



D I P L O M A R B E I T

Numerische Lösung singulärer Randwertprobleme zweiter Ordnung in impliziter Form

ausgeführt am Institut für
Analysis und Scientific Computing
der Technischen Universität Wien

unter Anleitung von Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Ewa
Weinmüller

unter Mitwirkung von Univ.Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn. Othmar Koch

durch

Georg Kitzhofer

Zum Anningerblick 34
2331 Vösendorf

Datum

Unterschrift

Inhaltsverzeichnis

1	Problemstellung	4
1.1	Kollokationsverfahren	4
1.2	Runge-Kutta Basis für die Kollokationslösung von Differentialgleichungen zweiter Ordnung	6
1.2.1	Definition für das Intervall $[0, 1]$	6
1.2.2	Berechnung der Runge-Kutta Basis im Intervall $[0,1]$	7
1.2.3	Definition für allgemeine Intervalle	8
1.3	Kollokationsgleichungen in der Runge-Kutta Basis	10
1.3.1	Allgemeine Form der Kollokationsgleichungen	10
1.3.2	Das Newtonverfahren	10
1.3.3	Aufstellen der Gleichungen und der Jakobimatrix	11
2	Implementierung in Matlab	16
2.1	Programmdokumentation <code>kollimplizitord2</code>	17
2.1.1	Beispiel	17
2.1.2	<code>bvpfile</code> Generator	17
2.1.3	Der Befehl <code>run</code>	21
2.1.4	Der Befehl <code>neuerstartwert</code>	22
2.1.5	Der Befehl <code>startprofil</code>	23
2.2	Testläufe	25
2.2.1	Nichtlineares, singuläres Beispiel (eindimensional)	25
2.2.2	Nichtlineares, singuläres Beispiel (zweidimensional)	33
2.2.3	Implizites Beispiel	39
2.2.4	Lineares, reguläres Beispiel	46
3	Quasilineare parabolische Gleichungen	50
3.1	Problemstellung	50
3.1.1	Gleichung	50
3.1.2	Transformation auf das Intervall $[0,1]$	51
3.2	Numerische Lösung mit Hilfe des Kollokationsprogramms <code>kollimplizitord2</code>	52
3.2.1	Allgemeine Bemerkungen	52
3.2.2	Verfeinerung des Gitters	52

3.2.3	Startprofil	53
3.2.4	Konvergenzordnung	54
3.2.5	Berechnung mit 3 äquidistanten Kollokationspunkten	55
3.2.6	Berechnung mit 4 äquidistanten Kollokationspunkten	62
3.2.7	Berechnung mit 5 äquidistanten Kollokationspunkten	65
3.2.8	Berechnung mit 1 bzw. 2 Kollokationspunkten	65
3.2.9	Berechnung mit 5 Gaußpunkten	69
3.2.10	Graphische Rücktransformation	70
3.2.11	Variation von σ	72
3.2.12	Variation von β	76
3.3	Vergleich mit dem Matlab-Solver <code>bvp4c</code>	79
3.3.1	Berechnung im Intervall $[0, T]$	79
3.3.2	Transformation auf das Intervall $[0, 1]$	81
3.4	Vergleich mit dem Fortran-Programm <code>colnew</code>	84
3.4.1	Berechnung im Intervall $[0, T]$	84
3.4.2	Transformation auf das Intervall $[0, 1]$	85
3.5	Vergleich mit DDASSL und Maple	87
3.6	Randwertproblem ohne Transformation	88
3.7	Originalgleichung	92
4	Die nichtlineare Schrödingergleichung	96
4.1	Problemstellung	96
4.1.1	Gleichung	96
4.1.2	Trennung von Real- und Imaginärteil	97
4.1.3	Transformation auf das Intervall $[0, 1]$	98
4.2	Numerische Lösung mit Hilfe des Kollokationsprogramms <code>kollimplizitor2</code>	101

Vorwort

Ziel der Diplomarbeit war es, einen Matlab-Code zu entwickeln, mit dem man singuläre Randwertprobleme zweiter Ordnung für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen direkt in impliziter Form numerisch behandeln kann. In dieser Arbeit wird anhand zahlreicher Beispiele vorgeführt, daß das neue Programm `kollimplizitord2` diese Aufgabe erfolgreich bewältigt.

Im 1. Kapitel beschreibe ich das verwendete Kollokationsverfahren und gehe dann im 2. Kapitel auf die Anwendung von `kollimplizitord2` ein. Bei diesem Programm habe ich besonderen Wert auf Benutzerfreundlichkeit gelegt: Es steht zum Beispiel ein Eingabeformular mit graphischer Benutzeroberfläche zur Verfügung und die Ableitungen für die analytische Berechnung der Jakobimatrix, die für das verwendete Newtonverfahren notwendig ist, werden automatisch generiert.

