(5.11) Kollokationsverfahren

Wir betrachten wieder das Anfangswertproblem

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0$$

Es seien $c_1 < \cdots < c_s \in [0, 1]$ *und eine Schrittweite* h *vorgegeben. Gesucht ist ein Polynom* u *vom Grad* $\leq s$*, welches die Kollokationsbedingungen*

$$\begin{aligned} u(t_0) &= y_0 \\ u'(t_0 + c_i h) &= f(t_0 + c_i h, u(t_0 + c_i h)), \quad i = 1, \dots, s \end{aligned}$$

erfüllt. Wir setzen dann $y_1 = u(t_0 + h)$.

Das Kollokationspolynom u *hat die richtigen Steigungen an den Kollokationspunkten* $t_0 + c_i h$, $i = 1, \dots, s$ *und den richtigen Anfangswert* $u(t_0)$.

(1) Satz

Das Kollokationsverfahren ist äquivalent zum impliziten RKV

$$\begin{array}{c|c} c_i & a_{ij} \\ \hline & b_j \end{array}, \qquad i, j = 1, \dots, s$$

mit den Koeffizienten

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \ell_j(x) dx, \qquad b_j = \int_0^1 \ell_j(x) dx,$$

wobei

$$\ell_j(x) = \frac{\prod_{k \neq j}(x - c_k)}{\prod_{k \neq j}(c_j - c_k)}$$

das j*-te Lagrange-Polynom zu den Knoten* $c_1, \dots, c_s$ *ist.*

(1) Bemerkung

1. $\ell_j(x)$ *ist ein Polynom vom Grad* $\leq s-1$ *mit*

$$\ell_j(c_k) = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

2. *Die Existenz und Eindeutigkeit des Kollokationspolynoms für* h *klein genug wird später gezeigt.*
3. *Die Koeffizienten aus Satz 1 erfüllen*

$$\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{k-1} = \frac{1}{k} \quad \textit{und} \quad \sum_{j=1}^{s} a_{ij} c_j^{k-1} = \frac{1}{k} c_i^k \tag{1}$$

für $i, k = 1 \ldots, s$.

Beweis:
Setzen wir $Y_i' = u'(t_0 + c_i h)$ und $Y_i = u(t_0 + c_i h)$, so folgt aus der Kollokationsbedingung (**??**) $Y_i' = f(t_0 + c_i h, Y_i)$. Da u' ein Polynom vom Grad $s-1$ ist, stimmt es mit dem Interpolationspolynom in den s Knoten $t_0 + c_i h$ überein, d.h.

$$u'(t_0 + xh) = \sum_{j=1}^{s} \ell_j(x) Y_j'$$

(Lagrange-Interpolation). Außerdem erhalten wir

$$Y_i = u(t_0 + c_i h) = y_0 + h \int_0^{c_i} u'(t_0 + xh) dx = y_0 + h \sum_{j=1}^{s} \underbrace{\int_0^{c_i} \ell_j(x) dx}_{a_{ij}} \; Y_j'$$

und daraus mit

$$y_1 = u(t_0 + h) = y_0 + h \int_0^{1} u'(t_0 + xh) dx = y_0 + h \sum_{j=1}^{s} \underbrace{\int_0^{1} \ell_j(x) dx}_{b_j} \; Y_j'$$

die Behauptung.

(2) Bemerkung

Für genügend kleines h existiert das Kollokationspolynom u eindeutig.

(2) Satz

Das Kollokationsverfahren hat dieselbe Ordnung wie die zugehörige Quadraturformel, d.h das implizite RKV aus Satz 1 hat die Ordnung p genau dann, wenn die Quadraturformel

$$\int_0^1 g(x)dx \approx \sum_{j=1}^{s} b_j g(c_j)$$

die Ordnung p hat, also exakt ist für alle Polynome bis zum Grad $p-1$.

Es bleibt noch ein technisches Detail zu zeigen, nämlich dass $||\delta^{(p+1)}||$ gleichmäßig beschränkt ist. Da δ lediglich von u und $f(y)$ abhängt, genügt es dafür zu zeigen, dass alle Ableitungen von u beschränkt bleiben.

