

Linear-implizite Splitting-Methoden für räumlich mehrdimensionale parabolische Differentialgleichungen

2.1. Einführung

In diesem Kapitel werden wir eine Klasse von Verfahren herleiten, die zur numerischen Lösung räumlich mehrdimensionaler parabolischer Anfangs-Randwertprobleme geeignet sind, wenn der Ortsraum ein Parallelepipid ist (vgl. (1) und (2)). Wir bezeichnen diese Verfahren als *linear-implizite Splitting-Methoden*. D.h., wir ordnen sie der Klasse der Splitting-Methoden zu. Die Bezeichnung *Splitting-Methoden* findet man in der mathematischen Literatur in unterschiedlichen Zusammenhängen. Allen gemein ist das Ziel, durch geeignetes Aufsplitten komplexer Aufgabenstellungen mehrere einfacher zu lösende Probleme zu erhalten.

Ein Überblick zu *Splitting-Methoden zur numerischen Lösung von Anfangs- oder Anfangs-Randwertproblemen von Differentialgleichungen* wird im folgenden Abschnitt gegeben. Anschließend werden wir auf die Stabilität von Splitting-Methoden eingehen und verschiedene Stabilitätsbegriffe einführen. Ausgehend von diesen Stabilitätsbetrachtungen werden in Abschnitt 2.4 linear-implizite Splitting-Methoden definiert und anschließend deren Eigenschaften untersucht. In Abschnitt 2.6 werden die eingeführten Methoden anhand von Beispielen numerisch getestet.

2.2. Überblick über Splitting-Methoden

Seit vielen Jahren haben sich Splitting-Methoden für die numerische Lösung von zeitabhängigen, mehrdimensionalen partiellen Differentialgleichungen bewährt ([Hou79],[Mar90],[Mit80]). Eine typische Vorgehensweise beim Splitten ist zum Beispiel, ein räumlich mehrdimensionales Problem derart zu zerlegen, daß man nur eine Folge von eindimensionalen Berechnungen durchzuführen hat. Dies führte zur Entwicklung einer großen Anzahl von Splitting-Methoden (*splitting methods*), die in der Literatur auch als Teilschrittverfahren (*fractional step methods*) bezeichnet werden. Die bekanntesten sind die sogenannten alternierenden Richtungsverfahren (*alternating direction implicit methods*, *ADI methods*), die lokal eindimensionalen Methoden (*locally one-dimensional methods*, *LOD methods*) und die Hopscotch-Typ Methoden (*hopscotch methods*).

Zur numerischen Behandlung des Anfangs-Randwertproblems partieller Differentialgleichungen wird der bereits in Kapitel 1.1 erläuterten Linienmethode gefolgt. (*Lineare*) *Splitting-Methoden* sind Integrationsmethoden, die die Eigenschaft ausnutzen, daß die rechte Seite $f = f(t, w)$ des semidiskreten gewöhnlichen Differentialgleichungssystems

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt}(t) &= f(t, w(t)), & f : [0, t_e] \times \mathbb{R}^r &\longrightarrow \mathbb{R}^r, \\ w(0) &= w_0 \in \mathbb{R}^r, & t &\in [0, t_e], \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

einer *linearen Splitting-Relation*

$$f(t, w) = \sum_{i=1}^k f_i(t, w), \quad f_i : [0, t_e] \times \mathbb{R}^r \longrightarrow \mathbb{R}^r \quad (2.2.2)$$

genügt. Die Funktionen f_i nennt man *Splitting-Funktionen*. Die Funktionen f und f_i hängen von der originalen partiellen Differentialgleichung und dem Typ der Semidiskretisierung ab. Hierbei haben die Splitting-Funktionen f_i i.allg. eine Jacobi-Matrix mit einfacher Struktur oder anderen besonderen Eigenschaften (vgl. Abschnitt 2.2.2 und 2.2.3).

Lineare Splitting-Methoden unterscheiden sich durch die unterschiedliche Wahl der *Splitting-Funktionen* f_i und deren Verwendung in den Verfahrensvorschriften zur Zeitintegration, den sogenannten *Splitting-Formeln*.

Bei der Formulierung der verschiedenen Splitting-Methoden betrachten wir zunächst Splitting-Formeln und gehen später auch auf die spezielle Wahl von Splitting-Funktionen ein.

2.2.1. Lineare Splitting-Formeln

In diesem Abschnitt werden wir einige bekannte lineare Splitting-Formeln und ihre Eigenschaften vorstellen. In [Hou79] wurden autonome Probleme (2.2.1) betrachtet und eine allgemeine Klasse linearer Splitting-Formeln eingeführt. Für die numerische Integration von nichtautonomen Problemen ist das Analogon durch folgende Definition gegeben.

DEFINITION 2.2.1. *Eine s-stufige Einschrittintegrationsformel der Form*

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(0)} &= v_m \\ v_{m+1}^{(j)} &= v_m + \tau_m \sum_{l=0}^j \sum_{i=1}^k \lambda_{jli} f_i(t_m + c_l \tau_m, v_{m+1}^{(l)}), \quad j = 1(1)s, \\ v_{m+1} &= v_{m+1}^{(s)} \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

ist eine lineare Splitting-Formel, wobei v_m die numerische Approximation der Lösung von (2.2.1) zum Zeitpunkt $t = t_m$ ist und $\tau_m = t_{m+1} - t_m$ die Zeitschrittweite bezeichnet. Die Parameter λ_{jli} , c_l sind geeignet gewählte reelle Zahlen, die die Integrationsformel vollständig festlegen.

Abhängig von diesen Parametern erhält man unterschiedliche (klassische) Konsistenz- und Stabilitätseigenschaften. Zweckmäßig ist es, die Parameter zur Ausnutzung der Splitting-Relation zu verwenden, um ein für die numerische Behandlung geeignetes und effektives Verfahren zu erhalten.

BEMERKUNG 2.2.2.

- Eine Stufe der Splitting-Formel, die implizit ist, soll dies nur bezüglich einer der Splitting-Funktionen sein, damit die aufzulösenden impliziten Beziehungen auf die Lösung von skalaren Gleichungen oder von Gleichungssystemen mit tridiagonaler Koeffizientenmatrix führen. D.h., wenn $\lambda_{jil} \neq 0$ für $l \in \{1, \dots, k\}$ gilt, dann soll $\lambda_{jji} = 0$ für alle $i \neq l$ gelten.
- Für $\lambda_{jji} = 0$, $i = 1(1)k$, ist das Schema (2.2.3) explizit. Dieser Fall tritt aber in der Theorie der Splitting-Methoden selten auf.
- Für $k = 1$ liegt kein Splitting vor, und das Schema (2.2.3) geht über in ein s-stufiges diagonal-implizites Runge-Kutta-Verfahren ([Dek84]). \square

In [Lie94] (für autonome Formeln in [Hou79]) findet man folgendes Lemma:

LEMMA 2.2.3. *Die lineare Splitting-Formel (2.2.3) ist von 2. Ordnung konsistent mit dem gewöhnlichen System (2.2.1), wenn die λ_{jli} die folgenden Bedingungen erfüllen:*

$$\sum_{l=0}^s \lambda_{sli} = 1 \quad \forall i = 1(1)k, \quad (2.2.4)$$

$$\sum_{l=1}^s \lambda_{sli} c_l = \frac{1}{2} \quad \forall i = 1(1)k, \quad (2.2.5)$$

$$\sum_{l=1}^s \sum_{\nu=0}^l \lambda_{sli} \lambda_{l\nu\mu} = \frac{1}{2} \quad \forall i, \mu = 1(1)k. \quad (2.2.6)$$

Ist zusätzlich die Knotenbedingung

$$\sum_{l=0}^j \lambda_{jli} = c_j \quad \forall j = 1(1)s, \forall i = 1(1)k \quad (2.2.7)$$

erfüllt, so sind die Stufenwerte $v_{m+1}^{(j)}$ konsistente Approximationen 1. Ordnung an $w(t_m + c_j \tau_m)$.

In den folgenden beiden Abschnitten werden spezielle Splitting-Methoden angegeben. Wir werden verdeutlichen, wie die geeignete Wahl der Splitting-Funktionen zu numerisch effektiven Verfahren führt, und unterscheiden dabei *Operator-* und *Gebiets-Splitting*.

2.2.2. Operator-Splitting-Methoden

Operator-Splitting-Methoden sind dadurch gekennzeichnet, daß eine Splitting-Funktion $f_i(t, w)$, $i = 1(1)k$, einem semidiskretisierten Operator G_i der betrachteten partiellen Differentialgleichung

$$u_t = G[u] = \sum_{i=1}^k G_i[u]$$

zugeordnet werden kann. Hierbei ist G_i ein Operator, der von t, x, u und Ortsableitungen von u abhängen kann. Für die numerische Integration von (2.2.1) können dann spezielle Eigenschaften der f_i , w.z.B. tridiagonale Jacobi-Matrizen oder steife und nichtsteife Anteile, berücksichtigt werden. Die am häufigsten verwendeten und auch von uns ausschließlich betrachteten Operator-Splitting-Methoden beruhen auf der Zuordnung je einer Raumdimension zu einem f_i .

Wir wollen unseren Betrachtungen parabolische Differentialgleichungen zugrunde legen, die sich durch

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \sum_{i=1}^d G_i \left(t, x_1, \dots, x_d, u, \frac{\partial u}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \right), \quad (2.2.8)$$

mit Operatoren G_i , $t \in [0, t_e]$ und $x = (x_1, \dots, x_d) \in \Omega := (0, 1)^d \subset \mathbb{R}^d$ darstellen lassen. Die Kopplung der Ortsableitungen in den Operatoren G_i sei linear, w.z.B. in den partiellen Differentialgleichungen der Form (1) oder (2). Weiterhin seien Anfangs- und homogene Dirichlet-Randbedingungen

$$u(0, x_1, \dots, x_d) = u_0(x_1, \dots, x_d) \quad \forall x = (x_1, \dots, x_d) \in \Omega, \quad (2.2.9)$$

$$u(t, x_1, \dots, x_d) = 0 \quad \forall t \in [0, t_e], \forall x = (x_1, \dots, x_d) \in \partial\Omega \quad (2.2.10)$$

vorgeschrieben, die untereinander einer Verträglichkeitsbedingung genügen, d.h. $u_0(x_1, \dots, x_d) = 0 \quad \forall x = (x_1, \dots, x_d) \in \partial\Omega$.

