



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Festkörperforschung

**Fast A-stabile Donelson-Hansensche zyklische
Verfahren zur numerischen Integration von
stiff-Differentialgleichungssystemen**

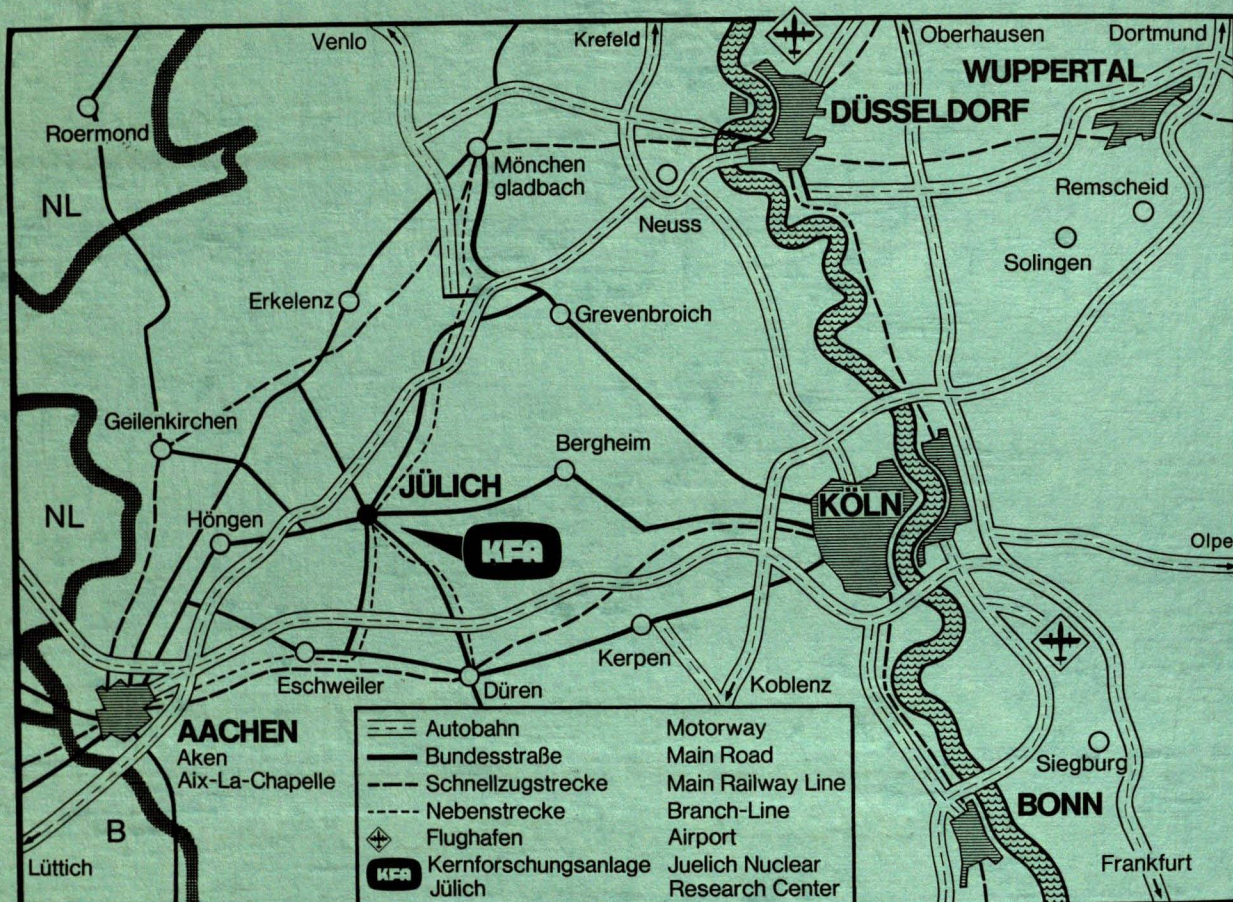
von

M. MIHELČIĆ

Jül - 1438

Juli 1977

**Als Manuskript gedruckt
ISSN 0366-0885**



Berichte der Kernforschungsanlage Jülich - Nr. 1438

Institut für Festkörperforschung Jülich - 1438

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,
Jülich, Bundesrepublik Deutschland

**Fast A-stabile Donelson-Hansensche zyklische
Verfahren zur numerischen Integration von
stiff-Differentialgleichungssystemen**

von

M. MIHELČIĆ

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden neue Donelson-Hansen 2-zyklische 3-Schritt-Verfahren mit der Ordnung 4 bzw. 3-zyklische 3-Schritt-Verfahren der Ordnung 5 (kürzer $(k=3, M=2)$ - bzw. $(k=3, M=3)$ -Verfahren) entwickelt, die in der ganzen linken Halbebene mit Ausnahme endlicher Bereiche nahe der imaginären Achse (Bild 1, 2 und 4) absolut stabil sind, im Gegensatz zu den in [5] ursprünglich entwickelten Verfahren, die sich zwar durch höhere Ordnung ($P=5$ bzw. 6) auszeichnen, aber dafür kleine Stabilitätsbereiche haben. Die neuen Verfahren besitzen außerdem optimale Konvergenzeigenschaften für $L \rightarrow -\infty$ ($L=h \cdot q$) und sind dadurch für sehr steife (stiff) Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme geeignet. Die Effizienz der neuen Verfahren wurde an zahlreichen Beispielen erprobt, und einige davon werden hier angegeben.

Inhaltsverzeichnis

O.	Einleitung	3
1.	Einige Grundbegriffe aus der Theorie der linearen Mehrschrittverfahren	5
1.1	Konvergenz	5
1.2	Ordnung und Fehlerkonstante	6
1.3	Der lokale und globale Abbruchfehler	7
1.4	Konsistenz und Stabilität (zero stability)	9
1.5	Numerische Stabilität	13
1.6	Stiff-Differentialgleichungen und -Differentialgleichungssysteme	17
1.6.1	Das Problem der Stabilität bei der numerischen Integration von stiff-Differentialgleichungs- systemen	19
2.	M-zyklische k-Schrittverfahren	23
3.	Modifizierte M-zyklische k-Schrittverfahren	26
3.1	Erweiterung des Stabilitätsbereiches	27
3.1.1	(k=3,M=2)-Verfahren	28
3.1.2	(k=3,M=3)-Verfahren	33
4.	Numerische Ergebnisse	39
5.	Schlußdiskussion	44
	Anhang	45
	Literaturverzeichnis	46
	Tabellen	48
	Abbildungen	

0. Einleitung

Im folgenden werden wir uns mit der numerischen Integration des Anfangswertproblems für Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme erster Ordnung befassen, und zwar:

$$\vec{y}' = \vec{f}(x, \vec{y}); \quad \vec{y}(a) = \vec{\eta} . \quad (0.1)^1)$$

Gesucht wird die Lösung dieser Aufgabe im Intervall $a \leq x \leq b$, wobei a und b endlich sind. Es wird weiter vorausgesetzt, daß die Funktion $\vec{f}$ gewisse Bedingungen²⁾ erfüllt, so daß die Gleichung (0.1) eine eindeutige stetig differenzierbare Lösung besitzt.

Insbesondere interessieren uns diejenigen Probleme (0.1), für welche Norm $\left\| \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}} \right\|$ groß ist. Mit dieser Art von Gleichungen werden wir uns später ausführlicher beschäftigen.

Die Mehrzahl der Verfahren, die zur Lösung von (0.1) führen können, sind sog. Diskretisierungsverfahren, die im allgemeinen darin bestehen, die Lösung $y(x)$ der Differentialgleichung an den Stellen $x = x_j$ einer Punktmenge $\{x_j = a + jh \mid h = \frac{b-a}{n}; j = 0, 1, \dots, n\}$ durch Näherungswerte $\{y_j\}$ zu approximieren, indem die Differentialgleichung (0.1) durch eine Differenzengleichung ersetzt wird und die $\{y_j\}$ aus dieser bestimmt werden. Nimmt das Verfahren die Form

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} \quad (0.2)$$

an, wobei y_n eine Approximation der theoretischen Lösung an der Stelle x_n und $f_n \equiv f(x_n, y_n)$ sind, so nennt man dieses Verfahren lineares k -Schrittverfahren. Dabei wird angenommen, daß die Kon-

¹⁾ Unter (0.1) werden wir im folgenden der Einfachheit halber nur eine Differentialgleichung verstehen, was aber auf das weitere keinen Einfluß haben wird.

²⁾ a) Die Funktion $\vec{f} = [f_1, f_2, \dots, f_m]^T$ ist im Gebiet $G = \{a \leq x \leq b; -\infty < y_i < \infty; i = 1, \dots, m\}$ definiert und stetig,

b) $\vec{f}$ erfüllt die Lipschitz-Bedingung

stanten α_0 und β_0 nicht gleichzeitig den Wert 0 annehmen können und daß α_k immer verschieden von Null ist. Die Konstanten α_j, β_j sind, wie aus (0.2) folgt, bis auf eine multiplikative Konstante fest, so daß wir im folgenden $\alpha_k=1$ setzen werden (Normierung). Für $\beta_k=0$ heißt das Verfahren explizit, für $\beta_k \neq 0$ implizit, denn y_{j+k} ist in diesem Fall noch in $f_{j+k}=f(x_{j+k}, y_{j+k})$ enthalten. In beiden Fällen benötigt man, um das Verfahren starten zu können, k Startwerte $y_\mu, \mu=0, 1, \dots, k-1$, die man mittels anderer Verfahren (z.B. Einschrittverfahren) berechnen kann. Bei einem impliziten Verfahren, das man im allg. auch Korrektor nennt, benötigt man bei jedem Integrationsschritt wegen $\beta_k \neq 0$ noch eine Vorhersage des Wertes y_{n+k} . Diesen Wert bestimmt man meistens mittels eines expliziten Verfahrens, das man im allg. Prediktor nennt.

Das natürliche Vorgehen bei der Entwicklung von Diskretisierungsverfahren ist es, möglichst genaue Verfahren mit gleichzeitig großen Stabilitätsgebieten zu gewinnen. Daß die beiden Eigenschaften, insbesondere wenn es sich um lineare k -Schrittverfahren handelt, nicht miteinander konform sind, wird später ersichtlich, wie auch die Schwierigkeiten, diese beiden Eigenschaften dennoch zu realisieren.

1. Einige Grundbegriffe aus der Theorie der linearen Mehrschrittverfahren

In diesem Abschnitt werden einige Grundbegriffe wie Konvergenz, Konsistenz, Ordnung, Null-Stabilität (zero stability) und Stabilitätsbereich, die für das bessere Verständnis dieser Verfahren von Wichtigkeit sind, erklärt.

1.1 Konvergenz

Von einem akzeptablen linearen k -Schrittverfahren wird verlangt, daß die von dem Verfahren ausgehende Lösung $\{y_n\}$ für $h \rightarrow 0$ in gewissem Sinne gegen die Lösung $y(x)$ der Differentialgleichung konvergiert.

Definition 1.1

Ein lineares k -Schrittverfahren (0.2) heißt konvergent, wenn für alle Anfangswertaufgaben (0.1) gilt:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ nh = x - a}} y_n = y(x_n)$$

und zwar für alle $x \in [a, b]$ und alle Lösungen $\{y_n\}$ der Differenzengleichung, die die Startbedingungen $y_\mu = \eta_\mu(h)$, $\mu = 0, 1, \dots, k-1$ befriedigen, wobei die Startwerte y_μ die Bedingung $\lim_{h \rightarrow 0} y_\mu = \eta$ erfüllen müssen.

Es ist bemerkenswert, daß von den Startwerten als Funktionen von h nur $y_\mu \rightarrow \eta$ für $h \rightarrow 0$ verlangt wird und nicht etwa, daß die Startwerte selber die exakten Lösungen der Differentialgleichung für entsprechende Werte $x \in [a, b]$ sein müssen.

1.2 Ordnung und Fehlerkonstante

Im folgenden ordnen wir dem linearen k-Schrittverfahren einen linearen Differenzenoperator L zu und zwar

$$L[y(x);h] = \sum_{j=0}^k [\alpha_j y(x+jh) - h\beta_j y'(x+jh)], \quad (1.1)$$

wobei $y(x)$ auf $[a,b]$ eine beliebige, stetig differenzierbare Funktion ist.

Der Grund für die Einführung dieses Operators liegt in der Auswahl der Testfunktion $y(x)$, von der man im Gegensatz zu der Lösung des Anfangswertproblems beliebig viele höhere Ableitungen verlangen kann. Dadurch ist man in der Lage, die Ordnung des Operators L und des mit ihm verbundenen linearen k-Schrittverfahrens zu definieren.

Durch Taylorentwicklung der Funktion $y(x+jh)$ und ihrer Ableitung $y'(x+jh)$ in dem Punkt x ergibt sich aus (1.1)

$$L[y(x);h] = c_0 y(x) + c_1 h y^{(1)}(x) + \dots + c_q h^q y^{(q)}(x) + \dots \quad (1.2)$$

wobei c_q von α_j und β_j abhängige Konstanten sind.

Definition 1.2

Der lineare Differenzenoperator L (1.1) und das mit ihm verbundene lineare k-Schrittverfahren (0.2) haben die Ordnung p, wenn in (1.2) $c_0 = c_1 = \dots = c_p = 0$ und $c_{p+1} \neq 0$ erfüllt ist.

Für die Koeffizienten c_q gilt dabei:

$$c_0 = \sum_{j=0}^k \alpha_j; \quad c_1 = \sum_{j=1}^k j\alpha_j - \sum_{j=0}^k \beta_j; \quad c_q = \frac{1}{q!} \sum_{j=1}^k j^q \alpha_j - \frac{1}{(q-1)!} \sum_{j=1}^k j^{(q-1)} \cdot \beta_j; \quad q=2,3,\dots \quad (1.3)$$

Die Konstante c_{p+1} nennt man Fehlerkonstante.

1.3 Der lokale und globale Abbruchfehler

Definition 1.3

Der lokale Abbruchfehler eines k -Schrittverfahrens (0.2) an der Stelle x_{n+k} ist durch den Wert des Ausdrucks $L[y(x_n); h]$ in (1.1) bestimmt, wobei $y(x)$ die theoretische Lösung des Anfangswertproblems (0.1) darstellt.