$\delta = y - u$

(1) Lemma

Für das Kollokationspolynom gilt

$$||y^{(k)}(t) - u^{(k)}(t)|| \leq Ch^{s+1-k}, \qquad k = 0, \dots, s.$$

<u>Beweis:</u> Die exakte Lösung y erfüllt überall die Kollokationsbedingung, insbesondere in den Kollokationspunkten $t_0 + c_i h$. Mit Hilfe der Lagrange-Interpolationsformel folgt wie im Beweis des Satzes

$$y'(t_0 + th) = \sum_{j=1}^{s} \underbrace{f(t_0 + c_j h, y(t_0 + c_j h))}\ell_j(t) + h^s r(t, h) \qquad y' = \dot{y}$$

mit einer Funktion r die glatt in t und h ist. Durch Integration der Differentialgleichung ergibt sich

$$y(t_0 + th) = y(t_0) + h \int_0^t y'(t_0 + \tau h) d\tau,$$

$$y(t_0+th)-u(t_0+th)=h\sum_{j=1}^{s}\Delta f_j\int_0^t \ell_j(\tau)d\tau + h^{s+1}\int_0^t r(\tau,h)d\tau$$

mit

$$\Delta f_j = f(t_0+c_jh, y(t_0+c_jh)) - f(t_0+c_jh, u(t_0+c_jh)).$$

Für die k-te Ableitung nach t gilt somit

$$h^k\left(y^{(k)}(t_0+th)-u^{(k)}(t_0+th)\right)=h\sum_{j=1}^{s}\underbrace{\Delta f_j\ell_j^{(k-1)}}(t)+\underbrace{h^{s+1}\frac{\partial^{k-1}}{\partial t^{k-1}}r(t,h)}.$$

Der letzte Summand auf der rechten Seite ist beschränkt.

Wir zeigen $||\Delta f_j||=O(h^{s+1})$. Wegen (1) ist

$$y(t_0+c_ih)=y_0+h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}f(t_0+c_jh,y(t_0+c_jh))+O(h^{s+1})$$

und nach Definition des Kollokationspolynoms gilt

$$u(t_0+c_ih)=y_0+h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}f(t_0+c_jh,u(t_0+c_jh)).$$

Subtraktion der beiden Gleichungen liefert

$$y(t_0+c_ih)-u(t_0+c_ih)=h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}\Delta f_j+O(h^{s+1}). \qquad (2)$$

Aus der Lipschitz-Bedingung an f folgt

$$||\Delta f_j||\le L||y(t_0+c_ih)-u(t_0+c_ih)||$$

und aus (2) damit

$$||y(t_0+c_ih)-u(t_0+c_ih)||=O(h^{s+1}).$$

Also ist $||\Delta f_j||=O(h^{s+1})$.

(3) Bemerkung

Das fehlende technische Detail aus dem Beweis von Satz 2 ist durch dieses Lemma gezeigt, denn aus der hinreichenden Glattheit der Lösung y folgt mit der Dreiecksungleichung die Beschränktheit aller Ableitungen von u. (Höhere Ableitungen von u verschwinden, da u ein Polynom vom Grad s ist).

(5.12) A-stabile RKV

Zur Bestimmung des Stabilitätsbereichs eine impliziten RKVs wenden wir ein (implizites) RKV auf die Testgleichung an.
Falls $(I - z\mathcal{A})$ *invertierbar ist, d.h.* z^{-1} *kein Eigenwert von* $\mathcal{A}$, *gilt*

$$y_1 = y_0 + zb^T Y = \underbrace{[1 + zb^T(I - z\mathcal{A})^{-1}\mathbb{1}]}y_0 =: R(z)y_0$$

$$\mathbb{1} = e = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^s.$$

mit der **Stabilitätsfunktion**

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)}, \qquad \deg P, \deg Q \leq s.$$

Genauer gilt (ÜA)

$$R(z) = \frac{\det(I_s - z\mathcal{A} + z\mathbb{1}b^T)}{\det(I_s - z\mathcal{A})}.$$

Lemma 2

$$\mathcal{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^{s}$$
$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix}$$

Korollar 3

Stabilitätsbereich $S = \{ z \in \mathbb{C} : I - zA$ invertierbar und $|R(z)| \leq 1 \}$

Beispiel 4

1) Gauß - Kollokationsverfahren

Wählt man für die s Knoten c_j $j = 1..s$ die der Gaußquadraturformeln, so erhält man ein Kollokationsverfahren der Ordnung 2s (Satz 2)

$s = 1$ $\quad c_1 = 1/2$ $\quad b_1 = 1$ $\quad a_{11} = 1/2$ $\quad \begin{array}{c|c} c & a \\ \hline & b \end{array}$

$$Y_1 = \overset{\frac{1}{2} y_0 + \frac{1}{2} y_0}{y_0} + h \tfrac{1}{2} f(t_0 + \tfrac{1}{2} h, Y_1)$$

$$y_1 = y_0 + h f(t_0 + h/2, Y_1)$$

$$y_1 = y_0 + h f\left(t_0 + h/2, \underline{\frac{y_1 + y_0}{2}}\right)$$ "implizite Mittelpunktsregel"

Anwenden auf Testgleichung

$$y_1 = y_0 + h \lambda \left(\frac{y_1 + y_0}{2} \right)$$

$$y_1 = \frac{1 + z/2}{1 - z/2} y_0$$ $\Leftarrow$ A-stabil, da die Stabilitätsfunktion mit der der Trapezregel übereinstimmt.

