

## Einleitung

Die mathematische Modellierung zahlreicher Zusammenhänge aus Naturwissenschaft und Technik führt oftmals auf spezielle Klassen zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen. Daher ist die Untersuchung ihrer analytischen Lösung und ihrer numerischen Behandlung ein wichtiger Bestandteil der Mathematik. Eine numerische Simulation ist ein nützliches Hilfsmittel für den Naturwissenschaftler und Ingenieur, wenn das numerische Verfahren sicher und effizient arbeitet und die Modellierung möglichst realitätsnah ist. Die zunehmende Komplexität von Modellierungen erfordert sowohl die Entwicklung effektiver und zuverlässiger numerischer Integrationsverfahren für spezielle Klassen partieller Differentialgleichungssysteme als auch die Einbeziehung neuer Probleme in die Betrachtungen.

Die vorliegende Arbeit unterteilt sich in zwei Schwerpunkte, in denen sich mit der numerischen Behandlung jeweils einer speziellen Klasse von *Anfangs-Randwertproblemen* (ARWP) partieller Differentialgleichungen beschäftigt wird. Beiden Klassen gemein ist, daß zeitlich veränderliche Prozesse in einem räumlichen Gebiet betrachtet werden. Solch ein Prozeß ist auch wesentlich von dem momentanen Zustand des betrachteten Gebietes zum Beginn des Prozesses und den möglichen Einflüssen des das Gebiet umgebenden Mediums bestimmt. Dies wird durch die Formulierung von Anfangs- und geeigneten Randbedingungen berücksichtigt.

Im ersten Kapitel werden einige mathematische Grundlagen vorbereitet, die in Kapitel 2 und 3 verwendet werden. Es wird das Prinzip der *Linienmethode* zur numerischen Behandlung von zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen vorgestellt und anschließend die vertikale Linienmethode näher erläutert. Hierbei wird auf eine Ortsdiskretisierung mittels finiter Differenzen, die Zeitintegration des semidiskreten Problems mit Einschrittverfahren und die Konvergenz der Gesamtdiskretisierung eingegangen. Weiterhin werden einige Grundlagen und Begriffe der Theorie *linearer differentiell-algebraischer Gleichungen* mit konstanten Koeffizientenmatrizen zusammengestellt.

In Kapitel 2 wird eine Klasse *linear-impliziter Splitting-Methoden* zur numerischen Lösung *räumlich mehrdimensionaler parabolischer Anfangs-Randwertprobleme* entwickelt. Diese erweisen sich für zahlreiche solcher Probleme als sehr effektiv. Hierzu gehören skalare parabolische Differentialgleichungen der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \sum_{i=1}^d \left[ a_i(t, x, u) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}(t, x) + b_i(t, x, u) \frac{\partial u}{\partial x_i}(t, x) \right] + g(t, x, u) \quad (1)$$

mit  $x = (x_1, \dots, x_d) \in \Omega = (0, 1)^d \subset \mathbb{R}^d$ ,  $t \in \mathcal{J} = (0, t_e)$ ,  $0 < t_e < \infty$ . Es sei  $\tilde{\mathcal{J}} = [0, t_e]$  und  $u : \tilde{\mathcal{J}} \times [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$ . Die Funktionen  $a_i, b_i, g : \tilde{\mathcal{J}} \times [0, 1]^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  seien hinreichend glatt. Es gelte  $a_i > 0$ , und die  $b_i$  seien von moderater Größe gegenüber den  $a_i$ . Für die Funktion  $g$  gelte  $\frac{\partial g}{\partial u} \leq 0$ . Unter diesen Voraussetzungen ist (1) eine parabolische Differentialgleichung (siehe z.B. [Mei90]). Weiterhin seien Anfangs- und geeignete Randbedingungen vorgeschrieben. Anstelle des Intervalls  $[0, 1]$  für jede Ortskoordinate kann man auch Intervalle  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  wählen, da man das gestellte Problem durch geeignete Koordinatentransformationen stets auf das Intervall  $[0, 1]$  überführen kann. Unter einer Lösung (im klassischen Sinne) der betrachteten Differentialgleichung verstehen wir eine stetige Funktion  $u$  mit mindestens einer stetigen Ableitung nach der Variablen  $t$  und zwei stetigen Ableitungen nach den Variablen  $x_i$  auf  $\tilde{\mathcal{J}} \times [0, 1]^d$  ( $i = 1(1)d$ ), die die Differentialgleichung und die gegebenen Anfangs- und Randbedingungen erfüllt.

Die betrachtete Problemklasse (1) kann z.B. auch auf Systeme parabolischer Differentialgleichungen erweitert werden. Hierbei wird allerdings nur eine Kopplung im Quellterm zugelassen, d.h., wir betrachten ein semilineares System der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = D \Delta u(t, x) + g(t, x, u) \quad (2)$$

mit  $x = (x_1, \dots, x_d) \in \Omega$ ,  $t \in \mathcal{J}$ ,  $u : \tilde{\mathcal{J}} \times [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}^n$ . Es sei  $D = \text{diag}(\delta_1(t, x), \dots, \delta_n(t, x)) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine Diagonalmatrix,  $\delta_i > 0$  stetig mit stetigen partiellen Ableitungen erster Ordnung. Weiterhin seien Anfangs- und geeignete Randbedingungen vorgeschrieben.

