Numerik Partieller Differentialgleichungen

Martin Neumüller, Institute of Computational Mathematics, JKU Linz

martin.neumueller@jku.at www.numa.uni-linz.ac.at

Inhaltsverzeichnis

| 2 | Parabolische Differentialgleichungen | | | 2 |
|--|--------------------------------------|----------------------|---|----|
| | 2.1 | Variat | ionsformulierung von parabolischen Anfangs-Randwertproblemen . | 2 |
| | | 2.1.1 | Klassische Formulierung | 2 |
| | | 2.1.2 | Semi-Variationsformulierung | 3 |
| | | 2.1.3 | Abstrakte Variationsformulierung unter Verwendung von Bochner | |
| | | | Analysis | 4 |
| | 2.2 | Semi-Diskretisierung | | 7 |
| | | 2.2.1 | Vertikale Linienmethode | 7 |
| | | 2.2.2 | Der Semi-Diskretisierungsfehler | 9 |
| 2.3 Explizite Runge-Kutta Verfahren für allgemeine gewöh | | Expliz | tite Runge-Kutta Verfahren für allgemeine gewöhnliche Differential- | |
| | | gleich | ungen erster Ordnung | 12 |
| | | 2.3.1 | Das Euler-Verfahren | 12 |
| | | 2.3.2 | Eine Verallgemeinerung: Einschrittverfahren | 13 |
| | | 2.3.3 | Konvergenzanalyse für Einschrittverfahren | 13 |
| | | 2.3.4 | Explizite s -stufige Runge-Kutta Verfahren | 16 |
| | 2.4 | Steife | Differentialgleichungen | 18 |
| | | 2.4.1 | Dissipative Systeme | 19 |
| | | 2.4.2 | Kontraktion und A-Stabilität | 21 |
| | 2.5 | Impliz | ite Runge-Kutta Verfahren | 23 |
| | | 2.5.1 | Konsistenz impliziter Runge-Kutta Verfahren | 26 |
| | | 2.5.2 | A-Stabilität von Runge-Kutta Verfahren | 26 |
| | | 2.5.3 | Allgemeine dissipative Systeme | 27 |
| | 2.6 | Voll-d | iskretisierte parabolische Differentialgleichungen | 28 |

2 Parabolische Differentialgleichungen

2.1 Variationsformulierung von parabolischen Anfangs-Randwertproblemen

Ausgehend von der klassischen Formulierung wollen wir in diesem Abschnitt eine schwache Formulierung herleiten.

2.1.1 Klassische Formulierung

Wir betrachten das beschränkte Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, d=1,2,3 mit hinreichend glatten Rand $\Gamma = \partial \Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ und weiters das Zeitintervall (0,T) mit $0 < T < \infty$. Wir definieren dann den Raum-Zeit-Zylinder $Q_T := \Omega \times (0,T) \in \mathbb{R}^{d+1}$. Die Problemstellung lautet dann: Gesucht ist $u: \overline{Q}_T \to \mathbb{R}$, sodass

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + (\mathcal{L}u)(x,t) = f(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in Q_T,$$

$$u(x,t) = g_D(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in \Gamma_D \times (0,T),$$

$$(2.2)$$

$$u(x,t) = g_D(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in \Gamma_D \times (0,T), \tag{2.2}$$

$$(A(x)\nabla u(x,t)) \cdot \underline{n}(x) = g_N(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in \Gamma_N \times (0,T),$$

$$u(x,0) = u_0(x) \qquad \text{für } x \in \overline{\Omega}$$

$$(2.4)$$

$$u(x,0) = u_0(x)$$
 für $x \in \overline{\Omega}$ (2.4)

mit dem Differentialoperator

$$(\mathcal{L}u)(x,t) := -\operatorname{div}(A(x)\nabla u(x,t)) + \underline{b}(x) \cdot \nabla u(x,t) + c(x)u(x,t),$$

den hinreichend regulären Koeffizienten

$$A(x) \in \mathbb{R}^{d \times d}, \quad b(x) \in \mathbb{R}^d, \quad c(x) \in \mathbb{R} \quad \text{für } x \in \overline{\Omega}$$

und den gegebenen skalaren Daten f, g_D, g_N, u_0 .

Beispiel 2.1 (Das d-dimensionale parabolische Modellproblem). Für A = I, $\underline{b} = \underline{0}$ und c = 0 erhalten wir das d-dimensionale Modellproblem

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) - \Delta u(x,t) = f(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in Q_T,$$

$$u(x,t) = g_D(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in \Gamma_D \times (0,T),$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x,t) = g_N(x,t) \qquad \text{für } (x,t) \in \Gamma_N \times (0,T),$$

$$u(x,0) = u_0(x) \qquad \text{für } x \in \overline{\Omega}.$$

Für die Klassische Formulierung (2.1)–(2.4) müssen die Daten g_D und u_0 die Bedingung

$$\lim_{t\to 0} g_D(x,t) = u_0(x) \qquad \text{für alle } x \in \Gamma_D$$

erfüllen, damit für die klassische Lösung u die Stetigkeit gewährleistet werden kann. Weitere Diskussionen über die Funktionenräume im klassischen Sinn werden hier nicht behandelt.

Bemerkung 2.2. Für den Fall $g_D \neq 0$ kann die Problemstellung (2.1)–(2.4) homogenisiert werden, falls es eine Funktion $g: \overline{Q}_T \to \mathbb{R}$ gibt für die gilt

$$g(x,t) = g_D(x,t)$$
 für alle $(x,t) \in \Gamma_D \times (0,T)$.

Auf Grund der Bemerkung 2.2 betrachten wir im Weiteren den Fall $g_D = 0$.

2.1.2 Semi-Variationsformulierung

Die Herleitung dieser Variationsformulierung beruht auf den folgenden Schritten:

- Multiplikation der Differentialgleichung (2.1) mit einer Testfunktion $v:\overline{\Omega}\to\mathbb{R}$.
- Integration über das Rechengebiet Ω .
- Partielle Integrations des Hauptteils.
- Einarbeitung der natürlichen Randbedingung (2.3).
- Die wesentliche Randbedingung (2.2) und die Anfangsbedingung (2.4) werden explizit gefordert.

Wir erhalten dann die Variationsformulierung: Gesucht ist $u: \overline{Q}_T \to \mathbb{R}$ mit u(x,t) = 0 für $(x,t) \in \Gamma_D \times (0,T)$, sodass

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t)v(x) + a(u(\cdot,t),v) = \langle F(t), v \rangle,$$

für alle $v: \overline{Q}_T \to \mathbb{R}$ mit v(x) = 0 für $x \in \Gamma_D$ und weiters

$$u(x,0) = u_0(x)$$
 für alle $x \in \overline{\Omega}$

erfüllt ist. Dabei ist die Bilinearform für $t \in (0,T)$ gegeben durch

$$a(u(\cdot,t),v) := \int_{\Omega} \left[A(x)\nabla u(x,t) \cdot \nabla v(x) + \underline{b}(x) \cdot \nabla u(x,t)v(x) + c(x)u(x,t)v(x) \right] dx$$

und die Linearform ist definiert als

$$\langle F(t), v \rangle := \int_{\Omega} f(x, t)v(x)dx + \int_{\Gamma_N} g_N(x, t)v(x)ds_x.$$

Zur einfacheren Darstellung schreiben wir jetzt die Funktion u = u(x,t) also Funktion von t, deren Werte Funktionen von x sind, also

$$u(x,t) = u(t)(x).$$

Unter Verwendung der schwachen Ableitungen aus Kapitel?? und des daraus resultierenden Funktionenraums

$$V = \{v \in H^1(0,1) : v = 0 \text{ auf } \Gamma_D\}$$

ergibt sich für klassiche Voraussetzungen bezüglich der Zeit die Semi-Variationsformulierung: Gesucht ist $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$, sodass

$$(u',v)_{L^2(\Omega)} + a(u(t),v) = \langle F(t),v \rangle \qquad \text{für alle } v \in V \text{ und alle } t \in (0,T),$$

$$u(0) = u_0 \qquad \text{in } V$$

$$(2.5)$$

erfüllt ist. Dabei stellen wir an die Daten die Voraussetzungen

$$f \in \mathcal{C}([0,T], L^2(\Omega)), \qquad g_N \in \mathcal{C}([0,T], L^2(\Gamma_N)), \qquad u_0 \in V,$$

beziehungsweise an die Koeffizienten

$$A \in [L^{\infty}(\Omega)]^{d \times d}, \quad \underline{b} \in [L^{\infty}(\Omega)]^{d}, \quad c \in L^{\infty}(\Omega).$$

Unter diesen Voraussetzungen ist die Bilinearform $a: V \times V \to \mathbb{R}$ beschränkt und weiters ist $F(t) \in V^*$ für alle $t \in [0, T]$ und, siehe Kapitel ??.

Ziel ist es nun die klassischen Voraussetzungen bezüglich der Zeit auch abzuschwächen.

2.1.3 Abstrakte Variationsformulierung unter Verwendung von Bochner Analysis

In diesem Abschnitt wollen wir, ausgehend von einer abstrakten semi-variationellen Formulierung, unser endgültiges Variationsproblem herleiten. Dazu seien V und H zwei Hilbert Räume mit $V \subseteq H$. Weiters sei $a: V \times V \to \mathbb{R}$ eine auf V beschränkte und elliptische Bilinearform. Dann betrachten wir die semi-variationelle Formulierung: Gesucht ist $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$, sodass

$$\begin{aligned} (u'(t),v)_H + a(u(t),v) &= \langle F(t),v\rangle & \text{für alle } v \in V \text{ und alle } t \in (0,T), \\ (u(0),w) &= (u_0,w) & \text{für alle } w \in H \end{aligned}$$

erfüllt ist. Dabei sei vorerst $F \in \mathcal{C}([0,T],V^*)$.

Definition 2.3 (Bochner-meßbar). Eine Funktion $w:(0,T)\to V$ heißt Bochner-meßbar, falls die Funktionen

$$t\mapsto \langle G,w(t)\rangle$$

für alle $G \in V^*$ auf (0,T) Lebesque-meßbar sind.

Lemma 2.4. Sei $w:(0,T) \to V$ Bochner-meßbar, dann ist die Funktion

$$t \mapsto \|w(t)\|_{V}$$

Lebesgue- $me\beta bar$.

Beweis. Sei $w:(0,T)\to V$ Bochner-meßbar, dann ist die Funktion

$$t \mapsto \frac{\langle G, w(t) \rangle}{\|G\|_{V^*}}$$

für alle $0 \neq G \in V^*$ Lebesgue-meßbar. Das Supremum von einer Folge von Lebesgue-meßbarer Funktionen ist wiederum Lebesgue-meßbar und somit folgt, dass

$$||w(t)||_V = \sup_{0 \neq G \in V^*} \frac{\langle G, w(t) \rangle}{||G||_{V^*}}.$$

Lebesgue-meßbar ist.

