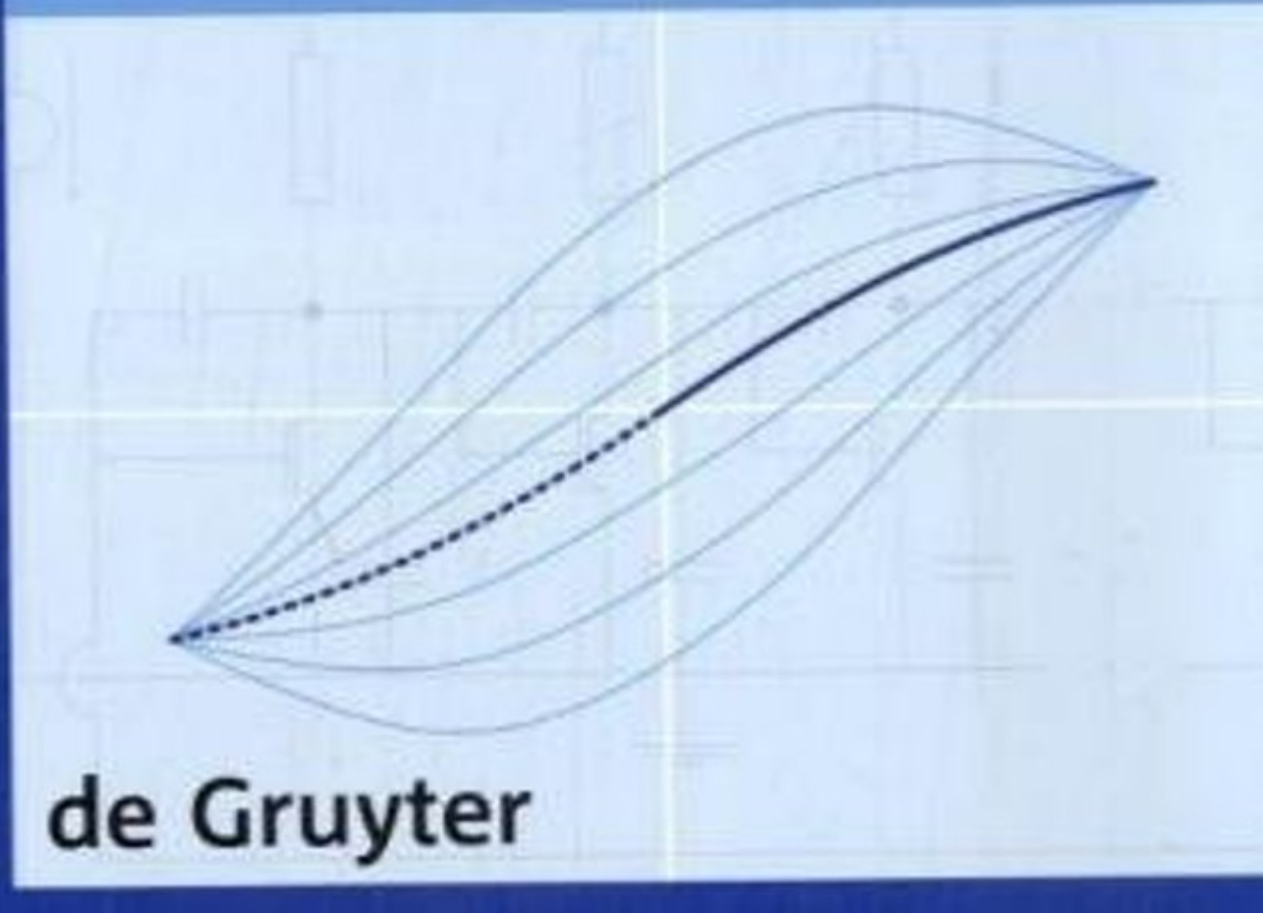
Peter Deuflhard
Folkmar Bornemann

Numerische Mathematik 2

Gewöhnliche Differentialgleichungen

3. Auflage



de Gruyter

de Gruyter Lehrbuch

Deuflhard/Bornemann · Numerische Mathematik 2

Peter Deuflhard
Folkmar Bornemann

Numerische Mathematik 2

Gewöhnliche Differentialgleichungen

3., durchgesehene und korrigierte Auflage

Walter de Gruyter
Berlin · New York

Prof. Dr. Peter Deuflhard
Zuse-Institut Berlin (ZIB)
Takustr. 7
14195 Berlin
und
Freie Universität Berlin
Institut für Mathematik

Prof. Dr. Folkmar Bornemann
Zentrum Mathematik – M3
Wissenschaftliches Rechnen
Technische Universität München
85747 Garching bei München

Mathematics Subject Classification 2000: Primary 65-01; Secondary 65Lxx, 65L05, 65L06, 65L20

∞ Gedruckt auf säurefreiem Papier, das die US-ANSI-Norm über Haltbarkeit erfüllt.

ISBN 978-3-11-020356-1

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

© Copyright 2008 by Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, 10785 Berlin.

Dieses Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Printed in Germany.
Konvertierung von LaTeX-Dateien der Autoren: Kay Dimler, Müncheberg.
Einbandgestaltung: Martin Zech, Bremen.
Druck und Bindung: AZ Druck und Datentechnik GmbH, Kempten.

Vorwort

Begünstigt durch die rasante Entwicklung der Rechner (Computer) und der Rechenmethoden (Algorithmen), ist die natur- und ingenieurwissenschaftliche Modellierung der Wirklichkeit in den letzten Jahren immer genauer und differenzierter geworden. Als Folge davon sind Mathematiker heute mit der Lösung sehr großer Differentialgleichungssysteme von hoher Komplexität konfrontiert. Dies erfordert die Einbettung des Faches *Numerische Mathematik* in das größere Gebiet *Scientific Computing*, oft auch als *Wissenschaftliches Rechnen* bezeichnet. Das vorliegende Buch trägt dieser Tatsache Rechnung und konzentriert sich vorrangig auf die Darstellung *effizienter Algorithmen* sowie ihrer mathematischen Theorie. Während die erste Auflage nur Anfangswertprobleme bei gewöhnlichen Differentialgleichungen und differentiell-algebraischen Gleichungen behandelt hatte, sind in der *zweiten Auflage* noch Randwertprobleme als weiterer Schwerpunkt hinzugekommen.