Die Bezeichnung "lokal" in der Definition 1.3 des lokalen Abbruchfehlers soll folgendermaßen verstanden werden: Es wird angenommen, daß der Wert y_{n+k} , der durch das Verfahren (0.2) an der Stelle x_{n+k} geliefert wird, durch keine vorherigen Abbruchfehler beeinflusst wurde. Mit anderen Worten: Wir setzen voraus, daß $y_{n+j} = y(x_{n+j})$ für $j=0, 1, \dots, k-1$. Nehmen wir an, daß in (1.1) $y(x)$ die theoretische Lösung des Anfangswertproblems (0.1) sei, dann folgt aus (1.1):

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^k \alpha_j y(x_n + jh) &= h \sum_{j=0}^k \beta_j y'(x_n + jh) + L[y(x_n); h] \\ &= h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_n + jh, y(x_n + jh)) + L[y(x_n); h]. \end{aligned}$$

Aus (0.2) folgt dagegen:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n+j}, y_{n+j}).$$

Nach der Subtraktion beider Ausdrücke und Ausnutzung der oben genannten lokalen Eigenschaft ergibt sich:

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k} = h \beta_k [f(x_{n+k}, y(x_{n+k})) - f(x_{n+k}, y_{n+k})] + L[y(x_n); h].$$

Nach der Anwendung des Mittelwertsatzes, wobei η_{n+k} ein Punkt aus dem Intervall $(y_{n+k}, y(x_{n+k}))$ ist, ergibt sich schließlich:

$$T_{n+k} \equiv L[y(x_n); h] = [1 - h\beta_k \frac{\partial f(x_{n+k}, y_{n+k})}{\partial y}] \cdot [y(x_{n+k}) - y_{n+k}] . \quad (1.4)$$

Aus (1.4) folgt, daß für ein explizites Verfahren ($\beta_k=0$) der lokale Abbruchfehler der Differenz zwischen der theoretischen Lösung und der durch das Verfahren (0.2) gelieferten Lösung gleich ist; für ein implizites Verfahren ($\beta_k \neq 0$) dagegen ist der Abbruchfehler proportional dieser Differenz. Nimmt man aber an, daß die theoretische Lösung $y(x)$ stetige Ableitungen beliebig hoher Ordnung besitzt, so ergibt sich aus (1.4) für beide Verfahren (explizite und implizite):

$$y(x_{n+k}) - y_{n+k} = c_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+2}), \quad (1.5)$$

wobei p die Ordnung des Verfahrens bedeutet. Den Ausdruck $c_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n)$ nennt man hauptlokalen Abbruchfehler (principal local truncation error).

Wenn man die eigentlich unrealistische lokale Eigenschaft in (1.4) und (1.5) nicht voraussetzt, dann wird der Fehler $\ell_{n+k} = y(x_{n+k}) - y_{n+k}$ der globale Abbruchfehler genannt. Dieser Fehler enthält alle Abbruchfehler, die bei jeder Anwendung des Verfahrens (0.2) entstanden sind, und hängt in komplizierter Weise sowohl von den Koeffizienten des Verfahrens als auch von dem Anfangswertproblem selbst ab.

1.4 Konsistenz und Stabilität (zero stability)

Definition 1.4

Das lineare k -Schrittverfahren (0.2) heißt konsistent, wenn es die Ordnung $p \geq 1$ hat.

Als Konsequenz dieser Definition folgt aus (1.3):

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0 ; \quad \sum_{j=0}^k j \alpha_j = \sum_{j=0}^k \beta_j . \quad (1.6)$$

In der folgenden Betrachtung setzen wir $h \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ und $nh = x - a$ voraus, wobei $nh = x - a$ konstant bleiben soll. Es gelte noch $y_n \rightarrow y(x)$. Da k fest vorgegeben ist, gilt auch $y_{n+j} \rightarrow y(x)$ für $j = 0, 1, \dots, k$, oder anders ausgedrückt:

$$y(x) = y_{n+j} + \theta_{j,n}(h); \quad j = 0, 1, \dots, k,$$

wobei vorausgesetzt wird, daß $\lim_{h \rightarrow 0} \theta_{j,n}(h) = 0$ für $j = 0, 1, \dots, k$.

Daraus folgt:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y(x) = \sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} + \sum_{j=0}^k \alpha_j \theta_{j,n}(h) ,$$

oder

$$y(x) \cdot \sum_{j=0}^k \alpha_j = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} + \sum_{j=0}^k \alpha_j \theta_{j,n}(h) .$$

Für $h \rightarrow 0$ verschwindet in dem letzten Ausdruck die rechte Seite, so daß wegen $y(x) \neq 0$ (im allgemeinen) folgt: $\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0$.

Es ist bemerkenswert, daß die erste Bedingung in (1.6) nicht von der Differentialgleichung abhängt. Diese Bedingung ist schon dann erfüllt, wenn vorausgesetzt werden kann, daß die Lösung $\{y_n\}$ zu der beliebigen Funktion $y(x)$ tendiert. Erst die zweite Bedingung in (1.6) hängt von der Differentialgleichung ab.

Für $h \rightarrow 0$ folgt nämlich: $(y_{n+j} - y_n)/jh \rightarrow y'(x)$ ($j=1, 2, \dots, k$) oder

$$y_{n+j} - y_n = jh y'(x) + jh \phi_{j,n}(h); \quad j=1, 2, \dots, k,$$

wobei $\lim_{h \rightarrow 0} \phi_{j,n}(h) = 0$ vorausgesetzt wird. Daraus ergibt sich:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} - \sum_{j=0}^k \alpha_j y_n = h \sum_{j=0}^k j \alpha_j y'(x) + h \sum_{j=0}^k j \alpha_j \phi_{j,n}(h),$$

oder

$$h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} - y_n \sum_{j=0}^k \alpha_j = h y'(x) \sum_{j=0}^k j \alpha_j + h \sum_{j=0}^k j \alpha_j \phi_{j,n}(h).$$

Wegen $\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0$ und nach Division mit h folgt:

$$\sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j} = y'(x) \sum_{j=0}^k j \alpha_j + \sum_{j=0}^k j \alpha_j \phi_{j,n}(h).$$

Da für $h \rightarrow 0$ $f_{n+j} \rightarrow f(x, y(x))$, ergibt sich schließlich (für $h \rightarrow 0$):

$$f(x, y(x)) \sum_{j=0}^k \beta_j = y'(x) \sum_{j=0}^k j \alpha_j.$$

Daraus schließt man, daß $y(x)$ dann eine Lösung der Differentialgleichung (0.1) wird, wenn $\sum_{j=0}^k \beta_j = \sum_{j=0}^k j \alpha_j$ erfüllt ist.

Daß die Bedingungen (1.6) für die Konvergenz notwendig, aber nicht hinreichend sind, wird im folgenden gezeigt.

Wir führen zunächst zwei Polynome $\rho(\xi)$ und $\sigma(\xi)$ ein, die wir das erste und das zweite charakteristische Polynom des Verfahrens (0.2) nennen wollen, und zwar:

$$\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j; \quad \sigma(\xi) = \sum_{j=0}^k \beta_j \xi^j. \quad (1.7)$$

Aus (1.6) folgt dann, daß ein lineares k-Schrittverfahren konsistent ist, wenn

$$\rho(1)=0, \rho'(1)=\sigma(1) \quad (1.8)$$

erfüllt ist.

Aus (1.8) schließt man, daß das erste charakteristische Polynom eines konsistenten k-Schrittverfahrens immer für $\xi=1$ eine Nullstelle hat. Diese Wurzel nennt man Hauptwurzel und bezeichnet sie mit ξ_1 . Die restlichen $(k-1)$ Nullstellen des Polynoms ρ , d.h. $\xi_s, s=2,3,\dots,k$ sind sog. Nebenwurzeln. Diese Wurzeln haben nichts mit der Lösung der Differentialgleichung (0.1) zu tun, sondern entstehen als Folge der Approximation einer Differentialgleichung erster Ordnung durch eine Differenzengleichung k-ter Ordnung. Es liegt daher die Vermutung nahe, daß diese Wurzeln sehr sorgfältig kontrolliert werden müssen, wenn das Verfahren konvergent sein soll. Um das zu zeigen, betrachten wir eine triviale Anfangswertaufgabe $y'=0, y(0)=0$ mit der Lösung $y(x)\equiv 0$. Nach der Anwendung des Verfahrens (0.2) ergibt sich folgende Differenzengleichung: $\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = 0$. Unter der Voraussetzung, daß die Nullstellen des Polynoms $\rho(\xi)$ alle reell und verschieden sind, wie auch, daß die Startwerte $y_\mu \rightarrow y(0)$ für $\mu=0,1,\dots,k-1$ und $h \rightarrow 0$, lautet die Lösung der Differenzengleichung:

$$y_n = h(d_1 \xi_1^n + d_2 \xi_2^n + \dots + d_k \xi_k^n),$$

wobei d_i Konstanten sind.

Für ein konvergentes Verfahren geht für $h \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$ und $nh=x, y_n$ gegen Null, wobei $nh=x$ fixiert bleiben soll. Dann gilt auch

$\lim_{h \rightarrow 0, nh=x} h \xi_s^n = x \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} (\xi_s^n / n) = 0$ dann und nur dann, wenn $|\xi_s| \leq 1$. Mit

Sicherheit also wird das Verfahren nicht konvergent sein, wenn nur eine der Wurzeln ξ_s dem Betrag nach größer als 1 ist.

Betrachten wir jetzt den Fall, daß eine der Wurzeln ξ_s die Mehrfachheit $m > 1$ besitzt. In dem Fall ist der Beitrag dieser Wurzel zur Lösung y_n gleich:

$h[d_{s,1} + d_{s,2} \cdot n + d_{s,3} \cdot n \cdot (n-1) + \dots + d_{s,m} n(n-1) \dots (n-m+2)] \xi_s^n$, so daß für $q \geq 1$ gilt: $\lim_{h \rightarrow 0, nh=x} h n^q \xi_s^n = x \cdot \lim_{n \rightarrow \infty} n^{q-1} \xi_s^n = 0$ dann und nur dann, wenn $|\xi_s| < 1$ ist.

Daraus folgt, daß das Polynom $\rho(\xi)$ eines konvergenten Verfahrens keine mehrfachen Wurzeln ξ_s mit $|\xi_s| \geq 1$ haben darf. Dasselbe gilt auch, wenn die Wurzeln von $\rho(\xi)$ komplex sind.

Da die Konsistenz keinen Einfluß auf die Nebenwurzeln des Polynoms $\rho(\xi)$ ausüben kann, folgt, daß ein konsistentes Verfahren nicht notwendigerweise konvergent ist.

Definition 1.5

Ein lineares k -Schrittverfahren heißt stabil (zero stable), wenn keine Wurzel des Polynoms $\rho(\xi)$ dem Betrag nach größer 1 ist und jede Wurzel mit dem Betrag 1 einfach ist.

Damit ist gesichert, daß der Einfluß der Nebenwurzeln von $\rho(\xi)$ für $h \rightarrow 0$ verschwindet.

Wir schließen diesen Abschnitt mit zwei grundlegenden Sätzen von Dahlquist, und zwar:

Satz 1.1

Konsistenz und Stabilität (zero stability) sind notwendige und hinreichende Bedingungen für die Konvergenz eines linearen k -Schrittverfahrens.

Satz 1.2

Ein stabiles, explizites k -Schrittverfahren ($\beta_k = 0$) der Form (0.2) hat höchstens die Ordnung $p = k$; ein stabiles implizites k -Schrittverfahren ($\beta_k \neq 0$) hat höchstens die Ordnung $p = k + 2$, wenn k gerade ist und $p = k + 1$, wenn k ungerade ist.

Stabile k-Schrittverfahren mit der Ordnung $k+2$ bezeichnet man als optimale Verfahren. Es kann gezeigt werden, daß für diese Verfahren alle Nullstellen des Polynoms $\rho(\xi)$ auf dem Kreis mit Radius 1 liegen. Im folgenden wird gezeigt, daß die optimalen Verfahren wegen der Lage ihrer Nullstellen gewisse numerische Schwierigkeiten zeigen, so daß nichtoptimale Verfahren ($p < k+2$) für die Anwendung durchaus von Bedeutung sind.

1.5 Numerische Stabilität

Wie wir gesehen haben, haben die Konsistenz und Stabilität (zero stability) gesichert, daß die lokalen Fehler und ihre Fortsetzung unter gegebenen Voraussetzungen $h \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$ und $nh = \text{const.}$ während der Integration der Differentialgleichung mit dem Verfahren (0.2) in vernünftigen Grenzen bleiben.

Das allerdings entspricht nicht der reellen Situation, in der h während der Integration eine feste positive Zahl bleibt. Die Frage, die sich daraus ableiten läßt, betrifft dann das Verhalten der Fehler, wenn $n \rightarrow \infty$ strebt. Es muß ein Kriterium entwickelt werden, das h zu erfüllen hat, um zu verhindern, daß sich der globale Fehler für $n \rightarrow \infty$ vergrößert. Wir betrachten zunächst das folgende k-Schrittverfahren:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+j}, \quad (1.9)$$

wobei vorausgesetzt wird, daß das Verfahren konsistent und stabil ist. Die theoretische Lösung $y(x)$ des Anfangswertproblems genügt dem Ausdruck:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j y(x_{n+j}) = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n+j}, y(x_{n+j})) + T_{n+k}, \quad (1.10)$$

wobei T_{n+k} der lokale Abbruchfehler ist. Wir bezeichnen mit $\{\tilde{y}_n\}$ die Lösung der Differenzengleichung (1.9) unter Berücksichtigung der Rundungsfehler, so daß gilt:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \tilde{y}_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(x_{n+j}, \tilde{y}_{n+j}) + R_{n+k}. \quad (1.11)$$

Nach der Subtraktion (1.11) von (1.10) und Einführung des globalen Fehlers $\tilde{l}_n = y(x_n) - \tilde{y}_n$ ergibt sich:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \tilde{l}_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j [f(x_{n+j}, y(x_{n+j})) - f(x_{n+j}, \tilde{y}_{n+j})] + \phi_{n+k}, \quad (1.12)$$

wobei $\phi_{n+k} = T_{n+k} - R_{n+k}$.

Unter der Voraussetzung der Existenz der Ableitung $\frac{\partial f}{\partial y}$ für alle $x \in [a, b]$ und nach Anwendung des Mittelwertsatzes, wobei ξ_{n+j} eine Zahl aus dem Intervall $(\tilde{y}_{n+j}, y(x_{n+j}))$ ist, ergibt sich:

$$f(x_{n+j}, y(x_{n+j})) - f(x_{n+j}, \tilde{y}_{n+j}) = [y(x_{n+j}) - \tilde{y}_{n+j}] \cdot \frac{\partial f(x_{n+j}, \xi_{n+j})}{\partial y} = \tilde{l}_{n+j} \cdot \frac{\partial f(x_{n+j}, \xi_{n+j})}{\partial y}$$

und

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \tilde{l}_{n+j} = h \cdot \sum_{j=0}^k \beta_j \frac{\partial f(x_{n+j}, \xi_{n+j})}{\partial y} \tilde{l}_{n+j} + \phi_{n+k}.$$

Wir machen an dieser Stelle zwei wichtige Vereinfachungen, und zwar:

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \lambda$$

$$\phi_n = \phi$$

Nach der Anwendung dieser Vereinfachungen folgt aus (1.12) die folgende linearisierte Fehlergleichung:

$$\sum_{j=0}^k (\alpha_j - h\lambda\beta_j) \tilde{l}_{n+j} = \phi. \quad (1.13)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet:

$$\tilde{l}_n = \sum_{j=0}^k d_j r_j^n - \phi / h\lambda \sum_{j=0}^k \beta_j, \quad (1.14)$$

wobei d_j Konstanten und r_j die Nullstellen (der Voraussetzung nach alle verschieden) der Polynomgleichung:

$$\sum_{j=0}^k (\alpha_j - \lambda h \beta_j) r_j^j = 0 \quad (1.15)$$

sind.