Definition 2.5. Sei V ein Banachraum, dann definieren wir die Menge der Funktionen

$$L^{2}((0,T),V) := \left\{ v : (0,T) \to V : v \text{ ist Bochner-me} \beta bar \text{ und } \|v\|_{L^{2}((0,T),V)} < \infty \right\},$$

mit

$$||v||_{L^2((0,T),V)} := \left[\int_0^T ||v(t)||_V^2 dt\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Bemerkung 2.6. Man kann zeigen, dass die Menge $L^2((0,T),V)$ ausgestattet mit der Norm $\|\cdot\|_{L^2((0,T),V)}$ vollständig ist, also ein Banachraum ist.

Für $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$ gilt

$$(u'(t), v)_H = \frac{d}{dt}(u(t), v)_H$$
 für alle $v \in V$.

Dies motiviert nun einen schwachen Ableitungsbegriff für die reelle Funktion

$$t \mapsto (u(t), v)_H$$

einzuführen.

Definition 2.7. Eine Funktion $w' \in L^2((0,T),V^*)$ heißt verallgemeinerte Ableitung einer Funktion $w \in L^2((0,T),V)$ bezüglich H, falls für alle $v \in V$ die Funktion $t \mapsto \langle w'(t),v \rangle$ die schwache Ableitung der Funktion $t \mapsto (w(t),v)_H$ auf (0,T) ist, das heißt es gilt

$$\int_0^T \varphi(t) \langle w'(t), v \rangle dt = -\int_0^T \varphi'(t) (w(t), v)_H dt$$

für alle $v \in V$ und alle $\varphi \in \mathcal{C}_0^{\infty}(0,T)$.

Bemerkung 2.8. Falls für eine Funktion $w \in L^2((0,T),V)$ die schwache Ableitung $w' \in L^2((0,T),V^*)$ existiert, schreiben wir auch

$$\frac{d}{dt}(w(t),v)_H:=\langle w'(t),v\rangle \qquad \text{für alle }v\in V.$$

Definition 2.9. Mit $H^1((0,T),V;H)$ bezeichnen wir den Sobolev-Raum, mit Funktionen aus $L^2((0,T),V)$ für die, die schwache Ableitung in $L^2((0,T),V^*)$ bezüglich H existiert, also

$$H^1((0,T),V;H) := \left\{ v \in L^2((0,T),V) : \text{es existiert } v' \in L^2((0,T),V^*) \text{ bezüglich } H \right\}.$$

Weiters wird durch

$$||v||_{H^1((0,T),V;H)} := \left[||v||_{L^2((0,T),V)}^2 + ||v'||_{L^2((0,T),V^*)}^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

eine Norm auf $H^1((0,T),V;H)$ definiert.

Theorem 2.10. Die Einbettung $H^1((0,T),V;H) \subset \mathcal{C}([0,T],H)$ ist stetig. Das heißt, es existiert eine Konstante $c_{tr} > 0$, sodass

$$\max_{t \in [0,T]} \|v(t)\|_{H} \le c_{tr} \|v\|_{H^{1}((0,T),V;H)} \qquad \text{für alle } v \in H^{1}((0,T),V;H).$$

Beweis. Beweisskizze siehe Übungen oder siehe [Zeidler].

Theorem 2.10 garantiert, dass die Punktauswertung u(0) wohldefiniert ist in H. Mit den oben eingeführten Räumen können wir nun das endgültige Variationsproblem aufstellen: Gesucht ist $u \in H^1((0,T),V;H)$, sodass

$$\frac{d}{dt}(u(t),v)_H + a(u(t),v) = \langle F(t),v\rangle \qquad \text{für alle } v \in V \text{ und fast alle } t \in (0,T),$$

$$u(0) = u_0 \qquad \text{in } H$$

$$(2.6)$$

erfüllt ist. Dabei ist das Variationsproblem (2.6) wohldefiniert für $F \in L^2((0,T),V^*)$ und $u_0 \in H$.

Bemerkung 2.11. Verwendet man den von der Bilinearform $a: V \times V \to \mathbb{R}$ induzierten Operator $A: V \to V^*$, so lässt sich das Variationsproblem (2.6) schreiben als: Gesucht ist $u \in H^1((0,T),V;H)$, sodass

$$u'(t) + Au(t) = F(t)$$
 in V^* und fast alle $t \in (0, T)$,
 $u(0) = u_0$ in H (2.7)

erfüllt ist. Man spricht dabei auch von einer gewöhnlichen Differentialgleichung im Banachraum.

Theorem 2.12. Es seien V und H zwei seperable Hilberträume mit $V \subseteq H$. Weiters sei V dicht in H und es existiert eine Konstante c > 0, sodass

$$\|v\|_H \leq c \|v\|_V \qquad \textit{für alle } v \in V.$$

Die Bilinearform $a: V \times V \to \mathbb{R}$ sei V-beschränkt und V-elliptisch. Dann gibt es für jedes $F \in L^2((0,T),V^*)$ und $u_0 \in H$ eine eindeutige Lösung $u \in H^1((0,T),V;H)$ vom Variationsproblem (2.6) mit

$$||u||_{H^1((0,T),V;H)} \le c_S \left[||u_0||_H + ||F||_{L^2((0,T),V^*)} \right].$$

Beweis. Siehe zum Beispiel [Zeidler].

Bemerkung 2.13. Für das parabolische Modellproblem sind die Voraussetzungen von Theorem 2.12 für die Hilberträume $H = L^2(\Omega)$ und $V \subseteq H^1(\Omega)$ erfüllt.

Theorem 2.14. Es seien die Voraussetzungen von Theorem 2.12 erfüllt und weiters sei $F \in L^2((0,T),H)$. Dann gilt für die eindeutige Lösung u von (2.6) die Abschätzung

$$||u(t)||_H \le e^{-\alpha t} ||u_0||_H + \int_0^t e^{-\alpha(t-s)} ||F(s)||_H ds$$
 für alle $t \in (0,T)$,

 $mit \ \alpha = \frac{c_1^a}{c} > 0.$

Beweis. Siehe zum Beispiel [Zulehner].

Korollar 2.15. Es seien die Voraussetzungen von Theorem 2.12 erfüllt. Für $u_0, w_0 \in H$ seien $u, w \in H^1((0,T),V;H)$ die eindeutigen Lösungen von (2.6) bezüglich den zwei Anfangswerten u_0, w_0 mit rechter Seite $F \in L^2((0,T),H)$. Dann gilt die Abschätzung

$$||u(t) - w(t)||_H \le e^{-\alpha t} ||u_0 - w_0||_H$$
 für alle $t \in (0, T)$.

Beweis. Einfach.

Bemerkung 2.16. Die V-Elliptizitätsbedingung in Theorem 2.12 kann ersetzt werden durch die Gårding-Ungleichung, also es existieren $c_1^a > 0$ und $\lambda \in \mathbb{R}$, sodass die Abschätzung

$$a(v,v) + \lambda \|v\|_H^2 \ge c_1^a \|v\|_V^2$$
 für alle $v \in V$

qilt.

2.2 Semi-Diskretisierung

2.2.1 Vertikale Linienmethode

Die Grundidee besteht darin eine Näherung für die Funktion u = u(t)(x) zu finden indem man die schon bekannte Finite Elemente Methode bezüglich dem Ort anwendet. Zur Vereinfachung betrachten wir $F \in \mathcal{C}([0,T],V^*)$ und $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$.

Da der Raum V dicht in H liegt ist, kann die Anfangsbedingung geschrieben werden als

$$\begin{split} u(0) &= u_0 & \text{in } H, \\ \Leftrightarrow & (u(0), v)_H = (u_0, v)_H & \text{für alle } v \in H, \\ \Leftrightarrow & (u(0), v)_H = (u_0, v)_H & \text{für alle } v \in V. \end{split}$$

Somit ist das folgende Variationsproblem der Ausgangspunkt für unsere Semi-Diskretisierung: Gesucht ist $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$, sodass

$$\frac{d}{dt}(u(t), v)_H + a(u(t), v) = \langle F(t), v \rangle \qquad \text{für alle } v \in V \text{ und alle } t \in (0, T),
(u(0), v)_H = (u_0, v)_H \qquad \text{für alle } v \in V.$$
(2.8)

Für die Diskretisierung betrachten wir jetzt einen endlichdimensionalen Teilraum $V_h \subset V$ und definieren dann das folgende Problem: Gesucht ist $u_h \in \mathcal{C}^1([0,T],V_h)$, sodass

$$\frac{d}{dt}(u_h(t), v_h)_H + a(u_h(t), v_h) = \langle F(t), v_h \rangle \qquad \text{für alle } v_h \in V_h \text{ und alle } t \in (0, T),$$

$$(u_h(0), v_h)_H = (u_0, v_h)_H \qquad \text{für alle } v_h \in V_h.$$

$$(2.9)$$

Analog zu Kapitel ?? wählen wir eine Basis für den diskreten Raum V_h , also $V_h = \text{span}\{\varphi_i\}_{i=1}^{n_h}$ und verwenden den Ansatz

$$u_h(x,t) = \sum_{j=1}^{n_h} u_j(t)\varphi_j(x)$$

mit den Zeitabhängigen Koeffizienten $u_j:[0,T]\to\mathbb{R},\ j=1,\ldots,n_h.$ Somit ist das Variationsproblem (2.9) äquivalent zu

$$\sum_{j=1}^{n_h} (\varphi_j, \varphi_i)_H u_j'(t) + \sum_{j=1}^{n_h} a(\varphi_j, \varphi_i) u_j(t) = \langle F(t), \varphi_i \rangle \qquad \forall i = 1, \dots, n_h, \quad \forall t \in (0, T),$$

$$\sum_{j=1}^{n_h} (\varphi_j, \varphi_i)_H u_j(0) = (u_0, \varphi_i)_H \qquad \forall i = 1, \dots, n_h.$$

Wir definieren nun die Matrizen

$$M_h := \left[(\varphi_j, \varphi_i)_H \right]_{i,j=1}^{n_h} \quad \text{und} \quad K_h := \left[a(\varphi_j, \varphi_i) \right]_{i,j=1}^{n_h}$$

und die Vektoren

$$\underline{f}_h(t) := \left[\langle F(t), \varphi_i \rangle \right]_{i=1}^{n_h}, \qquad \underline{g}_h := \left[(u_0, \varphi_i)_H \right]_{i=1}^{n_h} \quad \text{und} \quad \underline{u}_h(t) := \left[u_j(t) \right]_{j=1}^{n_h}.$$

Dabei ist $K_h \in \mathbb{R}^{n_h \times n_h}$ die Steifigkeitsmatrix aus Kapitel ?? und $M_h \in \mathbb{R}^{n_h \times n_h}$ wird als Massematrix bezeichnet. Mit diesen Definitionen ist das diskretisierte Problem (2.9) äquivalent zum System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung: Gesucht ist $\underline{u}_h \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^{n_h})$, sodass

$$M_h \underline{u}'_h(t) + K_h \underline{u}_h(t) = \underline{f}_h(t)$$
 für alle $t \in (0, T)$,
 $M_h \underline{u}_h(0) = g_h$. (2.10)

Lemma 2.17. Die Massematrix $M_h \in \mathbb{R}^{n_h \times n_h}$ ist symmetrisch und postiv definit.