Dieses Buch richtet sich an *Studierende der Mathematik, Natur- oder Ingenieurwissenschaften*. Für Grundkenntnisse der Numerischen Mathematik verweisen wir auf die entsprechenden Stellen der dritten Auflage des einführenden ersten Bandes [57], welchen wir innerhalb des Textes kurz als „Band 1“ zitieren. Aus der Analysis der gewöhnlichen Differentialgleichungen verwenden wir lediglich einfachere Existenz- und Eindeutigkeitssätze sowie elementare Lösungstechniken wie „Variation der Konstanten“ oder „Trennung der Variablen“. Aus der Funktionentheorie greifen wir an wenigen Stellen auf das Maximumprinzip sowie die Riemannsche Zahlensphäre zurück. Für angehende Naturwissenschaftler und Ingenieure mag die eine oder andere Passage etwas schwerer verdaulich sein; wir möchten sie deshalb durchaus ermutigen, technische Details mathematischer Beweise einfach zu überspringen und sich auf die Substanz der Aussagen zu konzentrieren. Wir haben uns ausdrücklich bemüht, die nur für Mathematiker wichtigen Fragen innerhalb von Beweisen oder Bemerkungen abzuhandeln, um so möglichst vielen Lesern (und Leserinnen – ein für allemal) den Zugang zu diesem Buch offenzuhalten.

Speziell für Mathematiker, die ja heutzutage nicht mehr unbedingt über Grundkenntnisse in den Naturwissenschaften verfügen, haben wir naturwissenschaftliche Einschübe vorgesehen, die uns im Zusammenhang mit gewöhnlichen Differentialgleichungen wichtig erschienen. Wir beginnen deshalb mit der elementaren Herleitung einiger Differentialgleichungsmodelle zeitabhängiger Prozesse in Natur und Technik.

Als roter Faden durch das ganze Buch zieht sich eine eingängige Abstimmung der *Begriffe* aus den Gebieten Numerik von Differentialgleichungen und Analysis dyna-

mischer Systeme, z. B. in Bezug auf die *Vererbung von Eigenschaften* kontinuierlicher Differentialgleichungen auf ihre Diskretisierungen.

Bei *Anfangswertproblemen* führt der Begriff der *Evolution*, Ausdruck der Eindeutigkeit der Lösung, in natürlicher Weise zur *Kondition* und schließlich zur asymptotischen Stabilität. Einschrittverfahren lassen sich in strenger Analogie durch den Begriff *diskrete Evolution* charakterisieren, der wiederum zu *diskreter Kondition* und asymptotischer Stabilität von Rekursionen führt. Durch den Vergleich von kontinuierlicher und diskreter Kondition lassen sich für konkrete Diskretisierungen *steife* und *nichtsteife* Anfangswertprobleme einfach unterscheiden. Zugleich liefern diese Begriffe ein Rüstzeug zur Interpretation numerischer Resultate bei Hamiltonschen Systemen – ein wichtiges Thema, das jedoch im Rahmen dieses Buches nur gestreift werden kann.

Bei *Randwertproblemen* gehen wir ebenfalls von theoretischen Aussagen zur lokalen Eindeutigkeit von Lösungen aus. Sie führen uns direkt zur *Kondition* von Randwertproblemen und zur *diskreten Kondition* der zugehörigen Algorithmen. Der Vergleich mit Anfangswertproblemen legt eine Unterscheidung in *zeitartige* und *raumartige* Probleme nahe, die sich auf die dazu passenden Algorithmen überträgt. Eine wichtige Quelle von zeitartigen Randwertproblemen sind Probleme der *optimalen Steuerung*, deren Beschreibung wir deshalb hier eingefügt haben. Unsere Darstellung folgt weitgehend der Linie einer Vorlesung, die R. Bulirsch zuerst 1971 an der Universität zu Köln gehalten und seit 1973 an der TU München weiterentwickelt hat; der Erstautor hatte als Assistent wiederholt das Vergnügen, diese interessante Vorlesung zu begleiten. Ihr Inhalt war bisher in Lehrbuchform weitgehend unzugänglich.

Das Buch enthält eine Reihe ansonsten unpublizierter Resultate der Autoren. Soweit wir uns im hier vorgegebenen Rahmen fachlich beschränken mussten, haben wir weiterführende Literatur zitiert. Im gesamten Text sind immer wieder interessante Anwendungsbeispiele zur Illustration eingefügt. Zahlreiche Übungsaufgaben sollen der Vertiefung des Stoffes dienen. Darüberhinaus haben wir uns ausdrücklich nicht gescheut, bis in Details der algorithmischen Implementierung zu gehen. Unser Ziel ist, Mathematikern wie Programmanwendern genau dasjenige Hintergrundwissen zu vermitteln, das nach unserer Erfahrung bei der Lösung wissenschaftlicher Probleme abseits der ausgetretenen Pfade wichtig ist. Die Namen ausgewählter Computerprogramme sind im Text genannt und im Index aufgeführt. Am Ende des Buches finden sich in einem *Softwareverzeichnis* einige Internet-Adressen, über welche diese Programme bezogen werden können.

An dieser Stelle möchten wir all jenen danken, die uns bei der Erstellung dieses Buches besonders unterstützt haben.

Für die *erste Auflage* geht unser spezieller Dank an: Rolf Krause für die Erstellung der Graphiken; Tilmann Friese, Jörg Heroth, Andreas Hohmann und Christof Schütte für die Durchsicht unserer Entwürfe; Michael Dellnitz für kritische Durchsicht des gesamten Manuskripts unter dem Blickwinkel der dynamischen Systeme.

Für die *zweite Auflage* geht unser erster Dank an Rainer Roitzsch (ZIB), ohne dessen fundierte Kenntnisse in mannigfachen kniffligen TEX-Fragen dieses Buches nie erschienen wäre. Ebenso danken wir vom ZIB: Frank Cordes, Thorsten Hohage, Ulli Nowak, Marcus Weber, Martin Weiser und Lin Zschiedrich für technische wie mathematische Unterstützung; Erlinda Körnig und Sigrid Wacker für vielfältige Hilfe.

