Runge-Kutta-Theorie:

Adjungierte Verfahren, *A*-Stabilität, Steife Systeme

Andre Neubert
bat@uni-paderborn.de

Gliederung :

- Adjungierte Verfahren / Symmetrische Verfahren
- A-Stabilität
- Steife Systeme

Zur Umkehr der Zeit gilt für den exakten Fluß: $\left(F_h\right)^{-1} = F_{-h}$

Für unseren numerischen Fluß I_h ist dies so i.a. nicht möglich.

Definition:

Das einem Verfahren I_h **adjungierte Verfahren** ist $I_h^* = \left(I_{-h}\right)^{-1}$.

Ein Verfahren mit $I_h = I_h^*$ heißt **symmetrisch** (selbstadjungiert, reflexiv, reversibel).

Satz:

a) Wir können aus einem bestehenden *s*-stufigem RK-Verfahren mit den Butcher-Parametern $(c_i),(a_{ij}),(b_j)$ folgendermaßen das ebenfalls s-stufige zugehörige adjungierte RK-Verfahren mit den Butcher-Parametern $(c_i^*),(a_{ij}^*),(b_i^*)$ konstruieren:

$$c_i^* = 1 - c_i, \qquad a_{ij}^* = b_i - a_{ij}, \qquad b_j^* = b_j \qquad \text{für } i, j = 1, \ldots, s$$

b) Ein konsistentes s-stufiges RK-Verfahren, dessen Butcher-Parameter die Symmetrie

$$c_{\pi(i)} = 1 - c_i, \qquad a_{\pi(i),\pi(j)} = b_i - a_{ij}, \qquad b_{\pi(j)} = b_j \qquad \text{für } i, j = 1, \ldots, s$$

mit einer beliebigen Permutation $\pi : \{1, \ldots, s\} \to \{1, \ldots, s\}$ aufweisen, ist symmetrisch. Es ist notwendigerweise implizit.

Zur Ordnung von adjungierten Verfahren:

Satz:

Für die Adjungierte I_h^* eines RK-Verfahrens I_h der Ordnung p mit

$$F_h(y) - I_h(y) = e(y)h^{p+1} + \mathrm{O}\left(h^{p+2}\right)$$

gilt

$$F_h(y) - I_h^*(y) = (-1)^p e(y)h^{p+1} + \mathrm{O}\left(h^{p+2}\right).$$

Dies bedeutet, dass das adjungierte Verfahren I_h^* die Ordnung p von I_h übernimmt.

Zur Ordnung von symmetrischen Verfahren:

Satz:

Ein symmetrisches RK-Verfahren hat die Ordnung p, wenn die Ordnungsgleichungen $\Phi(\rho\tau) = \dfrac{1}{\gamma(\rho\tau)}$ für alle Bäume mit ungerader Knotenzahl $|\rho\tau| \leq p$ erfüllt sind. Die Ordnung ist stets gerade.

Bemerkung:

Möchte man also implizierte Verfahren konstruieren und berücksichtigt dabei die Symmetrieforderungen (Seite 4), braucht man die Ordnungsgleichungen für Bäume mit gerader Knotenzahl nicht zu betrachten um auf die gewünschte Ordnungszahl zu kommen.

Satz:

Die Gauß-Legendre-Verfahren sind symmetrisch.

Motivation:

Es gibt spezielle Systeme mit gewissen qualitativen Eigenschaften. So laufen etwa bei asymptotisch stabilen dynamischen Systemen alle Lösungskurven für große Zeiten gegen einen Grenzpunkt. Der Prototyp eines solchen Systems ist das **Skalare Testproblem**, das gegeben ist durch das DGL

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y\,,\;\; y(t), \lambda \in \mathbb{C}\,,$$

dessen Lösungen $y(t) = y(t_0)e^{\lambda(t-t_0)}$ gegen 0 konvergieren falls der Realteil von λ negativ ist.