Beweis. Symmetrie folgt aus der Symmetrie Eigenschaft des Skalarprodukts, also $(\varphi_j, \varphi_i)_H = (\varphi_i, \varphi_j)_H$ und die postiv Definitheit folgt analog aus der Positivität des Skalarprodukts.

Theorem 2.18 (Picard-Lindelöf). Sei $\underline{f} \in \mathcal{C}([0,T] \times \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ Lipschitz-stetig bezüglich der 2. Variable, also es existiert eine Konstante L > 0, sodass

$$||f(t,\underline{u}) - f(t,\underline{v})|| \le L||\underline{u} - \underline{v}||$$

für alle $\underline{u}, \underline{v} \in \mathbb{R}^n$ und alle $t \in [0, T]$ erfüllt ist. Dann existiert für alle $\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n$ genau eine Lösung $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0, T], \mathbb{R}^n)$ des Anfangswertproblems

$$\underline{u}'(t) = \underline{f}(t, \underline{u}(t))$$
 für alle $t \in (0, T)$,
 $\underline{u}(0) = \underline{u}_0$.

Beweis. Siehe gewöhnliche Differentialgleichungen.

Da nach Lemma 2.17 die Massematrix M_h invertierbar ist, ist die Lipschitzbedinung für die rechte Seite $\underline{f}(t,\underline{u}_h) := M_h^{-1} \left[\underline{f}_h(t) - K_h \underline{u}_h\right]$ von unserem Anfangswertproblem (2.10)

$$\|\underline{f}(t,\underline{u}_h) - \underline{f}(t,\underline{v}_h)\| = \|M_h^{-1}K_h(\underline{u}_h - \underline{v}_h)\| \le \|M_h^{-1}K_h\|\|\underline{u}_h - \underline{v}_h\| =: L_h\|\underline{u}_h - \underline{v}_h\|$$

erfüllt mit der h-abhängigen Libschitz-Konstante $L_h = \|M_h^{-1}K_h\| < \infty$. Somit ist nach Theorem 2.18 das diskrete Anfangswertproblem (2.10) eindeutig lösbar.

2.2.2 Der Semi-Diskretisierungsfehler

Für die Näherungslösung $u_h \in \mathcal{C}^1((0,T),V_h)$ von (2.9) wollen wir den Fehler

$$\max_{t \in [0,T]} \|u(t) - u_h(t)\|_H$$

bezüglich der exakten Lösung $u \in \mathcal{C}^1((0,T),V)$ von (2.8) geeignet abschätzen. Dazu benötigen wir den folgenden Operator.

Definition 2.19 (Ritz-Projektion). Sei $a: V \times V \to \mathbb{R}$ eine beschränkte und elliptische Bilinearform bezüglich V. Die Ritz-Projektion $R_h: V \to V_h$ ist für ein $u \in V$ definiert als die Lösung des Variationsproblems: Gesucht ist $R_h u \in V_h$, sodass

$$a(R_h u, v_h) = a(u, v_h)$$
 für alle $v_h \in V_h$

erfüllt ist.

Es lässt sich leicht zeigen, dass die Ritz-Projektion wohldefiniert ist und einen linearen und beschränkten Operator definiert. Weiters sieht man leicht, dass $R_h: V \to V_h$ tatsächlich eine Projektion ist, also $R_h R_h = R_h$.

Die Grundlegende Idee für die Fehlerabschätzung ist gegeben durch die Aufspaltung

$$u(t) - u_h(t) = u(t) - R_h u(t) + R_h u(t) - u_h(t) = \varrho_h(t) + \theta_h(t),$$

mit
$$\varrho_h(t) := u(t) - R_h u(t) \in V$$
 und $\theta_h(t) := R_h u(t) - u_h(t)$.

Lemma 2.20. Für den Fehler $\varrho_h(t) := u(t) - R_h u(t) \in V$ gilt

$$\varrho_h \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$$
 und $\varrho'_h(t) = (I-R_h)u'(t).$

Beweis. Übung.

Lemma 2.21. Für den Fehler $\theta_h(t) := R_h u(t) - u_h(t) \in V_h$ gilt

$$\theta_h \in \mathcal{C}^1([0, t], V), \qquad \theta_h'(t) = R_h u'(t) - u_h'(t)$$

und

$$(\theta_h'(t),v_h)_H + a(\theta_h(t),v_h) = -(\varrho_h'(t),v_h)_H \quad \text{für alle $v_h \in V_h$ und alle $t \in [0,T]$.}$$

Beweis. Die ersten beiden Behauptungen folgen analog zu Lemme 2.21. Sei $u \in \mathcal{C}^1([0,T],V)$ die Lösung von (2.8) und $u_h \in \mathcal{C}^1([0,T],V_h)$ die Näherungslösung von (2.8), dann gilt wegen $V_h \subset V$, dass

$$(u'(t),v_h)_H + a(u(t),v_h) = \langle F(t),v_h\rangle \qquad \text{für alle } v_h \in V_h \text{ und alle } t \in [0,T].$$

Daraus folgt für $v_h \in V_h$ und $t \in [0, T]$ weiters

$$0 = (u'(t) - u'_h(t), v_h)_H + a(u(t) - u_h(t), v_h)$$

= $(u'(t) - R_h u'(t) + R_h u'(t) - u'_h(t), v_h)_H + a(R_h u(t) - u_h(t), v_h)$
= $(\varrho'_h(t), v_h)_H + (\theta'_h(t), v_h)_H + a(\theta_h(t), v_h).$

Und somit ist die Behauptung bewiesen.

Lemma 2.22. Für die obigen Fehler $\varrho_h \in V$ und $\theta_h \in V_h$ gilt die Abschätzung

$$\|\theta_h(t)\|_H \le \|\theta_h(0)\|_H + \int_0^t \|\varrho_h'(s)\| ds$$
 für alle $t \in [0, T]$.

Beweis. Mit Lemma 2.21 gilt für $t \in [0, T]$ mit $v_h = \theta_h$

$$(\theta_h'(t), \theta_h(t))_H + a(\theta_h(t), \theta_h(t)) = -(\varrho_h'(t), \theta_h(t))_H.$$

Unter Verwendung der Identität

$$(\theta_h'(t), \theta_h(t))_H = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\theta_h(t), \theta_h(t))_H = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_h(t)\|_H^2 = \|\theta_h(t)\|_H \frac{d}{dt} \|\theta_h(t)\|_H,$$

folgt dann weiters

$$\|\theta_{h}(t)\|_{H} \frac{d}{dt} \|\theta_{h}(t)\|_{H} = -a(\theta_{h}(t), \theta_{h}(t)) - (\varrho'_{h}(t), \theta_{h}(t))_{H}$$

$$\leq \|\varrho'_{h}(t)\|_{H} \|\theta_{h}(t)\|_{H}.$$

Somit gilt die Abschätzung

$$\frac{d}{dt}\|\theta_h(t)\|_H \le \|\varrho_h'(t)\|_H \quad \text{für alle } \|\theta_h(t)\|_H \ne 0.$$
(2.11)

Falls $\|\theta_h(t)\|_H = 0$ ist in einer Umgebung von t, dann ist auch $\frac{d}{dt}\|\theta_h(t)\|_H = 0$ in dieser Umgebung. Somit ist die Ungleichung (2.11) für fast alle $t \in [0, T]$ erfüllt. Integration über (2.11) bezüglich $(0, t), t \in [0, T]$ liefert die Behauptung

$$\|\theta_h(t)\|_H - \|\theta_h(0)\|_H = \int_0^t \frac{d}{dt} \|\theta_h(s)\|_H ds \le \int_0^t \|\varrho_h'(s)\|_H ds.$$

Theorem 2.23. Sei $u \in C^1([0,T],V)$ die Lösung von (2.8) und $u_h \in C^1([0,T],V_h)$ die Näherungslösung von (2.8), dann gilt für $t \in [0,T]$ die Fehlerabschätzung

$$||u(t) - u_h(t)||_H \le ||(I - R_h)u(t)||_H + ||R_h u_0 - u_h(0)||_H + \int_0^t ||(I - R_h)u'(s)||_H ds.$$

Beweis. Mit Hilfe der Lemmata 2.20–2.22 folgt die Behauptung

$$||u(t) - u_h(t)||_H = ||u(t) - R_h u(t) + R_h u(t) - u_h(t)||_H$$

$$\leq ||(I - R_h) u(t)||_H + ||\theta_h(t)||_H$$

$$\leq ||(I - R_h) u(t)||_H + ||\theta_h(0)||_H + \int_0^t ||\varrho_h'(s)|| ds$$

$$= ||(I - R_h) u(t)||_H + ||R_h u_0 - u_h(0)||_H + \int_0^t ||(I - R_h) u'(s)||_H ds.$$

Theorem 2.23 besagt nun, dass der Fehler der Semi-Diskretisierung im wesentlichen über den Fehler der Ritz-Projektion abgeschätz werden kann. Für das parabolische Modell-problem 1D, kann unter Verwendung von

• Aubin-Nitsche Trick, siehe Theorem ??: Es existiert eine Konstante c > 0, sodass für alle $w \in V \cap H^2(0,1)$ gilt

$$\|(I - R_h)w(t)\|_{L^2(0,1)} \le ch^2 |w(t)|_{H^2(0,1)}$$

• $L^2(0,1)$ -Projektion: Sei $w \in L^2(0,1)$, dann ist $Q_h w \in V_h$ gesucht, sodass

$$(Q_h w, v_h)_{L^2(0,1)} = (w, v_h)_{L^2(0,1)}$$
 für alle $v_h \in V_h$

gilt. Somit gilt nach (2.8) die Beziehung $u_h(0) = Q_h u_0$ und darauß folgt

$$||R_h u_0 - u_h(0)||_{L^2(0,1)} = ||R_h u_0 - Q_h u_0||_{L^2(0,1)}$$

$$\leq ||u_0 - R_h u_0||_{L^2(0,1)} + ||u_0 - Q_h u_0||_{L^2(0,1)}$$

$$\leq ch^2 |u_0|_{H^2(0,1)}$$

eine Fehlerabschätzung gezeigt werden.