Von ausserhalb unserer Arbeitsgruppen würdigen wir dankbar Hilfe durch: Martin Arnold für den Hinweis auf einen versteckten Fehler in der ersten Auflage; Christian Lubich für wertvolle Hinweise zur Konzeption des Buches; Michael Günther und Caren Tischendorf für sehr nützliche Zuarbeit zu differentiell-algebraischen Problemen bei elektrischen Schaltkreisen; Georg Bock und Marc Steinbach für ausführliche Diskussionen zur Mehrzielmethode; Georg Bader für ausführliche Konsultationen zu adaptiven Kollokationsverfahren; Claudia Wulff für Zuarbeit beim periodischen Ringoszillator; ganz besonders schließlich Werner Rheinboldt für intensive Diskussionen, nicht nur zu Differentialgleichungen auf Mannigfaltigkeiten.

Abschließend danken wir ganz herzlich unseren Familien, die wegen der Arbeit an diesem Buch so manches Wochenende auf uns verzichten mussten – und dies fast ohne Murren getan haben.

Berlin und München, Dezember 2001 *Peter Deuflhard*
Folkmar Bornemann

Inhaltsverzeichnis

Überblick **1**

1 Zeitabhängige Prozesse in Natur und Technik **7**
1.1 Newtonsche Himmelsmechanik 10
1.2 Klassische Moleküldynamik 15
1.3 Chemische Reaktionskinetik 20
1.4 Elektrische Schaltkreise 28
Übungsaufgaben 34

2 Existenz und Eindeutigkeit bei Anfangswertproblemen **40**
2.1 Globale Existenz und Eindeutigkeit 41
2.2 Beispiele maximaler Fortsetzbarkeit 47
2.3 Struktur nichteindeutiger Lösungen 51
2.4 Schwach singuläre Anfangswertprobleme 59
2.5 Singuläre Störungsprobleme 64
2.6 Quasilineare differentiell-algebraische Probleme 67
Übungsaufgaben 78

3 Kondition von Anfangswertproblemen **83**
3.1 Sensitivität gegen Störungen 84
3.1.1 Propagationsmatrizen 84
3.1.2 Konditionszahlen 90
3.1.3 Störungsindex differentiell-algebraischer Probleme 94
3.2 Stabilität von Differentialgleichungen 99
3.2.1 Begriff der Stabilität 99
3.2.2 Lineare autonome Differentialgleichungen 102
3.2.3 Stabilität von Fixpunkten 110
3.3 Stabilität rekursiver Abbildungen 115
3.3.1 Lineare autonome Rekursionen 115
3.3.2 Spektren rationaler Funktionen von Matrizen 121
Übungsaufgaben 123

4 Einschrittverfahren für nichtsteife Anfangswertprobleme 128
4.1 Konvergenztheorie . . . 129
4.1.1 Konsistenz . . . 130
4.1.2 Konvergenz . . . 132
4.1.3 Begriff der Steifheit . . . 137
4.2 Explizite Runge-Kutta-Verfahren . . . 140
4.2.1 Idee von Runge-Kutta-Verfahren . . . 141
4.2.2 Klassische Runge-Kutta-Verfahren . . . 146
4.2.3 Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung . . . 153
4.2.4 Diskrete Konditionszahlen . . . 162
4.3 Explizite Extrapolationsverfahren . . . 166
4.3.1 Idee von Extrapolationsverfahren . . . 167
4.3.2 Asymptotische Entwicklung des Diskretisierungsfehlers . . . 172
4.3.3 Extrapolation der expliziten Mittelpunktsregel . . . 176
4.3.4 Extrapolation der Störmer/Verlet-Diskretisierung . . . 184
Übungsaufgaben . . . 191

5 Adaptive Steuerung von Einschrittverfahren 199
5.1 Lokale Genauigkeitskontrolle . . . 200
5.2 Regelungstechnische Analyse . . . 205
5.2.1 Exkurs über PID-Regler . . . 205
5.2.2 Schrittweitensteuerung als Regler . . . 208
5.3 Fehlerschätzung . . . 211
5.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren . . . 215
5.5 Lokale gegen erzielte Genauigkeit . . . 221
Übungsaufgaben . . . 225

6 Einschrittverfahren für steife und differentiell-algebraische Anfangswertprobleme 228
6.1 Vererbung asymptotischer Stabilität . . . 231
6.1.1 Rationale Approximation der Matrizenexponentiellen . . . 232
6.1.2 Stabilitätsgebiete . . . 234
6.1.3 Stabilitätsbegriffe . . . 242
6.1.4 Reversibilität und diskrete Isometrien . . . 246
6.1.5 Erweiterung auf nichtlineare Probleme . . . 249
6.2 Implizite Runge-Kutta-Verfahren . . . 253
6.2.1 Stabilitätsfunktionen . . . 260
6.2.2 Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme . . . 263
6.3 Kollokationsverfahren . . . 268
6.3.1 Idee der Kollokation . . . 268
6.3.2 Gauß- und Radau-Verfahren . . . 277
6.3.3 Dissipative Differentialgleichungen . . . 281

6.3.4 Erhalt quadratischer erster Integrale 287
6.4 Linear-implizite Einschrittverfahren 290
6.4.1 Linear-implizite Runge-Kutta-Verfahren 290
6.4.2 Linear-implizite Extrapolationsverfahren 294
6.4.3 Dynamische Elimination schneller Freiheitsgrade 304
Übungsaufgaben 315

7 Mehrschrittverfahren für Anfangswertprobleme 323
7.1 Mehrschrittverfahren über äquidistanten Gittern 325
7.1.1 Konsistenz 329
7.1.2 Stabilität 333
7.1.3 Konvergenz 338
7.1.4 Diskrete Konditionszahlen 347
7.2 Vererbung asymptotischer Stabilität 350
7.2.1 Schwache Instabilität bei Mehrschrittverfahren 352
7.2.2 Lineare Stabilität bei steifen Problemen 355
7.3 Direkte Konstruktion effizienter Verfahren 358
7.3.1 Adams-Verfahren für nichtsteife Probleme 359
7.3.2 BDF-Verfahren für steife Probleme 367
7.4 Adaptive Steuerung von Ordnung und Schrittweite 374
7.4.1 Adams-Verfahren über variablem Gitter 376
7.4.2 BDF-Verfahren über variablem Gitter 379
7.4.3 Nordsieck-Darstellung 388
Übungsaufgaben 397