Wir erhalten nach der Semidiskretisierung bez. der Ortsvariablen mittels finiter Differenzen ein Anfangswertproblem der Form (2.2.1), (2.2.2) mit $k = r$, d.h.

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dt}(t) &= f(t, w(t)) := \sum_{i=1}^d f_i(t, w(t)), \\ w(0) &= w_0 \in \mathbb{R}^r, \quad t \in [0, t_e], \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

$f, f_i : [0, t_e] \times \mathbb{R}^r \longrightarrow \mathbb{R}^r$, wobei f_i dem semidiskretisierten Operator G_i ($i = 1(1)d$) entspreche und r proportional zur Zahl der inneren Ortsgitterpunkte ist (für äquidistante Ortsgitter mit M inneren Punkten je Dimension ist $r = nM^d$).

Da das semidiskrete Problem (2.2.11) i.allg. ein steifes System ist, ist die Verwendung von impliziten Methoden zur numerischen Integration zweckmäßig. Bei Verwendung von impliziten ODE-Solvern, bei denen zur Lösung der impliziten Beziehungen die volle Jacobi-Matrix $\frac{\partial f}{\partial w}$ verwendet wird, ist der Rechenaufwand je nach Feinheit der Ortsdiskretisierung sehr hoch. Daher sollte man die spezielle Struktur von (2.2.11) ausnutzen, weil die Jacobi-Matrizen $\frac{\partial f_i}{\partial w}$, $i = 1(1)d$, der Funktionen f_i bei geeigneter Ortsdiskretisierung stets auf tridiagonale Gestalt transformiert werden können.

BEMERKUNG 2.2.4. Neben den Splitting-Methoden gibt es implizite Integrationsmethoden zur Lösung von semidiskreten ODEs der Form (2.2.1), bei denen zur Lösung der auftretenden Gleichungssysteme in ähnlicher Weise die spezielle Struktur der rechten Seite f ausgenutzt wird (z.B. Verfahren, bei der die auftretenden Gleichungssysteme durch geeignete Faktorisierungen [Hou97], [EL98b] gelöst werden). \square

Die Ausnutzung der Splitting-Relation (2.2.2) durch Splitting-Formeln und der damit verbundenen Reduzierung des Rechenaufwandes wollen wir zunächst anhand des zweidimensionalen Falls ($d = 2$) erläutern. Wir betrachten nun

$$u_t(t, x, y) = G_1(t, x, y, u, u_x, u_{xx}) + G_2(t, x, y, u, u_y, u_{yy}). \quad (2.2.12)$$

Dies entspricht Gleichung (2.2.8) mit $x = x_1, y = x_2$. Mit der 2-stufigen linearen Splitting-Formel

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(1)} &= v_m + \tau_m \left[\left(\lambda - \frac{1}{2} \right) f_1(t_m, v_m) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} f_1(t_m + \lambda\tau_m, v_{m+1}^{(1)}) + \lambda f_2(t_m, v_m) \right] \\ v_{m+1} &= v_m + \tau_m \left[\left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda} \right) f_1(t_m, v_m) + \frac{1}{2\lambda} f_1(t_m + \lambda\tau_m, v_{m+1}^{(1)}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} f_2(t_m, v_m) + \frac{1}{2} f_2(t_m + \tau_m, v_{m+1}) \right], \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

die bereits von zweiter Ordnung konsistent ist (vgl. Lemma 2.2.3), lassen sich durch Wahl des freien Parameters $\lambda > 0$ und durch die Spezifizierung der Splitting-Funktionen f_i verschiedene bekannte Splitting-Verfahren generieren.

Nach Einsetzen von $\lambda = \frac{1}{2}$ in (2.2.13) erhalten wir die bekannte *alternating direction implicit* (ADI)-Methode von Peaceman-Rachford ([Pea55],[Hou79],[Hun89]):

DEFINITION 2.2.5 (Peaceman-Rachford-Verfahren). *Bei Verwendung von Splitting-Funktionen f_1 und f_2 , die den semidiskretisierten Operatoren G_1 und G_2 in (2.2.8) entsprechen, erhält man mit der lineare Splitting-Formel*

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(1)} &= v_m + \frac{1}{2}\tau_m \left(f_1\left(t_m + \frac{\tau_m}{2}, v_{m+1}^{(1)}\right) + f_2(t_m, v_m) \right), \\ v_{m+1} &= v_{m+1}^{(1)} + \frac{1}{2}\tau_m \left(f_1\left(t_m + \frac{\tau_m}{2}, v_{m+1}^{(1)}\right) + f_2(t_{m+1}, v_{m+1}) \right). \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

das Peaceman-Rachford-Verfahren.

Die Näherung $v_{m+1}^{(1)}$ ist eine von 1.Ordnung konsistente Approximation der Lösung zum Zeitpunkt $t = t_m + \frac{1}{2}\tau_m$.

BEMERKUNG 2.2.6. Das Peaceman-Rachford-Verfahren ist das historisch älteste Verfahren vom ADI-Typ. Wählen wir $\lambda = 1$ in (2.2.13) so erhalten wir das ADI-Verfahren von Douglas und Rachford [Dou56],[Hou79]. \square

Wegen der speziellen Struktur der G_i und der Semidiskretisierung mittels finiter Differenzen 2.Ordnung (vgl. Abschnitt 1.1.1) nennt man $f = f_1 + f_2$ auch *5-Punkte-gekoppelt*. Bei der Semidiskretisierung wurde auf Ω ein Punktgitter gelegt. Jede Komponente von w und f ist daher mit einem inneren Gitterpunkt assoziiert. Sei die i -te Komponente von $f(t, w)$ dem Gitterpunkt X zugeordnet. Dann ist diese Komponente nur abhängig von t und von den Komponenten von w , die X und den nächsten auf den Gitterlinien liegenden Nachbarn von X zugeordnet sind. D.h., jede Komponente von $f(t, w)$ ist abhängig von einem *5-Punkte-Differenzenstern* (siehe Abbildung 2.1). Da im Operator G_1 die partiellen Ableitungen nach y bzw.

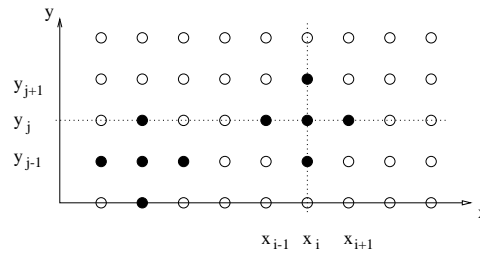


ABBILDUNG 2.1. 5-Punkte-Differenzenstern

in G_2 die nach x fehlen, sind die f_i als Semidiskretisierungen der Operatoren G_i jeweils 3-Punkte-gekoppelt. Dies bedeutet, daß sich die Jacobi-Matrizen der f_i stets durch Permutation auf tridiagonale Gestalt überführen lassen. Bei Verwendung von tridiagonalen Jacobi-Matrizen wiederum verringert sich der Rechenaufwand für implizite Integrationsmethoden wesentlich. Hieraus resultiert der Vorteil der Splitting-Methoden gegenüber anderen numerischen Verfahren.

Das Peaceman-Rachford-Verfahren ist bekanntlich nur für *Zweiterm-Splitting-Funktionen* ($d = 2$) geeignet (siehe [Mit80]). Die für *Multiterm-Splitting-Funktionen* ($d \geq 2$) geeignete *Methode von Douglas* [Dou62],[Hun98a], die auch als Methode der stabilisierenden Korrekturen [Mar90] (*method of stabilizing corrections*) bezeichnet wird, ist durch

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(0)} &= v_m + \tau_m f(t_m, v_m), \\ v_{m+1}^{(j)} &= v_{m+1}^{(j-1)} + \frac{1}{2}\tau_m \left(f_j(t_{m+1}, v_{m+1}^{(j)}) - f_j(t_m, v_m) \right), \quad j = 1(1)d, \\ v_{m+1} &= v_{m+1}^{(d)} \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

gegeben. Diese Methode besitzt die klassische Konsistenzordnung 2 und hat gegenüber anderen Splitting-Methoden den Vorteil, daß alle Stufenwerte $v_{m+1}^{(j)}$ konsistente Approximationen an die exakte Lösung zum Zeitpunkt t_{m+1} sind.

Wir wollen nun zwei lokal eindimensionalen Methoden vorstellen. Die von Yansenko [Yan71] entwickelte und sogenannte *lokal eindimensionale Methode von Yansenko* zur Lösung von (2.2.8) ist durch folgende r -stufige lineare Splitting-Formel gegeben:

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(0)} &= v_m, \\ v_{m+1}^{(j)} &= v_{m+1}^{(j-1)} + \tau_m \left[(1 - \alpha) f_j(t_m + c_{j-1}\tau_m, v_{m+1}^{(j-1)}) \right. \\ &\quad \left. + \alpha f_j(t_m + c_j\tau_m, v_{m+1}^{(j)}) \right], \quad j = 1(1)d, \\ v_{m+1} &= v_{m+1}^{(d)}, \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

wobei α ein noch freier Parameter ist. Für beliebige α ist die Formel von erster Ordnung konsistent mit (2.2.11). Die Methode wird lokal eindimensional genannt, da in der j -ten Stufe nur der semidiskretisierte eindimensionale Operator G_j benutzt wird. In Anwendungen ist der freie Parameter α im allgemeinen gleich $\frac{1}{2}$ oder 1. Erneut besitzen die zu lösenden Gleichungssysteme in jeder Stufe tridiagonale Jacobi-Matrizen.

Die von zweiter Ordnung konsistente *Trapez-Splitting-Methode* TRAPSP (trapezoidal splitting method) ist durch folgendes Schema gegeben ([Mat86],[Hun98b]):

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(0)} &= v_m, \\ v_{m+1}^{(i)} &= v_{m+1}^{(i-1)} + \frac{1}{2}\tau_m f_i(t_m, v_{m+1}^{(i-1)}), \quad i = 1(1)d, \\ v_{m+1}^{(d+j)} &= v_{m+1}^{(d+j-1)} + \frac{1}{2}\tau_m f_{d-j+1}(t_{m+1}, v_{m+1}^{(d+j)}), \quad j = 1(1)d, \\ v_{m+1} &= v_{m+1}^{(2d)}. \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

Diese Methode kann ebenfalls für beliebige $r \geq 1$ angewandt werden.