Wir wollen nun untersuchen, unter welchen Vorraussetzungen ein numerisches Verfahren dieses Verhalten mit beliebiger Schrittweite erhält.

Satz:

Sei ein *s*-tufiges RK-Verfahren gegeben durch die Butcher-Parameter $(c_i),(a_{ij}),(b_j)$ mit $A=(a_{ij}),\ b=(b_j)$.

Der Zeitschritt $I_h(y)=p(\lambda h)y$ des Verfahrens angewendet auf das Testproblem ist die Multiplikation mit einem skalaren Faktor $p(\lambda h)$, der **Stabilitätsfunktion** des Verfahrens.

Mit dem euklidischen Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle$ auf $\mathbb{R}^S$ und $e=(1,\ldots,1)^T\in\mathbb{R}^S$ ist

$$p(z)=1+z\left\langle b,(1-zA)^{-1}e\right\rangle\overset{*}{=}\frac{\det\left(1-z\left(A-eb^T\right)\right)}{\det(1-zA)}$$

eine rationale Funktion des Parameters $z=\lambda h$. Für explizite Verfahren ist die Stabilitätsfunktion ein Polynom.

Beobachtung:

Für ein lineares System $\frac{dy}{dt} = By$ auf dem $\mathbb{R}^N$ liefert das RK-Verfahren den Zeitschritt $I_h(y) = p(hB)y$ durch Multiplikation mit der Matrix $p(hB)$, die für diagonalisierbares $B = T\, diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)T^{-1}$ durch

$$p(hB) = T\, diag(p(\lambda_1 h), \ldots, p(\lambda_N h))T^{-1}$$

gegeben ist. Damit beschreibt die Wirkung des Integrators auf das Testproblem $\frac{dy}{dt} = \lambda y$ (mit komplexem λ) vollständig die Wirkung auf beliebige lineare Systeme. Der exakte Fluß ist durch

$$F_h = e^{hB} = T\, diag\left(e^{\lambda_1 h}, \ldots, e^{\lambda_N h}\right)T^{-1}$$

gegeben.

Definition:

Der **Stabilitätsbereich** eines Integrators mit Stabilitätsfunktion $p : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ ist $S = \{z \in \mathbb{C}; |p(z)| < 1\}$.

Der Integrator heißt ***A*-stabil**, wenn der Stabilitätsbereich die linke Halbebene umfasst: $|p(z)| < 1 \quad \forall z \in \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}(z) < 0$.

Beobachtung:

Für explizite Verfahren ist die Stabilitätsfunktion ein Polynom.
Sie ist damit in der linken komplexen Halbebene unbeschränkt, und daher können explizite Verfahren nicht *A*-stabil sein.

Beispiel 1:

Für das skalare Testproblem $\frac{dy}{dt} = f(y) = \lambda y$ liefert das Euler-Verfahren $I_h(y) = y + hf(y) = (1 + \lambda h)y$. Die Stabilitätsfunktion ist also gegeben durch $p(z) = 1 + z$. Der Stabilitätsbereich *S* ist der Einheitskreis in der komplexen Ebene mit dem Zentrum $(-1,0)$. Das Euler-Verfahren ist also nicht *A*-stabil.

Beispiel 2:

Für die durch $Y = y + hf\left(\left(y+Y\right)/2\right) = y + \lambda h\left(y+Y\right)/2$ definierte implizite Mittelpunktsregel gilt:

$$I_h(y) = Y = \frac{1+\lambda h/2}{1-\lambda h/2}\, y = p(\lambda h)y\,, \quad p(z) = \frac{1+z/2}{1-z/2}.$$

Die Forderung

$$\left|p(z)\right|^2 = p(z)p(\bar{z}) = \frac{1+\left(z+\bar{z}\right)/2 + z\bar{z}/4}{1-\left(z+\bar{z}\right)/2 + z\bar{z}/4} < 1$$

ist äquivalent zu $\mathrm{Re}(z) = \left(z+\bar{z}\right)/2 < 0$.

