Reiner Vanselow

Explizite Konstruktion von linearen Mehrschrittblockverfahren

Aplikace matematiky, Vol. 28 (1983), No. 1, 1–8

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/103997

EXPLIZITE KONSTRUKTION VON LINEAREN MEHRSCHRITTBLOCKVERFAHREN

REINER VANSELOW

(Eingegangen am 21. März 1980)

1. EINLEITUNG

An ein Verfahren zur numerischen Behandlung der Anfangswertaufgabe

$$(1.1) \qquad y'(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [0, T], \quad y(0) = y_0 \in R^m,$$

mit $f : [0, T] \times R^m \to R^m$ werden neben Konsistenz- und Konvergenzforderungen auch gewisse Stabilitätsforderungen gestellt. Betrachtet man z. B. eine konstante Schrittweite $h > 0$ ein beliebig großes Zeitintervall und ein lineares DGL-System mit konstanten Koeffizienten, dann spielt dabei der von Dahlquist (s. [1]) eingeführte A-Stabilitätsbegriff eine bedeutende Rolle. Für die linearen Mehrschrittverfahren konnte gezeigt werden, daß A-stabile Verfahren höchstens die Konsistenzordnung 2 besitzen (s. [1]). Es wurde deshalb nach Verfahrensklassen gesucht, in denen A-stabile Verfahren beliebig hoher Konsistenzordnung existieren.

In den Arbeiten von Práger, Taufer und Vitásek (s. [2] und [3]), sowie Watts (s. [4]) und Watts und Shampine (s. [5]) wurden Untersuchungen einer solchen Verfahrensklasse angestellt, die aus einer Verallgemeinerung der linearen Mehrschrittverfahren entstand und als Klasse der linearen Mehrschrittblockverfahren bezeichnet werden soll.

Die vorliegende Arbeit stellt in Abschnitt 3. eine explizite Konstruktion von linearen Mehrschrittblockverfahren vor. Dabei wird auf gewisse bisher bekannte Ergebnisse zurückgegriffen, die in Abschnitt 2. zusammengestellt sind. Die entsprechenden Beweise dieser Sätze sind in den zitierten Arbeiten enthalten bzw. können durch einfache Überlegungen unmittelbar erbracht werden.

2. LINEARE MEHRSCHRITTBLOCKVERFAHREN UND DEREN KONSTRUKTION

Zur Vereinfachung der Darstellung werde für die betrachtete Aufgabe (1.1) $m = 1$ vorausgesetzt. Weiterhin sei die Funktion f so beschaffen, daß Existenz und Eindeutigkeit der exakten Lösung im Intervall $[0, T]$ gewährleistet sind. Schließlich sei zur Vereinfachung der Darstellung $f_j = f(t_j, y_j)$.

Definition. *Vorgegeben seien eine natürliche Zahl $k > 0$, die Blocklänge, und ein Parameter $s \in N$ mit $1 \leqq s \leqq k$. Gegeben seien weiterhin eine reelle $k \times k$-Matrix C und ein reeller k-dimensionaler Vektor d so, daß das lineare Mehrschrittverfahren (kurz lMSV), das durch eine beliebige Zeile in (2.1) definiert wird, die Konsistenzordnung k besitzt.*

Gesucht ist die Lösung der Gleichungssysteme

$$\begin{bmatrix} y_{n+1} \\ y_{n+k} \\ \vdots \\ y_{n+k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_n \\ y_n \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} + hC \begin{bmatrix} f_{n+1} \\ f_{n+2} \\ \vdots \\ f_{n+k} \end{bmatrix} + hf_n \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_k \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

mi: $n = 0(s)$ $[N/s]$ bei einem vorgegebenen Startwert y_0 und einer festen Schrittweite $h > 0$.