2.2.3. Gebiets-Splitting-Methoden

Zur Vervollständigung des hier gegebenen Überblicks über Splitting-Methoden wird jetzt das Prinzip von Gebiets-Splitting-Methoden vorgestellt. Darüberhinaus werden wir uns mit dieser Art von Splitting-Methoden nicht weiter beschäftigen. Gebiets-Splitting-Methoden eignen sich für partielle Differentialgleichungen mit nichtlinearen Kopplungen oder gemischten partiellen Ortsableitungen. Für diese Gleichungen kann man keine Aufteilung (2.2.8) in Operatoren, die einer Raumdimension zugeordnet werden können, vornehmen. Allerdings wird erneut eine Zuordnung einer Komponente von $f(t, w)$ des semidiskreten Problems (2.2.1) zu einem Gitterpunkt getroffen und Splitting-Funktionen $f_i(t, w)$ gebildet. Wir wollen dies an einem Beispiel vorführen.

Die *Odd-Even Hopscotch Methode* ist geeignet für Probleme (2.2.1), die aus der Semidiskretisierung einer räumlich zweidimensionalen ($d = 2$) nichtlinearen parabolischen Differentialgleichung der Form

$$u_t(t, x, y) = G(t, x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{yy}) \quad (2.2.18)$$

mit entsprechenden Anfangs- und Randbedingungen resultieren. Hierbei ist die Kopplung voll nichtlinear. Für die weiteren Betrachtungen werden Vektorfunktionen f_\circ, f_\bullet, f_+ und f_\times eingeführt, so daß

$$f(t, w) = f_\circ(t, w) + f_\bullet(t, w) + f_+(t, w) + f_\times(t, w) . \quad (2.2.19)$$

Zur Definition dieser Vektorfunktionen teilt man die Gitterpunktmenge \mathfrak{J}_Ω in 4 disjunkte Teilmengen $\mathfrak{J}_{\Omega_\circ}, \mathfrak{J}_{\Omega_\bullet}, \mathfrak{J}_{\Omega_+}$ und $\mathfrak{J}_{\Omega_\times}$, wie in Figur 2.2 durch die entsprechenden Symbole angedeutet. Sei $\wedge \in \{\circ, \bullet, +, \times\}$ und bezeichne $f_\wedge^{[i]}(t, w)$ die i -te Kompo-

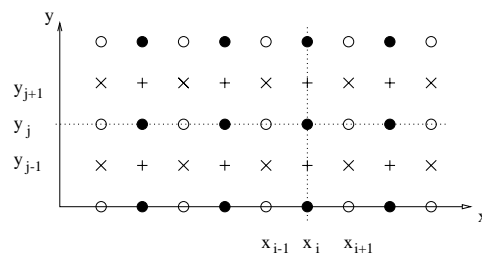


ABBILDUNG 2.2. Vier Gitterpunktgruppen

nente von $f_\wedge(t, w)$, dann werden die Funktionen $f_\wedge(t, w)$ definiert durch

$$f_\wedge^{[i]}(t, w) = \begin{cases} f^{[i]}(t, w) , & \text{wenn der zugeordnete Gitterpunkt} \in \mathfrak{J}_{\Omega_\wedge} \\ 0 & , \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.2.20)$$

Als Splitting-Funktionen f_1 und f_2 wählen wir nun

$$\begin{aligned} f_1(t, w) &= f_o(t, w) + f_+(t, w) , \\ f_2(t, w) &= f_\bullet(t, w) + f_\times(t, w) . \end{aligned}$$

Nach Einsetzen dieser Funktionen in (2.2.13) mit $\lambda = \frac{1}{2}$ erhalten wir die *Odd-Even Hopscotch Methode*.

Wir berechnen zuerst die Komponenten von $v_{m+1}^{(1)}$, die den Gitterpunkten $\in \mathfrak{J}_{\Omega_\bullet} \cup \mathfrak{J}_{\Omega_\times}$ zugeordnet sind, und anschließend die für die Punkte $\in \mathfrak{J}_{\Omega_o} \cup \mathfrak{J}_{\Omega_+}$. Dabei sind nur skalare Gleichungen zu lösen. Ebenso geht man mit vertauschter Reihenfolge bei der Berechnung von v_{m+1} vor.

In unseren folgenden Betrachtungen werden wir uns, wenn wir von Splitting-Methoden sprechen, auf Operator-Splitting-Methoden beziehen, wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben.

2.3. Lineare Stabilität von Operator-Splitting-Methoden

In Analogie zur Stabilitätsuntersuchung für gewöhnliche Differentialgleichungen ([Dah59], [Cro79], [Dor93], [Hai96] u.a.; siehe auch [Dah85]) legen wir unseren Betrachtungen Probleme der Form (2.2.1) zugrunde, wobei die Funktion f einer Klasse von linearen Funktionen angehöre, die wir in diesem Abschnitt einführen werden. Die skalare Stabilitätstestgleichung $w' = \lambda w$, die für die Untersuchung linearer Stabilität von ODE-Solvern i.allg. verwendet wird, ist für die Stabilitätsuntersuchung von Splitting-Methoden nicht ausreichend. Aus der Semidiskretisierung von PDEs erhält man stets ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Daher ist es sinnvoll, als Testproblem lineare Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen der Form

$$w'(t) = f(t, w) = A w(t) = \sum_{i=1}^d A_i w(t), \quad w(0) = w_0, \quad (2.3.1)$$

$w \in \mathbb{R}^r$, $A_i \in \mathbb{R}^{r \times r}$, zu betrachten. (Ein solches System erhält man z.B. bei der Semidiskretisierung der d -dimensionalen Wärmeleitungsgleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen.) Das semidiskrete Problem (2.3.1) einer parabolischen Differentialgleichung ist im allgemeinen groß und steif, wenn die Ortsgitterweiten klein sind. Dies kann durch die Voraussetzung $\mu[A_i] \leq 0$ für $i = 1(1)d$ an die Matrizen A_i charakterisiert werden (siehe Beispiel 1.1.14). Für die exakte Lösung von (2.3.1) gilt

$$w(t) = e^{At} w_0 \quad \implies \quad w(t + \tau) = e^{A\tau} w(t).$$

Es gilt $\|e^{A\tau}\| \leq e^{\mu[A]\tau}$ (vgl. [Dek84]). Wegen $\mu[A] \leq \sum_{i=1}^d \mu[A_i] \leq 0$ ist $\|e^{A\tau}\| \leq 1$, woraus

$$\|w(t + \tau)\| \leq \|w(t)\| \quad \forall \tau > 0, \quad (2.3.2)$$

$$\lim_{\tau \mu[A_i] \rightarrow -\infty} w(t + \tau) = 0 \quad \forall i = 1(1)d \quad (2.3.3)$$

folgt.

Wendet man eine lineare Splitting-Formel (2.2.3) auf das Testproblem (2.3.1) an, so erhält man mit $\tau = \tau_m$ die Beziehung

$$v_{m+1} = R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) v_m. \quad (2.3.4)$$

Hierbei heißt die Matrixfunktion R *Stabilitätsmatrix* und die zugeordnete rationale Funktion *Stabilitätsfunktion* der Splitting-Formel. (R entspricht der Stabilitätsfunktion von Standard-Einschrittverfahren für ODEs.) Aus (2.2.3) erhalten wir die folgenden Beziehungen¹

$$\begin{aligned} R^{(0)}(\tau A_1, \dots, \tau A_d) &= I, & I \in \mathbb{R}^{r \times r} \text{ Einheitsmatrix,} \\ R^{(j)}(\tau A_1, \dots, \tau A_d) &= \\ & \left(I - \tau \lambda_{jkk} A_k \right)^{-1} \left(I + \sum_{l=0}^{j-1} \sum_{i=1}^d \tau \lambda_{jli} A_i R^{(l)}(\tau A_1, \dots, \tau A_d) \right), \quad j = 1(1)s, \\ R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) &= R^{(s)}(\tau A_1, \dots, \tau A_d). \end{aligned}$$

Wünschenswert ist es, daß sich die numerischen Lösung von (2.3.1) qualitativ wie die exakte Lösung verhält. Das Analogon von Eigenschaft (2.3.2) für die numerische Lösung ist $\|v_{m+1}\| \leq \|v_m\|$. Daher fordern wir

$$\|R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)\| \leq 1 \quad \forall \tau > 0, \quad (2.3.5)$$

wobei die Matrixnorm der in (2.3.2) verwendeten Vektornorm zugeordnet ist. Das Analogon von (2.3.3) für die numerische Lösung fordert von der Stabilitätsmatrix $R(\cdot)$, daß sie

$$\lim_{\tau \mu[A_i] \rightarrow -\infty} \|R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)\| = 0 \quad \forall i = 1(1)d \quad (2.3.6)$$

erfüllt. Die Beziehungen (2.3.5) und (2.3.6) beschreiben Stabilitätseigenschaften einer Splitting-Formel.

¹Beweis erfolgt durch vollständige Induktion (vgl. [Lie94])

Wir führen nun zwei Klassen linearer Vektorfunktionen ein:

$$\tilde{\mathfrak{A}} := \left\{ f : f(t, w) = \sum_{i=1}^d f_i(t, w) = \sum_{i=1}^d A_i w, w \in \mathbb{R}^r, \right. \\ \left. A_i \in \mathbb{R}^{r \times r} \text{ und } \mu[A_i] \leq 0 \right\}, \quad (2.3.7)$$

$$\tilde{\mathfrak{A}}_C := \left\{ f : f(t, w) = \sum_{i=1}^d f_i(t, w) = \sum_{i=1}^d A_i w, w \in \mathbb{R}^r, \right. \\ \left. A_i \in \mathbb{R}^{r \times r}, \mu[A_i] \leq 0 \text{ und } A_i \text{ vertauschbar}^2 \right\} \subset \tilde{\mathfrak{A}}. \quad (2.3.8)$$

DEFINITION 2.3.1. Eine auf die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}$ bzw. $\tilde{\mathfrak{A}}_C$ angewendete Splitting-Formel heißt \tilde{A} -stabil bzw. \tilde{A}_C -stabil, wenn ihre Stabilitätsmatrix R die Eigenschaft (2.3.5) hat.