Kapitel 3 und 4 behandeln sehr detailliert die numerischen Ergebnisse ausgewählter Beispiele, die ich mit Hilfe zahlreicher Abbildungen veranschauliche. Außerdem wird das neue Programm mit Standardsoftware zur Lösung von Differentialgleichungen verglichen.

Besonders möchte ich Frau Dr. Ewa Weinmüller und Herrn Dr. Othmar Koch für die gute Zusammenarbeit und Unterstützung bei der Entstehung dieser Diplomarbeit danken.

Kapitel 1

Problemstellung

1.1 Kollokationsverfahren

Gegeben ist ein Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung in impliziter Form

$$g(t, z''(t), z'(t), z(t)) = 0, \quad t \in [a, b], \quad (1.1a)$$

$$R(z(a), z'(a), z(b), z'(b)) = 0 \quad (1.1b)$$

wobei

$$z : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad (1.2a)$$

$$g : [a, b] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad (1.2b)$$

$$R : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{2n}. \quad (1.2c)$$

Wir setzen voraus, daß eine Lösung von (1.1) existiert und das Problem wohlgestellt ist:

Es gilt also mit

$$g(t, \varsigma''(t), \varsigma'(t), \varsigma(t)) = \delta_1(t), \quad t \in [a, b]$$

$$R(\varsigma(a), \varsigma'(a), \varsigma(b), \varsigma'(b)) = \delta_2,$$

daß die Bedingung

$$\exists c_1, c_2 > 0 : \quad \|z^{(i)} - \varsigma^{(i)}\| \leq c_1 \|\delta_1\| + c_2 \|\delta_2\|, \quad i = 0, 1$$

erfüllt ist. Dabei bezeichnet δ_1 eine stetige Funktion, δ_2 einen Vektor in \mathbb{R}^{2n} , und $\|\cdot\|$ das Maximum im Intervall $[a, b]$ bzw. die Maximumnorm in \mathbb{R}^{2n} .

Für die numerische Lösung mittels Kollokation wird das Intervall $[a, b]$ wie in Abbildung 1.1 angegeben unterteilt. Für die x_i , $i = 0, 1, \dots, N$ wird oft auch die Bezeichnung *Gitterpunkte* (*engl. meshpoints*), für die τ_{ik} , $k =$

$1, \dots, m$ die Bezeichnung *Kollokationspunkte* (engl. *collocation points*) verwendet. Das Gitter ist im allgemeinen nicht äquidistant mit den Schrittweiten $h_i := x_{i+1} - x_i, i = 0, 1, \dots, N - 1$. Wir definieren die maximale Schrittweite $h, h := \max_{0 \leq i \leq N-1} h_i$ und das Gitter $\Delta(h) := \{x_i, i = 0, 1, \dots, N\}$.

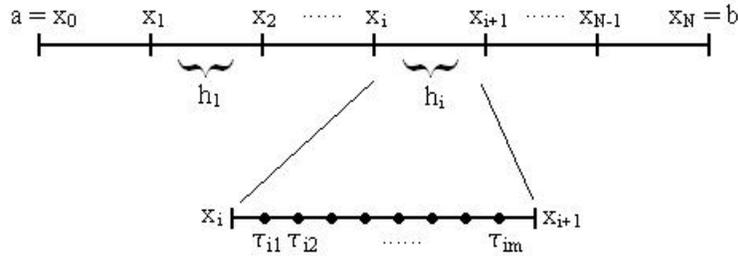


Abbildung 1.1: Gitter- und Kollokationspunkte auf $[a, b]$

Sei \mathbb{P}_{m+1} der Raum der stückweisen Polynomfunktionen vom Grad $\leq m + 1$, die global in $C^1[a, b]$ sind.

Die Lösung wird im Intervall $[x_i, x_{i+1}]$ durch ein Polynom $P_i(x)$ vom Grad $\leq m + 1$ approximiert, d.h. insgesamt durch eine Funktion

$P_{\Delta(h)} = \{P_0(x), P_1(x), \dots, P_{N-1}(x)\} \in \mathbb{P}_{m+1}$. Die Polynome erfüllen die Differentialgleichung an den Kollokationspunkten τ_{ik} exakt. Dies wird mit Hilfe der Kollokationsgleichungen (1.3a) präzisiert,

$$g(\tau_{ik}, P_i''(\tau_{ik}), P_i'(\tau_{ik}), P_i(\tau_{ik})) = 0, \quad i = 0, \dots, N - 1, \quad (1.3a)$$

$$k = 1, \dots, m,$$

$$P_{i-1}(x_i) - P_i(x_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad (1.3b)$$

$$P'_{i-1}(x_i) - P'_i(x_i) = 0, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad (1.3c)$$

$$R(P_0(a), P'_0(a), P_{N-1}(b), P'_{N-1}(b)) = 0. \quad (1.3d)$$

Die Bedingungen (1.3b) und (1.3c) stellen die Stetigkeitsbedingungen für die Lösung und ihre Ableitung dar.