(2.1) definiert die Klasse der Linearen Mehrschrittblockverfahren (kurz (lMSBV), bei der jeweils aus einem Näherungswert y_n im Gitterpunkt t_n k neue Näherungswerte $y_{n+1}, y_{n+2}, \ldots, y_{n+k}$ in den dazugehörigen Gitterpunkten $t_{n+1}, t_{n+2}, \ldots, t_{k+n}$ bestimmt werden. Der Parameter s ist ein Steuerparameter. Ist $s < k$, so werden die $(k - s)$ bereits berechneten Werte $y_{n+s+1}, y_{n+s+2}, \ldots, y_{n+k}$ nicht als Näherungen verwendet, stattdessen wird (2.1) mit y_{n+s} erneut gestartet. Für $k = 1$ erhält man eine Teilklasse der bereits bekannten Klasse der lMSV, nämlich die konsistenten Einschrittverfahren.

Die durch (2.1) beschriebenen lMSBV lassen sich noch durch die Erweiterung der Anzahl der Startwerte (s. [2] und [3]) sowie die nichtgleichabständige Wahl der Stützstellen für die Näherungspunkte (s. [4]) verallgemeinern.

Die vorliegende Verfahrensklasse wird entsprechend ihrem Charakter auch als Block Implizit One-step methods (s. [4] und [5]) bzw. Overimplicit Multistep methods (s. [2] und [3]) bezeichnet. Für die weitere Darstellung gelten folgende Vereinbarungen:

$e = (1, 1, \ldots, 1)^{\mathsf{T}} \in R^k$, $I \ldots k \times k$-Einheitsmatrix, $v \ldots k$-dimensionaler Nullvektor,

$$M = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & k \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 1^0 & 1^1 & \ldots & 1^{k-1} \\ 2^0 & 2^1 & \ldots & 2^{k-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ k^0 & k^1 & \ldots & k^{k-1} \end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix} 1/1! & & & 0 \\ & 1/2! & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1/k! \end{bmatrix}$$

Satz 1. *Jedes* lMSV, *das durch eine Zeile des Verfahrens* (1.2) *mit vorgegebenem C und d definiert werden kann, besitzt die Konsistenzordnung k genau dann,* *wenn für C und d gilt*

$$(2.2) \qquad i = d_i + \sum_{j=1}^{k} c_{ij} \quad \textit{für} \quad i = 1(1)\,k$$

$$i^l = l \sum_{j=1}^{k} c_{ij} j^{l-1} \quad \textit{für} \quad i = 1(1)\,k,\ l = 2(1)\,k\,.$$

Satz 2. *Es seien die Blocklänge k und der Parameter s vorgegeben. Dann ist die Klasse der durch* (2.1) *definierten* 1MSBV *nicht leer; konkret: Jedem beliebigen Vektor* $w \in R^k$ *läßt sich eineindeutig durch* (2.3) *ein* 1MSBV *zuordnen.*

$$(2.3) \qquad M^2 V = CMV(I + M) + [v, \ldots, v, (k+1)\,w]$$

$$d = Me - Ce\,.$$

Bei der Untersuchung der A-Stabilität von 1MSBV spielen die Polynome $Q(H) = \det\,(I - HC)$ und $P_s(H)$, $s = 1(1)\,k$, eine wesentliche Rolle. Dabei ist $P_s(H)$ die Determinante derjenigen Matrix, die aus $(I - HC)$ durch Ersetzen der s-ten Apalte durch den Vektor $(e + Hd)$ entsteht.

Satz 3. *Der Parameter s sei fest vorgegeben, und es gelte* $Q(H) \neq 0$ *für alle* $H \in C^1$ *mit* $\operatorname{Re} H < 0$. *Dann ist das* 1MSBV (2.1) *A-stabil genau dann, wenn für alle* $H \in C^1$ *mit* $\operatorname{Re} H < 0$ (2.4) *gilt.*

$$(2.4) \qquad |P_s(H)/Q(H)| < 1\,.$$

Satz 4. *Für eine Matrix C, die zusammen mit einem Vektor d ein* 1MSBV *beschreibt, ist*