$s = 2$ $\quad c_{1/2} = 1/2 \pm \sqrt{3}/6$ $\quad b_1 = b_2 = 1/2$

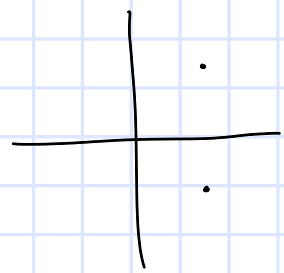
$a_{11} = 1/4$ $\quad a_{12} = 1/4 - \sqrt{3}/6$

$a_{21} = 1/4 + \sqrt{3}/6$ $\quad a_{22} = 1/4$

$$\dots \quad R(z) = \frac{1 + z/2 + z^2/12}{1 - z/2 + z^2/12}$$

Zum Nachweis der A-Stabilität könnte man

1) Pole von $R(z)$ berechnen
2) $|R(ix)| \leq 1$ für $x \in \mathbb{R}$ zeigen
und dann das Maximumsprinzip anwenden



Man kann zeigen, dass alle Gauß-Kollokationsverfahren A-stabil

$R(z)$ ist ein sogenannte (s,s)-Padé Approximation an e^z

Nachteil von Gauß Kollokationsverfahren

Es gilt

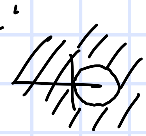
$$\lim_{|z| \to \infty} |R(z)| = 1 \qquad \dot{y} = \lambda y$$

Deswegen werden sehr steife Komponenten nicht gedämpft

2) Radau - Kollokationsverfahren

Radau QF sind eindeutig bestimmte s-stufige QF der Ordnung $2s-1$ mit $c_s = 1$

$s = 1$ $\quad c_1 = 1 \quad b_1 = 1 \quad a_{11} = 1$ ‚ implizites Eulerverfahren ' A-stabil



$s = 2$ $\quad c_1 = 1/3 \quad c_2 = 1$

$a_{11} = 5/12 \quad a_{12} = -1/12$

$a_{21} = b_1 = 3/4 \quad a_{22} = b_2 = 1/4$

$$\begin{array}{c|cc} 1/3 & 5/12 & -1/12 \\ 1 & 3/4 & 1/4 \\ \hline & 3/4 & 1/4 \end{array}$$

$$\det(I - z\mathfrak{A}) = \begin{vmatrix} 1 - 5/12\, z & 1/12\, z \\ -3/4\, z & 1 - 1/4\, z \end{vmatrix}$$

$$= 1 - 8/12\, z + 5/48\, z^2 + 3/48\, z^2 = 1 - 2/3\, z + 1/6\, z^2$$

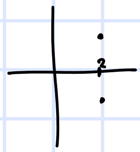
$$\det\left(I - z\mathfrak{A} - z\,\mathbb{1} b^T\right) = \begin{vmatrix} 1 - 5/12\,z + 3/4\,z & 1/12\,z + 1/4\,z \\ -3/4\,z + 3/4\,z & 1 - 1/4\,z + 1/4\,z \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1 + 1/3\,z & 1/3\,z \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 + 1/3\,z$$

$$R(z) = \frac{1 + z/3}{1 - 2/3\,z + 1/6\,z^2} \leftarrow$$

1. Pole von $R(z)$ $\qquad 6 - 4z + z^2 \qquad z_{1/2} = \frac{4 \pm \sqrt{16-24}}{2} = 2 \pm \sqrt{2}\,i$

liegen in der rechten Halbebene



2. $$|R(ix)|^2 = \frac{1 + \frac{x^2}{9}}{\left(1 - \frac{x^2}{6}\right)^2 + 4/9\,x^2} = \frac{1 + x^2/9}{1 - x^2/3 + x^4/36 + 4/9\,x^2} = \frac{1 + x^2/9}{1 + x^2/9 + x^4/36} \leq 1$$

Mit dem Maximumsprinzip folgt $|R(z)| \leq 1$ für $\mathrm{Re}(z) \leq 1$

Man kann zeigen, dass alle Radau Verfahren A-stabil sind.