Hinweis: Man beachte, daß es sich bei den $P_i(x)$ wegen (1.2) um Polynomvektoren der Dimension n handelt. Da dies bei den theoretischen Überlegungen irrelevant ist, soll eine spezielle Kennzeichnung der Einfachheit halber entfallen.

Anzahl der Unbekannten: $N(m + 2)n$, wobei N für die Anzahl der Teilintervalle, $m + 2$ für die Anzahl der Konstanten in den Polynomen und n für die Dimension der Polynomvektoren steht.

Bezeichnet ξ die exakte Lösung eines regulären Problems in expliziter Form,

$$\begin{aligned} z''(t) - g(t, z'(t), z(t)) &= 0, \quad t \in [a, b] \\ R(z(a), z'(a), z(b), z'(b)) &= 0, \end{aligned}$$

und $P_{\Delta(h)}$ die mit dem Kollokationsverfahren berechnete Lösung, so erwarten wir unter bestimmten Voraussetzungen (vgl. [8] bzw. [9]) für ein Gitter mit Schrittweite h und beliebig gewählte Kollokationspunkte für $h \rightarrow 0$ die Konvergenzordnung m , d.h.

$$|\xi^{(l)}(x) - P_{\Delta(h)}^{(l)}(x)| = \mathcal{O}(h^m), \quad l = 0, 1, \quad a \leq x \leq b.$$

Für äquidistante Kollokationspunkte gilt die Konvergenzordnung p ,

$$|\xi^{(l)}(x) - P_{\Delta(h)}^{(l)}(x)| = \mathcal{O}(h^p), \quad l = 0, 1, \quad a \leq x \leq b$$

mit $p = m + 1$ für m ungerade und $p = m$ für m gerade. Wählt man ρ_1, \dots, ρ_m allgemein so, daß

$$\begin{aligned} \int_0^1 s^k \omega(s) ds &= 0, \quad k = 0, 1, \dots, \nu, \quad \nu < m \quad \text{und} \\ \omega(s) &= (s - \rho_1)(s - \rho_2) \cdots (s - \rho_m), \end{aligned}$$

dann gilt

$$|\xi^{(l)}(x_i) - P_{\Delta(h)}^{(l)}(x_i)| = \mathcal{O}(h^{m+\nu+1}), \quad l = 0, 1, \quad i = 0, \dots, N,$$

was auch als *Superkonvergenz* bezeichnet wird. Allgemein gilt hier

$$|\xi^{(l)}(x) - P_{\Delta(h)}^{(l)}(x)| = \mathcal{O}(h^{m+1}), \quad l = 0, 1, \quad a \leq x \leq b.$$

Wie die experimentellen Ergebnisse zeigen werden, lassen sich die theoretischen Überlegungen für reguläre Probleme auch auf singuläre übertragen. Näheres zum Schätzen der Konvergenzordnung wird im Abschnitt 3.2.4 beschrieben.

1.2 Runge-Kutta Basis für die Kollokationslösung von Differentialgleichungen zweiter Ordnung

1.2.1 Definition für das Intervall $[0, 1]$

Die Basis, die für die beschriebenen Polynome $\{P_0(x), P_1(x), \dots, P_{N-1}(x)\}$ gewählt wird, muß nicht notwendigerweise die Monombasis sein. Vielmehr werden im folgenden die Koeffizienten bezüglich einer sogenannten Runge-Kutta Basis berechnet (vgl. auch [1]). Die Vorteile dieser Darstellung werden später diskutiert.

Diese wird zunächst für das Intervall $[0, 1]$ eingeführt und anschließend für

ein beliebiges Intervall $[a, b]$ verallgemeinert.

Wir betrachten m Kollokationspunkte $\rho_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad 0 < \rho_1 < \rho_2 < \rho_3 < \dots < \rho_m < 1$, auf dem Intervall $[0, 1]$. Die $m + 2$ Runge-Kutta Basispolynome $\{\varphi_1(x), \varphi_2(x), \Psi_1(x), \Psi_2(x), \dots, \Psi_m(x)\}$ für die m Kollokationspunkte $\rho_j, \quad j = 1, \dots, m$ auf dem Intervall $[0, 1]$, werden dadurch definiert, daß sie die Bedingungen

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= 1, \quad \varphi_2(x) = x, \\ \Psi_k(0) &= 0, \quad \Psi'_k(0) = 0, \quad \Psi''_k(\rho_j) = \delta_{kj}, \quad k, j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

oder äquivalent

$$\begin{pmatrix} \varphi_1(0) & \varphi'_1(0) & \varphi''_1(\rho_1) & \dots & \varphi''_1(\rho_m) \\ \varphi_2(0) & \varphi'_2(0) & \varphi''_2(\rho_1) & \dots & \varphi''_2(\rho_m) \\ \Psi_1(0) & \Psi'_1(0) & \Psi''_1(\rho_1) & \dots & \Psi''_1(\rho_m) \\ \vdots & & & & \vdots \\ \Psi_m(0) & \Psi'_m(0) & \Psi''_m(\rho_1) & \dots & \Psi''_m(\rho_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}$$

erfüllen müssen.