8 Randwertprobleme bei gewöhnlichen Differentialgleichungen 401
8.1 Sensitivität bei Zweipunkt-Randwertproblemen 402
8.1.1 Lokale Eindeutigkeit 402
8.1.2 Konditionszahlen 405
8.2 Anfangswertmethoden für zeitartige Randwertprobleme 409
8.2.1 Schießverfahren 409
8.2.2 Mehrzielmethode 413
8.3 Zyklische lineare Gleichungssysteme 418
8.3.1 Diskrete Konditionszahlen 420
8.3.2 Algorithmen 423
8.4 Globale Diskretisierungsmethoden für raumartige Randwertprobleme 428
8.4.1 Elementare Differenzenverfahren 429
8.4.2 Adaptive Kollokationsverfahren 437
8.5 Allgemeinere Typen von Randwertproblemen 440
8.5.1 Berechnung periodischer Lösungen 442
8.5.2 Parameteridentifizierung in Differentialgleichungen 449

8.6 Variationsprobleme 455
8.6.1 Klassische Variationsprobleme 456
8.6.2 Probleme der optimalen Steuerung 463
Übungsaufgaben 469

Software 477

Literatur 479

Index 491

Überblick

Das Buch gliedert sich in acht Kapitel, ein Softwareverzeichnis, ein Literaturverzeichnis und einen Index. Die ersten drei Kapitel legen die Grundlagen der Modellierung, der Analysis und der Numerik. Die folgenden vier Kapitel handeln von Algorithmen für Anfangswertprobleme, darunter zunächst drei Kapitel von Einschrittverfahren, ein Kapitel von Mehrschrittverfahren. Das letzte Kapitel ist den Randwertproblemen gewidmet.

Kapitel 1. Hier gehen wir auf den naturwissenschaftlichen Hintergrund von Differentialgleichungen als Ausdruck deterministischer Modelle ein: Die *Newtonsche Himmelsmechanik* etwa kommt heute bei der Bahnberechnung von Satelliten oder Planetoiden vor. Auch die klassische *Moleküldynamik*, die beim Entwurf von Medikamenten und beim Verständnis von Viruserkrankungen eine zunehmende Rolle spielt, basiert auf der Newtonschen Mechanik. Hier treten zum ersten Mal *Hamiltonsche Systeme* auf. Steife Anfangswertprobleme tauchten historisch zum ersten Mal in der *chemischen Reaktionskinetik* auf, die heute wichtiger Teil der industriellen Verfahrenstechnik ist. Als letztes Anwendungsgebiet stellen wir *elektrische Schaltkreise* dar, die beim Entwurf technischer Geräte vom Mobiltelefon bis zum ABS-Bremssystem in Autos vorkommen. Sie führen in natürlicher Weise auf die Klasse differentiell-algebraischer Anfangswertprobleme.

Kapitel 2. In diesem Kapitel legen wir die Grundlagen der analytischen *Existenz- und Eindeutigkeitstheorie*, jedoch speziell mit Blick auf ihre Anwendung in der *mathematischen Modellierung*. Ausgehend von Punkten, an denen die rechte Seite nicht Lipschitz-stetig ist, entsteht eine interessante Struktur nicht-eindeutiger Lösungen, die in diesem Detailgrad kaum sonstwo dargestellt ist. *Singuläre Störungsprobleme* sind ein schönes und nützliches Hilfsmittel für die Analyse dynamischer Multiskalensysteme und spielen auch für die Numerik eine Rolle. Zu ihrer Erweiterung auf allgemeinere *quasilineare differentiell-algebraische* Probleme führen wir explizite Darstellungen lösungsabhängiger Orthogonalprojektoren ein, die uns die Charakterisierung eines Index-1-Falles gestatten, der ansonsten in der Literatur meist als Index-2-Fall behandelt werden muss. Diese Charakterisierung hilft später bei der Implementierung von differentiell-algebraischen Einschritt- wie Mehrschrittverfahren. Die Einschränkung auf den Index 1 gilt für das ganze Buch.

Kapitel 3. Hier wenden wir uns der praktisch wichtigen Frage der Numerischen Analysis, die sich mit der Sensitivität gegenüber typischen Eingabedaten befaßt. Ganz im Sinne von Band 1, Kapitel 2, definieren wir *Konditionszahlen* für Anfangswertprobleme. *Asymptotische Stabilität* wird zunächst für Spezialfall linear-autonomer Differentialgleichungen untersucht, in dem eine Charakterisierung allein über die Realteile der Eigenwerte möglich ist. Die Übertragung ins Nichtlineare erfolgt für die Umgebung von Fixpunkten durch Zerlegung invarianten Tangentialräume der zugeordneten Mannigfaltigkeiten. Nach dem gleichen Muster werden auch diskrete dynamische Systeme dargestellt, die ja bei Diskretisierung der Differentialgleichungen entstehen: Zunächst untersuchen wir linear-autonome Rekursionen, wo eine erschöpfende Charakterisierung über die Beträge der Eigenwerte möglich ist, dann die Übertragung ins Nichtlineare durch die Charakterisierung über die Tangentialräume zu den Fixpunkten. Der Zusammenhang der charakterisierenden Realteile im Kontinuierlichen und der Beträge im Diskreten wird genutzt zur Diskussion der *Vererbung* von Eigenschaften der Matrizenexponentiellen auf approximierende rationale Matrizenfunktionen.

Damit sind die methodischen *Grundlagen* zur Behandlung der numerischen Lösung von Differentialgleichungsproblemen gelegt.

