten ähnliche Bemerkungen wie im Anschluß an den Satz über das implizite Euler-Verfahren in [1].

Fehlerstrukturen im allgemeinen Fall

In denjenigen Fällen, die durch Satz 1 und Satz 2 nicht abgedeckt sind, treten unglatte Fehleranteile, die nicht durch Variationsgleichungen beschrieben werden können, auf reduziertem Ordnungsniveau auf, etwa auf h^2-Niveau im Fall der IMR. Solche allgemeineren Fehlerstrukturen werden in [3] untersucht. Beispielsweise gilt für die IMR folgendes Resultat.

Satz 3: *Unter der Voraussetzung $\varepsilon \leqq Ch^2$ gilt für den globalen Fehler der impliziten Mittelpunktsregel eine Entwicklung der Gestalt* (1). *Dabei sind die $e_{2i}(t)$ glatte Lösungen der Variationsgleichungen* (9), *und es gilt*

$$R_\nu = T(t_\nu) \begin{pmatrix} h^4\alpha_4(t_\nu; h)\,(-1)^\nu + \ldots \\ h^2\beta_2(t_\nu; h)\,(-1)^\nu + h^4\beta_4(t_\nu; h)\,(-1)^\nu + \ldots \end{pmatrix} \tag{12}$$

mit glatten Funktionen $\alpha_4(t; h)$, $\beta_2(t; h)$ und $\beta_4(t; h)$. Der führende Term $\beta_2(t; h)$ ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$\beta_2'(t; h) = \left(d_{22}(t) - \frac{4\varepsilon}{h^2 c_2(t)}\right)\beta_2(t; h)\,. \tag{13}$$

Die Voraussetzung $\varepsilon \leqq Ch^2$ ist milder als die entsprechende Voraussetzung in Satz 1. Damit sind auch in gewissem Sinn „mittelsteife" Situationen mit abgedeckt. Weiters gibt Satz 3 Auskunft über den stark steifen Fall ($\varepsilon \ll h^2$) für diejenigen Fälle, in denen (8) nicht erfüllt ist. Bezüglich der definierenden Gleichungen für $\alpha_4(t; h)$ und $\beta_4(t; h)$ siehe [3].

Satz 3 beleuchtet den *oszillierenden Charakter* der dominanten unglatten Fehlerterme, wobei die Amplituden durch die Funktionen $\beta_2(t; h)$, $\alpha_4(t; h)$, ... beschrieben werden. Falls $\varepsilon \leqq Ch^2$ nicht erfüllt ist, ist die Amplitude dieser oszillierenden Terme nicht mehr glatt; allerdings tritt dann ein ausgeprägtes *Abklingverhalten* ein. Anstatt der Terme $(-1)^\nu$ treten nun typischerweise Faktoren der Gestalt

$$\prod_{\mu=1}^{\nu} \left(\left(1 - \frac{hc_2\left(t_\mu - \frac{h}{2}\right)}{2\varepsilon}\right) \Bigg/ \left(1 + \frac{hc_2\left(t_\mu - \frac{h}{2}\right)}{2\varepsilon}\right)\right) \tag{14}$$

auf. Die detaillierte Fehlerstruktur für den Fall $\varepsilon \nleqq h^2$ wird in [3] diskutiert.

Anwendungen

In [4] werden Anwendungen der obigen Aussagen besprochen und durch numerische Beispiele illustriert. Ein zentraler Punkt ist hier die Diskussion „Beschleunigter Algorithmen" wie Extrapolationsverfahren oder Iterierte Defektkorrektur. Die genaue Kenntnis der Fehlerstruktur erlaubt eine theoretische Analyse dieser Verfahren und liefert Information darüber, wie die Algorithmen im steifen Fall modifiziert werden müssen, um effizient zu funktionieren. Es stellt sich heraus, daß diese Verfahren auch dann, wenn eine reine asymptotische Fehlerentwicklung nicht existiert, erfolgreich einsetzbar sind (mit gewissen Einschränkungen, insbesondere im Fall der Extrapolation).

Bei der Defektkorrektur ist es wesentlich, bei den zur Defektschätzung verwendeten Interpolationsmechanismen nur auf jeden zweiten Gitterpunkt zuzugreifen, um die Effekte der Fehleroszillation (vgl. obigen Satz 3) auszuschalten. Weiters ist es — sowohl für Extrapolation als auch für Defektkorrektur — vorteilhaft, eine sogenannte „globale Verbindungsstrategie" zu verwenden, um im mittelsteifen Fall das Abklingverhalten der unglatten Fehlerterme auszunützen.

Literatur

1 Auzinger, W.; Frank, R.; Macsek, F.: Fehlerstrukturen bei steifen Differentialgleichungen. Im vorliegenden Band S. T 133 bis T 134.
2 Auzinger, W.; Frank, R.: Asymptotic error expansions for stiff equations: An analysis for the implicit midpoint and trapezoidal rules in the strongly stiff case. Report Nr. 73/88, Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, TU Wien, 1988. (Eingereicht bei Numer. Math.)
3 Auzinger, W.; Frank, R.: Asymptotic error expansions for stiff equations: The implicit midpoint rule. (In Vorbereitung).
4 Auzinger, W.; Frank, R.; Kirlinger, G.: Asymptotic error expansions for stiff equations: Applications. (In Vorbereitung).
5 Gragg, W. B.: Repeated extrapolation to the limit in the numerical solution of ordinary differential equations. Dissertation, UCLA 1963.

Anschrift: Dr. Winfried Auzinger, Dr. R. Frank, Technische Universität Wien, Institut für Angewandte und Numerische Mathematik, Wiedner Hauptstraße 8—10/115, A-1040 Wien, Österreich