Stellt man ein Polynom im Intervall $[0, 1]$ mit Hilfe dieser Runge-Kutta Basis dar, also

$$p(x) := \sum_{j=1}^2 y_j \varphi_j(x) + \sum_{j=1}^m z_j \Psi_j(x),$$

so hängen die Koeffizienten y_j und z_j mit den Werten von p bzw. mit seinen Ableitungen – wie unmittelbar aus der Definition ablesbar – folgendermaßen zusammen:

$$y_1 = p(0), \quad y_2 = p'(0), \quad z_j = p''(\rho_j).$$

1.2.2 Berechnung der Runge-Kutta Basis im Intervall $[0, 1]$

Wir beschreiben nun eine Möglichkeit, wie man die Koeffizienten der Basispolynome im Intervall $[0, 1]$ bezüglich der Monombasis berechnen könnte. Es sei

$$\Psi_j(x) = \int_0^x \int_0^u L_j(v) \, dv \, du.$$

Dabei bezeichnet $L_j(x)$ das j -te Basispolynom vom Grad $\leq m$ der Lagrangebasis für die m Stützstellen ρ_1, \dots, ρ_m das durch

$$L_j(x) := \prod_{\substack{s=1 \\ s \neq j}}^m \frac{x - \rho_s}{\rho_j - \rho_s}$$

gegeben ist.

Im folgenden bezeichne $[x^k]p(x)$ den Koeffizienten von x^k eines Polynoms $p(x)$ vom Grad n in seiner Darstellung bezüglich der Monombasis, d.h. $p(x) = [x^n]x^n + [x^{n-1}]x^{n-1} + \dots + [x^k]x^k + \dots + [x^0]$.

Es sei

$$c_k^n := [x^k] \prod_{s=1}^n (x - a_s), \quad k \leq n.$$

Diese Koeffizienten lassen sich durch die Rekursion

$$c_k^n = \begin{cases} c_0^{n-1}(-a_n) & \text{für } k = 0, \\ c_{k-1}^{n-1} + c_k^{n-1}(-a_n) & \text{für } 0 < k < n, \\ 1 & \text{sonst,} \end{cases}$$

mit den Startwerten $c_0^1 = -a_1$ und $c_1^1 = 1$, berechnen.

Die Lagrange Basispolynome zu den Stützstellen ρ_1, \dots, ρ_m können also in der Form

$$L_j(x) = \frac{\sum_{s=0}^{m-1} c_s^{m-1} x^s}{\prod_{s=1, s \neq j}^m (\rho_j - \rho_s)}$$

mit

$$a_s := \begin{cases} \rho_s & \text{für } s < j, \\ \rho_{s+1} & \text{für } s \geq j \end{cases}$$

dargestellt werden.

Daraus ergibt sich

$$\Psi_j''(x) = L_j(x) = \frac{\sum_{s=0}^{m-1} c_s^{m-1} x^s}{\prod_{s=1, s \neq j}^m (\rho_j - \rho_s)}, \quad (1.4a)$$

$$\Psi_j'(x) = \int_0^x L_j(v) dv = \frac{\sum_{s=1}^m c_{s-1}^{m-1} \frac{x^s}{s}}{\prod_{s=1, s \neq j}^m (\rho_j - \rho_s)}, \quad (1.4b)$$

$$\Psi_j(x) = \int_0^x \int_0^u L_j(v) dv du = \frac{\sum_{s=2}^{m+1} c_{s-2}^{m-1} \frac{x^s}{s(s-1)}}{\prod_{s=1, s \neq j}^m (\rho_j - \rho_s)}, \quad (1.4c)$$

da $\Psi_j(0) = \Psi_j'(0) = 0$.

1.2.3 Definition für allgemeine Intervalle

Man nennt die Kollokationspunkte τ_{ik} , $k = 1, \dots, m$, auf den Intervallen $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, N-1$, *äquivalent*, wenn m reelle Zahlen ρ_k , $0 < \rho_1 < \dots < \rho_m < 1$,

existieren, so daß

$$\tau_{ik} = x_i + \rho_k \cdot h_i \quad \text{mit } h_i := x_{i+1} - x_i$$

für alle i gilt.