Kapitel 4. In diesem Kapitel werden explizite *Einschrittverfahren* für *nichtsteife* Anfangswertprobleme zusammenfassend dargestellt. Die Notation berücksichtigt von Anfang an den adaptiven Fall, also nichtuniforme Gitter. Durch die Einschritt-Diskretisierung geht die Evolution des Differentialgleichungssystems über in eine *diskrete Evolution*, die Konditionszahlen entsprechend in *diskrete Konditionszahlen*. Der Vergleich von kontinuierlichen und diskreten Konditionszahlen legt schließlich auf äußerst einfache Weise den Begriff *Steifheit* von Anfangswertproblemen dar, selbst für eine einzige skalare Differentialgleichung. In Taylorentwicklungen, die beim Aufstellen der Bedingungsgleichungen für die Koeffizienten von *Runge-Kutta-Verfahren* auftreten, schreiben wir höhere Ableitungen sowie anfallende Koeffizientenprodukte konsequent als multilineare Abbildungen. Damit können wir die Butcherschen Wurzelbäume indexfrei als Darstellung der Einsetzungsstruktur in die multilinearen Abbildungen deuten. Durch besonders transparente Darstellung sowie suggestive Bezeichnungsweise hoffen wir, speziell diesen nicht ganz einfach zugänglichen Stoff lesbar gemacht zu haben. *Explizite Extrapolationsverfahren* mit einer asymptotischen τ^2-Entwicklung des Diskretisierungsfehlers werden über die Reversibilität der diskreten Evolution charakterisiert (Stetter-Trick). Die asymptotische Energieerhaltung der Störmer/Verlet-Diskretisierung wird diskutiert an Hand des chaotischen Verhaltens *Hamiltonscher Systeme*; ein tieferes Verständnis gelingt erst über die Analyse der Kondition dieser Anfangswertprobleme.

Kapitel 5. Die *adaptive Steuerung* von Schrittweite und Verfahrensordnung in numerischen Integratoren ist bei stark variierender Dynamik von zentraler Bedeutung

für den Rechenaufwand. Dieses Kapitel behandelt zunächst nur Einschrittverfahren. Zum tieferen Verständnis machen wir einen methodischen Ausflug in die Theorie der Regelungstechnik und interpretieren die Schrittweitensteuerung als diskreten Regler. Aus dieser Sicht erhalten wir eine äußerst brauchbare Stabilitätsbedingung, die das empirisch bekannte robuste Abschneiden der Schrittweitensteuerung in Verfahren höherer Ordnung auch bei Ordnungsabfall theoretisch untermauert. Damit ist die Brücke zu steifen Integratoren gebaut.

Kapitel 6. Hierin behandeln wir *Einschrittverfahren* für *steife* und *differentiell-algebraische* Anfangswertprobleme. Dazu analysieren wir die Vererbung von Eigenschaften eines kontinuierlichen Phasenflusses auf die diskreten Flüsse. Unter den rationalen Approximationen der komplexen Exponentialfunktion, die im Punkt $z = \infty$ ein wesentliche Singularität besitzt, wählen wir diejenigen aus, die im Punkt $z = \infty$ verschwinden, und kommen so zum tragenden Konzept der *L-Stabilität*. Die Annäherung an die wesentliche Singularität längs der imaginären Achse, die ja nicht zum wert 0 führt, behandeln wir im Zusammenhang der *isometrischen* Struktur von Phasenflüssen. Nach dieser Analyse verzweigt unsere Darstellung in natürlicher Weise in implizite und linear-implizite Einschrittverfahren. Im Runge-Kutta-Rahmen von Butcher führt dies zu den *impliziten Runge-Kutta-Verfahren*, bei denen *nichtlineare* Gleichungssysteme zu lösen sind. Unter diesen Verfahren richten wir unser Hauptinteresse auf *Kollokationsverfahren*, die sich durch transparente Beweismethoden und schöne Vererbungseigenschaften auszeichnen. Darüberhinaus bilden sie eine wichtige Klasse von Verfahren zur Lösung von Randwertproblemen (siehe weiter unten). Die direkte Umsetzung des Konzeptes der Störung von linearen Phasenflüssen führt uns zu den *linear-impliziten Einschrittverfahren*, bei denen lediglich *lineare* Gleichungssysteme zu lösen sind. Unter diesen Verfahren legen wir die Betonung auf das extrapolierte linear-implizite Euler-Verfahren, da es derzeit die einzige brauchbare W-Methode höherer und sogar variabler Ordnung darstellt; es eignet sich für quasilineare differentiell-algebraische Probleme nur bis zum Index 1 – eine Einschränkung, die ohnehin im ganzen Buch durchgehalten ist. Die letztere Klasse von Verfahren wird insbesondere bei *Linienmethoden* für *partielle Differentialgleichungen* mit Erfolg angewendet. Darüberhinaus bilden sie eine bequeme Basis für die Realisierung einer *numerischen singulären Störungsrechnung*, die neuerdings bei der dynamischen Elimination schneller Freiheitsgrade eine wichtige Rolle spielt, insbesondere im Kontext einer Modellreduktion bei zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen vom Diffusions-Reaktions-Typ.

Damit ist die Darstellung von Einschrittverfahren abgeschlossen.

Kapitel 7. In diesem Kapitel werden *Mehrschrittverfahren* für *nichtsteife* und *steife* Anfangswertprobleme parallel abgehandelt. Zunächst wird die klassische Konvergenztheorie über *äquidistantem* Gitter dargestellt. Der übliche Weg geht über die for-

male Interpretation von k-Schrittverfahren als Einschrittverfahren k-facher Dimension, was jedoch zu einer unhandlichen Norm führt, die über eine Jordansche Normalform definiert ist. Stattdessen entwickeln wir einen recht einfachen *Folgenkalkül*, der Abschätzungen in der Maximumnorm gestattet. Strukturell nimmt unser Folgenkalkül eine alte Idee von Henrici wieder auf, wobei wir allerdings die für diesen großen Klassiker der numerischen Differentialgleichungen typischen Gebrauch komplexer Analysis vermieden haben. Der Gesichtspunkt der Vererbung der Stabilität eines Phasenflusses schält wiederum die wesentliche Struktur von Mehrschrittverfahren für nichtsteife und steife Probleme simultan heraus: Über die Stabilität bei $z = 0$ gelangen wir direkt zu Adams-Verfahren, während uns die Stabilität bei $z = \infty$ in vergleichbarer Weise zu den BDF-Verfahren führt. Die Familie der Adams-Verfahren lässt sich als numerische Integration interpretieren, ausgehend von einer Interpolation des Richtungsfeldes. Die Familie der BDF-Verfahren hingegen lässt sich als numerische Differentiation interpretieren, ausgehend von einer Interpolation der Lösung. Beide Verfahren werden einheitlich über *variablem* Gitter und auch in Nordsieck-Form dargestellt bis hin zu wichtigen Details der *adaptiven* Steuerung von Schrittweiten und Ordnung. Durch unsere Herleitung ergibt sich die Erweiterung der BDF-Verfahren auf quasilineare differentiell-algebraische Probleme unmittelbar.