Führt man im Ausdruck (1.15) das erste und zweite charakteristische Polynom $\rho(r)$ und $\sigma(r)$ ein, so ergibt sich:

$$P(r, L) = \rho(r) - L\sigma(r) = 0 \quad (1.16)$$

mit $L = h \cdot \lambda$.

Dieses Polynom nennt man Stabilitätspolynom des linearen k -Schrittverfahrens. Unser Interesse richtet sich jetzt auf die entscheidende Frage, ob der Fehler $\tilde{\epsilon}_n$ mit wachsendem n größer wird oder nicht. Aus (1.14) folgt dementsprechend die Definition:

Definition 1.6

Ein lineares k -Schrittverfahren heißt absolut stabil für ein vorgegebenes L , wenn alle Nullstellen r_j in (1.16) die Bedingung $|r_j| < 1, j=1, \dots, k$ erfüllen. Das Verfahren ist absolut stabil in einem Intervall (α, β) der reellen L -Achse, wenn es absolut stabil für jedes $L \in (\alpha, \beta)$ ist.

Das Intervall, in welchem das Verfahren absolut stabil ist, hängt nur von den Koeffizienten dieses Verfahrens ab. Andererseits aber hängt die Schrittweite h auch von dem Wert λ ab, d.h. von der Differentialgleichung.

Im allgemeinen ist $\frac{\partial f}{\partial y}$ natürlich keine Konstante. In dem Fall ist es notwendig, den maximalen Wert dieser Ableitung abzuschätzen.

Bei der numerischen Integration eines Differentialgleichungssystems wird die Ableitung $\frac{\partial f}{\partial y}$ durch die Matrix $\left| \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right|$ (Jacobian) ersetzt. Da

die Eigenwerte dieser Matrix auch komplex sein können, kann man nicht mehr von einem Intervall, sondern man muß von einem Gebiet der absoluten Stabilität in der komplexen L -Ebene sprechen.

Wie aus (1.16) leicht zu sehen ist, geht das Stabilitätspolynom $P(r, L)$ für $L=0$ in das erste charakteristische Polynom $\rho(\xi)$ über. Es sei jetzt r_1 diejenige Wurzel des Polynoms $P(r, L)$, die für $L \rightarrow 0$ ($h \rightarrow 0$) zu der Hauptwurzel ξ_1 des Polynoms $\rho(\xi)$ tendiert (es kann gezeigt werden, daß die Wurzeln r_j stetige Funktionen des Parameters L (bzw. h) sind).

Für die Wurzel r_1 gilt dann die folgende Beziehung:

$$r_1 = \exp(L) + O(L^{p+1}) . \quad (1.17)$$

Aus (1.17) ergibt sich sofort, daß für hinreichend kleine L (für diese nämlich gilt die Aussage (1.17)) $r_1 > 1$ immer dann gilt, wenn $L > 0$ ist, d.h. jedes konsistente k -Schrittverfahren ist für kleine positive L absolut instabil. Nach dieser Einschränkung stellt sich die Frage, ob für jedes k -Schrittverfahren immer ein Intervall der absoluten Stabilität existiert. Die Antwort ist negativ, und zwar kann gezeigt werden, daß z.B. alle optimalen k -Schrittverfahren kein solches Intervall besitzen können. Für diese Verfahren ist das Wachsen der Fehler für $n \rightarrow \infty$ ($h = \text{const.}$) unvermeidbar. Es kann außerdem leicht bewiesen werden, daß, wenn alle Nebenwurzeln des Polynoms $\rho(\xi)$ eines Verfahrens strikt innerhalb des Einheitskreises liegen, das Verfahren ein nicht verschwindendes Intervall der absoluten Stabilität hat.

Wie schon erwähnt wurde, sind alle linearen k -Schrittverfahren absolut instabil für kleines positives L . Dies impliziert, daß sich der Fehler bei der numerischen Integration einer Differentialgleichung, für welche $\frac{\partial f}{\partial y} > 0$ ist, mit fortlaufender Integration vergrößern wird. Diese Situation ist nicht so pessimistisch, wie sie zunächst aussehen mag, d.h. es kann gezeigt werden, daß immer dann, wenn die Lösung der Fehlergleichung (1.14) durch den Teil $d_1 r_1^n$ dominiert wird, der Fehler sich mit ungefähr demselben Zuwachs vergrößern wird, wie die Lösung $y(x)$ der Differentialgleichung.

Definition 1.7

Ein lineares k -Schrittverfahren heißt relativ stabil für das gegebene L , wenn für die Wurzeln des Stabilitätspolynoms $P(r, L)$ die Aussage $|r_j| < |r_1|$, $j=2, 3, \dots, k$ gilt. Ein Intervall (α, β) der reellen Achse heißt ein Intervall der relativen Stabilität, wenn das Verfahren für jedes $L \in (\alpha, \beta)$ relativ stabil ist.

Ein Verfahren, das kein Intervall der absoluten Stabilität hat, kann immer noch ein Intervall der relativen Stabilität haben. Der wichtigere Fall für die Praxis bleibt das Problem der Stabilität für $L < 0$, das wir ausführlich in dem nächsten Abschnitt behandeln werden.

1.6 Stiff-Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme

In vielen Anwendungsgebieten, wie z.B. der chemischen Kinetik, Kontroll-Theorie, Reaktorberechnungen, Ratengleichung bei bestrahlten Proben, usw., findet man öfters Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme mit der sog. "stiffness"-Eigenschaft. Das Problem wurde im Jahr 1952 von Curtiss und Hirschfelder erkannt und danach sehr intensiv erforscht, so daß heutzutage schon über 40 Verfahren existieren, die zur Lösung solcher Gleichungen angewandt werden können. Schwierigkeiten, die bei der numerischen Integration dieser Gleichungen auftauchen, werden wir am Beispiel eines linearen Differentialgleichungssystems zeigen. Es sei also ein lineares Differentialgleichungssystem

$$\vec{y}' = A\vec{y} + \vec{\phi}(x) \quad (1.18)$$

gegeben, mit bekannten Eigenwerten λ_t und zugehörigen Eigenvektoren $\vec{c}_t, t=1,2,\dots,m$ der $(m \times m)$ Matrix A . Außerdem wird angenommen, daß alle Eigenwerte verschieden sind. Die allgemeine Lösung dieses Systems lautet dann:

$$\vec{y}(x) = \sum_{t=1}^m k_t e^{\lambda_t x} \cdot \vec{c}_t + \vec{\psi}(x). \quad (1.19)$$

Wir setzen weiter voraus, daß $\operatorname{Re} \lambda_t < 0$ für $t=1,2,\dots,m$ ist, so daß der Anteil $\sum_{t=1}^m k_t e^{\lambda_t x} \cdot \vec{c}_t \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \infty$. Diesen Teil der Lösung wollen wir mit Nebenteil und den Teil $\vec{\psi}(x)$ mit Hauptteil der Lösung bezeichnen. Es seien weiterhin λ_μ und λ_ν zwei Eigenwerte der Matrix A mit der Eigenschaft:

$$|\operatorname{Re} \lambda_\mu| \geq |\operatorname{Re} \lambda_t| \geq |\operatorname{Re} \lambda_\nu|; \quad t=1,2,\dots,m.$$

Wenn man jetzt numerisch den Teil $\vec{\psi}(x)$ bestimmen will, so muß man die Integration soweit hinaustreiben, bis die Komponente $\exp(\lambda_\nu x)$ mit dem "kleinsten" Eigenwert verschwindend klein wird. Man sieht also, je kleiner $|\operatorname{Re}\lambda_\nu|$ ist, desto größer wird das Integrationsintervall. Andererseits aber zwingt die Präsenz des "großen" Eigenwerts $|\operatorname{Re}\lambda_\mu| \gg 0$ dazu, mit einem äußerst kleinen Wert h zu integrieren wegen der Forderung, daß $L=h \cdot \lambda_\mu$ in dem Intervall der absoluten Stabilität des Verfahrens liegen muß. Ein quantitatives Maß dieser Schwierigkeit ist die Größe von $|\operatorname{Re}\lambda_\mu|$. Falls also $|\operatorname{Re}\lambda_\mu| \gg |\operatorname{Re}\lambda_\nu|$, dann sind wir in der schwierigen Lage, numerisch über ein sehr großes Intervall mit sehr kleiner Schrittweite h integrieren zu müssen.

Definition 1.8

Ein lineares Differentialgleichungssystem $\vec{y}' = A\vec{y} + \vec{\phi}(x)$ nennt man stiff, wenn: (1) $\operatorname{Re}\lambda_t < 0$ für $t=1,2,\dots,m$ und (2) $\max_{t=1,2,\dots,m} |\operatorname{Re}\lambda_t| \gg \min_{t=1,2,\dots,m} |\operatorname{Re}\lambda_t|$, wobei $\lambda_t, t=1,2,\dots,m$ die Eigenwerte der Matrix A sind. Das Verhältnis $S = [\max_{t=1,2,\dots,m} |\operatorname{Re}\lambda_t| / \min_{t=1,2,\dots,m} |\operatorname{Re}\lambda_t|]$ nennt man stiff-Verhältnis.

Ein nichtlineares Differentialgleichungssystem besitzt stiff-Eigenschaft, wenn sich die Eigenwerte seiner Jakobischen Matrix in ähnlicher Weise verhalten. Der einzige Unterschied besteht darin, daß die Eigenwerte nicht mehr konstant sind, sondern von x abhängen. Dementsprechend sagt man, daß ein nichtlineares Differentialgleichungssystem $\vec{y}' = \vec{f}(x, \vec{y})$ in einem Intervall I der reellen Achse x stiff ist, wenn die Eigenwerte $\lambda_t(x)$ der Jakobischen Matrix die Bedingungen (1) und (2) in der Definition 1.8 erfüllen. Daß nicht nur Differentialgleichungssysteme stiff-Eigenschaft besitzen können, zeigen wir am Beispiel folgender Differentialgleichung:

$$y' = \lambda(y - F(t)) + F'(t); \quad y(0) = y_0, \quad F(0) = F_0 \quad (1.20)$$

mit $\lambda \ll 0$. Diese Gleichung zeigt stiff-Verhalten, wenn die Funktion $F(t)$ eine glatte, sich langsam verändernde Funktion ist. Die Lösung von (1.20) lautet:

$$y = (y_0 - F_0) e^{\lambda t} + F(t).$$

Man sieht auch hier, daß, obwohl das Glied $(y_0 - F_0) e^{\lambda t}$ der Lösung wegen $\lambda \ll 0$ wenig beitragen kann, gerade es die Schrittweite h bestimmt, die dann so klein sein könnte, daß der Einfluß der Rundungsfehler und die Rechenzeit kritisch werden. Das Ziel ist es also, solche Verfahren zu entwickeln, die auf die Schrittweite nicht restriktiv wirken werden.

1.6.1 Das Problem der Stabilität bei der numerischen Integration von stiff-Differentialgleichungssystemen

Es wurde im Abschnitt 1.6 gezeigt, daß eine der Schwierigkeiten bei der numerischen Integration der stiff-Differentialgleichungen in der Einschränkung der Schrittweite h liegt. Diese Einschränkung entsteht, wie wir wissen, durch endliche Gebiete der absoluten Stabilität der numerischen Verfahren. Im folgenden bringen wir einige Definitionen, die nicht nur auf lineare k-Schrittverfahren, sondern auf alle Diskretisierungsverfahren angewandt werden können.

Definition 1.9 (Dahlquist)

Ein numerisches Verfahren nennt man A-stabil, wenn das Gebiet der absoluten Stabilität die ganze linke Halbebene $\operatorname{Re} \lambda < 0$ enthält.

Aus der Definition 1.9 folgt, daß ein A-stabiles Verfahren von der Stabilität her keinerlei Einschränkungen auf die Schrittweite h hat. Daß A-Stabilität aber eine sehr harte Anforderung an die numerischen Verfahren stellt, sieht man aus dem nächsten Satz.

Satz 1.3 (Dahlquist)

- (1) Ein explizites lineares k-Schrittverfahren kann nicht A-stabil sein.
- (2) Ein A-stabiles implizites lineares k-Schrittverfahren hat höchstens die Ordnung 2.

Eine Abschwächung der A-Stabilität zeigt die nächste Definition über $A(\alpha)$ -Stabilität.

Definition 1.10

Ein numerisches Verfahren heißt $A(\alpha)$ -stabil für ein $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2})$, wenn das Gebiet der absoluten Stabilität die Form $W_\alpha = \{h\lambda \mid -\alpha < \pi - \arg h\lambda < \alpha\}$ hat; es heißt $A(0)$ -stabil, wenn es $A(\alpha)$ -stabil ist für ein hinreichend kleines $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2})$.

Der folgende Satz stammt von Widlund:

Satz 1.4 (Widlund)

- (1) Kein explizites lineares k-Schrittverfahren ist $A(0)$ -stabil.
- (2) Zu jedem $\alpha \in [0, \pi/2)$ gibt es $A(\alpha)$ -stabile implizite k-Schrittverfahren der Ordnung $p=k=3$ und $p=k=4$.

Eine weitere Abschwächung der A-Stabilität zeigt die nächste Definition.

Definition 1.11 (Gear)

Ein numerisches Verfahren heißt stoff-stabil, wenn es in dem Gebiet $R_1 = \{\operatorname{Re}(L) \leq -a\}$ absolut stabil ist und in dem Gebiet $R_2 = \{-a \leq \operatorname{Re}(L) \leq b, \mid \operatorname{Im}(L) \mid \leq C\}$ stabil und genau ist.

Die Motivation für diese Definition liegt darin, daß man kein Interesse an der Genauigkeit der numerischen Integration derjenigen Glieder in der Lösung (1.19) hat, für welche $L=h \cdot \lambda$ (λ =komplexe Konstante) groß ist und damit in dem Gebiet R_1 liegt. Bei der Integration dieser Glieder fordert man nur die absolute Stabilität. Die restlichen Eigenwerte gehören dann zu den Gliedern in (1.19), die man gerne sowohl stabil als auch genau integrieren möchte. Mit einer geeigneten Wahl der Schrittweite h liegen die Werte von L für diese Glieder im Bereich R_2 .

Daß die Forderung der A-Stabilität an sich noch immer keine Garantie für eine erfolgreiche Integration eines stiff-Differentialgleichungssystems ist, zeigt das nächste Beispiel.