Theorem 2.24. Sei $u \in C^1([0,T], H^2(0,1))$ die Lösung des parabolischen Modellproblems und $u_h \in C^1([0,T], V_h)$ die entsprechende Näherungslösung, dann gilt für $t \in [0,T]$ die Fehlerabschätzung

$$||u(t) - u_h(t)||_{L^2(0,1)} \le ch^2 \left[|u(t)|_{H^2(0,1)} + |u_0|_{H^2(0,1)} + \int_0^t |u'(s)|_{H^2(0,1)} \, \mathrm{d}s \right].$$

Beweis. Folgt mit Theorem 2.23 unter Verwendung der obigen Ergebnisse.

Bemerkung 2.25. Nach Theorem 2.24 ergibt sich für das parabolische Modellproblem bezüglich der $L^2(0,1)$ -Norm die gleich Konvergenzrate wie im elliptischen Fall.

2.3 Explizite Runge-Kutta Verfahren für allgemeine gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung

In diesem Abschnitt betrachten wir die gewöhnlich Differentialgleichung erster Ordnung: Gesucht ist $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$, sodass

$$\underline{u}'(t) = \underline{f}(t, \underline{u}(t)) \qquad \text{für alle } t \in (0, T),$$

$$\underline{u}(0) = \underline{u}_0. \tag{2.12}$$

Dabei ist $\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n$ und $\underline{f} \in \mathcal{C}([0,T] \times \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$. Sei $(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ein inneres Produkt auf \mathbb{R}^n mit der induzierten Norm $\|\cdot\|$. Weiters sei die Lipschitz-Bedingung

$$\left\|\underline{f}(t,\underline{u}) - \underline{f}(t,\underline{v})\right\| \leq L\|\underline{u} - \underline{v}\| \qquad \text{für alle } \underline{u},\underline{v} \in \mathbb{R}^n \text{ und alle } t \in [0,T]$$
erfüllt, siehe auch Theorem 2.18.

2.3.1 Das Euler-Verfahren

Wir betrachten die Zerlegung des Intervalls [0, T]

$$0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_m = T$$

mit den Knoten/Zeitpunkten $I_{\tau} := \{t_0, t_1, \dots, t_m\}$ und den Zeitschrittweiten

$$\tau_k := t_{k+1} - t_k, \quad k = 0, 1, \dots, m - 1, \qquad \quad \tau := \max_{k=0,\dots,m-1} \tau_k.$$

Für äquidistante Zerlegungen gilt $t_k = k\tau$, mit $\tau = \frac{T}{m}$. Zur Herleitung des Euler-Verfahrens integrieren wir die Gleichung $\underline{u}'(t) = \underline{f}(t,\underline{u}(t))$ über das Intervall $(t,t+\tau)$ und erhalten

$$\underline{u}(t+\tau) = \underline{u}(t) + \int_{t}^{t+\tau} \underline{f}(s, \underline{u}(s)) ds \approx \underline{u}(t) + \tau \underline{f}(t, \underline{u}(t)).$$

Dies motiviert nun die folgende Vorschrift:

$$\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n \text{ gegeben}$$

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \underline{f}(t_k, \underline{u}_k) \qquad \text{für } k = 0, 1, \dots, m - 1.$$
(2.13)

Die Methode (2.13) wird explizites Euler-Verfahren genannt.

2.3.2 Eine Verallgemeinerung: Einschrittverfahren

Definition 2.26. Ein Schema zur Zeitdiskretisierung der Form

$$\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n \ gegeben$$

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \phi(t_k, \underline{u}_k, \tau_k) \qquad \text{für } k = 0, 1, \dots, m-1$$
(2.14)

mit der Verfahrensfunktion $\phi:[0,T]\times\mathbb{R}^n\times[0,\tau]\to\mathbb{R}^n$ wird als Einschrittverfahren bezeichnet.

Beispiele sind:

• Das Eulerverfahren:

$$\phi(t, \underline{u}, \tau) = f(t, \underline{u}).$$

• Das verbesserte Eulerverfahren/Mittelpunktsregel:

$$\phi(t,\underline{u},\tau) = \underline{f}(t + \frac{\tau}{2},\underline{u} + \frac{\tau}{2}\underline{f}(t,\underline{u})) \approx \underline{f}(t + \frac{\tau}{2},\underline{u}(t + \frac{\tau}{2})).$$

2.3.3 Konvergenzanalyse für Einschrittverfahren

Die Iterationsvorschrift (2.14) liefert für gegebene Gitterpunkte $I_{\tau} = \{t_0, t_1, \dots, t_m\}$ eine Näherung aus der Menge aller Gitterfunktionen

$$X_{\tau} := \{ \underline{v}_{\tau} : I_{\tau} \to \mathbb{R}^n \}$$
.

Definition 2.27 (Globaler Fehler, Konvergenz). Sei $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$ die exakte Lösung von (2.12). Weiters sei $u_{\tau} \in X_{\tau}$ die Gitterfunktion, die durch das Einschrittverfahren (2.14) für eine gegebene Verfahrensfunktion ϕ erzeugt wird. Wir definieren dann den globalen Fehler als

$$e_{\tau}: I_{\tau} \to \mathbb{R}^n, \qquad t_k \mapsto e_k := u(t_k) - u_k.$$

Wir messen den globalen Fehler $\underline{e}_{\tau} \in X_{\tau}$ bezüglich einer gegebene Norm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{R}^n mit

$$\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} := \max_{k=0,\dots,m} \|\underline{e}_{k}\|.$$

Weiters bezeichnen wir das Einschrittverfahren (2.14) als konvergent bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{X_{\tau}}$, falls

$$\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} \to 0$$
 für $\tau \to 0$.

Das Einschrittverfahren (2.14) konvergiert mit der Ordnung $p \in \mathbb{N}$, falls

$$\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} = \mathcal{O}(\tau) \quad \text{für } \tau \to 0.$$

Definition 2.28 (Lokaler Fehler). Sei $\underline{u} \in C^1([0,T],\mathbb{R}^n)$ die exakte Lösung von (2.12). Dann ist für das Einschrittverfahren (2.14) der lokale Fehler $\underline{d}_{\tau} \in X_{\tau}$ gegeben durch

$$\underline{d}_0 := \underline{0},
d_{k+1} := u(t_{k+1}) - [u(t_k) + \tau_k \phi(t_k, u(t_k), \tau_k)] \qquad \text{für } k = 0, 1, \dots, m-1.$$

Definition 2.29 (Konsistenzfehler). Für das Einschrittverfahren (2.14) und einer gegebenen Gitterfunktion $\underline{v}_{\tau} \in X_{\tau}$ definieren wir $\underline{\psi}_{\tau}(\underline{v}_{\tau}) \in X_{\tau}$ als

$$\underline{\psi}_0(\underline{v}_\tau) := \underline{v}_0 - \underline{u}_0,$$

$$\underline{\psi}_{k+1}(\underline{v}_\tau) := \frac{1}{\tau_k} \left[\underline{v}_{k+1} - \underline{v}_k \right] - \phi(t_k, \underline{v}_k, \tau_k) \qquad \text{für } k = 0, 1, \dots, m - 1.$$

Sei $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$ wiederum die exakte Lösung von (2.12) und $\underline{\tilde{u}}_{\tau} \in X_{\tau}$ die Gitterfunktion mit $\underline{\tilde{u}}_k = \underline{u}(t_k)$, $k = 0, \ldots, m$, dann bezeichnen wir

$$\underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \in X_{\tau}$$

als den Konsistenzfehler.

Bemerkung 2.30. Für den Konsistenzfehler gilt

$$u(t_{k+1}) = u(t_k) + \tau_k \left[\phi(t_k, \underline{u}(t_k), \tau_k) + \psi_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right], \quad \text{für } k = 0, 1, \dots, m-1.$$

Das heißt, die exakte Lösung im Punkt t_{k+1} kann geschrieben werden durch die Anwendung einer Iteration des Einschrittverfahrens (2.14), wobei die Verfahrensfunktion ϕ durch den Konsistenzfehler $\psi_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau})$ korrigiert werden muss. Weiters gilt der Zusammenhang mit dem lokalen Fehler $\underline{d}_{\tau} \in X_{\tau}$

$$\psi_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) = \frac{1}{\tau_k} \underline{d}_{k+1} \qquad f \ddot{u} r \ k = 0, 1, \dots, m-1.$$

Die Konvergenzuntersuchung basiert auf den zwei Schritten

- Konsistenzanalyse: Die Abschätzung des Konsistenzfehlers $\psi_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \in X_{\tau}$.
- Stabilitätsanalyse: Die Analyse wie Störungen propergiert werden.

Für die Konsistenzanalyse betrachten wir eine weitere Norm $\|\cdot\|_{Y_{\tau}}$ auf X_{τ} , die wir später genauer fixieren werden.

Definition 2.31 (Konsistenz). Sei $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$ die exakte Lösung von (2.12) und $\underline{\tilde{u}}_{\tau} \in X_{\tau}$ die Gitterfunktion mit $\underline{\tilde{u}}_k = \underline{u}(t_k)$, $k = 0, \ldots, m$. Ein Einschrittverfahren (2.14) heißt konsistent bezüglich $\|\cdot\|_{Y_{\tau}}$, falls für den Konsistenzfehler $\underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \in X_{\tau}$ gilt, dass

$$\left\| \underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\|_{Y_{\tau}} \to 0 \quad \text{für } \tau \to 0.$$

Wir sprechen weiters von der Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$, falls eine Konstante K > 0 existiert mit

$$\left\| \underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\|_{Y_{\tau}} \le K \tau^{p}.$$

Definition 2.32 (Stabilität). Sei $\underline{u}_{\tau} \in X_{\tau}$ die Gitterfunktion die von dem Einschrittverfahren (2.14) erzeugt wird. Das Einschrittverfahren (2.14) heißt stabil bezüglich $\|\cdot\|_{X_{\tau}}$ und $\|\cdot\|_{Y_{\tau}}$, falls eine Konstante $c_S > 0$ existiert, sodass

$$\|\underline{u}_{\tau} - \underline{v}_{\tau}\|_{X_{\tau}} \le c_S \|\underline{\psi}_{\tau}(\underline{v}_{\tau})\|_{Y_{\tau}}$$
 für alle $\underline{v}_{\tau} \in X_{\tau}$.