Die vier Kapitel über *Anfangswertprobleme* orientieren sich strikt in Richtung auf wenige wesentliche numerische Integrationsmethoden:

- für *nichtsteife* Probleme auf
  (a) die expliziten Runge-Kutta-Verfahren von Dormand und Prince,
  (b) die expliziten Extrapolationsverfahren zur Mittelpunktsregel und zur Störmer/Verlet-Diskretisierung,
  (c) das Adams-Verfahren in verschiedenen Implementierungen;
- für *steife und differentiell-algebraische* Probleme auf
  (a) das Radau-Kollokationsverfahren von Hairer und Wanner,
  (b) das Extrapolationsverfahren auf Basis der linear-impliziten Euler-Diskretisierung von Deuflhard und Nowak,
  (c) das BDF-Verfahren oder auch Gear-Verfahren in verschiedenen Implementierungen.

Kapitel 8. Auch bei *Randwertproblemen* gehen wir von analytischen Aussagen zur (lokalen) Eindeutigkeit aus. Sie stellen die Basis der Definition von *Konditionszahlen* für Randwertprobleme dar, die invariant gegen affine Transformation der Randbedingungen sind. Der Vergleich mit Anfangswertproblemen legt eine Unterscheidung in zeit- und raumartige Probleme nahe. Bei *zeitartigen* Randwertproblemen existiert eine klar ausgezeichnete Vorzugsrichtung, in der das Anfangswertproblem gutkonditioniert ist; die unabhängige Variable ist typischerweise als Zeit interpretierbar.

Bei *raumartigen* Randwertproblemen existiert keine solche Vorzugsrichtung; die unabhängige Variable ist typischerweise als Raumvariable interpretierbar, oft entsteht dieser Problemtyp durch Reduktion von Randwertproblemen bei partiellen Differentialgleichungen auf eine Raumdimension. Dem entspricht eine klare Orientierung in Richtung auf zwei effiziente Verfahrensklassen:

- für *zeitartige* Probleme auf die *Mehrzielmethode*,
- für *raumartige* Probleme auf adaptive *Kollokationsmethoden*.

In beiden Verfahrensklassen ergibt sich jeweils die Definition *diskreter Konditionszahlen* unmittelbar. Sie taucht zugleich auf in der Analyse von Eliminationsverfahren für die auftretenden *zyklischen* linearen Gleichungssysteme. Neben den klassischen Zweipunkt-Randwertproblemen geben wir noch einen Einblick in unterbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Berechnung periodischer Orbits*, und in überbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Parameteridentifizierung* in Differentialgleichungen. Zum Abschluss erwähnen wir noch, in gebotener Kürze, Probleme der *Variationsrechnung* und der *optimalen Steuerung*, die in der Regel auf Mehrpunkt-Randwertprobleme führen.

1 Zeitabhängige Prozesse in Natur und Technik

Dieses Buch behandelt die numerische Lösung von i. a. gekoppelten *Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen*

$$x_i' = f_i(t, x_1, \ldots, x_d), \quad i = 1, \ldots, d,$$

zunächst für gegebene *Anfangswerte*

$$x_i(t_0) = x_{i0} \in \mathbb{R}, \quad i = 1, \ldots, d.$$

In Kurzschreibweise lautet das *Anfangswertproblem* bei gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$x' = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^d,$$

wobei $(t, x) \in \Omega \subset \mathbb{R}^{d+1}$ und $f : \Omega \to \mathbb{R}^d$. Da die Differentialgleichung eine Funktion $x(t)$ indirekt über ihre Ableitung $x'(t)$ beschreibt, können wir den Lösungsprozess als *Integration* auffassen. In Zukunft sprechen wir daher von der numerischen Integration von Anfangswertproblemen.

Ein weiterer in der Praxis häufig auftretender Problemtyp ist das *Randwertproblem*, in der einfachsten Form als Zweipunkt-Randwertproblem

$$x' = f(t, x), \quad t \in [a, b], \qquad r(x(a), x(b)) = 0, \quad r : \mathbb{R}^{2d} \to \mathbb{R}^d.$$

Hier werden also die zusätzlich zu den Differentialgleichungen erforderlichen d Bedingungen zur Festlegung einer Lösung nicht wie beim Anfangswertproblem direkt gegeben, sondern indirekt über d Gleichungen in den Randwerten, die im allgemeinen Fall auch nichtlinear sein können. Die numerische Lösung von Randwertproblemen werden wir im abschließenden Kapitel 8 behandeln.

In der Regel ist die Variable t als physikalische *Zeit* interpretierbar. In diesem Fall haben die Anfangswertprobleme einen halboffenen Charakter ($t_0 \leq t < \infty$) und heißen *Evolutionsprobleme*. In seltenen Fällen, zumeist bei Randwertproblemen, stellt t auch eine Raumvariable dar, etwa bei Vorliegen ebener, zylindersymmetrischer oder kugelsymmetrischer Geometrie. Der Vektor x charakterisiert den Zustand eines Systems und heißt deshalb oft *Zustandsvektor*. Gewöhnliche Differentialgleichungen wurden wohl erstmalig im 17. Jahrhundert in Europa formuliert, nachweislich von I. Newton 1671 und von G. W. Leibniz um 1676. I. Newton notierte den kryptischen Hinweis: „Data aequatione quotcunque fluentes quantitae involvente fluxiones invenire et vice versa.“ Übersetzt lautet er etwa: „Aus gegebenen Gleichungen,

die zeitabhängige Größen (quantitae) enthalten, die Ableitungen (fluxiones) finden und umgekehrt.“ Während Leibniz eher abstrakt an der „inversen Tangentenmethode“ interessiert war, ergaben sich für I. Newton solche mathematischen Probleme aus physikalischen Vorstellungen, insbesondere aus seiner Mechanik.