Wendet man z.B. das A-stabile Verfahren $y_{n+1}-y_n=(h/2)(f_{n+1}+f_n)$ (Trapez-Regel) auf die Differentialgleichung $y'=\lambda y$ mit der komplexen Konstanten λ und $\text{Re}\lambda < 0$ an, so ergibt sich:

$$y_{n+1}/y_n = (1+h\lambda/2)/(1-h\lambda/2) \quad (1.21)$$

Wegen der A-Stabilität geht $y_n \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$ ($h=\text{const.}$). Aus (1.21) folgt weiter:

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1+h\lambda/2}{1-h\lambda/2} \right| = \left| \frac{1+h\text{Re}\lambda+(1/4)h^2|\lambda|^2}{1-h\text{Re}\lambda+(1/4)h^2|\lambda|^2} \right|^{1/2} \quad (1.22)$$

Aus (1.22) folgt für $|\text{Re}\lambda| \rightarrow \infty$ und $h=\text{const.}$: $|y_{n+1}/y_n| \rightarrow 1$, d.h. $|y_n|$ geht zwar wegen der A-Stabilität gegen Null, nur ist die Konvergenz so langsam, daß das Verfahren nicht zur Integration starker stiff-Differentialgleichungssysteme geeignet ist. Wenden wir jetzt das A-stabile Verfahren $y_{n+1}-y_n=hf_{n+1}$ (Rückwärts-Euler-Verfahren) auf dieselbe Differentialgleichung wie oben an, so ergibt sich:

$$\left| \frac{y_{n+1}}{y_n} \right| = \left| \frac{1}{1-h\lambda} \right| = \left| \frac{1}{1-2h\text{Re}\lambda+h^2|\lambda|^2} \right|^{1/2} \quad (1.23)$$

Für $|\operatorname{Re}\lambda| \rightarrow \infty$ und $h = \text{const.}$ geht $|y_{n+1}/y_n| \rightarrow 0$, d.h. $|y_n|$ konvergiert gegen Null sehr schnell, und zwar sogar dann, wenn die Schrittweite h mäßig groß ist. Dieses Verfahren ist deswegen für Differentialgleichungssysteme mit großem "stiffness"-Verhältnis geeignet.

2. M-zyklische k-Schrittverfahren

Wie wir schon gesehen haben, bedeutet der Satz 1.2 wegen der Erfüllung der Stabilitätsbedingung eine sehr harte Einschränkung der Ordnung der linearen k-Schrittverfahren. Diese Stabilitätsbarriere wurde durch Einführung eines zusätzlichen Schrittes in (0.2), eines sog. off-step Punktes überwunden, der gleichzeitig aber eine weitere Berechnung der Funktion $f(x,y)$ verlangt. Diese Verfahren wurden von Gragg und Stetter, Butcher und Gear¹⁾ vorgeschlagen. Sie liefern die Ordnung bis $p=2k+1$ für $k \leq 7$. Für $k > 7$ existieren keine weiteren stabilen Verfahren dieses Typs.

Die M-zyklischen k-Schrittverfahren (kürzer (k,M)-Verfahren) von Donelson und Hansen [5] stellen eine weitere Entwicklung der linearen k-Schrittverfahren dar. Bei diesen Verfahren wendet man zur Berechnung M aufeinanderfolgender Näherungslösungen y_j einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung (oder eines Differentialgleichungssystems) M verschiedene Korrektoren (implizite k-Schrittverfahren) in einer festen Reihenfolge an. Die Reihenfolge wird zyklisch wiederholt. Dabei gilt sowohl $M \leq k$ als auch $M > k$. Die Ordnung des Verfahrens ist mit $P = \min_{1 \leq i \leq M} p_i$ definiert, wobei p_i die Ordnung des i-ten Korrektors bedeutet.

Die bemerkenswerte Eigenschaft dieser Verfahren, wie in [5] bewiesen wurde, besteht darin, daß im Falle $M=k$, bei gleichzeitiger Erfüllung der Stabilitätsbedingung, $P=2k$ möglich ist. In ihren Überlegungen sind Donelson und Hansen folgenden Weg gegangen:

¹⁾ Literaturangabe siehe in [8]

Man kombiniert M Korrektoren mit der Schrittzahl k und der Ordnung $p=2k-1$. Es sei dabei bemerkt, daß es nicht möglich ist, $p=2k$ zu setzen, weil es nur einen Korrektor mit dieser Ordnung geben kann (1.3). Nach dem Satz 1.2 und $k>2$ ist jeder einzelne der M Korrektoren instabil, liefert aber wegen $p=2k-1<2k$ einen freien Parameter, so daß man insgesamt M freie Parameter zur Verfügung hat. Davon werden $(k-1)$ zur Stabilisierung des Systems benötigt. Setzt man $M=k$, so bleibt ein Parameter frei, den man zur Erhöhung der Ordnung des Systems verwenden kann. Man braucht also neben den Gleichungen, deren Erfüllung zur Stabilität des Verfahrens führt, noch eine Gleichung, die die Erhöhung der Ordnung des Verfahrens sichern soll.

Die $(k-1)$ Gleichungen zur Stabilisierung kann man aus dem charakteristischen Polynom des Verfahrens ableiten. Die k -te Gleichung zur Steigerung der Ordnung wurde von Donelson und Hansen durch eine Transformation des gegebenen Systems der Korrektoren auf ein äquivalentes stabiles Hilfs-System von M Korrektoren mit der Ordnung $2k$ abgeleitet. Sie gewannen dabei die Verfahren mit $(k=3, M=3)$ und $(k=4, M=4)$ mit der Ordnung $\max P=6$ bzw. 8. Trotz ihres großen Vorteils in der Genauigkeit, ohne daß dabei zusätzliche Berechnungen der Funktion $f(x,y)$ erforderlich sind, sind diese Verfahren wegen ihres sehr kleinen Stabilitätsbereiches für $k=M\geq 4$ bis jetzt praktisch unbrauchbar geblieben. Eine Untersuchung, durchgeführt vom Autor dieser Arbeit, hat auch gezeigt, daß z.B. die Verfahren $k=M=5$ mit der Ordnung 10 einen Bereich der absoluten Stabilität mit Radius $R\leq 1/2^{15}$ haben. Es ist anzunehmen, daß Donelson und Hansen das schon geahnt haben, weil man

in [5] (S. 156) folgendes findet: "We cannot account for the comparatively poor performance of method 6 with $P=8$ ²⁾. The error constants for the individual correctors composing method 6 are roughly three times as large as those for method 5³⁾. However, this cannot account for difference in accuracy. The stability of method 6 is extremely sensitive to perturbation of the coefficients of the characteristic polynomial due to using finite step size $h>0$. It is possible some small unstable error growth has occurred...".

²⁾ (k=4, M=4) -Verfahren

³⁾ (k=3, M=3) -Verfahren

3. Modifizierte M-zyklische k-Schrittverfahren

In dieser Arbeit wurde ein Versuch unternommen zu zeigen, daß Donelson-Hansen-zyklische Verfahren existieren, die in der ganzen linken Halbebene mit Ausnahme endlicher Bereiche nahe der imaginären Achse (Bild 1) absolut stabil sind. Die neuen Verfahren besitzen außerdem optimale Konvergenzeigenschaften für $L \rightarrow -\infty$ ($L = h \cdot q$) und sind dadurch für sehr steife (stiff) Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme geeignet. Es wird also das folgende Problem behandelt: Es sei das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y), \quad x \in [a, b] \\ y(a) &= \eta \end{aligned} \quad (3.1)$$

und ein (k, M) -Donelson-Hansen-Verfahren in Matrixform,

$$A_0 Y_n + A_1 Y_{n+1} + \dots + A_{j_0} Y_{n+j_0} - h(B_0 F_n + B_1 F_{n+1} + \dots + B_{j_0} F_{n+j_0}) = 0 \quad (3.2)$$

mit $n=0, 1, \dots$ gegeben. Die M -Vektoren Y_{n+i} und F_{n+i} ($i=0, \dots, j_0$) sowie die $M \times M$ -Matrizen A_i und B_i ($i=0, \dots, j_0$) sind folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} Y_n &= [y_{nM}, \dots, y_{nM+M-1}]^T; & F_n &= [f_{nM}, \dots, f_{nM+M-1}]^T; \\ A_0 &= \begin{bmatrix} a_{01} & a_{11} & \dots & a_{(M-1)1} \\ 0 & a_{02} & \dots & a_{(M-2)2} \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & a_{0M} \end{bmatrix}; & B_0 &= \begin{bmatrix} b_{01} & b_{11} & \dots & b_{(M-1)1} \\ 0 & b_{02} & \dots & b_{(M-2)2} \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \dots & b_{0M} \end{bmatrix} \text{ usw. (siehe [5]);} \end{aligned}$$

wobei a_{ij} , b_{ij} die Koeffizienten in dem j -ten Korrektur des Systems sind. Die Konstante j_0 ist: $j_0 = (k/M)$, wenn $M|k$, sonst $j_0 = [(k+M-1)/M]$, wobei $[R] \equiv$ ganzer Teil von R ist.

Das Problem liegt darin, solche (k, M) -Verfahren zu finden, die möglichst große Stabilitätsbereiche haben.

3.1 Erweiterung des Stabilitätsbereiches

Um das Problem zu lösen, setzt man zunächst in (3.1) $f(x,y)=q \cdot y$ ein, womit sich aus (3.2) mit $L=h \cdot q$

$$(A_0 - LB_0)Y_n + (A_1 - LB_1)Y_{n+1} + \dots + (A_{j_0} - LB_{j_0})Y_{n+j_0} = 0 \quad (3.3)$$

ergibt.

Dieser Differenzengleichung mit Matrixkoeffizienten ist das folgende Stabilitätspolynom

$$P(L, Z) = \det \left(\sum_{i=0}^{j_0} (A_i - LB_i) Z^i \right) \quad (3.4)$$

zugeordnet [5].

Bekanntlich ist ein (k, M) -Verfahren in einem Gebiet Γ mit $\operatorname{Re} L < 0$ genau dann absolut stabil, wenn für jedes feste $L \in \Gamma$ die absoluten Beträge aller Wurzeln Z_i , $i=1, \dots, k$ des Polynoms $P(L, Z)$ vom Grad k kleiner 1 sind, d.h.

$$\forall L \in \Gamma \Rightarrow |Z_i| < 1, \quad i=1, \dots, k. \quad (3.5)$$

Wenn dies in der ganzen linken Halbebene gilt, ist das Verfahren A-stabil (Definition 1.9).

Wie in Abschnitt 2 schon erwähnt wurde, besteht die Möglichkeit, mit einer gewissen Anzahl freier Parameter pro Korrektor die Stabilisierung und Erhöhung der Ordnung eines (k, M) -zyklischen Verfahrens zu erreichen. Es stellt sich jetzt die Frage, ob man die freien Parameter auch zur Erweiterung des Stabilitätsbereiches eines (k, M) -Verfahrens anwenden könnte. Daß das tatsächlich möglich ist, allerdings unter Verzicht auf maximale Ordnung, wird am Beispiel eines $(k=3, M=2)$ -bzw. $(k=3, M=3)$ -Verfahrens gezeigt.

3.1.1 (k=3,M=2)-Verfahren

Nach Donelson und Hansen hat ein (k=3,M=2)-zyklisches Verfahren die höchstmögliche Ordnung P=5. Das wird dadurch erreicht, daß man die Ordnung des jeweiligen Korrektors auf 2k-1=5 setzt. Dadurch werden wegen M=2 zwei Parameter frei, die man dann zur Stabilisierung des Systems benutzt. Setzt man aber die Ordnung auf 4 herab, besteht, wie im folgenden gezeigt wird, die Möglichkeit, ein (k=3,M=2)-zyklisches Verfahren zu gewinnen, das in der ganzen linken Halbebene bis auf ein relativ kleines Gebiet in der Nähe der imaginären Achse absolut stabil ist (Bild 1). In diesem Fall ergibt sich für $P(L,z)$ wegen M/k und $j_0=2$ der folgende Ausdruck:

$$\begin{aligned}
 P(L,z) &= Q_0(L) + Q_1(L)z + Q_2(L)z^2 + Q_3(L)z^3 \\
 \text{mit } Q_0(L) &= [a_{01}a_{02} - (a_{01}b_{02} + a_{02}b_{01})L + b_{01}b_{02} \cdot L^2] \\
 Q_1(L) &= [a_{01}a_{22} - a_{11}a_{12} + a_{21}a_{02} + (b_{11}a_{12} - b_{01}a_{22} + b_{12}a_{11} - a_{21}b_{02} - a_{02}b_{21} - \\
 &\quad - a_{01}b_{22})L + (b_{01}b_{22} + b_{02}b_{21} - b_{11}b_{12})L^2] \\
 Q_2(L) &= [-a_{12} - a_{11} + a_{21}a_{22} + (b_{11} + b_{12} - b_{21}a_{22} + b_{31}a_{12} + b_{32}a_{11} - a_{21}b_{22})L + \\
 &\quad + (b_{22}b_{21} - b_{32}b_{11} - b_{31}b_{12})L^2] \\
 Q_3(L) &= [-1 + (b_{31} + b_{32})L - b_{31}b_{32}L^2],
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

wobei in (3.6) $a_{31}=a_{32}=1$ gesetzt wurde (Normierung).

$P(L,z)$ ist also ein Polynom dritten Grades in z und zweiten Grades in L . Das normierte Polynom $P(L,z)$ bezeichnen wir mit

$P_N(L,z) = P(L,z)/Q_3(L)$. Aus $P(L,z)$ bzw. $P_N(L,z)$ werden zunächst zwei weitere Polynome abgeleitet, und zwar:

$$\begin{aligned}
 P_1(z) &= \lim_{h \rightarrow 0} P(L,z) \\
 P_2(z) &= \lim_{L \rightarrow -\infty} P_N(L,z)
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Das Polynom $P_1(z)$ hat neben $z_1=1$ (Konsistenzbedingung) noch zwei Wurzeln z_2 und z_3 , die nach Definition 1.5 die Stabilitätsbedingung (für $h \rightarrow 0$) erfüllen müssen. Um z_2 und z_3 steuern zu können, braucht man zwei freie Parameter. Das Polynom $P_2(z)$ hat dagegen drei Wurzeln $\hat{z}_1$, $\hat{z}_2$ und $\hat{z}_3$, die die Bedingung in (3.5) erfüllen müssen, so daß man hier drei freie Parameter benötigt. Einen freien Parameter kann man dabei allerdings einsparen, indem man von $\hat{z}_2$ und $\hat{z}_3$ den gleichen absoluten Betrag verlangt. Es werden also 4 freie Parameter gebraucht. Diese Parameter kann man dadurch gewinnen, daß man die Ordnung 4 für jeden Korrektur wählt. In diesem Fall werden 2 freie Parameter pro Korrektur als frei wählbar gesichert.

Man wählt nun die folgende Parametrisierung:

$$\begin{aligned} a_{3i} &= 1 & b_{2i} &= -5b_{3i} + a_{2i}/3 + 3 \\ a_{1i} &= 24b_{3i} - 9 & b_{1i} &= 19b_{3i} + (4/3)a_{2i} - 6 \\ a_{0i} &= -24b_{3i} - a_{2i} + 8 & b_{0i} &= 9b_{3i} + a_{2i}/3 - 3 \end{aligned} \quad (3.8)$$

mit a_{2i} , b_{3i} als freie Parameter und $i=1,2$.