DEFINITION 2.3.2. Eine auf die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}$ bzw. $\tilde{\mathfrak{A}}_C$ angewendete Splitting-Formel heißt \tilde{L} -stabil bzw. \tilde{L}_C -stabil, wenn sie \tilde{A} -stabil bzw. \tilde{A}_C -stabil ist und ihre Stabilitätsmatrix R die Eigenschaft (2.3.6) hat.

BEMERKUNG 2.3.3. Die Stabilitätsuntersuchungen für Splitting-Methoden in [Hou79] und [War79] beziehen sich auf die Untersuchung der Eigenschaft (2.3.5), und die dort verwendeten Methoden setzen die Vertauschbarkeit der Matrizen A_i voraus. D.h., es wird die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}_C$ betrachtet. \square

Weiterhin werden wir für unsere Untersuchungen ein Lemma benutzen, das auf einem Ergebnis von J. von Neumann [Neu51] basiert (vgl. [Hai82]).

LEMMA 2.3.4. Sei die Norm $\|\cdot\|$ durch ein Skalarprodukt induziert und sei $A \in \mathbb{R}^{r \times r}$ eine gegebene Matrix mit $\mu[A] \leq \nu$. Sei $R(z)$ eine in $S(\nu) := \{z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) \leq \nu\}$ analytische rationale Funktion. Dann existiert $R(A)$ und in der zugeordneten Matrixnorm gilt $\|R(A)\| \leq \bar{R}(\nu)$, wobei $\bar{R}(\nu) := \sup\{|R(z)| : z \in S(\nu)\}$.

Im folgenden setzen wir voraus:

VORAUSSETZUNG 2.3.5. Die Stabilitätsmatrix $R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)$ kann in Faktoren $R_{(ki)}(\tau A_i)$ zerlegt werden, die jeweils nur von einem der Matrixargumente τA_i abhängen, d.h.

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = \prod_k \prod_{i \in \{1, \dots, d\}} R_{(ki)}(\tau A_i). \quad (2.3.9)$$

²engl: commuting

BEMERKUNG 2.3.6. Stabilitätsuntersuchungen für Verfahren mit Stabilitätsmatrizen, die diese Eigenschaft nicht besitzen, sind für vertauschbare Operatoren u.a. in [Jor94] zu finden. \square

Unter der Voraussetzung 2.3.5 können wir mit Lemma 2.3.4 die Norm der Stabilitätsmatrix (2.3.9) einer lineare Splitting-Formel abschätzen. Wenden wir eine lineare Splitting-Formel auf die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}_C$ an, so erhalten wir mit der Bezeichnung $R_{(i)}(\tau A_i) := \prod_k R_{(ki)}(\tau A_i)$

$$\|R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)\| \leq \prod_{i=1}^d \|R_{(i)}(\tau A_i)\| \leq \prod_{i=1}^d \sup\{|R_{(i)}(z)| : \operatorname{Re}(z) \leq 0\}.$$

\tilde{A}_C -Stabilität ergibt sich hieraus, wenn $|R_{(i)}(z)| \leq 1 \forall z \in \mathbb{C}^-, \forall i = 1(1)d$.

Wir betrachten nun die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}$. In diesem Fall kann es sein, daß die Matrizen A_i nicht vertauschbar sind. Es wird wie folgt abgeschätzt:

$$\begin{aligned} \|R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)\| &\leq \prod_k \prod_{i \in \{1, \dots, d\}} \|R_{(ki)}(\tau A_i)\| \\ &\leq \prod_k \prod_{i \in \{1, \dots, d\}} \sup\{|R_{(ki)}(z)| : \operatorname{Re}(z) \leq 0\}. \end{aligned}$$

Daher können wir i.allg. nur dann \tilde{A} -Stabilität nachweisen, wenn jedes der $|R_{(ki)}(z)|$ durch 1 beschränkt ist für alle $z \in \mathbb{C}^-$.

In den folgenden Beispielen wird für einige Splitting-Formeln die Faktorisierung der Stabilitätsmatrix gemäß Voraussetzung 2.3.5 und die Stabilitätseigenschaft angegeben.

BEISPIEL 2.3.7. Die Stabilitätsmatrix für das Peaceman-Rachford-Verfahren (2.2.14) ist gegeben durch

$$R(\tau A_1, \tau A_2) = \underbrace{(I - \frac{\tau}{2}A_2)^{-1}}_{=:R_{(12)}(\tau A_2)} \underbrace{(I + \frac{\tau}{2}A_1)}_{=:R_{(11)}(\tau A_1)} \underbrace{(I - \frac{\tau}{2}A_1)^{-1}}_{=:R_{(21)}(\tau A_1)} \underbrace{(I + \frac{\tau}{2}A_2)}_{=:R_{(22)}(\tau A_2)}.$$

Obwohl $R(\cdot)$ die Voraussetzung 2.3.5 erfüllt, sind die Faktoren $|R_{(11)}(z)|$ und $|R_{(22)}(z)|$ nicht beschränkt. Wenden wir diese Splitting-Formel allerdings auf die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}_C$, so können wir Faktoren vertauschen und erhalten

$$R(\tau A_1, \tau A_2) = \underbrace{(I - \frac{\tau}{2}A_2)^{-1}(I + \frac{\tau}{2}A_2)}_{=:R_{(2)}(\tau A_2)} \underbrace{(I - \frac{\tau}{2}A_1)^{-1}(I + \frac{\tau}{2}A_1)}_{=:R_{(1)}(\tau A_1)}.$$

Da $|R_{(1)}(z)|, |R_{(2)}(z)| \leq 1 \forall z \in \mathbb{C}^-$ und $|R_{(1)}(-\infty)| = |R_{(2)}(-\infty)| = 1$, ist das Schema (2.2.14) \tilde{A}_C -stabil. \square

BEISPIEL 2.3.8. Für die Stabilitätsmatrix der lokal eindimensionalen Methode von Yanenko (2.2.16) gilt

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = \prod_{i=d}^1 (I - \tau \alpha A_i)^{-1} (I + \tau(1 - \alpha)A_i).$$

Die Norm dieser Matrix kann leicht abgeschätzt werden, und man erhält \tilde{A} -Stabilität für $\alpha \in [\frac{1}{2}, \infty)$ und \tilde{L} -Stabilität für $\alpha = 1$. \square

BEISPIEL 2.3.9. Die Trapez-Splitting-Methode (2.2.17) ist \tilde{A}_C -stabil, weil ihre Stabilitätsmatrix durch

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = \prod_{i=1}^d (I - \frac{\tau}{2} A_i)^{-1} \prod_{i=d}^1 (I + \frac{\tau}{2} A_i)$$

gegeben ist und für vertauschbare Matrizen A_i wie folgt geschrieben werden kann:

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = \prod_{i=1}^d (I - \frac{\tau}{2} A_i)^{-1} (I + \frac{\tau}{2} A_i).$$

\square

BEMERKUNG 2.3.10. Im Gegensatz zu den oben genannten Methoden erfüllt die Stabilitätsmatrix

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = I + \left(\prod_{i=1}^d (I - \frac{\tau}{2} A_i) \right)^{-1} \sum_{i=1}^d \tau A_i$$

der Splitting-Methode von Douglas (2.2.15) die Voraussetzung 2.3.5 nicht. Ausführliche Stabilitätsuntersuchungen für diese Methode sind für vertauschbare Matrizen A_i in [Hun98a] zu finden. Dort wird gezeigt, daß diese Methode \tilde{A}_C -stabil nur für $d \leq 2$ ist und für $d \geq 3$ Stabilität (im Sinne von Gleichung (2.3.5)) nur unter starken Einschränkungen der Schrittweite τ erhalten wird. \square

Zusammenfassend stellen wir fest, daß es Splitting-Methoden zur Lösung von Systemen (2.2.11) gibt (die aus der Semidiskretisierung einer PDE entstanden sind), die entweder von erster Ordnung konsistent und \tilde{L} -stabil oder von Konsistenzordnung zwei, aber nur \tilde{A}_C -stabil sind. In allen diesen Methoden sind voll implizite Gleichungen zu lösen.

2.4. Definition linear-impliziter Splitting Methoden

Ein Ziel dieses Kapitels ist es, Splitting-Formeln zu finden, die von klassischer Konsistenzordnung zwei, \tilde{L} -stabil und bei denen nur lineare Gleichungssysteme mit einfacher Koeffizientenmatrix zu lösen sind. Beispiele von Diskretisierungsmethoden zur Lösung von AWPn gewöhnlicher Differentialgleichungssysteme, bei denen

nur *lineare* Gleichungen gelöst werden müssen, sind die *linear-impliziten Runge-Kutta-Methoden*, w.z.B. die Rosenbrock-Methoden oder die adaptiven Runge-Kutta-Methoden (siehe [Str92]). Diese Methoden haben gute Stabilitätseigenschaften und sind einfach zu implementieren. Sie beziehen eine Approximation an die Jacobi-Matrix direkt in die Verfahrensvorschrift ein, aber sie nutzen nicht die spezielle Splitting-Relation (2.2.2) der rechten Seite aus.

Daher wollen wir eine Klasse von linear-impliziten Splitting-Formeln einführen, die eine ähnliche Struktur wie die *adaptiven Runge-Kutta-Verfahren* haben.