Die tatsächliche Lösung solcher Gleichungen ist gleichbedeutend mit einer *Zukunftsvorhersage* für das beschriebene System – falls die mathematischen Gleichungen ein genaues Abbild des realen Systems darstellen. In der Tat ist bei Kenntnis des Anfangswertes $x(t_0)$ der Zustand $x(t)$ für alle Zeiten t festgelegt, d. h. determiniert. Diese Erkenntnis wurde von den Zeitgenossen als revolutionär empfunden. Noch im 18. Jahrhundert stützte sich die naturphilosophische Strömung des Determinismus auf das Paradigma der Newtonschen Mechanik als Begründung ihres Weltbildes. Dieses allzu einfache Gedankengebäude brachte zu Anfang des 20. Jahrhunderts H. Poincaré zum Einsturz durch eine innovative mathematische Theorie, die zum Ausgangspunkt für das interessante Gebiet der *Dynamischen Systeme* geworden ist. Wir werden auf Aspekte dieser Theorie auch im Zusammenhang mit der numerischen Lösung von Differentialgleichungen zu sprechen kommen. Allgemein sind wir heute sehr viel vorsichtiger in der philosophischen Interpretation mathematisch-physikalischer Theorien. Denn in aller Regel beschreiben mathematische Gleichungen immer nur einen Ausschnitt, eine Abmagerung der Realität – wir sprechen deshalb von einem *mathematischen Modell*. Ein schlechtes Modell enthält inakzeptable Vereinfachungen, ein gutes Modell hingegen akzeptable Vereinfachungen. Ein Modell taugt deshalb keinesfalls zur „Untermauerung“ eines philosophischen Lehrgebäudes, allenfalls zu seiner Widerlegung.

Es war lange strittig, ob Differentialgleichungsmodelle auch geeignet sind, biologische oder medizinische Sachverhalte einigermaßen vernünftig zu beschreiben. Solche Systeme scheinen weniger klar determiniert zu sein, da sie nicht nur vom Zustand zu einem einzigen Zeitpunkt abhängen, sondern in der Regel zusätzlich noch von der *Zustandsgeschichte*. Ein erster Schritt zur Erweiterung von gewöhnlichen Differentialgleichungen in diese Richtung sind die sogenannten *retardierten* Differentialgleichungen

$$x'(t) = f(t, x(t), x(t-\tau)), \quad \tau \geq 0.$$

Das Verzögerungsargument τ heißt auch *Retardierung*. Offenbar benötigen solche Systeme zu ihrer eindeutigen Lösbarkeit zumindest eine ausreichende Kenntnis des Zustandes in einem Zeitintervall $[t_0 - \tau, t_0]$. Weitere Bedingungen müssen hinzukommen. In wichtigen realistischen Fällen der Biologie oder Biochemie ist die Retardierung zudem noch abhängig vom Zustand x, also $\tau = \tau(x)$, was die numerische Lösung zusätzlich kompliziert. Diesen Problemtyp werden wir hier nicht eigens behandeln, sondern verweisen dazu auf Spezialliteratur – siehe etwa [90], Kapitel II.15, und Referenzen darin.

Gegen Ende des 18. Jahrhunderts wurde das Konzept der Differentialgleichungen erweitert auf *partielle* Differentialgleichungen. Dies sind Gleichungen, in de-

nen neben Ableitungen nach der Zeit auch Ableitungen nach den Raumvariablen auftreten. So wurden die gewöhnlichen Differentialgleichungen gewöhnlich. Partielle Differentialgleichungen gestatten die mathematische Beschreibung recht allgemeiner räumlich-zeitlicher Phänomene. Für bestimmte Gleichungen dieser Klasse lassen sich zeitliche Anfangswerte und räumliche Randwerte derart festlegen, dass eindeutige Lösungen entstehen, die *stetig* von den Anfangswerten abhängen. So erhält man *wohlgestellte* räumlich-zeitliche Evolutionsprobleme wie etwa die *Wellengleichung* oder die *Wärmeleitungsgleichung*. Auch diese Probleme können wir hier nicht behandeln, sondern verweisen ebenfalls auf die umfangreiche Literatur dazu. Jedoch lassen sich eine Reihe numerischer Techniken für Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen unter dem Gesichtspunkt der Evolution auch auf partielle Differentialgleichungen übertragen. Unter den in Kapitel 8 dargestellten Methoden für Randwertprobleme lassen sich nur die sogenannten globalen Randwertmethoden auch auf partielle Differentialgleichungen übertragen.

Um den Kontext sichtbar zu machen, in dem algorithmisch orientierte Numerische Mathematik heute angesiedelt ist, geben wir im vorliegenden ersten Kapitel zunächst eine elementare Einführung in einige Fragen der Modellierung zeitabhängiger Prozesse mittels gewöhnlicher Differentialgleichungen. Auch für die „nur“ numerische Lösung von Differentialgleichungen ist es zumindest nützlich, Kenntnisse des naturwissenschaftlichen Hintergrunds der zu lösenden Probleme zu haben (oder zu erwerben), ehe man „blind drauflos simuliert“. Im Sinne eines *Scientific Computing* ist ein solches Wissen sogar unverzichtbar – die schön isolierten Differentialgleichungsprobleme, mundgerecht und leicht verdaulich für Mathematiker serviert, finden sich allenfalls gelegentlich noch in akademischen Lehrbüchern.

In unserer Darstellung beschränken wir uns auf gewöhnliche Differentialgleichungsmodelle, die exemplarisch für zahlreiche Probleme aus Naturwissenschaft und Technik stehen. Als Prototypen deterministischer Modelle stellen wir in Abschnitt 1.1 zunächst die Newtonsche Mechanik am Beispiel der *Himmelsmechanik* vor; Satellitenbahnberechnung ist nur einer der zahlreichen aktuellen Bezüge. Eine hochaktuelle Variante der Newtonschen Mechanik ist die *klassische Moleküldynamik*, die wir in Abschnitt 1.2 skizzieren; sie bildet eine wichtige Basis für den Entwurf neuartiger Medikamente gegen Viruskrankheiten. Im folgenden Abschnitt 1.3 behandeln wir die auf L. Boltzmann zurückgehende *chemische Reaktionskinetik* als Musterbeispiel deterministischer Modellierung stochastischer Prozesse. Im letzten Abschnitt 1.4 gehen wir auf die *Simulation elektrischer Schaltkreise* ein; diese Thematik steckt heute hinter dem rechnergestützten Entwurf nahezu aller elektronischer Bauteile, die in unserer Informationsgesellschaft eine zentrale Rolle spielen.