In Analogie zur Definition für das Intervall $[0, 1]$ werden die $m + 2$ Basispolynome der Runge-Kutta Basis $B_{RK}^{(i)} := \{\Phi_{i1}(x), \Phi_{i2}(x), \dots, \Phi_{i(m+2)}(x)\}$ durch

$$\begin{aligned} \Phi_{i1}(x) &= 1, \\ \Phi_{i2}(x) &= x - x_i \quad \text{und} \\ \Phi_{ik}(x) &= h_i^2 \Psi_{k-2} \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right) \quad \text{für } k \geq 3 \end{aligned}$$

definiert, wobei Ψ gemäß der Definition im Intervall $[0, 1]$ gewählt wird. Das Polynom $P_i(x)$ läßt sich also in der Gestalt

$$\begin{aligned} P_i(x) &= \sum_{j=1}^2 y_{ij} \Phi_{ij}(x) + \sum_{j=3}^{m+2} z_{i(j-2)} \Phi_{ij}(x) \\ &= y_{i1} + y_{i2}(x - x_i) + h_i^2 \sum_{j=1}^m z_{ij} \Psi_j \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right) \end{aligned} \quad (1.5)$$

schreiben. Dabei bezeichnen y_{ij} und z_{ij} die unbekanntenen Koeffizienten des Polynoms.

Der Vorteil dieser Darstellung ist, daß die Ψ_k nur für das Intervall $[0, 1]$ berechnet und tabelliert werden müssen. Man sieht leicht, daß die Werte von $\Psi_k'' \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right)$ für die Kollokationspunkte $x = \tau_{i1}, \dots, \tau_{im} \in [x_i, x_{i+1}]$ identisch sind mit den Werten von $\Psi_k''(\rho)$ für die Kollokationspunkte $\rho = \rho_1, \dots, \rho_m \in [0, 1]$.

Aus

$$\tau_{ij} = x_i + \rho_j(x_{i+1} - x_i) = x_i + \rho_j h_i$$

folgt

$$\Psi_k'' \left(\frac{\tau_{ij} - x_i}{h_i} \right) = \Psi_k'' \left(\frac{x_i + \rho_j h_i - x_i}{h_i} \right) = \Psi_k''(\rho_j) = \delta_{kj}.$$

Wegen

$$\frac{d}{dx} \Psi_k \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right) = \frac{1}{h_i} \frac{d}{d\rho} \Psi_k(\rho) \Big|_{\rho = \frac{x - x_i}{h_i}}, \quad k = 1, \dots, m,$$

und

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_k \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right) = \frac{1}{h_i^2} \frac{d^2}{d\rho^2} \Psi_k(\rho) \Big|_{\rho = \frac{x - x_i}{h_i}}, \quad k = 1, \dots, m,$$

ergibt sich aus der Darstellung (1.5)

$$y_{i1} = P_i(x_i), y_{i2} = P'_i(x_i), z_{ij} = P''_i(\tau_{ij}), \quad j = 1, \dots, m,$$

woraus

$$P_i(x) = P_i(x_i) + P'_i(x_i)(x - x_i) + h_i^2 \sum_{j=1}^m P''_i(\tau_{ij}) \Psi_j \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right), \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

folgt.

1.3 Kollokationsgleichungen in der Runge-Kutta Basis

1.3.1 Allgemeine Form der Kollokationsgleichungen

Mit den obigen Überlegungen ergibt sich aus (1.3) das nichtlineare Gleichungssystem für die unbekannt Parameter y_{i1}, y_{i2}, z_{ij} , $i = 0, 1, \dots, N-1$, $j = 1, \dots, m$

$$g(\tau_{ik}, z_{ik}, P'_i(\tau_{ik}), P_i(\tau_{ik})) = 0, \quad i = 0, \dots, N-1, \quad (1.6a)$$

$$k = 1, \dots, m,$$

$$P_{i-1}(x_i) - y_{i1} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (1.6b)$$

$$P'_{i-1}(x_i) - y_{i2} = 0, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (1.6c)$$

$$R^1(y_{01}, y_{02}, P_{N-1}(b), P'_{N-1}(b)) = 0, \quad (1.6d)$$

$$R^2(y_{01}, y_{02}, P_{N-1}(b), P'_{N-1}(b)) = 0, \quad (1.6e)$$

mit

$$P'_i(x) = y_{i2} + h_i \sum_{j=1}^m z_{ij} \Psi'_j \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right),$$

$$P_i(x) = y_{i1} + y_{i2}(x - x_i) + h_i^2 \sum_{j=1}^m z_{ij} \Psi_j \left(\frac{x - x_i}{h_i} \right),$$

wobei hier $R : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ in $R^1 : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ und $R^2 : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ aufgeteilt worden ist.

1.3.2 Das Newtonverfahren

In diesem Abschnitt wird kurz das Grundprinzip des Newtonverfahrens beschrieben (vgl. auch [2]).

Das Newtonverfahren im eindimensionalen Fall

Um eine Nullstelle $x_* \in \mathbb{R}$ einer gegebenen Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zu bestimmen, wählt man einen geeigneten Startwert x_0 und führt die Iteration

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, \dots$$

solange durch, bis man ausreichend nahe an der Lösung x_* gelangt ist. Natürlich müssen für die Konvergenz dieses Verfahrens ganz bestimmte Voraussetzungen erfüllt sein, die hier nicht näher erläutert werden (vgl. [2]).