Lemma 2.33. Ein konsistentes und stabiles Einschrittverfahren (2.14) mit der Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$ ist konvergent bezüglich $\|\cdot\|_{X_{\tau}}$ mit der Konvergenzordnung p.

Beweis. Sei $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$ die exakte Lösung von (2.12) und $\underline{\tilde{u}}_{\tau} \in X_{\tau}$ die Gitterfunktion mit $\underline{\tilde{u}}_k = \underline{u}(t_k), \ k = 0, \dots, m$. Dann gilt

$$\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} = \|\underline{u}_{\tau} - \underline{\tilde{u}}_{\tau}\|_{X_{\tau}} \le c_S \|\psi_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau})\|_{Y_{\tau}} \le c_S K \tau^p.$$

Somit gilt $\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} \to 0$ für $\tau \to 0$ mit der Konvergenzordnung p.

Das heißt Konsistenz und Stabilität impliziert Konvergenz. Die Konsistenz eines Verfahrens, lässt sich meistens über eine Taylorreihenentwicklung zeigen. Um die Stabilität zeigen zu können, ist folgendes Theorem hilfreich.

Theorem 2.34. Für die Verfahrensfunktion ϕ des Einschrittverfahrens (2.14) gelte die Lipschitz-Bedingung

$$\|\phi(t_k, \underline{u}, \tau_k) - \phi(t_k, \underline{v}, \tau_k)\| \le \Lambda \|\underline{u} - \underline{v}\|$$
(2.15)

für alle $\underline{u},\underline{v} \in \mathbb{R}^n$, alle $t_k \in [0,T]$ und alle $\tau_k \in [0,\tau]$ mit einer Konstante $\Lambda > 0$, dann ist das Einschrittverfahren (2.14) stabil bezüglich der Norm

$$\|\underline{v}_{\tau}\|_{Y_{\tau}} := \|\underline{v}_{0}\| + \sum_{k=1}^{m} \tau_{k-1} \|\underline{v}_{k}\|, \quad \text{für alle } \underline{v}_{\tau} \in X_{\tau}$$

mit der Stabilitätskonstante $c_S = e^{T\Lambda}$. Im Speziellen gilt somit

$$\|\underline{e}_{\tau}\|_{X_{\tau}} \le e^{T\Lambda} \|\underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau})\|_{Y_{\tau}}.$$

Beweis. Induktiv, siehe zum Beispiel [Zulehner].

Für das explizite Euler-Verfahren wollen wir nun die Konsistenz und die Stabilität überprüfen. Für die Stabilität überprüfen wir die Lipschitz-Bedingung der Verfahrensfunktion $\phi(t_k, \underline{u}, \tau_k) = f(t_k, \underline{u})$, also

$$\left\|\underline{\phi}(t_k,\underline{u},\tau_k) - \underline{\phi}(t_k,\underline{v},\tau_k)\right\| = \left\|\underline{f}(t_k,\underline{u}) - \underline{f}(t_k,\underline{v})\right\| \le L\|\underline{u} - \underline{v}\|.$$

Somit ist nach Theorem 2.34 die Stabilitätskonstante gegeben durch $c_S = e^{TL}$. Weiters gilt für den Konsistenzfehler die Abschätzung

$$\left\| \underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\|_{Y_{\tau}} = \left\| \underline{\psi}_{0}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\| + \sum_{k=0}^{m-1} \tau_{k} \left\| \underline{\psi}_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\| \leq \tau \sum_{k=0}^{m-1} \left\| \underline{\psi}_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\|.$$

Für $\underline{u} \in \mathcal{C}^2([0,T],\mathbb{R}^n)$ gilt mit Hilfe der Taylor-Entwicklung, dass

$$\underline{\psi}_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) = \frac{1}{\tau_k} \left[\underline{u}(t_{k+1}) - \underline{u}(t_k) \right] - \underline{\phi}(t_k, \underline{u}(t_k), \tau_k) = \frac{1}{\tau_k} \left[\underline{u}(t_{k+1}) - \underline{u}(t_k) \right] - \underline{f}(t_k, \underline{u}(t_k))$$

$$= \frac{1}{\tau_k} [\underline{u}(t_{k+1}) - \underline{u}(t_k)] - \underline{u}'(t_k)$$

$$= \frac{1}{\tau_k} \left[\underline{u}(t_k) + \underline{u}'(t_k)\tau_k + \int_{t_k}^{t_{k+1}} (t_{k+1} - t)u''(t)dt - \underline{u}(t_k) \right] - \underline{u}'(t_k)$$

$$= \frac{1}{\tau_k} \int_{t_k}^{t_{k+1}} (t_{k+1} - t)u''(t)dt.$$

Dies ergibt die Abschätzung

$$\left\| \underline{\psi}_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\| \le \int_{t_k}^{t_{k+1}} \|\underline{u}''(t)\| dt.$$

Somit gilt die Konsistenzabschätzung

$$\left\| \underline{\psi}_{\tau}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\|_{Y_{\tau}} \leq \tau \sum_{k=0}^{m-1} \left\| \underline{\psi}_{k+1}(\underline{\tilde{u}}_{\tau}) \right\| \leq \tau \sum_{k=0}^{m-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \|\underline{u}''(t)\| \mathrm{d}t = \tau \int_0^T \|\underline{u}''(t)\| \mathrm{d}t$$

mit der Konsistenzordnung p=1. Für den Fehler des Euler-Verfahrens gilt somit nach Lemma 2.33 die Abschätzung

$$\max_{k=0,\dots,m} \|\underline{u}(t_k) - \underline{u}_k\| \le \tau e^{TL} \int_0^T \|\underline{u}''(t)\| dt.$$

2.3.4 Explizite s-stufige Runge-Kutta Verfahren

Ziel ist es nun Verfahren mit möglichst hoher Konsistenzordnung $p \in \mathbb{N}$ zu konstruieren. Die Idee besteht darin das Integral mit $s \in \mathbb{N}$ Integrationspunkten zu approximieren, also

$$\int_{t}^{t+\tau} \underline{f}(\sigma, \underline{u}(\sigma)) d\sigma \approx \tau \sum_{i=1}^{s} b_{i} \underline{f}(t + c_{i}\tau, \underline{u}(t + c_{i}\tau)).$$

Dabei sind b_i , i = 1, ..., s gegebene Gewichte mit

$$b_i \in [0, 1]$$
 und $\sum_{i=1}^{s} b_i = 1$.

Weiters bezeichnen wir c_i , $i=1,\ldots,s$ als Koeffizienten, wobei

$$c_1 = 0$$
 und $c_i \in (0, 1]$ für $i = 2, ..., s$

gilt. Da die Funktionen $\underline{u}(t+c_i\tau) \in \mathbb{R}^n$ für $i=2,\ldots,s$ unbekannt sind, führen wir für $i=2,\ldots,s$ die weitere Approximationen

$$\underline{u}(t+c_i\tau) = u(t) + \int_t^{t+c_i\tau} \underline{f}(\sigma, u(\sigma)) d\sigma \approx u(t) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\underline{f}(t+c_j\tau, \underline{u}(t+c_j\tau))$$

ein. Dabei sind a_{ij} , $j=1,\ldots,i-1$ für $i=2,\ldots,s$ wiederum gegebene Gewichte. Diese Approximationen führen auf folgendes Schema:

Für eine gegebene Näherung $\underline{u}_k \in \mathbb{R}^n$ im Punkt t_k berechne die nächste Näherung $\underline{u}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ im Punkt t_{k+1} als

$$\underline{g}_{1} = \underline{u}_{k},
\underline{g}_{2} = \underline{u}_{k} + \tau_{k} a_{21} \underline{f}(t_{k} + c_{1}\tau, \underline{g}_{1}),
\underline{g}_{3} = \underline{u}_{k} + \tau_{k} \left[a_{31} \underline{f}(t_{k} + c_{1}\tau, \underline{g}_{1}) + a_{32} \underline{f}(t_{k} + c_{2}\tau_{k}, \underline{g}_{2}) \right],
\vdots
\underline{g}_{s} = \underline{u}_{k} + \tau_{k} \left[a_{s1} \underline{f}(t_{k} + c_{1}\tau, \underline{g}_{1}) + \dots + a_{s,s-1} \underline{f}(t_{k} + c_{s-1}\tau_{k}, \underline{g}_{s-1}) \right],
\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_{k} + \tau_{k} \sum_{i=1}^{s} b_{i} \underline{f}(t + c_{i}\tau_{k}, \underline{g}_{i}).$$
(2.16)

Das Schema (2.16) wird als s-stufiges Runge-Kutta Verfahren bezeichnet. Dabei können je nach Wahl von a_{ij} , b_i und c_i für $j=1,\ldots,i-1$ und $i=1,\ldots,s$ die verschiedensten Verfahren konstruiert werden. Diese werden oft im sogenannten Butcher-Tableau zusammengefasst

Beispiel 2.35. 1.) Explizites Euelr-Verfahren:

2.) Verbessertes Euler-Verfahren:

$$\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\
\hline
& 0 & 1 & \\
\end{array}$$

3.) Klassisches 4-stufiges Runge-Kutta Verfahren mit Konsistenzordnung p=4

Bemerkung 2.36. Die Stabilitätsanalyse von s-stufigen Runge-Kutta Verfahren verläuft wiederum über Theorem 2.34, indem man ausgehend von der Lipschitz-Stetigkeit von $\underline{f}:[0,T]\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ die Lipschitz-Stetigkeit der Verfahrensfunktion $\underline{\phi}:[0,T]\times\mathbb{R}^n\times[0,\tau]\to\mathbb{R}^n$ zeigt. Die Konsistenzanalyse erfolgt wiederum über Taylorreihenentwicklung.