DEFINITION 2.4.1. *Eine 2d-stufige, lokal eindimensionale, linear-implizite Splitting-Formel zur Lösung von (2.2.11) ist durch die folgende Vorschrift gegeben:*

$$\begin{aligned}
v_{m+1}^{(0)} &= v_m, \\
v_{m+1}^{(s)} &= R_0^{(s)}(a_s \tau T_s) v_{m+1}^{(s-1)} + \tau R_1^{(s)}(a_s \tau T_s) \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj} K_{sj}, \quad s = 1(1)d, \\
v_{m+1}^{(\tilde{s})} &= R_0^{(\tilde{s})}(a_{\tilde{s}} \tau T_{2d-\tilde{s}+1}) v_{m+1}^{(\tilde{s}-1)} \\
&\quad + \tau R_1^{(\tilde{s})}(a_{\tilde{s}} \tau T_{2d+1-\tilde{s}}) \sum_{j=0}^{\tilde{s}-1} b_{\tilde{s}j} K_{2d-\tilde{s}+1,j}, \quad \tilde{s} = d+1(1)2d, \\
v_{m+1} &= v_{m+1}^{(2d)} \\
\text{mit } K_{ij} &= f_i(t_m + c_j \tau, v_{m+1}^{(j)}) - T_i v_{m+1}^{(j)}, \quad i = 1(1)d, \quad j = 0(1)2d-1.
\end{aligned} \tag{2.4.1}$$

Hierbei sind die T_s ($s = 1(1)d$) beliebige, konstante Matrizen. Allerdings nimmt man aus Stabilitätsgründen i. allg. an, daß sie Approximationen der Jacobi-Matrizen $\frac{\partial f_s}{\partial w}$ sind. Die skalaren Größen a_s , c_s und b_{ij} sind Parameter der Methode. Die Matrixfunktionen $R_0^{(*)}(\cdot)$, $R_1^{(*)}(\cdot)$ sollen rationalen Funktionen $R_0^{(*)}(z)$, $z \in \mathbb{C}$, zugeordnet sein, wobei $R_0^{(*)}(z)$ eine Approximation an die Exponentialfunktion e^z (für $z \rightarrow 0$) von mindestens erster Ordnung und

$$R_1^{(*)}(z) = \frac{R_0^{(*)}(z) - 1}{z}$$

sei. Weiterhin nehmen wir zumindest für die letzten d Stufen ($\tilde{s} = r+1(1)2d$) an, daß

$$R_0^{(\tilde{s})}(z) \text{ analytisch für } \operatorname{Re}(z) \leq 0 \text{ ist und } |R_0^{(\tilde{s})}(-\infty)| < \infty \text{ gilt.} \tag{2.4.2}$$

Dies bedeutet, daß die letzten d Stufen linear-implizit sind.

2.5. Eigenschaften linear-impliziter Splitting-Methoden

2.5.1. Klassische Konsistenzbetrachtungen und Ordnungsbedingungen

In diesem Abschnitt werden wir Ordnungsbedingungen für die (klassische) Konsistenzordnung bez. der Zeit für eine linear-implizite Splitting-Formel (2.4.1) herleiten.

In der linear-impliziten Splitting-Formel (2.4.1) werden Approximationen an Exponentialfunktionen von Matrizen verwendet. Man spricht daher auch von *exponentiellem Splitting*. Die Untersuchungen in [She89] und [She93] des Fehlers der numerischen Lösung, der durch das Splitting verursacht wird, zeigen, daß die maximale Approximationsordnung von exponentiellem Splitting zwei ist. Dies hat zur Folge, daß die klassische Konsistenzordnung maximal von zweiter Ordnung sein kann.

Zur Bestimmung der Ordnungsbedingungen verwenden wir die Taylor-Entwicklungen der numerischen und der exakten Lösung zum Zeitpunkt t_m und fordern Konsistenzordnung zwei (siehe Abschnitt 1.1.2), d.h.

$$\tilde{v}_{m+1} - w(t_{m+1}) = \mathcal{O}(\tau^3), \quad \tau \rightarrow 0.$$

Aus dieser Forderung erhalten wir durch Koeffizientenvergleich Ordnungsbedingungen an die Parameter der Methode (2.4.1).

Die rationalen Funktionen $R_0^{(s)}(z)$ sind für $z \rightarrow 0$ Approximationen an e^z von mindestens erster Ordnung, d.h.

$$R_0^{(s)}(z) = 1 + z + \delta_s z^2 + \mathcal{O}(z^3), \quad z \rightarrow 0,$$

wobei δ_s zunächst ein Parameter sei, den wir später spezifizieren. Weiterhin unterscheiden wir zwei Fälle für die Wahl der Matrizen T_s , nämlich $T_s = \frac{\partial f_s}{\partial w} + \mathcal{O}(\tau)$ und T_s beliebig.

1. Für den Fall $T_s = \frac{\partial f_s}{\partial w} + \mathcal{O}(\tau)$ erhalten wir für $s = 1(1)d$ unter der Voraussetzung $a_s = \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj}$ die folgenden Ordnungsbedingungen für Ordnung zwei:

$$\begin{aligned} 1 &= a_s + a_{2d-s+1} && \text{(für } f_s), \\ \frac{1}{2} &= \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj} c_j + \sum_{j=0}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} c_j && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial t}), \\ \frac{1}{2} &= \delta_s a_s^2 + \delta_{2d-s+1} a_{2d-s+1}^2 + a_s a_{2d-s+1} && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial w} f_s), \\ \frac{1}{2} &= a_i, \quad i = 1(1)d, && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial w} f_i, \quad i \neq s). \end{aligned}$$

Durch Umformungen und Vereinfachungen ergibt sich

$$\frac{1}{2} = a_s = \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj}, \quad s = 1(1)2d,$$

$$1 = \delta_s + \delta_{2d-s+1}, \quad \frac{1}{2} = \sum_{j=0}^{s-1} (b_{sj} + b_{2d-s+1,j}) c_j + \sum_{j=s}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} c_j, \quad s = 1(1)d.$$

2. Für beliebige Matrizen T_s erhalten wir, ebenfalls mit $a_s = \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj}$, für $s = 1(1)d$ und $j \in \{1, \dots, d\}$ die Bedingungen

$$\begin{aligned} 1 &= a_s + a_{2d-s+1} && \text{(für } f_s), \\ \frac{1}{2} &= \sum_{j=0}^{s-1} b_{sj} c_j + \sum_{j=0}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} c_j && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial t}), \\ i < s : \quad \frac{1}{2} &= a_i \left(\sum_{j=i}^{s-1} b_{sj} + \sum_{j=i}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} \right) && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial w} f_i), \\ \frac{1}{2} &= a_s \sum_{j=s}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial w} f_s), \\ i > s : \quad \frac{1}{2} &= a_i \sum_{j=i}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} + (1 - a_s) \sum_{j=2d-i+1}^{2d-s} b_{2d-s+1,j} && \text{(für } \frac{\partial f_s}{\partial w} f_i), \\ s < r : \quad \frac{1}{2} &= a_s, \quad 1 = \delta_s + \delta_{2d-s+1}, && \text{(für } T_s f_i, i \neq s), \\ s = r : \quad \frac{1}{2} &= \delta_d a_d^2 + \delta_{d+1} a_{d+1}^2 + a_d a_{d+1} && \text{(für } T_d f_d). \end{aligned}$$

In beiden Fällen kann das System von Ordnungsbedingungen gelöst werden, wobei einige Parameter noch immer frei wählbar sind. Diese können so gewählt werden, daß der Rechenaufwand bez. der Zahl der erforderlichen Funktionsaufrufe und der LU-Zerlegungen reduziert wird. So kann man z.B. LU-Zerlegungen wieder verwenden, wenn $R_0^{(s)}(a_s \tau T_s) = R_0^{(2d-s+1)}(a_{2d-s+1} \tau T_s)$.

BEISPIEL 2.5.1. Sei T_s beliebig und sei $d = 3$, $a_3 = a_4 = \frac{1}{2}$. Dann können die Ordnungsbedingungen für Ordnung zwei vereinfacht werden. Diese sind in Tabelle 2.1 angeben. Ähnliche Tabellen erhalten wir für beliebige d . \square

$$a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a_5 = a_6 = \frac{1}{2},$$

s	b_{s0}	b_{s1}	b_{s2}	b_{s3}	b_{s4}	b_{s5}
1	$\frac{1}{2}$					
2	$\frac{1}{2} + b_{51}$	$-b_{51}$				
3	$\frac{1}{2} + b_{41} + b_{42}$	$-b_{41}$	$-b_{42}$			
4	$-\left(\frac{1}{2} + b_{41} + b_{42}\right)$	b_{41}	b_{42}	1		
5	$-\frac{1}{2} - b_{51}$	b_{51}	b_{54}	$1 - 2b_{54}$	b_{54}	
6	$-\frac{1}{2}$	b_{65}	b_{64}	$1 - 2(b_{64} + b_{65})$	b_{64}	b_{65}

$$\delta_s + \delta_{7-s} = 1, \quad s = 1, 2, 3,$$

$$c_3 = \frac{1}{2}, \quad 0 = b_{54}(c_2 + c_5 - 1), \quad 0 = b_{64}(c_2 + c_4 - 1) + b_{65}(c_1 + c_5 - 1).$$

TABELLE 2.1. Beispiel 2.5.1: Ordnungsbedingungen für klassische Konsistenz der Ordnung zwei einer linear-impliziten Splitting-Formel (2.4.1) mit beliebigen Matrizen T_s für $d = 3$.

2.5.2. Lineare Stabilität

Wenden wir eine linear-implizite Splitting-Formel (2.4.1) auf die Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}$ an und wählen wir $T_s = A_s$ ($s = 1(1)d$), so erhalten wir die Stabilitätsmatrix

$$R(\tau A_1, \dots, \tau A_d) = \prod_{s=2d}^{d+1} R_0^{(s)}(a_s \tau A_{2d-s+1}) \prod_{s=d}^1 R_0^{(s)}(a_s \tau A_s). \quad (2.5.1)$$

Diese Matrix genügt Voraussetzung 2.3.5, und durch die spezielle Wahl der Funktionen $R_0^{(s)}$ können wir direkt Einfluß auf die Stabilitäteeigenschaften der linear-impliziten Splitting-Formel nehmen. Wählen wir z.B.

$$R_0^{(s)}(z) = \frac{1}{1-z}, \quad \forall s = 1(1)2d,$$

so erhalten wir \tilde{L} -Stabilität, da

$$|R_0^{(s)}(z)| < 1, \quad \forall z \in \mathbb{C}, \operatorname{Re}(z) < 0, \quad \text{und} \quad R_0^{(s)}(-\infty) = 0. \quad (2.5.2)$$

Da $R_0^{(s)}(z)$ nur eine Approximation 1. Ordnung an e^z ist, liefern die Konsistenzbetrachtungen des vorangegangenen Abschnitts, daß für diese Wahl $p = 2$ nicht erreicht wird. In Abschnitt 2.5.4 wird gezeigt, daß es aber geeignete Matrixfunktionen gibt, so daß wir \tilde{L} -Stabilität und Konsistenzordnung zwei erhalten.