Parametrisiert man die beiden Polynome $P_1(z)$ und $P_2(z)$ mit (3.8) und setzt man außerdem $b_{31} + b_{32} = U$ und $b_{31} \cdot b_{32} = V$, so ergeben sich aus dem Polynom $P_1(z)$ nach Division mit $(z-1)$ und nach Anwendung der Vietaschen Formel für z_2 und z_3 die beiden Gleichungen:

$$-192U + 576V - 8(a_{21} + a_{22} - 3b_{31}a_{22} - 3a_{21}b_{32}) + a_{21}a_{22} + 64 = z_2 \cdot z_3 \quad (3.9)$$

$$24U - a_{21}a_{22} - 17 = -(z_2 + z_3) \quad (3.10)$$

Aus dem Polynom $P_2(z)$ erhält man mit $\hat{z}_1 = -a$ und $|\hat{z}_2| = |\hat{z}_3| = K$ zwei weitere Gleichungen, nämlich:

$$(9a^2 + 6a + 1) - 3(3a^2 + 52a + 9)U + (a^3 - 13a^2 + 451a + 81)V + ((a^2 + 14a + 1)/9)a_{21}a_{22} + (a^2 - 8a + 1)(a_{22} + a_{21} - 3b_{31}a_{22} - 3a_{21}b_{32}) = 0 \quad (3.11)$$

$$-9U + a_{21} + a_{22} + (a - 13)V - 3(b_{31}a_{22} + b_{32}a_{21}) + a_{21}a_{22}/9 + 9 = 0 \quad (3.12)$$

Die Gleichungen (3.9)-(3.12) bilden ein nichtlineares Gleichungssystem in den Unbekannten a_{21} , a_{22} , b_{31} und b_{32} , wobei a ($|a| \leq 1$), z_2 und z_3 zunächst frei wählbar sind. Der Parameter K hängt von den Werten z_2 und z_3 ab. Zur Illustration wurde im Bild 3 die Abhängigkeit des Parameters $K(K = |\pm\sqrt{S}|)$ von z_2 und z_3 dargestellt.

Die Wahl der Parameter a und K spielt, neben dem Stabilitätsbereich, eine sehr wichtige Rolle bei der Lösung einer steifen (stiff) Differentialgleichung oder eines steifen (stiff) Differentialgleichungssystems. Sie bestimmen nämlich die Konvergenzeigenschaften (für $L \rightarrow \infty$) eines A-stabilen Verfahrens. Aus der A-Stabilität folgt, daß die nach (3.3) berechnete Lösung y_n der Differentialgleichung $y' = q \cdot y$ ($\operatorname{Re} q < 0$) für $n \rightarrow \infty$ ($h \equiv \text{const.}$) gegen Null tendieren muß. Dabei ist nur die Hauptwurzel z_1 des Polynoms $P(L, z)$ für die Approximation der Lösung $\exp(qx)$ verantwortlich, während alle anderen, sogenannten Nebenwurzeln nichts zur Lösung beitragen; letztere treten nur infolge der Ersetzung einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung durch eine k -Schritt-Differenzengleichung auf (Abschnitt 1.4). Der Parameter a entscheidet jetzt darüber, wie gut die Hauptwurzel (bei festem h) die Lösung $\exp(qx)$ approximiert. Um das noch besser zu verdeutlichen, greifen wir auf die in 1.6.1 aufgeführten Bei-

spiele über die Konvergenzeigenschaft der Trapez-Regel und des "rückwärts" Euler-Verfahrens zurück.

Das Trapez-Regel-Verfahren ist bekanntlich ein $(k=1, M=1)$ A-stabiles Verfahren. Es lautet:

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2} (f_{n+1} + f_n). \quad (3.13)$$

Das Stabilitätspolynom $P(L, z)$ mit $f_n = q \cdot y_n$ (für $y' = qy$) und $L = h \cdot q$ lautet:

$$P(L, z) = \left(1 - \frac{L}{2}\right) z - \left(1 + \frac{L}{2}\right). \quad (3.14)$$

Für $L \rightarrow -\infty$ ist $|\hat{z}_1| = |a| = 1$.

Wegen der A-Stabilität konvergiert $y_n \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$ ($h = \text{const.}$). Die aus $|a| = 1$ resultierende Konvergenzverlangsamung schränkt aber die Schrittweiten derart ein, daß dieses Verfahren (wie schon in 1.6.1 gezeigt wurde) nicht für die Integration sehr steifer Differentialgleichungen ($q \ll 0$) (bzw. Differentialgleichungssysteme) geeignet ist. Ein Beispiel eines gut konvergierenden Verfahrens dagegen ist das "rückwärts" Euler-Verfahren. Es lautet:

$$y_{n+1} - y_n = h f_{n+1}. \quad (3.15)$$

Das zugehörige Stabilitätspolynom $P(L, z)$, unter denselben Bedingungen wie oben, lautet:

$$P(L, z) = (1 - L) z - 1. \quad (3.16)$$

Für $L \rightarrow -\infty$ ergibt sich jetzt $\hat{z}_1 = a = 0$.

Dieses Verfahren zeigt eine sehr gute Konvergenz für $L \rightarrow -\infty$ (s. 1.6.1), d.h. y_n geht sehr schnell gegen Null, sogar für nicht sehr kleine h . Aus dieser Überlegung folgt, daß der optimale Wert für den Parameter a gerade $a = 0$ ist. Den Wert des Parameters K , der nur eine

Störung der Lösung bedeutet, setzt man ebenfalls gleich Null, d.h. $K=0$. Diese Entscheidung für a und K hat die Folge, daß das Gebiet der Instabilität, das in der Nähe der imaginären Achse in der linken Halbebene liegt, etwas größer wird als für andere Werte von a und K (vgl. Bild 1 und Bild 2).

Wir wollen hier aber trotzdem den Verfahren mit besseren Konvergenzeigenschaften den Vorzug geben.

Interessant für uns sind also diejenigen Werte von z_2 und z_3 , für welche K den Wert $\neq 0$ annimmt und das Instabilitätsgebiet möglichst klein ist. Es folgt in diesem Fall $a=0$, $z_2 \doteq -0.425$ und $z_3 \doteq 0.501$, was den Wert $K \doteq 0,066$ ergibt. Dadurch sind die unbekannten Parameter bestimmt, und zwar:

$$\begin{aligned} a_{21} &= -1143/200 & a_{22} &= -60489/63500 \\ b_{31} &= 109/200 & b_{32} &= 387/1000 \end{aligned} \quad (3.17)$$

Mit (3.17) und der Parametrisierung (3.8) folgen die Koeffizienten der beiden Korrektoren:

$$\begin{aligned} a_{31} &= 1 & b_{31} &= 109/200 & a_{32} &= 1 & b_{32} &= 387/1000 \\ a_{21} &= -1143/200 & b_{21} &= -163/100 & a_{22} &= -60489/63500 & b_{22} &= 94929/127000 \\ a_{11} &= 102/25 & b_{11} &= -653/200 & a_{12} &= 36/125 & b_{12} &= 10527/127000 \\ a_{01} &= 127/200 & b_{01} &= 0 & a_{02} &= -21299/63500 & b_{02} &= 4203/25400 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Mit der sukzessiven Anwendung des Satzes von Schur [11], [12] wurde außerdem bewiesen, daß das dem Verfahren zugehörige Stabilitätspolynom $P(L,z)$ für $|L| \geq 10$ in der ganzen linken Halbebene die Bedingung der absoluten Stabilität erfüllt.

Da die hierbei abgeleiteten Ungleichungen sehr unhandlich und lang sind, soll hier auf die Beweisführung verzichtet werden⁴⁾. Für

⁴⁾ Die Ungleichungen wurden in FORMAC entwickelt.

$0 \leq |L| \leq 10$ wurde $P(L, z)$ auf seine Nullstellen hin getestet, und das Ergebnis ist im Bild 1 dargestellt. Im Bild 2 ist zum Vergleich der Instabilitätsbereich eines Verfahrens mit $a=0.6$ und $K \neq 0.28$ für $z_2 = -0.35$ und $z_3 = 0.9$ angegeben. Man sieht, daß der Instabilitätsbereich auf Kosten der Konvergenz etwas kleiner geworden ist. Es ist interessant zu erwähnen, daß für $a=0$ und konjugiert komplexe z_2 und z_3 immer $|K| > 1$ ist. Aufgrund der numerischen Untersuchungen läßt sich stark vermuten, daß kein $(k=3, M=2)$ -modifiziertes Donelson-Hansen-zyklisches Verfahren existiert, daß in der ganzen linken Halbebene absolut stabil, also A-stabil ist.

3.1.2 $(k=3, M=3)$ -Verfahren

Nach Donelson und Hansen [5] hat ein $(k=3, M=3)$ -zyklisches Verfahren die höchstmögliche Ordnung $P=6$. Das erreicht man dadurch, daß man die Ordnung des jeweiligen Korrektors auf $2k-1=5$ setzt. Dadurch werden wegen $M=3$ drei Parameter frei. Zwei von diesen benutzt man zur Stabilisierung des Systems (Nullstabilität) und den restlichen Parameter zur Befriedigung der Gleichung, die zur Erhöhung der Ordnung des Systems um eins führt (siehe Abschnitt 2). Setzt man aber die Ordnung jedes Korrektors auf 4 herab, so erhält man 6 freie Parameter, die man, wie im folgenden gezeigt wird, zur Gewinnung eines fast A-stabilen zyklischen Verfahrens der Ordnung 5 benutzen kann.

Für das Stabilitätspolynom $P(L, z)$ ergibt sich in diesem Fall der folgende Ausdruck:

$$P(L, z) = Q_0(L) + Q_1(L)z + Q_2(L)z^2 + Q_3(L)z^3 \quad (3.19a)$$

mit

$$\begin{aligned} Q_0(L) &= XLO0 + XL10 \cdot L + XL20 \cdot L^2 + XL30 \cdot L^3 \\ Q_1(L) &= XLO1 + XL11 \cdot L + XL21 \cdot L^2 + XL31 \cdot L^3 \\ Q_2(L) &= XLO2 + XL12 \cdot L + XL22 \cdot L^2 + XL32 \cdot L^3 \\ Q_3(L) &= XLO3 + XL13 \cdot L + XL23 \cdot L^2 + XL33 \cdot L^3 \end{aligned} \quad (3.19b)$$

und

$$\begin{aligned} \underline{XLO0} &= -a_{03}a_{02}a_{01} \\ \underline{XL10} &= a_{03}a_{02}b_{01} + a_{03}b_{02}a_{01} + b_{03}a_{02}a_{01} \\ \underline{XL20} &= -a_{03}b_{02}b_{01} - b_{03}a_{02}b_{01} - b_{03}b_{02}a_{01} \\ \underline{XL30} &= b_{03}b_{02}b_{01} \\ \underline{XLO1} &= -a_{13}a_{12}a_{11} + a_{13}a_{21}a_{02} + a_{23}a_{12}a_{01} + a_{22}a_{03}a_{11} - a_{03}a_{02} - a_{03}a_{01} - a_{02}a_{01} \\ \underline{XL11} &= a_{13}a_{12}b_{11} + a_{13}b_{12}a_{11} - a_{13}a_{21}b_{02} - a_{13}b_{21}a_{02} + b_{13}a_{12}a_{11} - b_{13}a_{21}a_{02} \\ &\quad - a_{23}a_{12}b_{01} - a_{23}b_{12}a_{01} - b_{23}a_{12}a_{01} + b_{33}a_{02}a_{01} + b_{31}a_{03}a_{02} - a_{22}a_{03}b_{11} \\ &\quad - a_{22}b_{03}a_{11} - b_{22}a_{03}a_{11} + b_{32}a_{03}a_{01} + a_{03}b_{02} + a_{03}b_{01} + b_{03}a_{02} + b_{03}a_{01} + a_{02}b_{01} + b_{02}a_{01} \\ \underline{XL21} &= -a_{13}b_{12}b_{11} + a_{13}b_{21}b_{02} - b_{13}a_{12}b_{11} - b_{13}b_{12}a_{11} + b_{13}a_{21}b_{02} + b_{13}b_{21}a_{02} \\ &\quad + a_{23}b_{12}b_{01} + b_{23}a_{12}b_{01} + b_{23}b_{12}a_{01} - b_{33}a_{02}b_{01} - b_{33}b_{02}a_{01} - b_{31}a_{03}b_{02} \\ &\quad - b_{31}b_{03}a_{02} + a_{22}b_{03}b_{11} + b_{22}a_{03}b_{11} + b_{22}b_{03}a_{11} - b_{32}a_{03}b_{01} - b_{32}b_{03}a_{01} \\ &\quad - b_{03}b_{02} - b_{03}b_{01} - b_{02}b_{01} \\ \underline{XL31} &= b_{13}b_{12}b_{11} - b_{13}b_{21}b_{02} - b_{23}b_{12}b_{01} + b_{33}b_{02}b_{01} + b_{31}b_{03}b_{02} - b_{22}b_{03}b_{11} + b_{32}b_{03}b_{01} \\ \underline{XLO2} &= -a_{03} - a_{02} - a_{01} + a_{13}a_{21} - a_{23}a_{22}a_{21} + a_{23}a_{12} + a_{22}a_{11} \\ \underline{XL12} &= b_{03} + b_{02} + b_{01} - a_{13}b_{32}a_{21} - a_{13}b_{21} - b_{13}a_{21} - a_{23}b_{31}a_{12} + a_{23}a_{22}b_{21} + a_{23}b_{22}a_{21} \\ &\quad - a_{23}b_{12} + b_{23}a_{22}a_{21} - b_{23}a_{12} - b_{33}a_{22}a_{11} + b_{33}a_{02} + b_{33}a_{01} + b_{31}a_{03} + b_{31}a_{02} \\ &\quad - a_{22}b_{11} - b_{22}a_{11} + b_{32}a_{03} + b_{32}a_{01} \\ \underline{XL22} &= a_{13}b_{32}b_{21} + b_{13}b_{32}a_{21} + b_{13}b_{21} + a_{23}b_{31}b_{12} - a_{23}b_{22}b_{21} + b_{23}b_{31}a_{12} - b_{23}a_{22}b_{21} \\ &\quad - b_{23}b_{22}a_{21} + b_{23}b_{12} - b_{33}b_{31}a_{02} + b_{33}a_{22}b_{11} + b_{33}b_{22}a_{11} - b_{33}b_{32}a_{01} - b_{33}b_{02} \\ &\quad - b_{33}b_{01} - b_{31}b_{32}a_{03} - b_{31}b_{03} - b_{31}b_{02} + b_{22}b_{11} - b_{32}b_{03} - b_{32}b_{01} \\ \underline{XL32} &= -b_{13}b_{32}b_{21} - b_{23}b_{31}b_{12} + b_{23}b_{22}b_{21} + b_{33}b_{31}b_{02} - b_{33}b_{22}b_{11} + b_{33}b_{32}b_{01} + b_{31}b_{32}b_{03} \\ \underline{XLO3} &= -1. ; \quad \underline{XL13} = b_{33} + b_{31} + b_{32}; \quad \underline{XL23} = -b_{33}b_{31} - b_{33}b_{32} - b_{31}b_{32}; \quad \underline{XL33} = b_{33}b_{31}b_{32} \end{aligned}$$

(3.19c)

Außerdem wurde $a_{31}=a_{32}=a_{33}=1$ gesetzt (Normierung).