Bemerkung 2.37. Nicht jedes s-stufige Runge-Kutta Verfahren hat die Konsistenzordnung p = s. Dabei gilt folgendes:

2.4 Steife Differentialgleichungen

Für das parabolische Modellproblem erhalten wir nach der Anwendung der Finiten Elemente Methode das System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\begin{split} \underline{u}_h'(t) &= \underline{f}_h(t,\underline{u}_h(t)) := M_h^{-1} \left[\underline{f}_h(t) - K_h\underline{u}_h(t)\right] \qquad \text{für } t \in (0,T), \\ \underline{u}_h(0) &= M_h^{-1}\underline{g}_h. \end{split}$$

Dabei geht für Einschrittverfahren die Lipschitz-Konstante L der Funktion $\underline{f}_h:[0,T]\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ in die Fehlerabschätzung ein. Für unser parabolisches Modellproblem 1D gilt dabei folgendes

$$\left\| \underline{f}_h(t,\underline{u}_h) - \underline{f}_h(t,\underline{v}_h) \right\|_{M_h} \le L_h \|\underline{u}_h - \underline{v}_h\|_{M_h}$$

mit der Lipschitzkonstante

$$L_h = \lambda_{\max}(M_h^{-1}K_h) \le \frac{12}{h^2}.$$

Lemma 2.38. Für das parabolische Modellproblem 1D gilt für eine gleichmäßige Zerlequng des Intervalls (0,1) mit der Maschenweite h > 0 die Abschätzung

$$\frac{3}{h^2} \le \lambda_{\max}(M_h^{-1}K_h) \le \frac{12}{h^2}.$$

Beweis. Übung.

Somit ergibt sich für das explizite Euler-Verfahren die Stabilitätskonstante $c_S = e^{12Th^{-2}}$. Weiter folgt dann für den Fehler die Abschätzung

$$\max_{k=0,\dots,m} \|\underline{u}_h(t_k) - \underline{u}_k\| \le \tau e^{12Th^{-2}} \int_0^T \|\underline{u}_h''(t)\| \mathrm{d}t.$$

Das heißt, die Zeitschrittweite τ muss nach dieser Abschätzung extrem klein gewählt werden $(\tau = e^{\mathcal{O}(h^{-2})})$, um vernünftige Näherungslösungen zu erhalten.

Es stellt sich nun die Frage, ob wir diese Abschätzung verbessern können? Beziehungsweise, ob wir die Stabilitätskonstante c_S besser abschätzen können?

2.4.1 Dissipative Systeme

Lemma 2.39. Für die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\underline{u}'(t) = \underline{f}(t, \underline{u}(t)) \qquad \text{für } t \in (0, T),$$

$$\underline{u}(0) = \underline{u}_0 \tag{2.17}$$

gelte die einseitige Lipschitz-Bedingung

$$\left(\underline{f}(t,\underline{u}) - \underline{f}(t,\underline{v}), \underline{u} - \underline{v}\right) \le \nu \|\underline{u} - \underline{v}\|^2 \quad \text{für alle } \underline{u},\underline{v} \in \mathbb{R}^n \text{ und alle } t \in [0,T]. \tag{2.18}$$

Weiters seien $\underline{u}, \underline{w} \in \mathcal{C}^1([0,T], \mathbb{R}^n)$ die zwei Lösungen von (2.17) bezüglich den zwei Anfangswerten $\underline{u}_0, \underline{w}_0 \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt

$$\|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| \le e^{t\nu} \|\underline{u}_0 - \underline{w}_0\|$$
 für alle $t \in [0, T]$.

Beweis. Es seien $\underline{u}_0,\underline{w}_0\in\mathbb{R}^n.$ Unter Verwendung der Identität

$$\|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| \frac{d}{dt} \|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| = (\underline{u}'(t) - \underline{w}'(t), \underline{u}(t) - \underline{w}(t))$$

$$= (\underline{f}(t, u(t)) - \underline{f}(t, w(t)), \underline{u}(t) - \underline{w}(t))$$

$$\leq \nu \|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\|^{2},$$

siehe dazu auch den Beweis von Lemma 2.22, folgt

$$\frac{d}{dt}\|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| \le \nu \|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| \quad \text{für fast alle } t \in [0, T].$$

Dies impliziert

$$0 \ge e^{-t\nu} \left[\frac{d}{dt} \| \underline{u}(t) - \underline{w}(t) \| - \nu \| \underline{u}(t) - \underline{w}(t) \| \right]$$
$$= \frac{d}{dt} \left[e^{-t\nu} \| \underline{u}(t) - \underline{w}(t) \| \right]$$

für fast alle $t \in [0,T]$. Integration dieser Ungleichung über (0,t) mit $t \in [0,T]$ ergibt die Behauptung des Lemmas

$$0 \ge e^{-t\nu} \|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| - e^{-0\nu} \|\underline{u}(0) - \underline{w}(0)\| = e^{-t\nu} \|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| - \|\underline{u}_0 - \underline{w}_0\|.$$

Es ist einfach zu sehen, dass die Lipschitz-Bedinung

$$||f(t,\underline{u}) - f(t,\underline{v})|| \le L||\underline{u} - \underline{v}||$$
 für alle $\underline{u},\underline{v} \in \mathbb{R}^n$ und alle $t \in [0,T]$

die einseitige Lipschitz-Bedingung (2.18) mit $\nu = L$ impliziert. Jedoch gibt es eine große Klasse von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit der Eigenschaft

$$\nu \ll L$$
.

Diese Klasse von gewöhnlichen Differentialgleichungen werden als steif bezeichnet.

Definition 2.40 (Dissipative). Die gewöhnliche Differentialgleichung (2.17) wird als dissipativ bezeichnet, falls die einseitige Lipschitz-Bedingung (2.18) mit $\nu = 0$ erfüllt ist.

Für dissipative Differentialgleichungen gilt nach Lemma 2.39 für zwei unterschiedliche Startwerte $\underline{u}_0, \underline{w}_0 \in \mathbb{R}^n$, dass

$$\|\underline{u}(t) - \underline{w}(t)\| \le \|\underline{u}_0 - \underline{w}_0\|$$
 für alle $t \in [0, T]$.

Das heißt die unterschiedlichen Lösungen driften nicht auseinander.

Lemma 2.41. Das Anfangswertproblem (2.10) ist dissipativ bezüglich dem von der Massematrix $M_h \in \mathbb{R}^{n_h \times n_h}$ induziertem Skalaprodukt.

Beweis. Die rechte Seite von (2.10) ist gegeben durch

$$\underline{f}_h(t,\underline{u}_h) = M_h^{-1} \left[\underline{f}_h(t) - K_h\underline{u}_h\right] \quad \text{für } t \in [0,T] \text{ und } \underline{u}_h \in \mathbb{R}^{n_h}.$$

Somit gilt

$$\begin{split} \left(\underline{f}_h(t,\underline{u}_h) - \underline{f}_h(t,\underline{v}_h), \underline{u}_h - \underline{v}_h\right)_{M_h} &= -(K_h(\underline{u}_h - \underline{v}_h), \underline{u}_h - \underline{v}_h)_{\ell^2} \\ &= -a(u_h - v_h, u_h - v_h) \leq 0. \end{split}$$

2.4.2 Kontraktion und A-Stabilität

Für dissipative Differentialgleichungen wünschen wir uns nun, dass die aus den Einschrittverfahren resultierenden Approximationen ähnliche Eigenschaften aufweisen

Definition 2.42 (Kontraktiv). Ein Einschrittverfahren (2.14) heißt kontraktiv für eine gegebene Zerlegung $I_{\tau} = \{t_0, t_1, \dots, t_m\}$ falls

$$\left\| \left[\underline{u} + \tau_k \phi(t_k, \underline{u}, \tau_k) \right] - \left[\underline{w} + \tau_k \phi(t_k, \underline{w}, \tau_k) \right] \right\| \le \left\| \underline{u} - \underline{w} \right\| \tag{2.19}$$

für alle $u, w \in \mathbb{R}^n$ und alle $k = 0, \dots, m-1$ gilt.

Lemma 2.43. Ein kontraktives Einschrittverfahren (2.14) ist stabil mit der Stabilitätskonstante $c_S = 1$.

Beweis. Durch rekursive Anwendung der Kontraktionseigenschaft (2.19).

Falls nun ein konsistentes Verfahren für eine Folge von Zerlegungen I_{τ} für $\tau \to 0$ kontraktiv ist, dann ist dieses Verfahren konvergent und die auftretenden Konstanten hängen nur mehr von der Konsistenzkonstante K ab.

Es stellt sich nun die Frage, wann ein Verfahren kontraktiv ist? Wir wollen dies für das Anfangswertproblem: Gesucht ist $\underline{u} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{R}^n)$, sodass

$$\underline{u}'(t) = J\underline{u}(t) + \underline{f}(t) \qquad \text{für } t \in (0, T),$$

$$\underline{u}(0) = \underline{u}_0 \tag{2.20}$$

erfüllt ist, untersuchen. Dabei ist $J = XDX^{\top} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine konstante und normale Matrix. Das Problem (2.20) ist offensichtlich äquivalent zu: Gesucht ist $\underline{\hat{u}} \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{C}^n)$, sodass

erfüllt ist. Da $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ eine Diagonalmatrix ist, sind die Gleichungen in (2.21) entkoppelt. Es genügt also die Kontraktion unserer Einschrittverfahren für die Dahlquistsche Testgleichung: Gesucht ist $u \in \mathcal{C}^1([0,T],\mathbb{C})$, sodass

$$u'(t) = \lambda u(t)$$
 für $t \in (0, T)$, $u(0) = u_0 \in \mathbb{C}$ (2.22)

zu untersuchen. Das System (2.20) ist genau dann dissipativ wenn gilt

$$(J\underline{u} - J\underline{v}, \underline{u} - \underline{v}) \le 0 \qquad \text{für alle } \underline{u}, \underline{v} \in \mathbb{R}^n$$

$$\Leftrightarrow \qquad (J\underline{v}, \underline{v}) \le 0 \qquad \text{für alle } \underline{v} \in \mathbb{R}^n$$

$$\Leftrightarrow \qquad \text{Re}(\lambda_i(J)) \le 0 \qquad \text{für alle } i = 1, \dots, n.$$

Das heißt zu untersuchen ist die Kontraktion unserer Einschrittverfahren für die Dahlquistsche Testgleichung (2.22) für den Fall $\text{Re}(\lambda) \leq 0$. Wir wenden also nun ein belibieges s-stufiges Runge-Kutta Verfahren auf die skalare Gleichung (2.22) an und erhalten

$$g_i = u_k + \tau_k \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \lambda g_j$$
 für $i = 1, \dots, s$,

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k \sum_{i=1}^s b_i \lambda g_i.$$

Dies ist gleichbedeutent mit

$$\underline{g} = u_k \underline{e} + \tau_k \lambda A \underline{g}$$
 und $u_{k+1} = u_k + \tau_k \lambda \underline{b}^{\top} \underline{g}$

wobei $\underline{g} := \{g_1, \dots, g_s\}^{\top} \in \mathbb{C}^s$ und $\underline{e} := \{1, \dots, 1\}^{\top} \in \mathbb{R}^s$. Somit kann die neue Näherung berechnet werden als

$$u_{k+1} = R(\tau_k \lambda) u_k$$
, mit $R(z) := 1 + z \underline{b}^\top [I - zA]^{-1} \underline{e}$, für $z \in \mathbb{C}$.