$$Q(H) = \det\,(I - HC) = \sum_{i=0}^{k} a_i H^i$$

durch die Lösung eines linearen Gleichungssystems berechenbar; konkret: Durch (2.3) *wird der Matrix C eindeutig ein Vektor* $w \in R^k$ *zugeordnet, der aus C explizit berechenbar ist. Aus diesem Vektor w lassen sich durch Lösung des linearen Gleichungssystems*

$$(2.5) \qquad MVN \begin{bmatrix} a_k \\ a_{k-1} \\ \vdots \\ a_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{k!}\,w - \frac{1}{(k+1)!}\,M^{k+1}e\,.$$

die Koeffizienten $a_1, a_2, \ldots, a_k$ *eindeutig berechnen, und es ist* $a_0 = 1$. *Damit ist* $Q(H)$ *für jedes H berechenbar.*

Satz 5. *Die Zuordnung zwischen einem Paar* (C, d), *wobei die Matrix C und der Vektor d ein* 1MSBV (2.1) *definieren, einem Vektor w, der durch* (2.3) *gegeben* *ist, und einem reellen Polynom*

$$Q(H) = \sum_{i=0}^{k} a_i H^i$$

mit $a_0 = 1$ *und* $Q(H) = \det(I - HC)$ *ist jeweils eineindeutig und durch* (2.3) *bzw.* (2.5) *gegeben.*

Satz 6. *Sein eine Matrix C und ein Vektor d gegeben. die ein* 1MSBV *beschreiben. Die Koeffizienten a_i des Polynoms*

$$Q(H) = \det(I - HC) = \sum_{i=0}^{k} a_i H^i$$

seien bekannt (es gilt $a_0 = 1$*). Dann gilt für die Polynome* $P_s(H)$

$$P_s(H) = \sum_{j=0}^{k} \left(\sum_{i=0}^{j} \frac{s^{j-i}}{(j-i)!} a_i \right) H^j \quad \text{für} \quad s = 1(1)\,k\,. \tag{2.6}$$

Satz 7. *Die Polynome* $Q(H)$ *bzw.* $P_s(H)$, $s = 1(1)\,k$, *sind für ein beliebiges* 1MSBV (2.1) *linear unabhängig und die Koeffizienten vor* H^0 *sind jeweils gleich* 1.

Satz 8. *Für die Matrix C und den Vektor d gilt mit den Polynomen* $Q(H)$ *und* $P_s(H)$, $s = 1(1)\,k$,

$$Q(H)\,d_i + \sum_{j=1}^{k} P_j(H)\,c_{ij} = \begin{cases} \dfrac{P_i(H) - Q(H)}{H} & \text{für } H \neq 0 \\ \lim\limits_{H \to 0} \dfrac{P_i(H) - Q(H)}{H} & \text{für } H = 0 \end{cases} \quad \text{für } i = 1(1)K, \tag{2.7}$$

und der Grenzwert

$$\lim_{H \to 0} \frac{P_i(H) - Q(H)}{H}$$

existiert und ist endlich.

Satz 9. *Sei die Blocklänge k fest vorgegeben. Für das* 1MSBV, *bei dem jedes durch eine Zeile von* (2.1) *beschriebene* 1MSV *sogar die Konsistenzordnung* $(k + 1)$ *besitzt (dies ist genau dann der Fall, wenn in* (2.3) $w = v$ *ist), sind die eindeutig bestimmte Matrix C und der dazugehörige Vektor d explizit angebbar und es gilt*

$$c_{ij} = \frac{1}{g'(j)} \int_0^i \frac{g(s)}{s - j}\,\mathrm{d}s \quad \text{für} \quad i, j = 1(1)\,k \tag{2.8}$$

$$d_i = \frac{1}{g'(0)} \int_0^i \frac{g(s)}{s}\,\mathrm{d}s \quad \text{für} \quad i = 1(1)\,k$$

mit $g(s) = s(s - 1) \ldots (s - k)$.