1.1 Newtonsche Himmelsmechanik

Von alters her hat die Bewegung der Himmelskörper und ihre Vorausberechnung die Menschheit fasziniert. Der eigentliche Durchbruch in dieser Frage gelang I. Newton in der zweiten Hälfte des 17. Jahrhunderts. Schon G. Galilei hatte beobachtet, dass Körper bei Abwesenheit von Kräften eine *gleichförmige Bewegung* ausführen, was bedeutet, dass sie ihre Geschwindigkeit und Richtung beibehalten. Bezeichnen wir mit $x(t) \in \mathbb{R}^3$ die Position eines Körpers im (physikalischen) Raum zur Zeit t und mit $v(t)$ seine Geschwindigkeit, so gilt in I. Newtons präziserer Formulierung, dass

$$v(t) = x'(t) = \text{const}\,.$$

Dies ist äquivalent zu

$$v' = x'' = 0.$$

Der Ausdruck x'' heißt Beschleunigung. Zur physikalischen Beschreibung von Kräften definierte I. Newton diese über Funktionen F, welche proportional zur Beschleunigung und zur trägen Masse m des Körpers sind. Da nach seiner Überzeugung der Zustand eines mechanischen Systems durch $x(t_0), x'(t_0)$ für alle Zeiten determiniert war, konnten diese Funktionen F ebenfalls nur von x und x' abhängen. Somit ergab sich die folgende Gleichung

$$mx'' = F(t, x, x')$$

zur Beschreibung allgemeiner mechanischer Systeme. Diese Form lässt sich noch reduzieren unter Berücksichtigung der Invarianz gegen *Zeittranslation*: Die Form eines Kraftgesetzes kann nicht davon abhängen, zu welchem Zeitpunkt der Zeitursprung gewählt wird; daraus folgt, dass F nicht explizit von t abhängen kann. Damit haben wir also Differentialgleichungen der Form

$$mx'' = F(x, x').$$

Auch die entsprechende Invarianz gegen Translation oder Drehung im dreidimensionalen Raum liefert noch Einschränkungen an die explizite Form der möglichen Kraftgesetze, auf die wir hier jedoch nicht näher eingehen wollen. Interessierte Leser verweisen wir auf einschlägige Lehrbücher der Theoretischen Mechanik [118, 3].

Ein wichtiges Basisresultat der Theoretischen Mechanik zeigt, dass die Energieerhaltung eines Systems äquivalent zu einer bestimmten Form der zugrundeliegenden Kraft ist: Die Kraft ist der Gradient

$$F = -\nabla U \tag{1.1}$$

einer skalaren Funktion U, des sogenannten *Potentials*. Solche Kräfte heißen auch *konservative* Kräfte oder *Potentialkräfte*. Für die Himmelsmechanik fehlt demnach nur die spezielle Form des Gravitationspotentials U, welche ebenfalls von I. Newton gefunden wurde.

Keplerproblem. Für das Beispiel von zwei Körpern mit Raumkoordinaten x_1, x_2, Massen m_1, m_2 und Abstand

$$r_{12} = |x_1 - x_2|$$

lautet das Gravitationspotential

$$U = -\gamma \frac{m_1 m_2}{r_{12}}, \tag{1.2}$$

wobei γ die Gravitationskonstante bezeichnet. Daraus erhält man durch Einsetzen die Bewegungsgleichungen in der Form

$$m_1 x_1'' = -\nabla_{x_1} U, \quad m_2 x_2'' = -\nabla_{x_2} U. \tag{1.3}$$

Dieses astronomische *Zweikörperproblem* kann analytisch geschlossen gelöst werden. Für die Planeten ergeben sich die schon von Kepler gefundenen ebenen elliptischen Bahnkurven, weshalb dieses Problem auch häufig als *Keplerproblem* bezeichnet wird. Die Erklärung der Keplerschen Gesetze durch Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichungen der Newtonschen Mechanik war jedenfalls ein historischer Meilenstein der abendländischen Naturwissenschaft! Daneben ließen sich so auch die parabolischen und hyperbolischen Bahnen von Kometen voraussagen – ebenfalls ein Phänomen, das die Zeitgenossen zutiefst bewegt hat.

Die Differentialgleichungen (1.3) beschreiben die Bewegung einzelner Planeten um die Sonne oder des Mondes bzw. eines Satelliten um die Erde. Sie stellen jedoch in mehrfacher Hinsicht Vereinfachungen dar: so berücksichtigen sie z. B. nicht die Wechselwirkung der verschiedenen Himmelskörper untereinander oder die Abplattung der Erde. In all diesen komplizierteren Fällen ist es bis heute trotz intensiver Bemühungen nicht gelungen, einen „geschlossenen“ Lösungsausdruck zu finden. Es bleibt also nur die numerische Integration solcher Differentialgleichungssysteme – womit wir zwangsläufig beim Thema dieses Buches sind.

Bemerkung 1.1. Unter der „geschlossenen“ Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung verstehen wir einen Ausdruck aus endlich vielen geschachtelten „einfachen“ Funktionen. Dabei hängt es stark vom Blickwinkel ab, welchen Baukasten an Funktionen und Operationen man als „einfach“ bezeichnet. Beispielsweise besitzt das einfache Anfangswertproblem

$$x' = 1 + (1 + 2t)x, \quad x(0) = 0,$$

die „geschlossene“ Lösung

$$x(t) = e^{t(1+t)} \int_0^t e^{-\tau(1+\tau)}\, d\tau. \tag{1.4}$$

Dieser Ausdruck enthält zwar durchaus interessante Informationen über die Lösung, beispielsweise über ihr Verhalten für große t, hat aber für die *Auswertung* der Lösung

sample content of Numerische Mathematik: Gewöhnliche Differentialgleichungen (de Gruyter Lehrbuch) (German Edition)

- read Exile on Wall Street: One Analyst's Fight to Save the Big Banks from Themselves pdf, azw (kindle)
- click The Boy Who Killed Demons here
- download online Planning A Tragedy: The Americanization of the War in Vietnam pdf, azw (kindle)
- download Inferno (The Kindred, Book 4)

- http://schrolf.de/books/Exile-on-Wall-Street--One-Analyst-s-Fight-to-Save-the-Big-Banks-from-Themselves.pdf
- http://ramazotti.ru/library/The-Boy-Who-Killed-Demons.pdf
- http://econtact.webschaefer.com/?books/Planning-A-Tragedy--The-Americanization-of-the-War-in-Vietnam.pdf
- http://www.experienceolvera.co.uk/library/Inferno--The-Kindred--Book-4-.pdf