Die motiviert nun folgende Definition.

Definition 2.44 (A-Stabilitätsfunktion, A-Stabilitätsgebiet). Für ein s-stufiges Runge-Kutta Verfahren mit $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und $\underline{b}, \underline{c} \in \mathbb{R}^{s}$ wird die Funktion

$$R: \mathbb{C} \to \mathbb{C}, \qquad z \mapsto 1 + z\underline{b}^{\top} [I - zA]^{-1}\underline{e}$$

als A-Stabilitätsfunktion bezeichnet. Weiters definieren wir für ein Einschrittverfahren das A-Stabilitätsgebiet als

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

Theorem 2.45. Ein s-stufiges Runge-Kutta Verfahren mit der Stabilitätsfunktion $R: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ ist genau dann kontraktiv für das dissipative Problem (2.20), also $\text{Re}(\lambda_i(J)) \leq 0$ für alle $i = 1, \ldots, n$, wenn

$$|R(\tau_k \lambda)| < 1$$
 für alle $\lambda \in \sigma(J)$ und alle $k = 0, \dots, m-1$

gilt.

Beweis. Sei $t_k \in I_\tau$ und $\underline{u}, \underline{v} \in \mathbb{R}^n$ mit $\underline{u} \neq \underline{v}$, dann gilt

$$\begin{split} & \left\| \left[\underline{u} + \tau_k \underline{\phi}(t_k, \underline{u}, \tau_k) \right] - \left[\underline{v} + \tau_k \underline{\phi}(t_k, \underline{v}, \tau_k) \right] \right\| \leq \|\underline{u} - \underline{v}\|, \\ \Leftrightarrow & \left\| R(\tau_k \lambda) \underline{u} - R(\tau_k \lambda) \underline{v} \right\| \leq \|\underline{u} - \underline{v}\| & \text{für alle } \lambda \in \sigma(J), \\ \Leftrightarrow & \left| R(\tau_k \lambda) \right| \|\underline{u} - \underline{v}\| \leq \|\underline{u} - \underline{v}\| & \text{für alle } \lambda \in \sigma(J), \\ \Leftrightarrow & \left| R(\tau_k \lambda) \right| \leq 1 & \text{für alle } \lambda \in \sigma(J). \end{split}$$

Definition 2.46 (A-stabil). Ein Einschrittverfahren heißt A-stabil, falls das A-Stabilitätsgebiet die ganze linke komplexe Halbebene \mathbb{C}^- beinhaltet, also

$$|R(z)| \le 1$$
 für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $Re(z) \le 0$.

Falls nun ein Einschrittverfahren A-stabil ist, dann ist die Kontraktion und somit nach Lemma 2.43 die Stabilität mit der Konstante $c_S = 1$ für dissipative Systeme der Form (2.20) sichergestellt.

Beispiel 2.47. Die Anwendung des expliziten Euler-Verfahrens auf die Dahlquistsche Testgleichung (2.22) ergibt

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k \lambda u_k = (1 + \tau_k \lambda) u_k = R(\tau_k \lambda) u_k,$$

 $mit\ R(z) := 1 + z$. Das A-Stabilitätsgebiet ist somit gegeben durch

$$S = \{ z \in \mathbb{C} : |1 + z| \le 1 \}.$$

Um nun die Kontraktion des Euler-Verfahrens für das parabolische Modellproblem 1D, also für das System (2.10) sicher zu stellen, muss gelten, dass

$$|1 + \tau_k \lambda| \le 1 \qquad \text{für alle } \lambda \in \sigma(-M_h^{-1} K_h)$$

$$\Leftrightarrow \qquad \tau_k \le \frac{2}{|\lambda|} \qquad \text{für alle } \lambda \in \sigma(-M_h^{-1} K_h).$$

Da $\lambda_{\max}(M_h^{-1}K_h) \leq 12h^{-2}$ gilt, ist durch die Forderung an die Schrittweiten

$$\tau_k \le \frac{2}{12h^{-2}} = \frac{1}{6}h^2$$
 für alle $k = 0, \dots, m-1$

eine hinreichende Bedinung gegeben, die die Kontraktion und somit die Stabilität gewährleistet. Das heißt, es werden sehr kleine Zeitrschrittweiten $\tau = \mathcal{O}(h^2)$ im Vergleich zu den Maschenweiten h benötigt um noch "vernünftige" Näherungslösungen zu erhalten.

Bemerkung 2.48. Die Stabilitätsfunktion eines beliebigen expliziten s-stufigen Runge-Kutta Verfahrens, also

$$R(z) = 1 + z\underline{b}^{\mathsf{T}} [I - zA]^{-1} \underline{e}$$

ist ein Polynom vom Grad kleiner gleich s. Somit folgt, dass kein expliziten s-stufiges Runge-Kutta Verfahren A-stabil, da Polynome unbeschränkt sind für $z \to -\infty$.

2.5 Implizite Runge-Kutta Verfahren

Ziel ist es nun A-stabile Verfahren zu konstruieren. Dazu approximatieren wir das Integral vorerst mit Hilfe der rechten Rechtecksregel und erhalten

$$\underline{u}(t+\tau) = \underline{u}(t) + \int_{t}^{t+\tau} \underline{f}(s, \underline{u}(s)) ds \approx \underline{u}(t) + \tau \underline{f}(t+\tau, \underline{u}(t+\tau)).$$

Dies motiviert dann die Vorschrift: :

$$\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n \text{ gegeben}$$

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \underline{f}(t_{k+1}, \underline{u}_{k+1}) \qquad \text{für } k = 0, 1, \dots, m-1.$$
(2.23)

Das Verfahren (2.23) wird als *implizites Euler-Verfahren* bezeichnet. Dabei ist die Näherung $\underline{u}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ implizit gegeben, das heißt in jedem Schritt muss nach \underline{u}_{k+1} aufgelöst werden. Ein weiteres implizites Verfahren ist zum Beispiel gegben durch die implizite Mittelpunktsregel:

Sei $\underline{u}_0 \in \mathbb{R}^n$ gegeben, dann berechne für $k=0,1,\dots,m-1$

$$\underline{g}_1 = \underline{u}_k + \frac{\tau_k}{2} \underline{f}(t_k + \frac{\tau_k}{2}, \underline{g}_1),$$

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \underline{f}(t_k + \frac{\tau_k}{2}, g_1).$$

Allgemeine s-stufige implizite Runge-Kutta Verfahren sind gegeben durch die Vorschrift: Für eine gegebene Näherung $\underline{u}_k \in \mathbb{R}^n$ im Punkt t_k berechne die neue Näherung $\underline{u}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ im Punkt t_{k+1} als

$$\underline{g}_i = \underline{u}_k + \tau_k \sum_{j=1}^s a_{ij} \underline{f}(t_k + c_j \tau_k, \underline{g}_j) \qquad \text{für } i = 1, \dots, s,$$
 (2.24)

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \sum_{i=1}^s b_i \underline{f}(t_k + c_i \tau_k, \underline{g}_i). \tag{2.25}$$

Dabei ist (2.24) im Allgemeinen ein gekoppeltes System von $s \in \mathbb{N}$ Gleichungen, welches nach $\underline{g} := \{\underline{g}_1^\top, \dots, \underline{g}_s^\top\}^\top \in \mathbb{R}^{sn}$ aufgelöst werden muss, um die neue Näherung $\underline{u}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ berechnen zu können. Eine kompakte Schreibweise für die Gleichungen (2.24)–(2.25) ist wiederum über das Butcher-Tableau gegeben:

Definition 2.49. Ein s-stufige Runge-Kutta Verfahren mit $A \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und $\underline{b}, \underline{c} \in \mathbb{R}^{s}$ heißt explizit, falls die Matrix A eine strikt untere Dreiecksmatrix ist. Anderenfalls bezeichnen wir dieses Schema als implizit.

Beispiel 2.50. 1.) Implizites Euler-Verfahren:

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

- 2.) Implizite Mittelpunktsregel:
- 3.) θ -Methode mit $\theta \in [0, 1]$

Für die θ -Methode ergeben sich die Sonderfälle:

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1-\theta & \theta \\ \hline & 1-\theta & \theta \end{array}$$

- $\theta = 0$: explizite Euler-Verfahren.
- $\theta = 1$: implizites Euler-Verfahren.
- $\theta = \frac{1}{2}$: sogenannte implizite Trapezregel.

Für das System (2.24) muss im jeden Schritt $k=0,\ldots,m-1$ die Lösbarkeit nach $\underline{g}=\{\underline{g}_1^\top,\ldots,\underline{g}_s^\top\}^\top\in\mathbb{R}^{sn}$ gewährleistet sein. Dazu schreiben wir die Gleichungen (2.24) als Fixpunktgleichung

$$g = G(g, t_k, \underline{u}_k, \tau_k). \tag{2.26}$$

Bemerkung 2.51. Falls die Funktion $\underline{f}:[0,T]\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ Lipschitz-stetig im zweiten Argument ist, dann lässt sich mit dem Banachschen-Fixpunktsatz zeigen, dass die Fixpunktgleichung (2.26) eindeutig nach $\underline{g}\in\mathbb{R}^{sn}$ aufgelöst werden kann, falls die Schrittweite τ_k klein genug gewählt wird.

Für dissipative Systeme lässt sich zeigen, dass die Fixpunktgleichung (2.26) für beliebige Schrittweiten $\tau_k > 0$ immer nach $g \in \mathbb{R}^{sn}$ aufgelöst werden kann.

Falls die Fixpunktgleichung (2.26) bzw. das System (2.24) nun eindeutig Lösbar sind, können wir die Vectoren \underline{g}_i für $i=1,\ldots,s$ bezüglich den gegebenen Daten $t_k\in\mathbb{R}$, $\underline{u}_k\in\mathbb{R}^n$ und τ_k berechnen und wir schreiben

$$\underline{g}_i = \gamma_i(t_k, \underline{u}_k, \tau_k)$$
 für $i = 1, \dots, s$.

Somit ergibt sich die neue Näherung $\underline{u}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ als

$$\underline{u}_{k+1} = \underline{u}_k + \tau_k \sum_{i=1}^s b_i \underline{f}(t_k + c_i \tau_k, \gamma_i(t_k, \underline{u}_k, \tau_k))$$
$$=: \underline{u}_k + \tau_k \underline{\phi}(t_k, \underline{u}_k, \tau_k).$$

Das heißt, alle s-stufigen Runge-Kutta Verfahren (implizit oder explizit) sind Einschrittverfahren der Form (2.14). Somit können alle gezeigten Aussagen für allgemeine Einschrittverfahren auf die impliziten s-stufigen Runge-Kutta Verfahren angewendet werden.