Wie man aus (3.19a) und (3.19b) leicht sehen kann, ist $P(L,z)$ ein Polynom dritten Grades in z und L .

Wie schon in (3.7) definieren wir auch hier die Polynome $P_1(z)$ und $P_2(z)$, und zwar:

$$\begin{aligned} P_1(z) &= \lim_{h \rightarrow 0} P(L, z) \\ P_2(z) &= \lim_{L \rightarrow -\infty} P_N(L, z) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Um die Wurzeln $z_2, z_3, \hat{z}_1, \hat{z}_2$ und $\hat{z}_3$ dieser Polynome steuern zu können, benötigt man höchstens 5 freie Parameter. Den sechsten Parameter werden wir zur Erhöhung der Ordnung des Systems einsetzen.

Wir benutzen hier dieselbe Parametrisierung wie in (3.8) mit dem Unterschied, daß der Index $i=1,2,3$ ist, d.h.:

$$\begin{aligned} a_{3i} &= 1 & b_{2i} &= -5b_{3i} + a_{2i}/3 + 3 \\ a_{1i} &= 24b_{3i} - 9 & b_{1i} &= 19b_{3i} + (4/3)a_{2i} - 6 \\ a_{0i} &= -24b_{3i} - a_{2i} + 8 & b_{0i} &= 9b_{3i} + a_{2i}/3 - 3 \end{aligned} \quad (3.21)$$

mit a_{2i}, b_{3i} als freie Parameter und $i=1,2,3$.

Nach der Parametrisierung des Polynoms $P_1(z)$ mit (3.21) und der Division mit $(z-1)$ sowie anschließender Anwendung der Vietaschen Formeln ergeben sich die beiden folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} -CP(1) + 8a_{23} - 240b_{33} - 240b_{31} + 8a_{22} - 24b_{32} - 27a_{23}b_{31}a_{22} + 9a_{23}a_{22} \\ - 24a_{23}b_{32} + 648b_{33}b_{31} - 24b_{31}a_{22} + 97 = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} -CP(2) - 8a_{23} - 192b_{33} - 192b_{31} - 8a_{22} - 192b_{32} + 24a_{23}b_{31} - 3a_{23}b_{31}a_{22} \\ - 72a_{23}b_{31}b_{32} + a_{23}a_{22} + 24a_{23}b_{32} + 576b_{33}b_{31} - 72b_{33}b_{31}a_{22} \\ - 1728b_{33}b_{31}b_{32} + 24b_{33}a_{22} + 576b_{33}b_{32} + 24b_{31}a_{22} + 576b_{31}b_{32} + 64 = 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

mit $CP(1) = -(z_2 + z_3)$ und $CP(2) = z_2 \cdot z_3$.

Aus (3.20) ergibt sich für das Polynom $P_2(z)$ der folgende Ausdruck:

$$P_2(z) = z^3 + (XL32/XL33) \cdot z^2 + (XL31/XL33)z + XL30/XL33.$$

Da man die beste Konvergenzeigenschaft des Verfahrens erreichen möchte, muß man alle Wurzeln des Polynoms $P_2(z)$ zu Null steuern. Man setzt also zunächst $XL30=0$, wodurch sich aus (3.19c) z.B. $b_{01}=0$ ergibt, d.h. $a_{21}=9-27b_{31}$, was gleichzeitig dazu führt, daß der Parameter a_{21} aus (3.22) und (3.23) eliminiert wird. Damit wird gleichzeitig die Anzahl der freien Parameter um eins vermindert. Um $\hat{z}_2=\hat{z}_3=0$ erreichen zu können, setzt man noch in $P_2(z)$ $XL31=XL32=0$, womit sich mit der Parametrisierung (3.21) aus (3.19c) zwei weitere Gleichungen ergeben, und zwar:

$$\begin{aligned} &6a_{23}-108b_{33}-108b_{31}+6a_{22}-54b_{32}-12a_{23}b_{31}-2a_{23}b_{31}a_{22}+36a_{23}b_{31}b_{32} \\ &+(2/3)a_{23}a_{22}-18a_{23}b_{32}+228b_{33}b_{31}+36b_{33}b_{31}a_{22}-56b_{33}b_{31}b_{32}- \\ &12b_{33}a_{22}+66b_{33}b_{32}-18b_{31}a_{22}+66b_{31}b_{32}+54=0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} &-30a_{23}-504b_{33}-504b_{31}-30a_{22}-450b_{32}+96a_{23}b_{31}-22a_{23}b_{31}a_{22} \\ &-288a_{23}b_{31}b_{32}+(22/3)a_{23}a_{22}+90a_{23}b_{32}+1572b_{33}b_{31}-288b_{33}b_{31}a_{22} \\ &-4427b_{33}b_{31}b_{32}+96b_{33}a_{22}+1410b_{33}b_{32}+90b_{31}a_{22}+1410b_{31}b_{32} \\ &+162=0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

Den übriggebliebenen freien Parameter, wie schon gesagt, werden wir zur Erhöhung der Ordnung des Verfahrens nutzen. Zur Erhöhung der Ordnung führt die folgende etwas modifizierte Gleichung (siehe [5]):

$$K_1 \cdot C_{51} + K_2 \cdot C_{52} + K_3 \cdot C_{53} = 0, \quad (3.26)$$

wobei C_{5i} mit $i=1,2,3$ die Fehlerkonstante des jeweiligen Korrektors ist, d.h. $C_{5i} = \frac{1}{5!} (a_{1i} + 2^5 \cdot a_{2i} + 3^5) - \frac{1}{4!} (b_{1i} + 2^4 \cdot b_{2i} + 3^4 \cdot b_{3i})$ (siehe Formel (1.3)) und

$$\begin{aligned} K_1 &= 1 + a_{02} + a_{03} - a_{12} \cdot a_{23} + a_{02} a_{03} \\ K_2 &= -a_{11} - a_{11} \cdot a_{03} + a_{21} \cdot a_{23} \\ K_3 &= -a_{21} - a_{21} a_{02} + a_{12} \cdot a_{11} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Parametrisiert man die Gleichung (3.26) mittels (3.21), so ergibt sich die fünfte Gleichung, die lautet:

$$\begin{aligned} &-648b_{33} - 648b_{31} - 729b_{32} - 9a_{23}b_{31} + 27a_{23}b_{31}b_{32} + 1701b_{33}b_{31} + 27b_{33}b_{31}a_{22} \\ &- 5112b_{33}b_{31}b_{32} - 9b_{33}a_{22} + 1944b_{33}b_{32} + 1944b_{31}b_{32} + 243 = 0 \end{aligned} \quad (3.28)$$

Die Gleichungen (3.22)-(3.25) und (3.28) stellen ein nichtlineares Gleichungssystem mit den Unbekannten $a_{22}, a_{23}, b_{31}, b_{32}$ und b_{33} dar, wobei z_2 und z_3 als frei wählbar vorausgesetzt werden. Die Lösung dieses Systems liefert also Parameter, die nach (3.21) die unbekannten Koeffizienten der Korrektoren bestimmen. Nach systematischem Variieren der frei wählbaren Wurzeln z_2 und z_3 hat sich für $z_2 = -0.2$ und $z_3 = -0.4$ ein Verfahren mit optimalem Stabilitätsgebiet ergeben (Bild 4). Die gesuchten Parameter (gerundet auf 6 Dezimalstellen) haben dabei die folgenden Werte:

$$\begin{aligned} b_{31} &= 0.497164 \\ b_{32} &= 0.481533 \\ b_{33} &= 0.345143 \\ a_{22} &= -2.174474 \\ a_{23} &= -0.401213 \end{aligned} \quad (3.29)$$

Es ist bemerkenswert, daß dieser Parameter (ungerundet, d.h. mit 32 Dezimalstellen) das nichtlineare Gleichungssystem mit einer Genauigkeit von $3.2 \cdot 10^{-30}$ befriedigen⁵⁾.

⁵⁾ Alle numerischen Rechnungen wurden auf der IBM370-168 Rechanlage der KFA Jülich mit der Zahlenlänge von 32 Dezimalstellen durchgeführt.

Die unhandlichen Parameter (3.29) kann man durch leichte Änderung der Wurzeln $\{z_2, z_3, \hat{z}_2, \hat{z}_3\}$ so transformieren, daß die neuen Parameter und damit die Koeffizienten des Verfahrens durch wenig Dezimalstellen dargestellt werden (siehe Anhang). Dabei wird das Stabilitätsgebiet keinesfalls nennenswert geändert.

Es sei hier noch bemerkt, daß der auf Bild 4 gezeichnete geschlossene Bereich das Instabilitätsgebiet des Verfahrens darstellt. Dieser Bereich ist durch die Abbildung des Einheitskreises $|z|=1$ über das Stabilitätspolynom $P(L, z)=0$ entstanden.

4. Numerische Ergebnisse

Die im Abschnitt 3.1.1 und 3.1.2 gewonnenen Verfahren wurden an einer Vielzahl von stiff-Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen erprobt, und einige davon sollen hier angegeben werden.

Es wurden folgende Beispiele numerisch gelöst:

Gleichung

Exakte Lösung

$$1. \quad y' = -Q(y-x) + 1$$

$$y(0) = 1$$

$$y = \exp(-Qx) + x$$

mit $Q = 500; 1000; 5000; 10000; 50000$

$$2. \quad y' = -200(y - F(x)) + F'(x)$$

$$y(0) = 10$$

$$y = 10 \cdot \exp(-200x) + F(x)$$

$$F(x) = 10 - (10+x)e^{-x}$$

System

$$3. \quad y_1' = -0.1y_1 - 49.9y_2$$

$$y_2' = -50y_2$$

$$y_3' = 70y_2 - 120y_3$$

$$y(0) = [2, 1, 2]^T$$

$$y_1 = \exp(-0.1x) + \exp(-50x)$$

$$y_2 = \exp(-50x)$$

$$y_3 = \exp(-50x) + \exp(-120x)$$

$$4. \quad y_1' = -0.1y_1 - 49.9y_2$$

$$y_2' = -50y_2$$

$$y_3' = (10^{11} - 50)y_2 - 10^{11}y_3$$

$$y(0) = [2, 1, 2]^T$$

$$y_1 = \exp(-0.1x) + \exp(-50x)$$

$$y_2 = \exp(-50x)$$

$$y_3 = \exp(-50x) + \exp(-10^{11}x)$$

5. $y_1' = -0.1y_1 + (0.1 - 10^{11})y_2$ $y_1 = \exp(-0.1x) + \exp(-10^{11}x)$
 $y_2' = -10^{11}y_2$ $y_2 = \exp(-10^{11}x)$
 $y_3' = -10^{11}y_3$ $y_3 = 2\exp(-10^{11}x)$
 $y(0) = [2, 1, 2]^T$
6. $y_1' = -0.04y_1 + 10^4y_2 \cdot y_3$ keine
 $y_2' = 0.04y_1 - 10^4y_2y_3 - 3 \cdot 10^7y_2^2$
 $y_3' = 3 \cdot 10^7y_2^2$
 $y(0) = [1, 0, 0]^T$

Die Beispiele 2, 3 und 6 sind aus Lapidus-Seinfeld [9] übernommen. Dabei bedeuten die in den Tabellen⁶⁾ 2, 3 und 5 vorhandenen Abkürzungen:

TR- Trapezregel,

TR-EX-Trapezregel mit Extrapolation,

LW1- Liniger-Willoughby Verfahren 1 (ohne zweite Ableitung),

LW3- Liniger-Willoughby Verfahren 3 (mit zweiter Ableitung).

Mit DH4 bzw. DH5 wurden die neuen Donelson-Hansenschen ($k=3, M=2$)- bzw. ($k=3, M=3$)-zyklischen Verfahren der Ordnung 4 bzw. 5 gekennzeichnet. Die Symbole Δ_A und Δ_R bedeuten jeweils den absoluten bzw. relativen Fehler. Alle Beispiele wurden mit der Länge von 32 Stellen auf der IBM 370/168 Rechenanlage der Kernforschungsanlage Jülich gerechnet.

⁶⁾ Die Ergebnisse der Verfahren TR, TR-EX, LW1 und LW3 in den Tabellen 2, 3 und 5 sind zum Zweck des Vergleichs mit DH4 bzw. DH5 aus Lapidus-Seinfeld [9] übernommen.

Das Beispiel 1 stellt eine Reihe von stiff-Differentialgleichungen mit den Eigenwerten $\lambda = -500; -1000; -5000; -10000; -50000$ dar. Charakteristisch für diese Gleichung ist, daß die Lösung immer eine sehr schnell abfallende und eine langsam veränderliche Komponente enthält. Um die Differentialgleichung bei $Q=50000$ mit einem Schritt $h=0.2$ integrieren zu können, wird vom Verfahren ein Stabilitätsintervall $(-L, 0)$ ($Q \equiv$ reelle Konst.) mit $\max L=10000$ verlangt. Um das Verhalten des Integrationsfehlers besser verfolgen zu können, wurde das Resultat der Integration (Tabelle 1) jeweils in der Nähe des Anfangs ($x=1.0$) und am Ende ($x=10.0$) des Integrationsintervalls angegeben. In allen 5 Fällen des Beispiels 1 kann man sehr schnelle Konvergenz der beiden Verfahren feststellen, wobei das Verfahren DH4 bei dieser Schrittweite und an diesen Stellen etwas besser als das Verfahren DH5 abgeschnitten hat.

Das Beispiel 2 ist wieder eine stiff-Differentialgleichung mit dem Eigenwert $\lambda = -200$. Die Lösung enthält eine schnell abfallende und eine langsam ansteigende Komponente. In der Tabelle 2 ist ein Vergleich zwischen den A-stabilen Einschrittverfahren TR, TR-EX, LW1, LW3 und den neuen Verfahren DH4 und DH5 angegeben.

Aus der Tabelle 2 ist ersichtlich, daß die oben genannten Einschrittverfahren mit DH4 bzw. DH5 an zwei verschiedenen Stellen $x=0.4$ bzw. $x=1.0$ verglichen wurden. Der Unterschied ist dadurch entstanden, daß die ersten 4 Verfahren in der Tabelle 2, wie schon bekannt, die Schrittzahl $k=1$ haben, während DH4 und DH5 die Schrittzahl $k=3$ pro Korrektur haben.

Die Ergebnisse zeigen, daß das TR-EX-Verfahren am Anfang des Intervalls genauer als die anderen Verfahren ist, während DH4 und DH5 eindeutig ein besseres Resultat an der Stelle $x=10.0$ liefern.