Der Stabilitätsbereich ist die offene linke komplexe Halbebene, d.h. die implizite Mittelpunktsregel ist A-stabil.

Interpretation des Stabilitätsbereichs:

Betrachte ein lineares AWP mit diagonalisierbarer Matrix *B* wie auf Seite 10. Mit dem iterierten Zeitschritt

$$\left(\underbrace{I_h \circ \ldots \circ I_h}_{n}\right)(y_0) = p(hB)^n y_0 = T\, diag\left(p(\lambda_1 h)^n, \ldots, p(\lambda_N h)^n\right) T^{-1} y_0$$

eines Integrators mit konstanter Schrittweite wird das Abklingen der exakten Lösung numerisch genau dann beschrieben, wenn für alle Eigenwerte gilt: $|p(\lambda_i h)| < 1$, d.h. $\lambda_i h \in S$.

Bei *A*-stabilen Verfahren ist diese Forderung schon wegen der Definition gegeben.

Bei nicht A-stabilen Verfahren muss der Wahl der Schrittweite besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden.

Beispiel:

Das AWP

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1000 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

hat die exakte Lösung

$$y_1(t) = \tfrac{1}{999}\left(e^{-t} - e^{-1000t}\right), \quad y_2(t) = e^{-t}.$$

(weiter auf der Tafel)

Beobachtung:

Zur Integration linearer Systeme muss die Schrittweite h so klein gewählt werden, dass für alle Eigenwerte mit negativem Realteil gilt: $\lambda_i h \in S$.

Andernfalls wird in der numerischen Lösung ein mit n anwachsender Term erzeugt, der in der exakten Lösung exponentiell abklingt.

Zum Erkennen solcher numerisch problematischen Systeme soll nun ein Maß eingeführt werden:

Definition:

Ein lineares System $\frac{dy}{dt} = By$ heißt **steif**, wenn mit den Eigenwerten λ_i von B gilt: $\sigma(B) := \frac{\max_i \left|\mathrm{Re}(\lambda_i)\right|}{\left|\max_i \mathrm{Re}(\lambda_i)\right|} >> 1$.

Für nichtlineare Systeme $\frac{dy}{dt} = f(y)$ auf dem $\mathbb{R}^N$ betrachte als lokales Steifheitsmaß $\sigma(f'(y))$ mit der Jacobi-Matrix erster partieller Ableitungen $f'(y) = (\partial f_i / \partial y_i)$.

Beachte: Es gibt in der Literatur kein allgemein akzeptiertes Steifheitsmaß.

Erklärung:

Die Eigenwerte seien in der Form $\operatorname{Re}(\lambda_1) \geq \ldots \geq \operatorname{Re}(\lambda_N)$ geordnet.

Durch λ_1 ist der führende Term der exakten Lösung gegeben. Für ihn muss gelten: $h|\operatorname{Re}(\lambda_1)| << 1$.

Um das Problem aus dem vorangegangenen Beispiel zu vermeiden, muss weiterhin gelten: $h\lambda_N \in S$.

Dies zwingt bei kleinem Stabilitätsbereich *S* dazu, die Schrittweiten extrem klein zu wählen.

Faustregel:

Zum Integrieren steifer Systeme A-stabile Verfahren verwenden, um nicht zu kleine Schrittweiten wählen zu müssen.

Hier spielen implizite Verfahren wieder eine wichtige Rolle, denn diese können trotz Mehraufwand in einem Schritt aufgrund der größeren Schrittweite einen geringeren Gesamtaufwand erreichen als explizite Verfahren.

Satz:

Ein RK-Verfahren gegeben durch die Butcher-Parameter $(c_i),(a_{ij}),(b_j)$, für das die Symplektizitätseigenschaft $Symp: b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j$ und $b_i > 0$ gilt für $i, j = 1,\dots,s$, ist *A*-stabil.

Folgerung:

Die Gauß-Legendre Verfahren sind *A*-stabil.