Zur numerischen Behandlung von (1) bzw. (2) wird die vertikale Linienmethode verfolgt, wobei die partiellen Ableitungen bez. der Ortsvariablen mittels finiter Differenzen approximiert werden. Die numerische Lösung des erhaltenen gewöhnlichen Differentialgleichungssystems, des semidiskreten Problems, ist Gegenstand des zweiten Kapitels. Dieses semidiskrete System ist in Abhängigkeit von der Zahl der Ortsvariablen und der Feinheit des Ortsgitters sehr groß und steif, besitzt aber eine spezielle Struktur. *Splitting-Methoden* sind Integrationsmethoden, die diese Struktur ausnutzen und dadurch den Rechenaufwand gegenüber anderen Integrationsmethoden erheblich reduzieren. Es wird zunächst ein Überblick über

einige bekannte Splitting-Methoden gegeben und auf die Stabilität von linearen Operator-Splitting-Methoden eingegangen. Hierfür werden geeignete Stabilitätsbegriffe definiert. Anschließend wird eine neue Klasse von linear-impliziten Splitting-Methoden eingeführt und hinsichtlich ihrer Konsistenz- und Stabilitätseigenschaften untersucht. Es zeigt sich, daß diese linear-impliziten Splitting-Methoden gute Stabilitätseigenschaften mit guter Implementierbarkeit verbinden. Es werden spezielle Verfahren angegeben und ihre Effektivität anhand von Beispielen illustriert.

Die Betrachtungen in Kapitel 3 wenden sich einer speziellen Klasse von Systemen partieller Differentialgleichungen zu, die bei der Modellierung komplexer Anwendungsprobleme in zunehmenden Maße auftreten und deren analytische und numerische Lösung daher in den letzten Jahren wachsendes Interesse gefunden hat. Diese partiellen Differentialgleichungssysteme bestehen aus einer Kopplung von Gleichungen unterschiedlichen Typs. Es werden (zeitabhängige) partielle Differentialgleichungen (engl.: *PDEs, partial differential equations*) z.B. mit differentiell-algebraischen Gleichungen (engl.: *DAEs, differential algebraic equations*) oder gewöhnlichen Differentialgleichungen (engl.: *ODEs, ordinary differential equations*) oder algebraischen Gleichungen gekoppelt. Derartige Systeme werden daher auch als partielle differentiell-algebraische Gleichungen (engl.: *PDAEs, partial differential algebraic equations*) bezeichnet. Ziel des dritten Kapitels der vorliegenden Arbeit ist es, eine Charakterisierung der Eigenschaften linearer PDAEs der Form

$$A \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + B \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) + C u(t, x) = g(t, x), \quad (t, x) \in \mathfrak{I} \times \Omega \quad (3)$$

mit  $A, B, C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $\Omega = (-l, l)$  ( $0 < l < \infty$ ),  $\bar{\Omega} = [-l, l]$  und  $u, g : \bar{\mathfrak{I}} \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^n$  zu geben. Mindestens eine der beiden Matrizen  $A, B$  sei dabei singulär. Für eine eindeutige Lösbarkeit muß (3) durch Anfangs- und geeignete Randbedingungen ergänzt werden. In dem Kapitel wird ausgeführt, daß im Gegensatz zu PDEs mit regulären Matrizen  $A, B$  (z.B. parabolische Differentialgleichungssysteme) bei singulärem  $A$  und/oder  $B$  nicht für alle Komponenten von  $u$  Anfangs- und/oder Randbedingungen vorgegeben werden können. Sie müssen gewissen zusätzlichen Bedingungen genügen. Die lineare PDAE (3) wird der Laplace- und einer endlichen Fouriertransformation unterzogen. Durch die beiden Transformationen wird (3) auf parameterabhängige DAEs überführt. Auf dieser Grundlage werden in Analogie zur Theorie der DAEs ein differentieller Ortsindex und ein einheitlicher differentieller Zeitindex für lineare PDAEs eingeführt. Diese charakterisieren spezielle Eigenschaften der betrachteten Problemklasse sowohl bez. der analytischen Lösung als auch der numerischen Behandlung. Anhand von Beispielen werden ferner die Schwierigkeiten aufgezeigt, die mit einem 'nichteinheitlichen' Zeitindex einer linearen PDAE verbunden sind. Die

beiden eingeführten Indexe werden dann bei der numerischen Behandlung linearer PDAEs verwendet, um Konvergenzaussagen zu treffen. Hierzu wird wieder die Liniemethode benutzt, wobei partielle Ortsableitungen durch finite Differenzenapproximationen ersetzt werden. Für die Zeitintegration des semidiskreten Problems wird das implizite Euler-Verfahren bzw. die Trapezregel verwendet. Es wird der Gesamtdiskretisierungsfehler des hieraus bei äquidistanter Orts- und Zeitschrittweite resultierenden BTCS Schemas bzw. Crank-Nicolson Verfahrens untersucht. Unter gewissen Voraussetzungen werden Konvergenzaussagen in Abhängigkeit der beiden Indexe getroffen. Für schwach gekoppelte lineare PDAEs können diese Aussagen unter schwächeren bzw. einfacher zu überprüfenden Voraussetzungen gefunden werden. Einige numerische Testrechnungen illustrieren die Ergebnisse und die Besonderheiten linearer PDAEs bei der numerischen Behandlung.

Die einzelnen Kapitel dieser Arbeit unterteilen sich in Abschnitte, Unterabschnitte und Paragraphen. Die Nummerierung für Strukturen wie Definitionen, Sätze, Lemmata, Beispiele usw. bestehen aus 3 Ziffern: der Kapitel- und der Abschnittsnummer sowie einer innerhalb eines Abschnitts über alle diese Strukturen fortlaufenden Nummer. Die Formelnummern setzen sich ebenfalls aus der Kapitel-, der Abschnitts- und einer im Abschnitt fortlaufenden Nummer zusammen. Am Ende der Arbeit ist ein Literaturverzeichnis und eine Übersicht über häufig verwendete Abkürzungen und Bezeichnungen zu finden.

Einige Ergebnisse dieser Arbeit wurden in [EL98a] und [Luc99] veröffentlicht.