2.5.1 Konsistenz impliziter Runge-Kutta Verfahren

Wie für die expliziten Verfahren lässt sich die Konsistenz von impliziten Verfahren über Taylorreihenentwicklungen zeigen. Dabei gilt folgendes:

- Implizetes Euler-Verfahren: Konsistenzordnung p = 1.
- Implizite Mittelpunktsregel: Konsistenzordnung p = 2.
- θ -Methode:
 - $-\theta \neq \frac{1}{2}$: Konsistenzordnung p=1.
 - $-\theta = \frac{1}{2}$: Konsistenzordnung p = 2.

Allgemein lässt sich mit einem implizitem s-stufigen Runge-Kutta Verfahren die maximale Konsistenzordnung p=2s erreichen. Solche Verfahren heißen auch Runge-Kutta Verfahren vom Gauß-Typ.

2.5.2 A-Stabilität von Runge-Kutta Verfahren

Für implizite Runge-Kutta Methoden lassen sich die Begriffe wie A-Stabilitätsfunktion, A-Stabilitätsgebiet und A-Stabilität anolog eingeführt werden. Dabei gilt wiederum

$$R(z) = 1 + z\underline{b}^{\mathsf{T}} \left[I - zA \right]^{-1} \underline{e},$$

mit $\underline{e} = \{1, \dots, 1\}^{\mathsf{T}}$. Dabei ist die Matrix $I - zA \in \mathbb{R}^{s \times s}$ genau dann invertierbar, falls

$$\frac{1}{z} \notin \sigma(A)$$
.

Weiters lässt sich zeigen, dass die A-Stabilitätsfunktion von s-stufigen Runge-Kutta Verfahren die Form

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}$$
, wobei $P, Q \in \mathbb{P}_s$ mit $P(0) = Q(0) = 1$

besitzt. Für explizite Runge-Kutta Verfahren gilt also Q(z)=1. Wiederum ist das A-Stabilitätsgebiet gegeben durch

$$S = \left\{ z \in \mathbb{C} : |R(z)| \le 1 \right\}.$$

Ein implizites Runge-Kutta Verfahren heißt A-stabil, falls $\mathbb{C}^- \subset S$ gilt.

Beispiel 2.52. • Für das implizite Euler-Verfahren gilt für $f(t, u(t)) = \lambda u(t)$

$$u_{k+1} = u_k + \tau_k \lambda u_{k+1}.$$

Dies impliziert

$$u_{k+1} = \frac{1}{1 - \tau_k \lambda} u_k = R(\tau_k \lambda) u_k, \quad mit \quad R(z) = \frac{1}{1 - z} f \ddot{u} r \ z \in \mathbb{C}.$$

Das Stabilitätsgebiet ist somit gegeben durch

$$S = \left\{ z \in \mathbb{C} : \frac{1}{|1 - z|} \le 1 \right\} = \left\{ z \in \mathbb{C} : 1 \le |1 - z| \right\}.$$

Es gilt also $\mathbb{C}^- \subset S$, wodurch die A-Stabilität des impliziten Euler-Verfahrens gezeigt wurde.

• Analog ergibt sich für die implizite Mittelpunktsregel die A-Stabilitätsfunktion

$$R(z) = \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}}.$$

Wodurch auch die A-Stabilität gewährleistet ist.

• Für die θ -Methode gilt

$$R(z) = \frac{1 + (1 - \theta)z}{1 - \theta z}.$$

Somit ist die θ -Method A-stabil für $\theta \geq \frac{1}{2}$.

Aus der A-Stabilität folgt für dissipative Systeme der Form (2.20) die Kontraktion unabhängig von der Schrittweite $\tau_k > 0$, siehe Theorem 2.45. Somit ist nach Lemma 2.43 die Stabilität mit der Stabilitätskonstante $c_S = 1$ erfüllt. Ist ein Verfahren zusätzlich konsistent, so folgt nach Lemma 2.33 die Konvergenz.

2.5.3 Allgemeine dissipative Systeme

Definition 2.53 (B-Stabilität). Ein Einschrittverfahren der Form (2.14) heißt B-stabil, falls für alle dissipativen Differentialgleichungen der Form

$$\underline{u}'(t) = \underline{f}(t, \underline{u}(t)) \qquad \text{für } t \in (0, T),$$

$$\underline{u}(0) = \underline{u}_0,$$

die Kontraktivität erfüllt ist.

Lemma 2.54. Das implizite Euler-Verfahren ist B-stabil.

Beweis. Für $\underline{u}, \underline{w} \in \mathbb{R}^n$ seien $\underline{u}_+, \underline{w}_+ \in \mathbb{R}^n$ die Lösungen von

$$\underline{u}_{+} = \underline{u} + \tau_{k}\underline{\phi}(t_{k}, \underline{u}_{+}, \tau_{k}) = \underline{u} + \tau_{k}\underline{f}(t_{k}, \underline{u}_{+}),$$

$$\underline{w}_{+} = \underline{w} + \tau_{k}f(t_{k}, \underline{w}_{+}).$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \left\| \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right\|^{2} &= \left(\underline{u}_{+} - \underline{w}_{+}, \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right) \\ &= \left(\underline{u} - \underline{w}, \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right) + \tau_{k} \left(\underline{f}(t_{k}, \underline{u}_{+}) - \underline{f}(t_{k}, \underline{w}_{+}), \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right) \\ &\leq \left(\underline{u} - \underline{w}, \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right) \leq \left\| \underline{u} - \underline{w} \right\| \left\| \underline{u}_{+} - \underline{w}_{+} \right\|. \end{aligned}$$

Und somit folgt die Kontraktivität

$$\left\| \underline{u}_+ - \underline{w}_+ \right\| \le \left\| \underline{u} - \underline{w} \right\|.$$

2.6 Voll-diskretisierte parabolische Differentialgleichungen

Die Semi-Diskretisierung des parabolischen Modellproblems 1D führt auf das System von gewöhnlichen Differentialgleichungen: Gesucht ist $\underline{u}_h \in \mathcal{C}^1([0,T], \mathbb{R}^n)$, sodass

$$\underline{u}_h'(t) = M_h^{-1} \left[f_h(t) - K_h \underline{u}_h(t) \right] \qquad \text{für } t \in (0, T),
\underline{u}_h(0) = M_h^{-1} \underline{g}_h$$
(2.27)

erfüllt ist. Die Anwendung des impliziten Euler-Verfahrens auf die gewöhnliche Differentialgleichung (2.27) führt auf das Schema

$$\underline{u}_{h,k+1} = M_h^{-1} \underline{g}_h,$$

$$\underline{u}_{h,k+1} = \underline{u}_{h,k} + \tau_k M_h^{-1} \left[f_h(t_{k+1}) - K_h \underline{u}_{h,k+1} \right] \qquad \text{für } k = 0, \dots, m-1.$$

Somit muss in jedem Schritt ein lineares Gleichungssystem gelöst werden, im Speziellen

$$[M_h + \tau_k K_h] \, \underline{u}_{h,k+1} = M_h \underline{u}_{h,k} + \tau_k \underline{f}_h(t_{k+1}) \qquad \text{für } k = 0, \dots, m-1.$$

Dabei kann das Gleichungssystem mit den in Kapitel ?? vorgestellten Methoden gelöst werden. Aus den berechneten Näherungslösungen $\underline{u}_{h,k}$, $k=0,\ldots,m$ für das System (2.27) ergeben sich mit

$$u_{h,k}(x) = \sum_{j=1}^{n_h} \underline{u}_{h,k}[j]\varphi_j(x)$$

Näherungen für die Gitterpunkte $t_k \in I_\tau$. Es stellt sich nun die Frage, wie gut diese Näherungen sind, also wir wollen den Fehler

$$u(t_k) - u_{h,k}$$
 für $t_k \in I_{\tau}$

geeignet abschätzen. Sei $\underline{u}_h \in \mathcal{C}^2([0,T], \mathbb{R}^n)$ die Lösung von (2.27) mit der entsprechenden Funktion $u_h \in \mathcal{C}^2([0,T], V_h)$. Dann gilt

$$||u(t_k) - u_{h,k}||_{L^2(0,1)} \le ||u(t_k) - u_h(t_k)||_{L^2(0,1)} + ||u_h(t_k) - u_{h,k}||_{L^2(0,1)}.$$

Der erste Term ist der Fehler der Semi-Diskretisierung, der mit Hilfe von Theorem 2.24 unter gewissen Regularitätsannahmen abgeschätzt werden kann durch

$$||u(t_k) - u_{h,k}||_{L^2(0,1)} \le ch^2 \left[|u(t_k)|_{H^2(0,1)} + |u_0|_{H^2(0,1)} + \int_0^{t_k} |u'(s)|_{H^2(0,1)} \, \mathrm{d}s \right].$$

Für das impliziten Euler Verfahren gilt die Konsistenzabschätzung

$$\left\| \underline{\psi}_{\tau}(\underline{u}_{\tau}) \right\| \leq \tau \int_{0}^{T} \left\| \underline{u}''(t) \right\| \mathrm{d}t$$

und somit folgt wegen der A-Stabilität, für den zweiten Term die Abschätzung

$$\|u_h(t_k) - u_{h,k}\|_{L^2(0,1)} = \|\underline{u}_h(t_k) - \underline{u}_{h,k}\|_{M_h}$$

$$\leq \tau \int_0^T \|\underline{u}_h''(t)\|_{M_h} \mathrm{d}t = \tau \int_0^T \|u_h''(t)\|_{L^2(0,1)} \mathrm{d}t.$$

Insgesamt gilt für $t_k \in I_\tau$ unter geeigneten Regularitätsannahmen die Abschätzung

$$||u(t_k) - u_{h,k}||_{L^2(0,1)} \le ch^2 \left[|u(t_k)|_{H^2(0,1)} + |u_0|_{H^2(0,1)} + \int_0^{t_k} |u'(s)|_{H^2(0,1)} \, \mathrm{d}s \right]$$
$$+ \tau \int_0^T ||u''_h(t)||_{L^2(0,1)} \, \mathrm{d}t.$$

Bemerkung 2.55. In der obigen Abschätzung ist noch die Funktion $u_h \in C^2([0,T],V_h)$ enthalten. Dieser Ausdruck lässt sich noch weiter abschätzen, sodass sich der Fehler insgesamt wie

$$||u(t_k) - u_{h,k}||_{L^2(0,1)} = \mathcal{O}(h^2 + \tau)$$

 $verh\"{a}lt.$