Das Beispiel 3 ist ein stiff-Differentialgleichungssystem mit den Eigenwerten $\lambda_1=-120$, $\lambda_2=-50$ und $\lambda_3=-0.1$. Das sog. "stiffness-Verhältnis" des Systems ist relativ klein und beträgt $\mu = \frac{\max |\operatorname{Re} \lambda_t|}{\min |\operatorname{Re} \lambda_t|} = \frac{120}{0.1} = 1.2 \cdot 10^3$ ($t=1,2,3$). Um das Verfahren DH4 bzw. DH5 in der Tabelle 3 mit den anderen Verfahren an der Stelle $x=0.4$ vergleichen zu können, wurde für DH4 bzw. DH5 diesmal die Schrittweite $h=0.01$ gewählt. Aus der Tabelle folgt, daß (bei Berücksichtigung der verschiedenen Schrittweiten und der Ordnung der Verfahren) TR-EX an der Stelle 0.4 wieder etwas besser als DH4 und DH5 ist, während DH4 und DH5 an der Stelle $x=10.0$ eindeutig besser sind.

Die Beispiele 4 und 5 sind zwei sehr steife (stiff) Differentialgleichungssysteme mit den Eigenwerten $\lambda_1=-0.1$, $\lambda_2=-50$, $\lambda_3=-10^{11}$ für das erste bzw. $\lambda_1=-0.1$, $\lambda_2=\lambda_3=-10^{11}$ für das zweite System. Das "stiffness-Verhältnis" beträgt in beiden Fällen $\mu = \frac{10^{11}}{0.1} = 10^{12}$. Trotz dieses enormen Wertes für μ zeigen die Verfahren DH4 und DH5 in beiden Fällen Zuverlässigkeit und sehr schnelle Konvergenz (für $x \rightarrow \infty$ und $h = \text{const.}$). In der Tabelle 4 sind die absoluten Fehler angegeben, weil im zweiten System bei den Komponenten y_2 und y_3 die Genauigkeit von 32 Dezimalstellen nicht ausreichte, um die relativen Fehler auszurechnen.

Die relativen Fehler für das erste System sind:

$$\begin{aligned} \text{DH4: } \Delta_{1R}(x=0.4) &= 3.8 \cdot 10^{-8}; \quad \Delta_{1R}(x=10.0) = 2.0 \cdot 10^{-13} \\ \Delta_{2R}(x=0.4) &= 1.7 \cdot 10^1; \quad \Delta_{3R}(x=0.4) = 1.8 \cdot 10^1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{DH5: } \Delta_{1R}(x=0.4) &= 6.4 \cdot 10^{-9}; \quad \Delta_{1R}(x=10.0) = 2.1 \cdot 10^{-18} \\ \Delta_{2R}(x=0.4) &= 3.0 \cdot 10^0; \quad \Delta_{3R}(x=0.4) = 2.9 \cdot 10^0 \end{aligned}$$

Das Beispiel 6 ist auch ein sehr steifes (stiff) nichtlineares Differentialgleichungssystem mit den Eigenwerten $\lambda_1=0$, $\lambda_2=0$ und $\lambda_3=-0.04$ für $x=0$ und $\lambda_1=0$, $\lambda_2=0$ und $\lambda_3=-10^4$ für $x=40$. Dabei wächst $|\lambda_{\max}|$ sehr schnell, und zwar im Intervall $[0; 0.02]$ von 0.04 auf 2405, so daß dieses Gleichungssystem eine schwierige Probe für die in der Tabelle 5 verglichenen Verfahren war. Als exakte Lösung wurde die Lösung des Systems mit dem Kutta-Merson-Verfahren und einer Genauigkeit von 10^{-20} gewählt. Die Schrittweite dieses Verfahrens wurde automatisch gesteuert, um die verlangte Genauigkeit zu erreichen. Wie aus der Tabelle 5 zu entnehmen ist, liefern das DH4- und DH5-Verfahren (bei Berücksichtigung der Schrittweite und der Ordnung) fast überall bessere Resultate.

Das Verfahren DH5 mit $P=5$ wurde nochmals auf die Differentialgleichung im Beispiel 1 mit $Q=1$ angewandt, um die Ordnung des Verfahrens zu bestätigen. Das Resultat ist in der Tabelle 6 angegeben.

Zum Schluß wurden die ursprünglich von Donelson und Hansen in [5] entwickelten Verfahren $(k=3, M=2)$ bzw. $(k=3, M=3)$ (method 1, 2, 3 und 4, S. 150) am Beispiel 1 mit $Q=100$ und $Q=500$ erprobt. Die Verfahren haben zwar die Ordnung 5 bzw. 6, aber, wie die Resultate in der Tabelle 7 zeigen, einen zu kleinen Stabilitätsbereich.

5. Schlußdiskussion

Es wurde gezeigt, daß die neuen $(k=3, M=2)$ - bzw. $(k=3, M=3)$ -zyklischen Verfahren A-stabil sind, bis auf ein endliches Gebiet in der Nähe der imaginären Achse, und daß sie die Ordnung 4 bzw. 5 besitzen, d.h. eine nur um 1 niedrigere als die in [5] angegebene höchstmögliche Ordnung für diese Verfahren. Der Instabilitätsbereich der neuen Verfahren kann bei der Lösung eines Differentialgleichungssystems mit komplexen Eigenwerten ($\operatorname{Re} \lambda_t < 0$) eine gewisse Einschränkung an die Schrittweite h stellen [6]. Das trifft nicht zu, wenn die Eigenwerte reell sind (s. Bild 1, 2 und 4).

Anhang

Die im Abschnitt 3.1.2 gewonnenen Parameter (3.29) wurden durch geringfügige Änderung der Wurzeln $\{z_2, z_3, \hat{z}_2, \hat{z}_3\}$ auf folgende Werte transformiert:

$$b_{31}=0.497 \quad a_{22}=-2.174908993771953127306000767438$$

$$b_{32}=0.481 \quad a_{23}=-0.401$$

$$b_{33}=0.345$$

Damit ergeben sich für die Koeffizienten der Korrektoren die folgenden Werte:

$$1) \quad a_{01}= 1.473 \quad b_{01}= 0.000$$

$$a_{11}= 8.784 \quad b_{11}=-7.347$$

$$a_{21}=-13.257 \quad b_{21}=-2.874$$

$$a_{31}= 3.000 \quad b_{31}= 1.491$$

$$2) \quad a_{02}=-1.369091006228046872693999232562$$

$$a_{12}= 2.544$$

$$a_{22}=-2.174908993771953127306000767438$$

$$a_{32}= 1.000$$

$$b_{02}= 0.6040303354093489575646664108540$$

$$b_{12}= 0.2391213416373958302586656434162$$

$$b_{22}=-0.1299696645906510424353335891459$$

$$b_{32}= 0.481$$

$$3) \quad a_{03}= 0.363 \quad b_{03}=-0.086$$

$$a_{13}=-2.160 \quad b_{13}= 0.061$$

$$a_{23}=-1.203 \quad b_{23}= 3.424$$

$$a_{33}= 3.000 \quad b_{33}= 1.035$$

mit den auf 3 Dezimalstellen gerundeten Wurzeln $z_2=(-0.212; 0)$;

$z_3=(-0.383; 0)$; $\hat{z}_2=(-0,017; -0.066)$; $\hat{z}_3=(-0.017; 0,066)$.

Literaturverzeichnis

- [1] Albrecht, P., Numerische Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen, Kernforschungsanlage Jülich, Report Jül-1274, Jülich (1976).
- [2] Albrecht, P., On the order of composed multistep methods for ordinary differential equations, to appear.
- [3] Dahlquist, C., Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations, Math. Scand. 4 (1956), S. 33-53.
- [4] Dahlquist, C., A special stability problem for linear multistep methods, BIT 3 (1963), S. 27-43.
- [5] Donelson, J., Hansen, E., Cyclic composite multistep Predictor-Corrector methods, SIAM J. Numer. Anal. 8 (1971), S. 137-157.
- [6] Gear, C.W., Numerical integration of stiff ordinary differential equations, University of Illinois, Dept. of Computer Science, Report No. 221 (1967).
- [7] Gear, C.W., Numerical initial value problems in ordinary differential equations, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1971).
- [8] Lambert, J.D., Computational methods in ordinary differential equations, J. Wiley, London (1973).
- [9] Lapidus, L., Seinfeld, J.H., Numerical solution of ordinary differential equations, Academic Press, New York/London 1971.
- [10] Mihelčić, M., Fast A-stabile Donelson-Hansensche zyklische Verfahren zur numerischen Integration von "stiff"-Differentialgleichungssystemen, Angewandte Informatik, wird veröffentlicht.

- [11] Miller, J.J.H., On the location of zeros of certain classes of polynomials with applications to numerical analysis, J. Inst. Math. Appl. 8 (1971), S. 397-406.

- [12] Schur, J., Über Potenzreihen, die im Innern des Einheitskreises beschränkt sind, J. Reine Angew. Math. 147 (1916), S. 205-232.

Tabelle 1

Q	h	DH4 Δ_R		DH5 Δ_R	
		x = 1.0	x = 10.0	x = 1.0	x = 10.0
500	0.2	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$-5.0 \cdot 10^{-19}$	$-9.9 \cdot 10^{-3}$	$-1.6 \cdot 10^{-19}$
1000	0.2	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$-2.0 \cdot 10^{-21}$	$-4.8 \cdot 10^{-3}$	$2.6 \cdot 10^{-21}$
5000	0.2	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$-1.4 \cdot 10^{-26}$	$-9.4 \cdot 10^{-4}$	$6.2 \cdot 10^{-23}$
10000	0.2	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$-2.1 \cdot 10^{-28}$	$-4.7 \cdot 10^{-4}$	$8.9 \cdot 10^{-24}$
50000	0.2	$2.5 \cdot 10^{-5}$	$-2.7 \cdot 10^{-31}$	$-9.4 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-25}$

Tabelle 2

Verfahren	h	Δ_R	
		x = 0.4	x = 10.0
TR	0.2	$1.85 \cdot 10^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-5}$
TR-EX	0.2	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-8}$
LW1	0.2	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$5.0 \cdot 10^{-8}$
LW3	0.2	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$9.0 \cdot 10^{-8}$
		x = 1.0	x = 10.0
DH4	0.2	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$7.0 \cdot 10^{-10}$
DH5	0.2	$7.4 \cdot 10^{-3}$	$7.0 \cdot 10^{-11}$

Tabelle 3

Verfahren	h	Δ_{1R}		Δ_{2R}	Δ_{3R}
		x = 0.4	x = 10.0	x = 0.4	x = 0.4
TR	0.2	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	$6.5 \cdot 10^7$	$1.3 \cdot 10^5$
TR-EX	0.2	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$8.1 \cdot 10^{-7}$	$5.7 \cdot 10^1$	$8.0 \cdot 10^1$
LW1	0.2	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$5.0 \cdot 10^5$	$5.0 \cdot 10^5$
DH4	0.01	$3.8 \cdot 10^{-8}$	$2.0 \cdot 10^{-13}$	$1.7 \cdot 10^1$	$1.8 \cdot 10^3$
DH5	0.01	$6.4 \cdot 10^{-9}$	$2.1 \cdot 10^{-18}$	$3.0 \cdot 10^0$	$-8.5 \cdot 10^2$

Tabelle 4

	Q_1	Q_2	Q_3	h	Δ_{1A}		Δ_{2A}	Δ_{3A}
					x = 0.4	x = 10.0	x = 0.4	x = 0.4
DH4	0.1	50.0	10^{11}	0.01	$3.6 \cdot 10^{-8}$	$7.2 \cdot 10^{-14}$	$3.6 \cdot 10^{-8}$	$3.6 \cdot 10^{-8}$
	0.1	10^{11}	10^{11}	0.01	$6.7 \cdot 10^{-15}$	$7.2 \cdot 10^{-14}$	0	0
DH5	0.1	50.0	10^{11}	0.01	$6.1 \cdot 10^{-9}$	$7.8 \cdot 10^{-19}$	$6.1 \cdot 10^{-9}$	$6.0 \cdot 10^{-9}$
	0.1	10^{11}	10^{11}	0.01	$1.3 \cdot 10^{-16}$	$7.8 \cdot 10^{-19}$	0	0

Tabelle 5

Verfahren	h	Δ_{1R}		Δ_{2R}		Δ_{3R}	
		x = 0.4	x = 10.0	x = 0.4	x = 10.0	x = 0.4	x = 10.0
TR	0.2	$1.35 \cdot 10^{-3}$	$1.05 \cdot 10^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-1}$	$9.0 \cdot 10^{-2}$	$1.5 \cdot 10^{-2}$
TR-EX	0.2	$1.7 \cdot 10^{-5}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-4}$	$6.8 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$
LW1	0.02	$1.6 \cdot 10^{-4}$	$4.9 \cdot 10^{-4}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-4}$	$3.2 \cdot 10^{-3}$	$4.4 \cdot 10^{-4}$
LW3	0.02	$5.9 \cdot 10^{-4}$	$7.1 \cdot 10^{-5}$	$2.9 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$4.0 \cdot 10^{-2}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$
DH4	0.02	$1.7 \cdot 10^{-7}$	$9.2 \cdot 10^{-8}$	$0.9 \cdot 10^{-6}$	$3.7 \cdot 10^{-7}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-7}$
DH5	0.02	$1.3 \cdot 10^{-7}$	$3.8 \cdot 10^{-8}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$1.0 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 6

Verfahren	Q	h	Δ_A	
			x = 1.0	x = 10.0
DH5	1	0.2	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$-2.1 \cdot 10^{-9}$
		0.02	$-3.3 \cdot 10^{-11}$	$-1.9 \cdot 10^{-14}$

Tabelle 7

Method	Q	h	Δ_R	
			x = 1.0	x = 10.0
1	100	0.2	-0.4	$2.7 \cdot 10^{24}$
	500	0.2	-0.7	$8.3 \cdot 10^{26}$
2	100	0.2	1.9	$-1.0 \cdot 10^{24}$
	500	0.2	4.0	$-5.9 \cdot 10^{26}$
3	100	0.2	-1.7	$2.5 \cdot 10^{34}$
	500	0.2	-3.1	$2.2 \cdot 10^{37}$
4	100	0.2	-0.4	$5.7 \cdot 10^{19}$
	500	0.2	-0.6	$2.3 \cdot 10^{22}$