Das Newtonverfahren im mehrdimensionalen Fall

Eine Funktion $F : \mathbb{R}^{N^*} \rightarrow \mathbb{R}^{N^*}$ heißt in einem Punkt $x \in \mathbb{R}^{N^*}$ *differenzierbar*, falls eine lineare Abbildung $DF(x) : \mathbb{R}^{N^*} \rightarrow \mathbb{R}^{N^*}$ mit der Eigenschaft

$$\frac{\|F(x+h) - F(x) - (DF)(x)(h)\|}{\|h\|} \rightarrow 0 \quad \text{für } h \rightarrow 0, h \in \mathbb{R}^{N^*}$$

existiert.

Die Abbildung $DF(x)$ ist so eindeutig festgelegt und wird durch die Jakobimatrix

$$DF := \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \frac{\partial F_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial x_{N^*}} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & \frac{\partial F_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial x_{N^*}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{N^*}}{\partial x_1} & \frac{\partial F_{N^*}}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial F_{N^*}}{\partial x_{N^*}} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N^* \times N^*} \quad (1.7)$$

repräsentiert.

Die Rekursion für das Newtonverfahren zur Bestimmung einer Nullstelle wird nun ähnlich wie im eindimensionalen Fall durch

$$x_{n+1} = x_n - (DF(x_n))^{-1}(F(x_n)), \quad n = 0, 1, \dots,$$

gebildet. Für weitere Details und Konvergenzordnungen siehe [2].

1.3.3 Aufstellen der Gleichungen und der Jakobimatrix

Die in Abschnitt 1.3.1 behandelten Gleichungen werden nun (ähnlich wie in [1]) mit dem in Abschnitt 1.3.2 beschriebenen Newtonverfahren gelöst. Dazu ist es notwendig, sowohl die Gleichungen als auch die Jakobimatrix (siehe (1.7)) für unseren Fall aufzustellen.

Die Koeffizienten der Kollokationsgleichungen aus (1.6) werden nun in die Reihenfolge, die durch den Vektor

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &:= (y_{01}, y_{02}, z_{01}, \dots, z_{0m}, y_{11}, y_{12}, z_{11}, \dots, z_{1m}, \dots, z_{N-1,m}), \quad \text{d.h.} \\ \mathbf{x} &= \left(\begin{pmatrix} y_{01}^1 \\ \vdots \\ y_{01}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_{02}^1 \\ \vdots \\ y_{02}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} z_{01}^1 \\ \vdots \\ z_{01}^n \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} z_{0m}^1 \\ \vdots \\ z_{0m}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_{11}^1 \\ \vdots \\ y_{11}^n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y_{12}^1 \\ \vdots \\ y_{12}^n \end{pmatrix}, \right. \\ &\quad \left. \begin{pmatrix} z_{11}^1 \\ \vdots \\ z_{11}^n \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} z_{N-1,m}^1 \\ \vdots \\ z_{N-1,m}^n \end{pmatrix} \right) \end{aligned}$$

repräsentiert wird, gebracht.

Daraus ergibt sich die Darstellung der Gleichungen aus (1.6) durch

$$F(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} R^1(y_{01}, y_{02}, P_{N-1}(b), P'_{N-1}(b)) \\ R^2(y_{01}, y_{02}, P_{N-1}(b), P'_{N-1}(b)) \\ g(\tau_{01}, z_{01}, P'_0(\tau_{01}), P_0(\tau_{01})) \\ \vdots \\ g(\tau_{0m}, z_{0m}, P'_0(\tau_{0m}), P_0(\tau_{0m})) \\ P_0(x_1) - y_{11} \\ P'_0(x_1) - y_{12} \\ g(\tau_{11}, z_{11}, P'_1(\tau_{11}), P_1(\tau_{11})) \\ \vdots \\ g(\tau_{1m}, z_{1m}, P'_1(\tau_{1m}), P_1(\tau_{1m})) \\ P_1(x_2) - y_{21} \\ P'_1(x_2) - y_{22} \\ \vdots \\ g(\tau_{N-1,m}, z_{N-1,m}, P'_{N-1}(\tau_{N-1,m}), P_{N-1}(\tau_{N-1,m})) \end{pmatrix} = 0.$$

Um die Jakobimatrix (vgl. (1.7)) aufzustellen, wird nun F mit Hilfe der Kettenregel

$$\frac{\partial g(\Phi_1(w), \Phi_2(w), \dots, \Phi_n(w))}{\partial w} = \sum_{i=1}^n D_i g \frac{\partial \Phi_i}{\partial w} \quad (1.8)$$

nach dem Vektor \mathbf{x} abgeleitet.