Satz 10. *Für jede Blocklänge k existieren A-stabile* 1MSBV (2.1), *d. h. es existieren A-stabile Verfahren mit beliebig hoher Konsistenzordnung.*

Mit diesen Ergebnissen war es bisher möglich, auf 2 Wegen, ausgehend von einem gegebenen Polynom

$$Q(H) = \sum_{i=0}^{k} a_i H^i$$

mit $a_0 = 1$, eine Matrix C und einen Vektor d so zu konstruieren, daß damit ein 1MSBV beschrieben wird und daß $Q(H) = \det(I - HC)$ gilt. Dabei sind C und d nach Satz 5 eindeutig bestimmt.

Methode I. Ausgehend von den vorgegebenen Koeffizienten des Polynoms $Q(H)$ wird mit Hilfe des Gleichungssystems (2.5) ein Vektor $w \in R^k$ und durch die anschließende Lösung des Gleichungssystems (2.3) die gesuchte Matrix C berechnet, woraus sich ebenfalls nach (2.3) der Vektor d ergibt.

Methode II. Zunächst werden aus dem gegebenen Polynom $Q(H)$ mit Hilfe von (2.6) die Polynome $P_s(H)$, $s = 1(1)\,k$, berechnet. Durch die Vorgabe von $(k + 1)$ verschiedenen Werten H können durch die Lösung des Gleichunssystems, daß aus (2.7) entsteht, die gesuchte Matrix C und der Vektor d berechnet werden.

Bei beiden Methoden zur Ermittlung der Koeffizienten eines 1MSBV (2.1) aus vorgegebenen Koeffizienten eines Polynoms $Q(H)$ sind jeweils lineare Gleichungssysteme zu lösen.

3. EINE EXPLIZITE KONSTRUKTIONSVORSCHRIFT FÜR 1MSBV (2.1)

Die im Abschnitt 2. angegebene Methode I bildet den Ausgangspunkt für die weiteren Überlegungen. Es soll gezeigt werden, daß die Lösung der Gleichungssysteme (2.3) zur Berechnung der Matrix C aus einem beliebigen Vektor $w \in R^k$ explizit erfolgen kann. Damit wäre, da w aus (2.5) bei vorgegebenen Koeffizienten a_i ebenfalls explizit berechenbar ist, eine explizite Berechnungsvorschrift der Verfahrenskoeffizienten c_{ij} und d_i des 1MSBV (2.1) bei gegebenen Werten a_i gefunden.

Zunächst einige Vorbetrachtungen.

Die zu berechnende Matrix C werde in folgender Weise zerlegt

$$C = C^0 + C^w\,, \tag{3.1}$$

wobei C^0 durch $M^2 V = C^0 M V(I + M)$ eindeutig gegeben ist. Nach Satz 9 ist C^0 explizit angebbar und für C^w ergibt sich aus (2.3) die Beziehung

$$C^w M V(I + M) = [v, \ldots, v, -(k + 1)\,w]\,. \tag{3.2}$$

Auf Grund der speziellen Gestallt von $(I + M)$ erhält man sofort

$$C^w M V = [v, \ldots, v, -w]\,. \tag{3.3}$$

Dieses Gleichungssystem ist äquivalent zu

(3.4) $$C_i^w M V = (0, \ldots, 0, -w_i) \quad \text{für} \quad i = 1(1)\, k\,,$$

wobei C_i^w die i-te Zeile der Matrix C^w bezeichne.

Es sei nun ein Vektor $T_i^{\mathsf{T}} \in R^k$ definiert durch

(3.5) $$T_i := C_i^w M\,.$$

Dann ist, da M eine Diagonalmatrix ist, C_i^w aus bekanntem T_i explizit berechenbar.

Für T_i ergibt sich aus (3.4) und (3.5) die Beziehung

(3.6) $$T_i V = (0, \ldots, 0, -w_i)\,,$$

d. h. die Berechnung der Matrix C aus (2.3) ist bis auf andere explizite Berechnungen auf die Lösung eines linearen Gleichungssystems der Form $T_i V = (0, \ldots, 0, -w_i)$ mit unbekanntem T_i zurückgeführt worden.