2.5.3. B-Konsistenz für lineare Probleme

In der numerischen Integration von steifen AWPn gewöhnlicher Differentialgleichungen kommt es oft vor, daß die erreichte Genauigkeit der numerischen Lösung eine geringere Ordnung hat als man nach der klassischen Konsistenzbetrachtung erwartet. Man spricht dann von einer Ordnungsreduktion ([Dek84],[SS86]).

Bei den Untersuchungen in Abschnitt 2.5.1, wurde die Steifheit des Problems (2.2.11) nicht berücksichtigt. In die \mathcal{O} -Terme der Abschätzung zur Bestimmung der klassischen Konsistenzordnung gehen die partiellen Ableitungen von f aus (2.2.11) ein. Auch wenn die Lösung $w(t)$ glatt im Sinne von

$$\left\| \frac{d^k w(t)}{d t^k} \right\| \leq C_k, \quad t \in [0, T], \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.5.3)$$

mit Konstanten C_k ist, die unabhängig von allen Größen sind, die die Steifheit des Problems (2.2.11) beeinflussen, kann $\left\| \frac{\partial f}{\partial w} \right\|$ für steife Probleme sehr groß werden. Somit sind die Aussagen der klassischen Konsistenzordnung nicht ausreichend, und man sucht Fehlerschranken, die unabhängig von der Steifheit des Problems sind.

Für diesen Zweck haben Frank, Schneid und Ueberhuber ([Fra81]) das Konzept der *B-Konsistenz* (und *B-Konvergenz*) eingeführt. Wir definieren die Klasse \mathfrak{F}_ν als die Probleme (2.2.11), deren rechte Seite die einseitigen Lipschitz-Konstante ν besitzt.

DEFINITION 2.5.2. *Ein Einschrittverfahren heißt B-konsistent der Ordnung q auf der Klasse \mathfrak{F}_ν , wenn für den lokalen Fehler*

$$\|\tilde{v}_{m+1} - w(t_{m+1})\| \leq C \tau^{q+1}, \quad \forall \tau \in (0, \tau^*], \quad (2.5.4)$$

gilt, wobei die reellen Größen C und $\tau^ > 0$ unabhängig von der Steifheit von \mathfrak{F}_ν sind.*

Wir nehmen an, daß die im folgenden betrachteten Probleme der folgenden Voraussetzung genügen:

VORAUSSETZUNG 2.5.3. Die Lösung $w(t)$ von (2.2.11) erfülle (2.5.3) und

$$\left\| \frac{d^k}{d t^k} f_i(t, w(t)) \right\| \leq L_{ik}, \quad t \in [0, T], \quad i = 1(1)d, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.5.5)$$

mit von der Steifheit unabhängigen Konstanten L_{ik} .

Wir betrachten die Klasse linearer Probleme (2.3.1) mit $\mu[A_i] \leq 0$ ($i = 1(1)d$), d.h. die Klasse \mathfrak{A} . Voraussetzung 2.5.3 sichert, daß $\left\| A_i \frac{d^k}{d t^k} w(t) \right\| \leq L_{ik}$ für $t \in [0, T]$, $i = 1(1)d$, $k = 1, 2, \dots$. Die Norm des lokalen Fehlers einer linear-impliziten

Splitting-Formel (2.4.1) angewendet auf diese Klasse ist mittels Taylor-Entwicklung von $w(t_{m+1})$ gegeben durch

$$\begin{aligned} & \|\tilde{v}_{m+1} - w(t_{m+1})\| \\ & \leq \left\| R(\tau A_1, \dots, \tau A_d)w(t_m) - \left(I + \tau \sum_{i=1}^d A_i \right) w(t_m) \right\| + \frac{\tau^2}{2} C_2, \end{aligned}$$

mit C_2 aus (2.5.3). Um B-Konsistenzordnung eins zu erhalten müssen wir die $R_0^{(i)}(\cdot)$, $i = 1(1)2d$, (siehe (2.5.1)) so wählen, daß

$$\left\| \left[\prod_{s=2d}^{d+1} R_0^{(s)}(a_s \tau A_{2d-s+1}) \prod_{s=d}^1 R_0^{(s)}(a_s \tau A_s) - \left(I + \tau \sum_{i=1}^d A_i \right) \right] w(t_m) \right\| \leq \tau^2 \bar{C},$$

wobei \bar{C} eine von der Steifheit des Problems unabhängige Konstante ist.

FOLGERUNG 2.5.4. *Unter der Voraussetzung 2.5.3 ist eine linear-implizite Splitting-Formel (2.4.1) für $d = 2$ B-konsistent der Ordnung eins auf der Klasse $\tilde{\mathfrak{A}}$, wenn ihre Stabilitätsmatrix die Form*

$$R(\tau A_1, \tau A_2) = \left(I - \frac{\tau}{2} A_1 \right)^{-1} \left(I - \frac{\tau}{2} A_2 \right)^{-1} \left(I + \frac{\tau}{2} A_2 \right) \left(I + \frac{\tau}{2} A_1 \right) \quad (2.5.6)$$

oder

$$R(\tau A_1, \tau A_2) = \left(I - \frac{\tau}{4} A_1 \right)^{-2} \left(I - \frac{\tau}{4} A_2 \right)^{-2} \left(I + \frac{\tau}{4} A_2 \right)^2 \left(I + \frac{\tau}{4} A_1 \right)^2 \quad (2.5.7)$$

besitzt.

BEWEIS. Für R aus (2.5.6) gilt:

$$\begin{aligned} [R(\tau A_1, \tau A_2) - (I + \tau(A_1 + A_2))]w(t_m) &= \left(I - \frac{\tau}{2} A_1 \right)^{-1} \left(I - \frac{\tau}{2} A_2 \right)^{-1} \\ & \underbrace{\left[\left(I + \frac{\tau}{2} A_2 \right) \left(I + \frac{\tau}{2} A_1 \right) - \left(I - \frac{\tau}{2} A_2 \right) \left(I - \frac{\tau}{2} A_1 \right) \left(I + \tau(A_1 + A_2) \right) \right]}_{=} w(t_m) \\ &= \left[-\frac{\tau^2}{2} (A_1^2 + A_1 A_2 + A_2 A_1 + A_2^2) - \frac{\tau^3}{4} A_2 A_1 (A_1 + A_2) \right] w(t_m) \\ &= -\frac{\tau^2}{2} w''(t_m) - \frac{\tau^3}{4} A_2 A_1 w'(t_m) \end{aligned}$$

Nach Lemma 2.3.4 ist $\| (I - \frac{\tau}{2} A_1)^{-1} \| \leq 1$ und $\| (I - \frac{\tau}{2} A_2)^{-1} \frac{\tau}{2} A_2 \| \leq 1$, da $\mu[A_1], \mu[A_2] \leq 0$. Wegen $\| A_1 w'(t_m) \| \leq L_{11}$, folgt

$$\| (R - (I + \tau A))w(t_m) \| \leq \frac{\tau^2}{2} (C_2 + L_{11}),$$

wobei C_2 und L_1 nach Voraussetzung von der Steifheit unabhängig sind. Für R aus (2.5.7) man kann die Behauptung analog zeigen. \square

BEMERKUNG 2.5.5.

1. Splitting-Methoden, deren Stabilitätsmatrizen die Form (2.5.6) oder (2.5.7) haben, sind \tilde{A}_C -stabil.
2. Die Aussagen von Folgerung 2.5.4 können auch auf Systeme der Form

$$w'(t) = A_1 w(t) + g_1(t) + A_2 w(t) + g_2(t) \quad (2.5.8)$$

erweitert werden, wobei $w, g_i \in \mathbb{R}^r$, $A_i \in \mathbb{R}^{r \times r}$, $\mu[A_i] \leq 0, i = 1, 2$. Hierbei können die Funktionen $g_i(t)$ z.B. die Randwerte der zugrundeliegenden PDE mit inhomogenen Randbedingungen enthalten (siehe [Hun89], [Hun92], [Hun98b]).

3. Wir konnten nur Splitting-Methoden finden, die \tilde{L} -stabil und B-konsistent einer Ordnung größer Null sind, unter der strengen Voraussetzung, daß $A_2 A_1 w(t)$ gleichmäßig beschränkt ist. In [Hun98b] wird erwähnt, daß dies z.B. für periodische Randbedingungen gilt. \square

2.5.4. Beispiele linear-impliziter Splitting-Methoden

Wir werden jetzt spezielle Methoden angeben, die wir für unsere numerischen Tests in Abschnitt 2.6 verwenden. Eine linear-implizite Splitting-Formel ist nicht nur durch die Parameter a_s, c_s und b_{ij} in (2.4.1) sondern auch durch die spezielle Wahl der Matrixfunktionen $R_0^{(s)}(\cdot)$ bestimmt. Wir geben zunächst einige Matrixfunktionen an, die Approximationen mindestens erster Ordnung an e^z sind.

$$\begin{aligned} \text{F1: } R_0(a_s \tau T_s) &= (I - \gamma a_s \tau T_s)^{-2} (I + (1 - 2\gamma) a_s \tau T_s), \quad \gamma = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ &\implies R_1(a_s \tau T_s) = (I - \gamma a_s \tau T_s)^{-2} (I - \gamma^2 a_s \tau T_s), \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

$$\begin{aligned} \text{F2: } R_0(a_s \tau T_s) &= (I - \frac{a_s \tau T_s}{2})^{-1} (I + \frac{a_s \tau T_s}{2}) \\ &\implies R_1(a_s \tau T_s) = (I - \frac{a_s \tau T_s}{2})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

$$\begin{aligned} \text{F3: } R_0(a_s \tau T_s) &= I + a_s \tau T_s \\ &\implies R_1(a_s \tau T_s) = I, \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

$$\begin{aligned} \text{F4: } R_0(a_s \tau T_s) &= (I - a_s \tau T_s)^{-1} \\ &\implies R_1(a_s \tau T_s) = (I - a_s \tau T_s)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.5.12)$$

Durch Kombinationen von Matrixfunktionen mit den Splitting-Formeln der folgenden Beispiele erhalten wir spezielle Splitting-Methoden.