Die Jakobimatrix ist schwach besetzt (*“sparse matrix”*) und hat die folgende Blockstruktur, vgl. [1]:

gilt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial g_{ik}}{\partial y_{i1}} &= D_4 g \cdot 1_n, \\ \frac{\partial g_{ik}}{\partial y_{i2}} &= D_3 g \cdot 1_n + D_4 g \cdot (\tau_{ik} - x_i), \\ \frac{\partial g_{ik}}{\partial z_{iq}} &= D_2 g \cdot \delta_{kq} + D_3 g \cdot h_i \cdot \Psi'_q \left(\frac{\tau_{ik} - x_i}{h_i} \right) + \\ &\quad + D_4 g \cdot h_i^2 \cdot \Psi_q \left(\frac{\tau_{ik} - x_i}{h_i} \right), \quad 1 \leq q \leq m.\end{aligned}$$

Die Teilblöcke J_i , $i = 0, \dots, N-1$, der Jakobimatrix lassen sich also in der Form

$$J_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_{i1}}{\partial y_{i1}} & \frac{\partial g_{i1}}{\partial y_{i2}} & \frac{\partial g_{i1}}{\partial z_{i1}} & \cdots & \frac{\partial g_{i1}}{\partial z_{im}} \\ \frac{\partial g_{i2}}{\partial y_{i1}} & \frac{\partial g_{i2}}{\partial y_{i2}} & \frac{\partial g_{i2}}{\partial z_{i1}} & \cdots & \frac{\partial g_{i2}}{\partial z_{im}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_{im}}{\partial y_{i1}} & \cdots & \cdots & \cdots & \frac{\partial g_{im}}{\partial z_{im}} \end{pmatrix}$$

darstellen.

Die Blöcke R der Randbedingungen

Für die Randbedingung muß eine Fallunterscheidung gemacht werden, da die Unbekannten y_{01} und y_{02} für $N = 1$ in den Polynomen $P_{N-1}(b)$ und $P'_{N-1}(b)$ vorkommen:

Für $N \neq 1$ setzen sich die Teilmatrizen aus

$$R_0^p = (D_1 R^p \cdot 1_n, D_2 R^p \cdot 1_n), \quad p = 1, 2$$

und

$$\begin{aligned}R_{N-1}^p &= \left(D_3 R^p \cdot 1_n, D_3 R^p \cdot (b - x_{N-1}) + D_4 R^p \cdot 1_n, \right. \\ &\quad \left. D_3 R^p \cdot h_{N-1}^2 \cdot \underbrace{\Psi_1 \left(\frac{b - x_{N-1}}{h_{N-1}} \right)}_{=1} + D_4 R^p \cdot h_{N-1} \cdot \Psi'_1(1), \dots, \right. \\ &\quad \left. D_3 R^p \cdot h_{N-1}^2 \cdot \Psi_m(1) + D_4 R^p \cdot h_{N-1} \cdot \Psi'_m(1) \right), \quad p = 1, 2\end{aligned}$$

zusammen. Für den Fall $N = 1$ gilt

$$R_0^p = \left(D_1 R^p \cdot 1_n + D_3 R^p \cdot 1_n, D_2 R^p \cdot 1_n + D_3 R^p \cdot (b-a) + D_4 R^p \cdot 1_n, \right. \\ \left. D_3 R^p \cdot (b-a)^2 \cdot \underbrace{\Psi_1 \left(\frac{b-a}{h_0} \right)}_{=1} + D_4 R^p \cdot (b-a) \cdot \Psi'_1(1), \dots, \right. \\ \left. D_3 R^p \cdot (b-a)^2 \cdot \Psi_m(1) + D_4 R^p \cdot (b-a) \cdot \Psi'_m(1) \right), \quad p = 1, 2.$$

Die Blöcke C der Stetigkeitsbedingungen

Die Blöcke für die Stetigkeitsbedingungen werden durch

$$C_i = \begin{pmatrix} 1 & (x_{i+1} - x_i) & h_i^2 \cdot \Psi_1 \left(\underbrace{\frac{x_{i+1} - x_i}{h_i}}_{=1} \right) & \dots & h_i^2 \cdot \Psi_m(1) & -1 & 0 \\ 0 & 1 & h_i \cdot \Psi'_1(1) & \dots & h_i \cdot \Psi'_m(1) & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

gebildet.

Kapitel 2

Implementierung in Matlab

Das im Kapitel 1 beschriebene Kollokationsverfahren ist in Matlab (Version 6.5.0.180913a Release 13, June 18, 2002) implementiert worden. Zum Lösen der nichtlinearen algebraischen Gleichungen wird der Solver “solve_nonlinear_sys.m” aus “SBVP” [7], der im wesentlichen nach dem Newtonverfahren (“fast frozen Newton”) arbeitet, verwendet.