Falls nun noch gezeigt werden kann, daß die Lösung des Gleichungssystems $T_i V = (0, \ldots, 0, -w_i)$ explizit angebbar ist, dann läßt sich unter Beachtung von (3.1), (3.5) und Satz 9 auch die Matrix C explizit konstruieren.

Lemma. *Für $k \geqq 1$ gilt*

(3.7) $$\sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} (-1)^j (j+1)^l = \begin{cases} 0 & \textit{für} \quad l = 0(1)\, k-2 \\ (-1)^{k-1}(k-1)! & \textit{für} \quad l = k-1\,. \end{cases}$$

Beweis. Zunächst gilt für $k \geqq 1$ folgende Umformung

$$\sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} (-1)^j (j+1)^l = -\frac{1}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} \frac{k}{j+1} (-1)^{j+1} (j+1)^{l+1} =$$

$$= -\frac{1}{k} \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k}{j+1} (-1)^{j+1} (j+1)^{l+1} = -\frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} \binom{k}{j} (-1)^j j^{l+1}.$$

Damit ist die Aussage des Lemmas äquivalent zur Aussage: Für $k \geqq 1$ gilt

(*) $$\sum_{j=1}^{k} \binom{k}{j} (-1)^j j^l = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad l = 1(1)\, k-1 \\ (-1)^k k! & \text{für} \quad l = k\,. \end{cases}$$

Der Beweis von (*) wird durch vollständige Induktion über l und k erbracht.

Induktionsanfang: „$l = 1$, k beliebig, $k \geqq 2$“. Es ist wegen $k \geqq 2$

$$\sum_{j=1}^{k} \binom{k}{j} (-1)^j j = k \sum_{j=1}^{k} \binom{k-1}{j-1} (-1)^j = k \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} (-1)^{j+1} =$$

$$= -k \sum_{j=0}^{k-1} \binom{k-1}{j} (-1)^j (+1)^{k-1-j} = -k(-1+1)^{k-1} = 0.$$

$$„l = 1\,, \quad k = 1“$$

Hier erhält man nun

$$\sum_{j=1}^{1} \binom{1}{j} (-1)^j j = -1.$$

Damit ist der Induktionsanfang erfüllt.

Induktionsvoraussetzung: „(*) gilt für alle l und k mit

$$\left\{\begin{matrix} 1 \leqq k \leqq \bar{k} - 1 & \text{mit} & 1 \leqq l \leqq k \\ k = \bar{k} & \text{mit} & 1 \leqq l < \bar{l} \leqq k = \bar{k} \end{matrix}\right\}$$

bei $\bar{k} \geqq 2$“.

Induktionsbehauptung: „(*) gilt für $\bar{l}$ und $\bar{k}$“.

Induktionsbeweis: Es gilt zunächst

$$\sum_{j=1}^{\bar{k}} \binom{\bar{k}}{j} (-1)^j j^{\bar{l}} = \bar{k} \sum_{j=1}^{\bar{k}} \binom{\bar{k}-1}{j-1} (-1)^j j^{\bar{l}-1}\,.$$

Da für die Binomialkoeffizienten bei $n \geqq (p+1)$ und unter Beachtung von $n \geqq 1$ und $p \geqq 0$ die Beziehung

$$\binom{n}{p} + \binom{n}{p+1} = \binom{n+1}{p+1} \text{ und außerdem } \binom{n}{n} = \binom{n+1}{n+1} \text{ gilt}\,,$$

folgt mit $\bar{k} \geqq 2$ weiter

$$= \bar{k} \sum_{j=1}^{\bar{k}} \binom{\bar{k}}{j} (-1)^j j^{\bar{l}-1} - \bar{k} \sum_{j=1}^{\bar{k}-1} \binom{\bar{k}-1}{j} (-1)^j j^{\bar{l}-1}\,.$$

