Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
FB Mathematik und Informatik der Universität Münster
Prof. Dr. M. Ohlberger

20.05.2008

Übung zur Vorlesung

Höhere Numerische Mathematik

SS 2008 — Blatt 6

Abgabe: 27.05.2008, vor der Vorlesung

Aufgabe 1 (Implizite Runge-Kutta-Verfahren) (8 Punkte)

Zur Lösung steifer AWP sind implizite Runge-Kutta Verfahren deutlich besser geeignet als explizite, da sie weniger Einschränkungen an die Gitterweite h stellen. Allerdings muß in jedem Schritt ein sN nicht-lineares Gleichungssystem gelöst werden, wobei s die Zahl der Zwischenschritte im RK-Verfahren und N die Dimension des AWPs ist. Gleichzeitig ist allerdings bei festem s die Konsistenzordnung bei einem impliziten Verfahren (max. $2s$) deutlich höher als bei einem expliziten (max. s), wodurch sich der Aufwand eines impliziten Verfahrens wieder verringert.

Bei einem **D**iagonal-**I**mpliziten- RK-Verfahren kann der Aufwand so reduziert werden, dass pro Schritt nur noch s-mal ein N-dimensionales nicht-lineares Gleichungssystem zu lösen ist. Die maximal mögliche Konsistenzordnung ist allerdings nur noch $s+1$ und die Stabilitätseigenschaften liegen zwischen denen eines impliziten und eines expliziten Verfahrens. Im Butcher Tableau eines s-stufigen DIRK gilt $\beta_{ij} = 0$ falls $j > i$ und $\beta_{ii} = B$ für $i = 1, \dots s$ mit $B \in \mathbb{R}$. Da wir nur skalare AWP betrachten, müssen im Fall der DIRK-Verfahren in jedem Zwischenschritt auch nur skalare nicht-lineare Gleichungen der Form $F(k) := f(x, y + hBk) - k = 0$ gelöst werden (x, y sind dabei dem Verfahren entsprechend zu wählen). Häufig wird dazu eine Variante des Newton-Verfahrens benutzt, etwa das vereinfachte Newtonverfahren:

$$DF(k^0)\Delta k^n = -F(k^n), \quad k^{n+1} := k^n + \Delta k^n,$$

wobei DF die Jacobi Matrix von F (in unserem Fall $DF = F'$) und k^0 ein geeigneter Startwert (etwa $k^0 = f(x, y)$) ist. Die Iteration wird zum Beispiel abgebrochen, falls $F(k^n) < 1e-10$.

Abgabe:

Implementieren Sie die folgenden zwei DIRK-Verfahren mit Konsistenzordnung 2 bzw. 4:

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array} \qquad\qquad \begin{array}{c|ccc} B & B & & \\ \frac{1}{2} & -\frac{\alpha}{2} & B & \\ 1-B & 1+\alpha & -1-2\alpha & B \\ \hline & \frac{1}{6\alpha^2} & 1-\frac{1}{3\alpha^2} & \frac{1}{6\alpha^2} \end{array}$$

Dabei ist α Lösung von $x^3 - x = 1$ und $B = \frac{1+\alpha}{2}$. Wir wählen $\alpha = -\frac{2}{3}\sqrt{3}\cos(70°)$. Untersuchen Sie die Effizienz (Anzahl Auswertungen von f sowie Ableitungen von f) der Verfahren im Vergleich mit den bereits implementierten expliziten Verfahren derselben Ordnung; wählen Sie für das explizite zweite Ordnung Verfahren $\alpha = 1$. Berechnen Sie den Fehler für $h = 2^{-n}, n = 0, \ldots, 15$. Als Testbeispiel verwenden Sie einerseits das AWP vom Blatt 3 mit b=4, ($\varepsilon = 10^{-3}$) und $y_0 = u_0 = (1+\varepsilon)^{0.25}$ und andererseits das "steifere" AWP

$$f(x,y) = \frac{\cos(x)(1+100x)^2\exp(\frac{-400x}{1+100x}) - 400y^4}{4y^3(1+100x)^2}, \tag{1}$$

$$y(x) = \left(\sin(x) + 1 + 10^{-3}\right)^{0.25}\exp\left(\frac{-100x}{1+100x}\right) \tag{2}$$

mit der selben Anfangsbedingung. Interpretieren Sie die Ergebnise.