<u>Satz 5</u>

Ist $c_s = 1$ und $a_{sj} = b_j$ für $j = 1..s$ und ist $\mathfrak{A}$ invertierbar so gilt
$$\lim_{|z| \to \infty} R(z) = 0$$

<u>Beweis</u>
$$\lim_{z\to\infty} R(z) = \lim_{z\to\infty} 1 + z\,b^T (I - z\mathfrak{A})^{-1}\mathbb{1}$$
$$= \lim_{z\to\infty} 1 + \cancel{z}\, b^T\left(\cancel{z}(1/z\, I - \mathfrak{A})\right)^{-1}\mathbb{1}$$

b ist die letzte Zeile von $\mathfrak{A}$

$$= 1 + b^T(-\mathfrak{A})^{-1}\mathbb{1} = 1 - \underbrace{e_s^T \mathfrak{A}}_{b^T} \mathfrak{A}^{-1}\mathbb{1} = 0 \qquad \square$$

Radau-Verfahren dämpfen also sehr steife Komponenten

Die Stabilitätsfunktionen von Radau-Verfahren sind $(s-1, s)$ Padé Approximationen an e^z

(5.13) Implementierung von RKV

Zum Lösen der nichtlinearen Gleichungssystem

$$Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j) \qquad i = 1..s \quad \leftarrow$$

der Dimension $s \cdot d$ verwendet man ein vereinfachtes Newton-Verfahren zur Lösung von

$$F(y) = 0$$

wobei

$$y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_s \end{bmatrix} \qquad F(y) = \begin{bmatrix} F_1(y) \\ \vdots \\ F_s(y) \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad F_i(y) = Y_i - y_0 - h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(t_0 + c_j h, Y_j)$$

Für die Ableitung / Jacobimatrix von F gilt

(5.13) Implementierung von RKV

$$F'(y) = I_{s\cdot d} -$$

$$F'(y) = I_{s\cdot d} - h \begin{bmatrix} a_{11} \overbrace{f_y(t_0+c_1h, Y_1)}^{\in \mathbb{R}^{d\times d}} & \cdots & a_{1s} f_y(t_0+c_sh, Y_s) \\ \vdots & & \\ a_{s1} f_y(t_0+c_1h, Y_1) & \cdots & a_{ss} f_y(t_0+c_sh, Y_s) \end{bmatrix}$$

f_y bezeichnet die Ableitung von $f(t,y)$ nach der zweiten Komponenten

Vereinfachung: Ersetze alle Ableitungen / Jacobimatrizen durch $J = f_y(t_0, y_0)$

Damit erhalten wir die Newtoniteration

$$\left(I_{sd} - h\,\mathfrak{A} \otimes J\right) \Delta y^{(k)} = -F(y^{(k)}) \quad \leftarrow \quad \text{LGS}$$
$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + \Delta y^{(k)}$$

mit Tensorprodukt / Kroneckerprodukt $\mathfrak{A} \otimes J = \begin{bmatrix} a_{11} J & \cdots & a_{1s} J \\ a_{s1} J & \cdots & a_{ss} J \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{s\cdot d \times s\cdot d}$

Statt einer direkten Lösung des LGS ist es effizienter $\mathfrak{A}$ zu diagonalisieren

$$\Lambda := T^{-1} \mathfrak{A}\, T \qquad (\Lambda \text{ diagonal})$$

$$I_s \otimes I_d - h\,\mathfrak{A} \otimes J = (T \otimes I_d)\left(I_s \otimes I_d - h\,\Lambda \otimes J\right)(T^{-1} \otimes I_d)$$

Nun berechnet man $q^{(k)} = -\left(T^{-1} \otimes I_d\right) F\left(y^{(k)}\right) = \begin{bmatrix} q_1^{(k)} \\ \vdots \\ q_s^{(k)} \end{bmatrix}$

Löse (parallel) für $j = 1 .. s$

$$\left(I_d - h \lambda_j J\right) \Delta z_j^{(k)} = q_j^{(k)} \qquad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1 .. \lambda_s)$$

$\nwarrow$ $d \times d$ LGS

und setze

$$\Delta y^{(k)} = \left(T \otimes I_d\right) \Delta z^{(k)}, \quad \text{wobei} \quad \Delta z^{(k)} = \begin{bmatrix} \Delta z_1^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta z_s^{(k)} \end{bmatrix}$$