BEISPIEL 2.5.6. Mit *LISM1* bezeichnen wir folgende Formel. Unter der Voraussetzung, daß T_s ein Approximation an die Jacobi-Matrix $\frac{\partial f_s}{\partial w}$ ist, ist diese von klassischer Konsistenzordnung zwei. Sei $s = 1(1)d$, $\tilde{s} = 2d - s + 1$, $v_{m+1}^{(0)} = v_m$,

$$v_{m+1} = v_{m+1}^{(2d)}:$$

LISM1:

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(s)} &= R_0\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)v_{m+1}^{(s-1)} + \frac{\tau}{2}R_1\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)\left(f_s(t_m, v_m) - T_s v_m\right), \\ v_{m+1}^{(\tilde{s})} &= R_0\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)v_{m+1}^{(\tilde{s}-1)} + \frac{\tau}{2}R_1\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)\left(f_s(t_m + \tau, v_{m+1}^{(d)}) - T_s v_{m+1}^{(d)}\right). \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

□

BEISPIEL 2.5.7. *LISM2* ist eine spezielle Formel aus Beispiel 2.5.1, in dem T_s beliebig sein kann. Sei $s = 1(1)d$, $\tilde{s} = 2d - s + 1$, $v_{m+1}^{(0)} = v_m$, $v_{m+1} = v_{m+1}^{(2d)}$.

$$\begin{aligned} \text{LISM2: } v_{m+1}^{(s)} &= R_0\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)v_{m+1}^{(s-1)} + \frac{\tau}{2}R_1\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)K_{s,s-1}, \\ v_{m+1}^{(\tilde{s})} &= R_0\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)v_{m+1}^{(\tilde{s}-1)} + \tau R_1\left(\frac{\tau}{2}T_s\right)\left(-\frac{1}{2}K_{s,s-1} + K_{s,r}\right), \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

$$K_{s,s-1} = f_s\left(t_m + \frac{\tau}{2}, v_{m+1}^{(s-1)}\right) - T_s v_{m+1}^{(s-1)},$$

$$K_{s,r} = f_s\left(t_m + \frac{\tau}{2}, v_{m+1}^{(d)}\right) - T_s v_{m+1}^{(d)}.$$

Wir wollen bemerken, daß bereits berechnete Werte $K_{s,s-1}$ in den Stufen $2d - s + 1$ wieder verwendet werden können. □

Wenn wir die Methoden LISM1 oder LISM2 mit der rationalen Funktion F1 kombinieren, erhalten wir die \tilde{L} -stabilen Methoden *LISM1F1* oder *LISM2F1*. Kombiniert mit F2 erhalten wir die \tilde{A} -stabilen Methoden *LISM1F2* und *LISM2F2*.

BEMERKUNG 2.5.8. Die Methoden LISM1 und LISM2 geben auch Möglichkeiten, Funktionsaufrufe, Jacobi-Matrixberechnungen, Matrix-mal-Vektor-Multiplikationen oder LU-Zerlegungen parallel durchzuführen. □

BEISPIEL 2.5.9. *LISM3F3F4* oder *LTRAP* bezeichne die folgende Formel: Seien $s = 1(1)d$, $\tilde{s} = 2d - s + 1$, $v_{m+1}^{(0)} = v_m$, $v_{m+1} = v_{m+1}^{(2d)}$. Für $R_0^{(s)}$ verwenden wir die Funktion F3, d.h., die ersten d Stufen sind explizit. Sei $T_s = \frac{\partial f_s}{\partial w}(t_m + \tau, v_{m+1}^{\tilde{s}-1}) + \mathcal{O}(\tau)$ und $R_0^{(\tilde{s})}$ die Funktion F4. Folglich sind nur die letzten d Stufen implizit.

LTRAP:

$$\begin{aligned} v_{m+1}^{(s)} &= v_{m+1}^{(s-1)} + \frac{\tau}{2}f_s(t_m, v_{m+1}^{(s-1)}), \quad s = 1(1)d, \quad \tilde{s} = 2d - s + 1, \\ v_{m+1}^{(\tilde{s})} &= v_{m+1}^{(\tilde{s}-1)} + \frac{\tau}{2}\left(I - \frac{\tau}{2}T_s\right)^{-1}f_s(t_m + \tau, v_{m+1}^{(\tilde{s}-1)}). \end{aligned} \quad (2.5.15)$$

Diese Methode entspricht der Trapez-Splitting-Methode (2.2.17), wenn dort die impliziten Beziehungen mit einer Newton-Iteration mit startend mit dem Stufenwert der vorherigen Stufe gelöst werden. □

BEISPIEL 2.5.10. Für $d = 2$ sind die Methoden LISM1F2, LISM2F2, LTRAP und die Trapez-Splitting-Methode (2.2.17) sowohl B-konsistent erster Ordnung als auch \tilde{A}_C -stabil auf der Klasse \mathfrak{A}_C . \square

2.6. Numerische Beispiele

In diesem Abschnitt werden einige numerische Ergebnisse für die in Abschnitt 2.4 bzw. 2.5.4 eingeführten linear-impliziten Splitting-Methoden und die Trapez-Splitting-Methode (2.2.17) vorgestellt. Die impliziten Beziehungen in TRAPSP werden durch vereinfachte Newton-Iteration gelöst. Die Methoden wurden unter Verwendung einer Schrittweitensteuerung für die Zeitintegration mittels Richardson-Extrapolation (siehe z.B. [Str95]) implementiert.

Am Ende des numerischen Zeitintegrationsprozesses wird die numerische Lösung mit der exakten Lösung $u_h(t)$ der PDE in den Gitterpunkten des fest gewählten, äquidistanten Ortsgitters mit Gitterweite $h = \frac{1}{M+1}$ verglichen. In den Abbildungen der nachfolgenden Beispiele wird die Rechenzeit in Abhängigkeit vom Logarithmus des relativen Fehlers

$$ERR = \sqrt{\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(\frac{v_i - u_h(t_e)_i}{1 + |u_h(t_e)_i|} \right)^2}$$

zum Endzeitpunkt t_e dargestellt, wobei v die numerische Lösung in t_e ist. In den Beispielen wurde der Quellterm, eingeschränkt auf das Ortsgitter, zu gleichen Teilen auf die Splitting-Funktionen aufgeteilt, und mit verschiedenen Toleranzen für die Richardson-Extrapolation gerechnet. Die Verfahren wurden in C implementiert. Die Rechnungen wurden auf einer Workstation (SUN SPARC ULTRA 1, 128 MB) durchgeführt.

BEISPIEL 2.6.1. Wir betrachten das zweidimensionale Problem

$$u_t = \frac{1}{2}x(1-x)u_{xx} + \frac{1}{2}(1+\alpha x)y(1-y)u_{yy} - (1-x)\alpha u$$

auf $\Omega = [0, 1]^2$ und $t \in [0, 1]$. Die Anfangsbedingung und Dirichlet-Randbedingungen seien so gewählt, daß wir als exakte Lösung

$$u(t, x, y) = e^{-(2+\alpha)t}x(1-x)y(1-y)$$

erhalten. Da die exakte Lösung der PDE ein Polynom in den Ortsvariablen vom Grad kleiner 4 ist, wird durch die Semidiskretisierung kein Ortsfehler in die ODE (2.2.11) eingeführt. Somit ist die exakte Lösung der ODE gleich der exakten Lösung der PDE in den Gitterpunkten. Die semidiskrete ODE ist ein lineares System der Form (2.3.1). Wir betrachten zwei Fälle, $\alpha = 0$ und $\alpha = 100$.

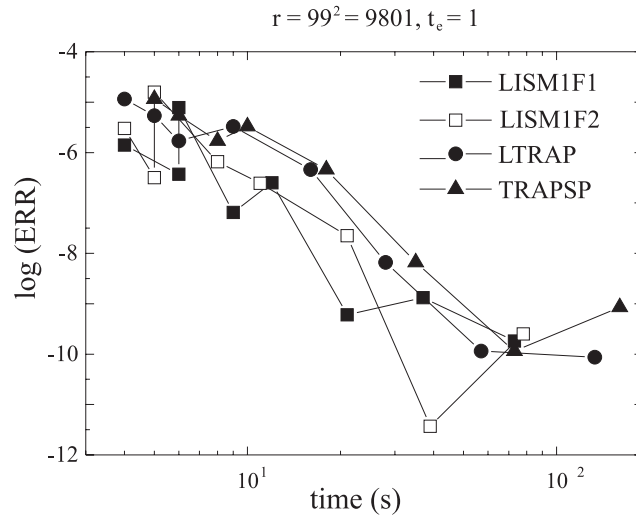


ABBILDUNG 2.3. Beispiel 2.6.1, $\alpha = 0$, $r = 99^2 = 9801$, $t_e = 1$

Für $\alpha = 0$ sind die Matrizen A_1 und A_2 vertauschbar, da wir ein äquidistantes Ortsgitter verwendet haben. In Abbildung 2.3 sehen wir, daß alle dargestellten Methoden vergleichbare Eigenschaften haben. Die \tilde{L} - und \tilde{A} -stabilen Methoden LISM1F1 und LISM1F2 sind für dieses lineare Beispiel bei gleicher Genauigkeit schneller als die \tilde{A}_C -stabilen Methoden TRAPSP und LTRAP.