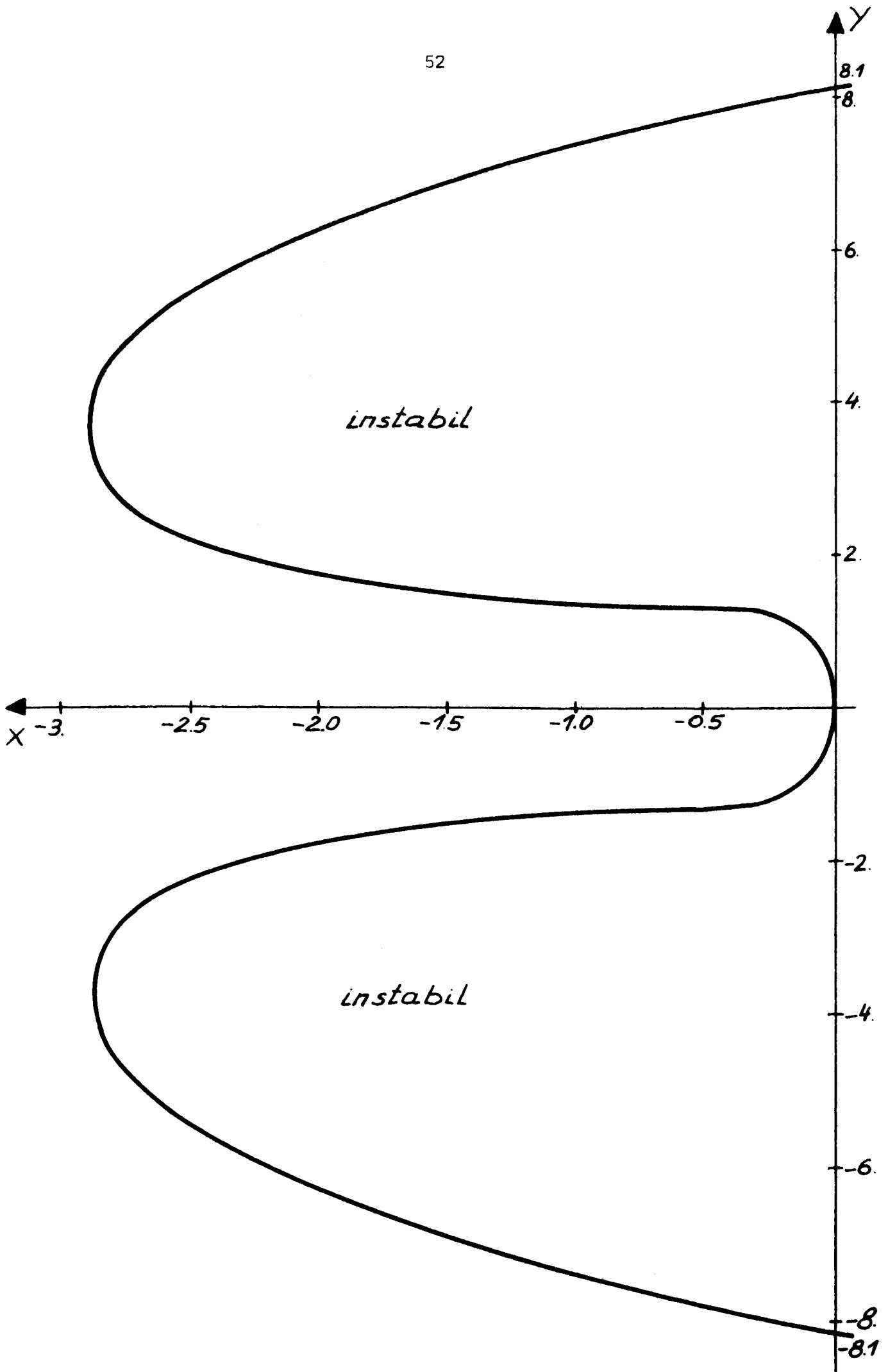


Bild 1

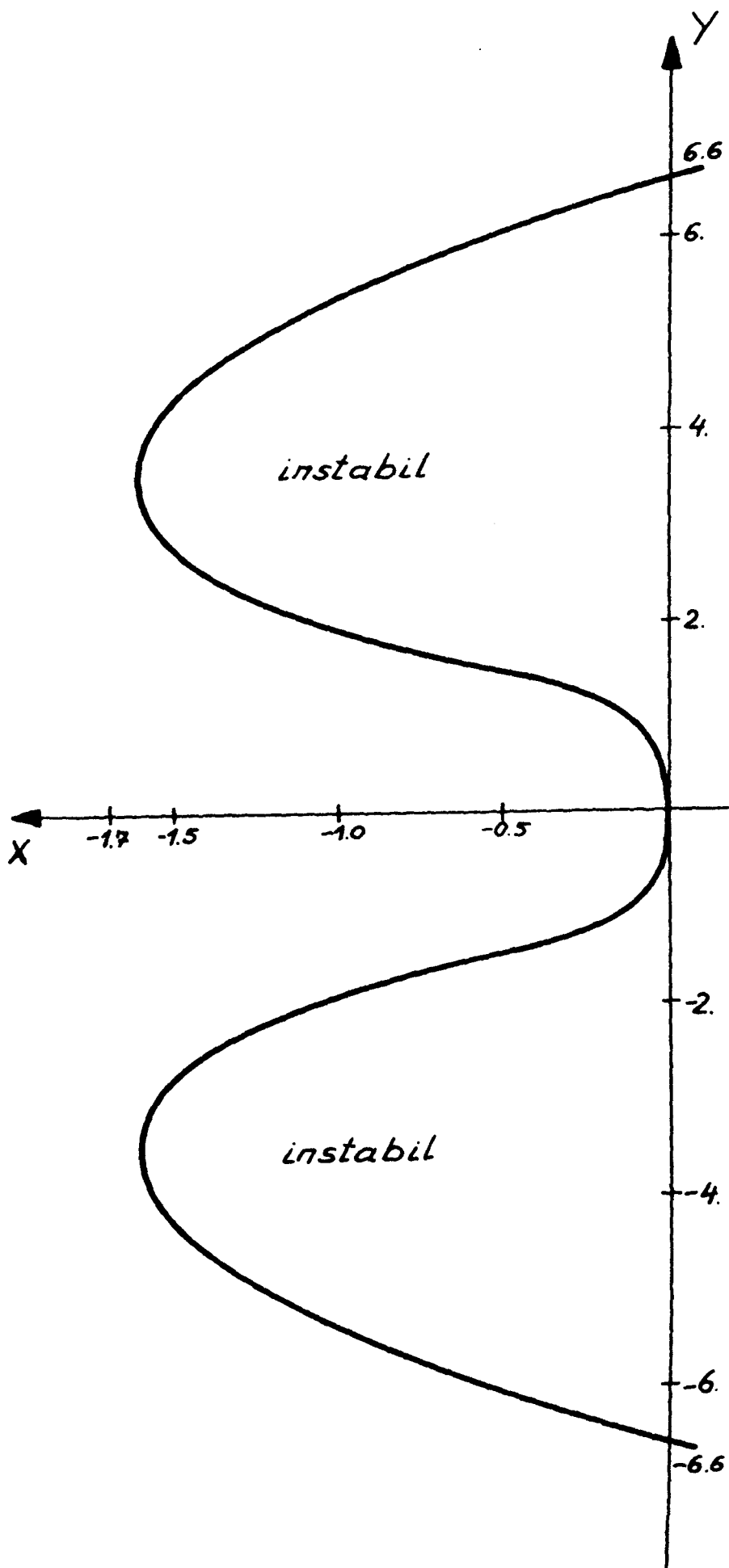


Bild 2

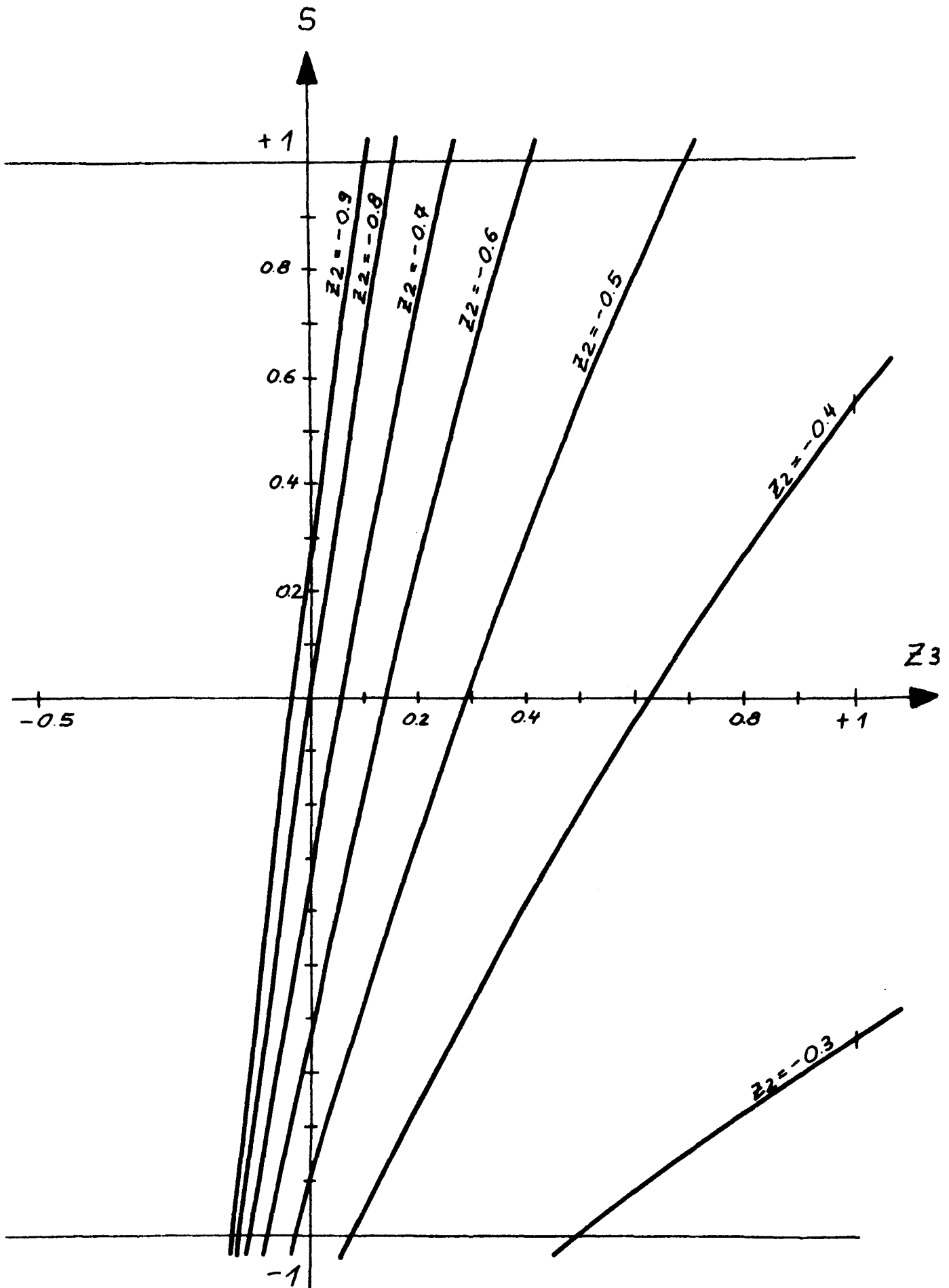


Bild 3

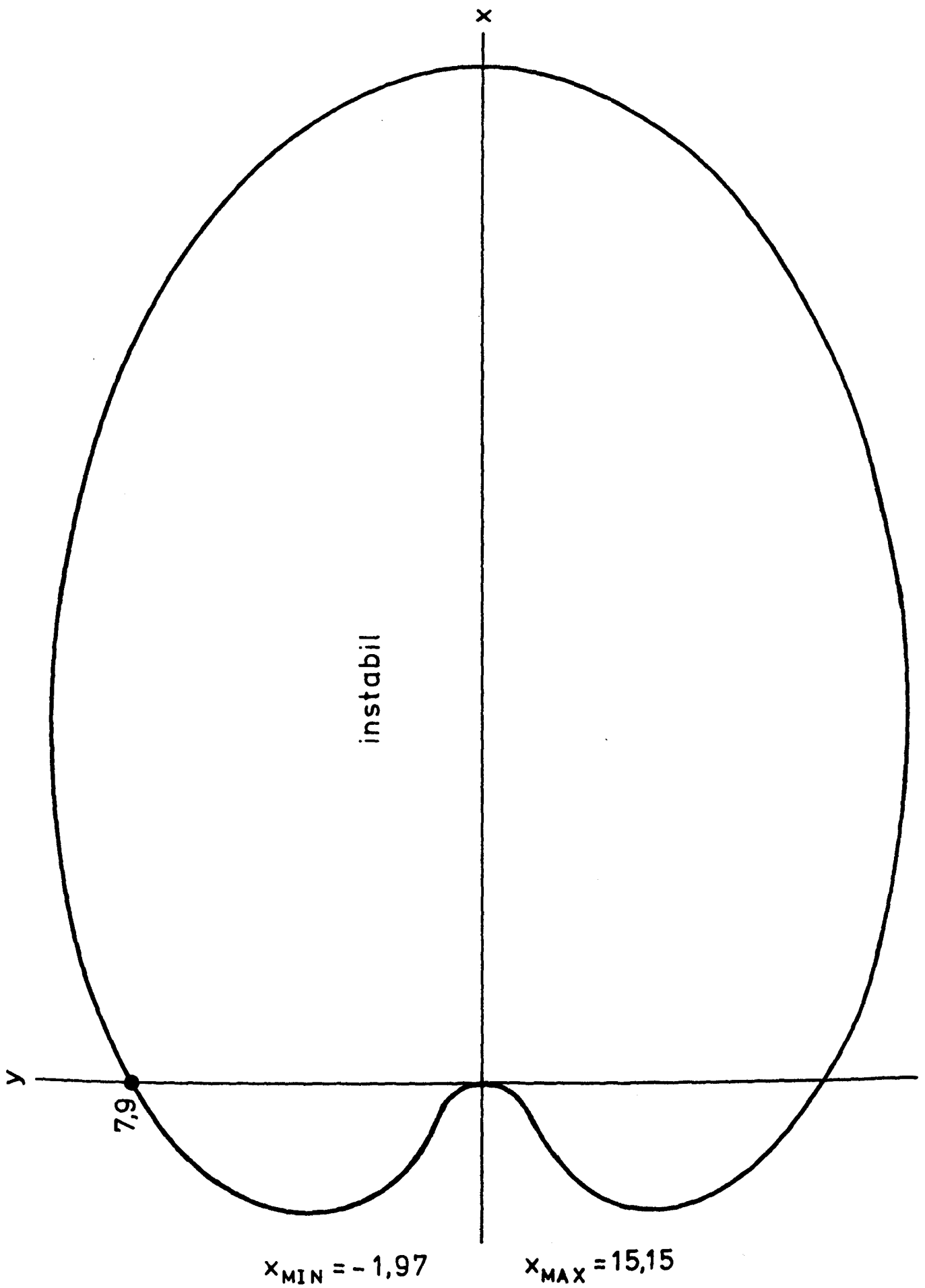


Bild 4

Zum Schluß möchte ich Herrn K. Wingerath sowie Frau L. Schätzler und Herrn H. Jungbluth für die wertvolle Programmier-Unterstützung danken. Insbesondere danke ich Herrn Dr. Mika für zahlreiche Diskussionen und sorgfältige Durchsicht des Manuskripts.