Der erste Term ist dabei nach Induktionsvoraussetzung für $k = \bar{k}$ und $l = \bar{l} - 1$ gleich Null, und nach Induktionsvoraussetzung für $k = \bar{k} - 1$ ergibt sich

$$= -\bar{k} \begin{cases} 0 & \text{für} \quad \bar{l} - 1 = 1(1)\,\bar{k} - 2\,, \\ (-1)^{\bar{k}-1} (\bar{k} - 1)! & \text{für} \quad \bar{l} - 1 = \bar{k} - 1\,, \end{cases}$$

womit die Induktionsbehauptung und damit (*) folgt.

Mit dem Lemma läßt sich nun unter Beachtung der speziellen Gestalt der Matrix V die Lösung des Gleichungssystems (3.6) explizit angeben. Es gilt

$$T_{ij} = \frac{\binom{k-1}{j-1} (-1)^{j-1}}{(-1)^{k-1} (k-1)!} (-w_i) \quad \text{für} \quad i, j = 1(1)\,k\,, \tag{3.8}$$

wobei T_{ij} die j-te Komponente des Vektors T_i bezeichne. Aus (3.5) ergibt sich damit für die Matrix $C^w = (c_{ij}^w)$

$$c_{ij}^w = \frac{(-1)^{j-k+1}}{j!\,(k-j)!} w_i \quad \text{für} \quad i, j = 1(1)\,k\,, \tag{3.9}$$

d. h. damit ist nach den Vorüberlegungen die Matrix C und der Vektor d explizit berechenbar.

Satz. *Gegeben sei zu einer festen Blocklänge k ein beliebiges Polynom $Q(H)$ k-ten Grades mit den Koeffizienten a_i, $i = 0(1)\,k$, und $a_0 = 1$.*

Dann sind die nach Satz 5 eindeutig zugeordnete Matrix C und der zugehörige Vektor d explizit berechenbar; konkret: Mit der in (3.1) gegebenen Zerlegung der Matrix C läßt sich aus (2.8) und (3.9) die Matrix C berechnen, aus (2.3) der Vektor d. Dabei ist $w = (w_1, w_2, \ldots, w_k)$ der durch (2.5) explizit berechenbare Vektor.

Literatur

[1] *G. G. Dahlquist:* A special stability problem for linear multistep methods. BIT 3, (1963), 27—43.

[2] *M. Práger, J. Taufer, E. Vitásek:* Overimplicit methods for the solution of evolution problems. Acta Universitatis Carolinae — Mathematica et Physica 1—2, (1974), 125—133.

[3] *M. Práger, J. Taufer, E. Vitásek:* Overimplicit multistep methods. Apl. Mat. 18, (1973), 399—421.

[4] *H. A. Watts:* A-stable block implicit one-step methods. Sandia Laboratories, Albuquerque, Applied Mathematics (1971).

[5] *H. A. Watts, L. F. Shampine:* A-stable block implicit one-step methods. BIT 12, (1972), 252—266.

[6] *R. Vanselow:* Stabilitäts- und Fehleruntersuchungen bei numerischen Verfahren zur Lösung steifer nichtlinearer Anfangswertprobleme. Diplomarbeit, TU Dresden (1978/79).

Souhrn

EXPLICITNÍ KONSTRUKCE LINEÁRNÍCH SILNĚ IMPLICITNÍCH MNOHOKROKOVÝCH METOD

REINER VANSELOW

Článek uvádí postup explicitní konstrukce lineárních silně implicitních mnohokrokových metod pro numerické řešení úloh s počáteční podmínkou. Tímto je možné vypočítat k danému polynomu stability koeficienty příslušné silně implicitní metody bez řešení lineární soustavy rovnic.

Anschrift des Verfassers: Dipl.-Mat. *Reiner Vanselow*, Sektion Mathematik der Technischen Universität, Mommsenstrasse 13, 8027 Dresden, DDR.