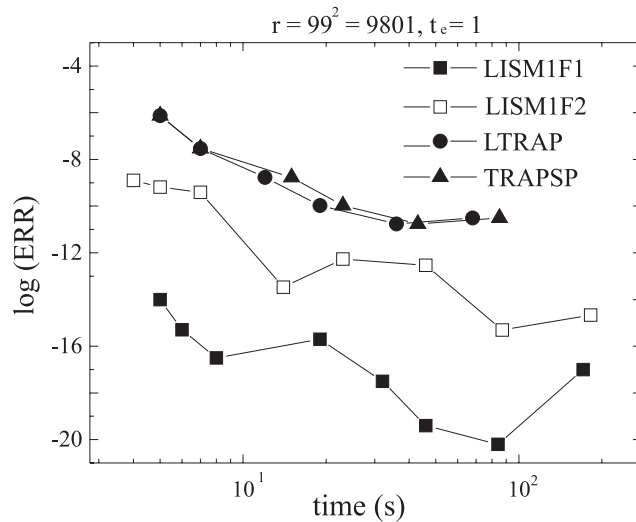


ABBILDUNG 2.4. Beispiel 2.6.1, $\alpha = 100$, $r = 99^2 = 9801$, $t_e = 1$

Für $\alpha = 100$ (siehe Abbildung 2.4) sind die Matrizen A_1 und A_2 nicht vertauschbar. Die Voraussetzung für die Stabilität von LTRAP und TRAPSP sind

nicht erfüllt. Die Methoden LISM1F1 und LISM1F2 benötigen diese Voraussetzungen nicht. Dies scheint der Grund für die besseren Ergebnisse der \tilde{A} -stabilen Methode LISM1F2 zu sein. Weiterhin zählt sich für dieses Beispiel die \tilde{L} -Stabilität der Methode LISM1F1 aus. \square

BEISPIEL 2.6.2. Wir betrachten die zweidimensionale, nichtlineare Diffusionsgleichung

$$u_t = e^u(u_{xx} + u_{yy}) + u(2\pi^2 e^u - 1), \quad (2.6.1)$$

mit $\Omega = [0, 1]^2$ und $t \in [0, 10]$. Die Anfangsbedingung und Dirichlet-Randbedingungen seien so gewählt, daß wir als exakte Lösung

$$u(t, x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) e^{-t} \quad (2.6.2)$$

erhalten. Im Gegensatz zur in Abschnitt 1.1 beschriebenen Semidiskretisierung

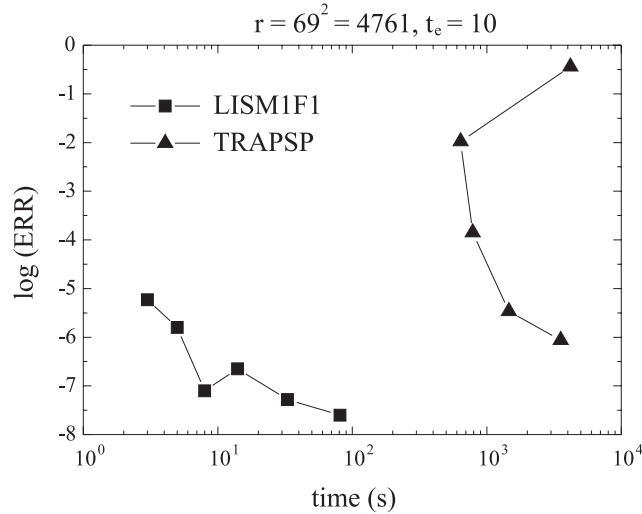


ABBILDUNG 2.5. Beispiel 2.6.2, $r = 69^2 = 4761$, $t_e = 10$

berechnen wir für unsere Tests den analytischen Ausdruck des Ortsfehlers, der durch die Semidiskretisierung entsteht. Sei $x_i = ih, y_j = jh$ ($i, j = 1(1)M$) und $u_{i,j}(t) = u(t, x_i, y_j)$. Es ist:

$$\begin{aligned} u_{xx}(t, x_i, y_j) &= -\pi^2 \sin(\pi x_i) \sin(\pi y_j) e^{-t}, \\ \sin(\pi(x_i \pm h)) &= \sin(\pi x_i) \cos(\pi h) \pm \cos(\pi x_i) \sin(\pi h), \\ \cos(\pi h) - 1 &= -2 \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right) \\ \implies r_{i,j}^{(x)} &:= u_{xx}(t, x_i, y_j) - \frac{1}{h^2} (u_{i-1,j}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i+1,j}(t)) \\ &= \left(-\pi^2 \sin(\pi x_i) - \frac{2}{h^2} (\cos(\pi h) - 1) \sin(\pi x_i)\right) \sin(\pi y_j) e^{-t} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(-\pi^2 + \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right)\right) \sin(\pi x_i) \sin(\pi y_j) e^{-t} \\
&= \left(-\pi^2 + \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right)\right) u_{i,j}(t) \\
\Rightarrow r_{i,j}^{(y)} &:= u_{yy}(t, x_i, y_j) - \frac{1}{h^2} (u_{i,j-1}(t) - 2u_{i,j}(t) + u_{i,j+1}(t)) = r_{i,j}^{(x)}
\end{aligned}$$

Somit ist durch Addition von $2e^{u_{i,j}(t)} \left(-\pi^2 + \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right)\right) u_{i,j}(t)$ für unsere Tests zu der dem Gitterpunkt (x_i, y_j) zugeordneten Komponente der rechten Seite der ODE (2.2.11) die exakte Lösung der ODE gleich der exakten Lösung der PDE (2.2.8), eingeschränkt auf das Gitter. D.h., ERR hängt nicht von einem Ortsfehler ab. Andererseits würde der Ortsfehler den Gesamtfehler bei kleinen Toleranzen für die Schrittweitensteuerung dominieren. Abbildung 2.5 zeigt, daß die linear-implizite \tilde{L} -stabile Methode LISM1F1 genauer und stabiler ist als die voll implizite \tilde{A}_C -stabile Methode TRAPSP. \square

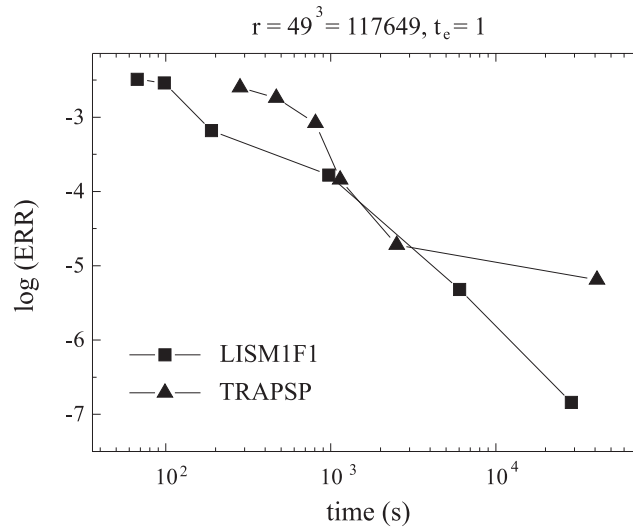


ABBILDUNG 2.6. Beispiel 2.6.3, $r = 49^3 = 117649$, $t_e = 10$

BEISPIEL 2.6.3. Als drittes Beispiel wählen wir die dreidimensionale PDE

$$\begin{aligned}
u_t &= u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} + e^t (x(1-x)y(1-y)z(1-z) \\
&\quad + 2y(1-y)z(1-z) + 2x(1-x)z(1-z) + 2x(1-x)y(1-y))
\end{aligned}$$

mit $\Omega = [0, 1]^3$, $t \in [0, 10]$ und homogenen Dirichlet-Randbedingungen. Die Anfangsbedingung sei so gewählt, daß die exakte Lösung

$$u(t, x, y, z) = e^t x(1-x)y(1-y)z(1-z)$$

ist. Bei der Semidiskretisierung tritt erneut kein Ortsfehler auf. Abbildung 2.6 demonstriert, daß beide Methode LISM1F1 und TRAPSP, ähnlich und zufriedenstellend für sehr große Probleme arbeiten. \square

BEISPIEL 2.6.4. Sei das zweidimensionale Problem

$$u_t = u_{xx} + u_{yy} + e^t (x(1-x)y(1-y)(16+y) + 2y(1-y)(16+y) + 6x(1-x)(5+y))$$

für $\Omega = [0, 1]^2$, $t \in [0, 1]$ gegeben. Die Funktion

$$u(t, x, y) = e^t x(1-x)y(1-y)(16+y)$$

ist die Lösung des Beispiels, wenn wir $u(0, x, y) = x(1-x)y(1-y)(16+y)$ und homogene Dirichlet-Randbedingungen vorschreiben. Abbildung 2.7 zeigt, daß LISM1F1 weniger genau sind als LTRAP oder TRAPSP. Wir nehmen an, daß der Grund dafür die bessere B-Konsistenz der Trapez-Splitting-Methode auf der Problemklasse (2.5.8) ist (siehe Bemerkung 2.5.5). \square

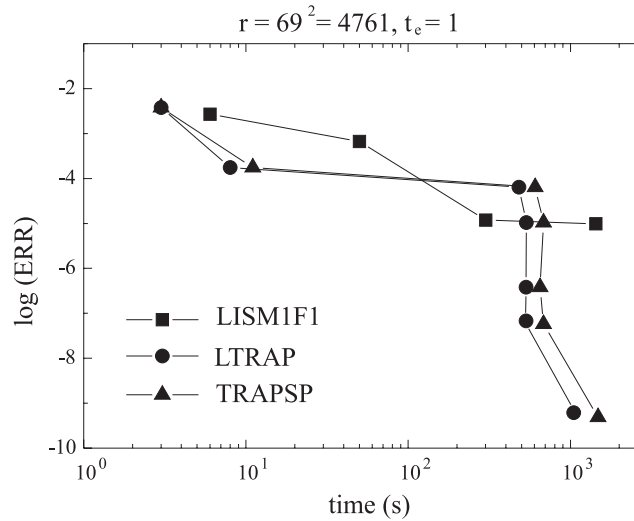


ABBILDUNG 2.7. Beispiel 2.6.4, $r = 69^2 = 4761$, $t_e = 1$

2.7. Zusammenfassung

Zur geeigneten Charakterisierung der Stabilitätseigenschaften von Splitting-Methoden wurden die Begriffe der \tilde{A}_C - und \tilde{A} -Stabilität (bzw. \tilde{L}_C - und \tilde{L} -Stabilität) definiert. Wir haben eine Klasse von linear-impliziten Splitting-Methoden von klassischer Konsistenzordnung zwei entwickelt, die \tilde{A} - und \tilde{L} -stabil sind (unabhängig von der Vertauschbarkeit der Matrizen A_i). Diese Methoden sind effektiv für die numerische Lösung von räumlich mehrdimensionalen parabolischen Differentialgleichungen auf Parallelepipeden, da hierfür nur die Lösung linearer Gleichungssysteme mit tridiagonalen Koeffizientenmatrizen erforderlich ist und der Rechenaufwand erheblich reduziert wird. Obwohl diese, im Gegensatz zu der Trapez-Splitting-Methode TRAPSP (welche nur \tilde{A}_C -stabil ist), nur eine B-Konsistenzordnung Null besitzen, zeigen unsere Tests, daß für gewisse Probleme die \tilde{L} -Stabilität (und klassische Ordnung zwei) von größerer Bedeutung sein kann als die B-Konsistenz.