Aufgabe 2 (Zeitschrittweitensteuerung) (8 Punkte)

Wir wollen die Verfahren aus der Vorlesung zur Zeitschrittweitensteuerung anhand des Schemas von Dormand-Prince testen. Implementieren Sie die zwei Algorithmen zur adaptiven Steuerung der Schrittweite h, die unten skizziert sind. Wie in der Vorlesung hergeleitet ist, beim ersten Verfahren $\sigma = (2^{p+1}-1)2^{-(p+1)}\eta$ und beim zweiten $\sigma = \eta$ ($\eta = 0.5Le^{-L(b-a)}\mathrm{TOL}$). Setzen Sie $L = 1$. Das zentrale Anliegen sollte sein den Rechenaufwand zu minimieren. Als Maß für den Aufwand setzen wir die Anzahl Auswertungen von f an. Ziel der Implementierung sollte also sein eine gegebene Fehlerschranke mit möglichst wenig Berechnungen von f zu unterschreiten.

Abgabe: Verwenden Sie zum Testen das AWP von Blatt 3 mit $b = 10, \varepsilon = 1e-6$ und $y_0 = u_0 = (1+\varepsilon)^{0.25}$. Wählen Sie $\mathrm{TOL} = 1e-3$ und für den ersten Schritt $h_0 = 1e-2$. Geben Sie jeweils den Approximationsfehler am Intervallende an, sowie die Anzahl der Schritte und die Anzahl der Aufrufe an die Funktion f. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit einer Rechnung auf einem äquidistanten Gitter der Schrittweite h mit dem Verfahren von Dormand-Prince (mit $p = 5$). Stellen Sie die Schrittweite h so ein, dass ungefähr derselbe Fehler erreicht wird wie mit adaptiver Schrittweitensteuerung.

Algorithmen: Gegeben: x_i, u_i, h_i:

(a) Setze $\tilde{h} = h_i$
(b) Berechne aus (x_i, u_i) den Wert $u_{1,i+1}$ mit der Schrittweite $\tilde{h}$
(c) Berechne aus (x_i, u_i) den Wert $u_{2,i+2}$ mit der Schrittweite $\tilde{h}/2$
(d) Setze $\lambda = (\sigma\tilde{h}/|u_{2,i+2} - u_{1,i+1}|)^{1/p}$
(e) Falls $\lambda >= 0.45$
    (a) $\lambda = \min\{2, \lambda\}$
    (b) Falls $\lambda >= 0.9$ dann setze $x_{i+1} = x_i + \tilde{h}, u_{i+1} = u_{1,i+1}, h_{i+1} = \lambda\tilde{h}$
    (c) sonst setze $x_{i+1} = x_i + \tilde{h}/2, u_{i+1} = u_{2,i+1}, h_{i+1} = \lambda\tilde{h}$
    (d) Weiter mit nächstem Schritt
(f) Setze $h_i = \tilde{h}\lambda$ und Schritt wiederholen

(a) Setze $\tilde{h} = h_i$
(b) Berechne aus (x_i, u_i) den Wert $u_{1,i+1}$ mit der Schrittweite $\tilde{h}$ und dem Verfahren fünfter Ordnung
(c) Berechne aus (x_i, u_i) den Wert $u_{2,i+1}$ mit der Schrittweite $\tilde{h}$ und dem Verfahren vierter Ordnung (Berechnen Sie die k_i nicht neu!)
(d) Setze $\lambda = (\sigma\tilde{h}/|u_{2,i+1} - u_{1,i+1}|)^{1/p}$
(e) Falls $\lambda >= 0.45$
    (a) $\lambda = \min\{2, \lambda\}$
    (b) Falls $\lambda >= 0.9$ dann setze $x_{i+1} = x_i + \tilde{h}, u_{i+1} = u_{1,i+1}, h_{i+1} = \lambda\tilde{h}$
    (c) sonst setze $x_{i+1} = x_i + \tilde{h}/2, h_{i+1} = \lambda\tilde{h}$ und berechnen aus (x_i, u_i) den Wert u_{i+1} mit der Schrittweite $\tilde{h}/2$ und dem Verfahren fünfter Ordnung
    (d) Weiter mit nächstem Schritt
(f) Setze $h_i = \tilde{h}\lambda$ und Schritt wiederholen