Das neue Paket `kollimplizitord2` beinhaltet die Dateien

- `gleichungen.m` (beinhaltet die wichtigsten Routinen, wie Aufstellen der Gleichungen, der Jakobimatrix, etc.)
- `run.m` (zum Ausführen des Programms)
- `generator.m` (zum einfachen Erzeugen der Datei, die die Problemdata beinhaltet (`bvpfile`))
- `neuerstartwert.m` (zum Verfeinern des Gitters)
- `newtonsolver.m` (zum Aufrufen des Newtonsolvers)
- `Psi0.m` und `Psi1.m` (Zur Berechnung der Runge-Kutta Basis)
- `zeichnepoly.m` (zur graphischen Ausgabe)
- `startprofil.m` (zur Übergabe eines Startprofils)

sowie aus [7]

- `solve_nonlinear_sys.m`
- `sbvpset.m`

2.1 Programmdokumentation kollimplizitor2

Es wird hier anhand eines Beispiels eine Anleitung gegeben, wie man mit dem Programm auf einfache und benutzerfreundliche Art Differentialgleichungen zweiter Ordnung numerisch lösen kann.

2.1.1 Beispiel

Zu Demonstrationszwecken sei die reguläre Differentialgleichung

$$z''(t) - \frac{1}{t} \begin{pmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix} z'(t) - \frac{1}{t^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} z(t) - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad (2.1)$$

mit $z = (z_1, z_2)^T$ und den Randbedingungen

$$z_1(0.5) = 3, \quad (2.2a)$$

$$z_2(0.5) = 0, \quad (2.2b)$$

$$z_1'(1) = 0, \quad (2.2c)$$

$$z_2(1) = 3 \quad (2.2d)$$

gegeben. Das Beispiel wird in Abschnitt 2.2.4 noch näher untersucht.

2.1.2 bvpfile Generator

Zuallererst ruft man mit dem Befehl `generator` den bvpfile Generator auf. In unserem Beispiel gibt man bei der ersten Abfrage am besten `demo1.m` ein. Dies ist der Name der Datei, die später die Problemdaten beinhalten soll. Als nächstes erscheint das in Abb. 2.1 abgebildete Formular, das nun im Detail beschrieben wird.

1. Geben Sie in dieses Feld eine Zahl vom Typ *real* ein. Alle Koeffizienten der Basispolynome werden auf diesen Wert gesetzt. Sollte es bei der Ausführung Probleme mit der Konvergenz geben, so variieren Sie diesen Wert oder verwenden Sie vor dem Aufruf des Programms den Befehl `startprofil` (siehe auch Abschnitt 2.1.5).
2. Geben Sie in dieses Feld eine Zahl vom Typ *integer* ein, die die Dimension n des Problems (d.h. die Anzahl der Gleichungen) bestimmt. In unserem Beispiel ist sie 2.
3. Wählen Sie hier `false`, wenn Sie den Vektor mit den Gitterpunkten selbst vorgeben wollen und `true`, wenn Sie Gaußpunkte verwenden wollen. In unserem Beispiel setzen wir den Wert auf `true`.

1. Geben Sie den Startwert ein (z.B. 2 bedeutet: Vektor aus $N^{(m+2)*n}$ Zweiern)
1

2. Geben Sie die Dimension des Problems ein
2

3. Wollen Sie mit Standardwerten für rho rechnen? (true/false)
true

4. Geben Sie das rho (Unterteilung des Intervalls [0,1]) ein bzw. den entsprechenden Eintrag bei Standardwerten (z.B. [1/2 2/3] bei false)
[1 4]

5. Geben Sie die x_j (Gitter) ein (z.B. [0 0.5 1])
[0.5 0.6 0.9 1]

6. Geben Sie die Funktion g ein (z.B. $z'+[z'(1); z'(2)]$ bei Dimension 2)
 $z''-[0.5 0; 0 0.5]/t*z'-[0 1; 0 0]/t^2*z-[1; 1]$

7. Geben Sie die Randbedingung 1 ein (z.B. $z_a+z_b'+[z_a(1); z_a(2)]$)
[za(1)-3; za(2)]

8. Geben Sie die Randbedingung 2 ein
[zb(1); zb(2)-3]

OK Cancel

Abbildung 2.1: bvpfile Generator

4. Sofern Sie den vorhergehenden Wert auf `false` gesetzt haben, bestimmen Sie hier die Position der Kollokationspunkte - transformiert auf das Intervall $[0,1]$. Zum Beispiel für 2 äquidistante Punkte: $[1/3 \ 2/3]$. Wenn Sie den vorhergehenden Wert auf `true` gesetzt haben, so geben Sie hier einen Zeilenvektor an, der aus 2 Komponenten besteht: Die erste Komponente bestimmt, welche Tabelle Sie wählen möchten (derzeit sind nur Gaußpunkte (1) tabelliert), die zweite Komponente gibt die Anzahl der Punkte (max. 6) an. In unserem Beispiel wollen wir mit 4 Gaußpunkten rechnen, also wählen wir $[1 \ 4]$.
5. Hier können Sie manuell das Gitter festlegen. In unserem Fall wurde $[0.5 \ 0.6 \ 0.9 \ 1]$ gewählt.
6. In dieses Feld geben Sie die Funktion g in den Variablen $z_1(t), \dots, z_n(t), z'_1(t), \dots, z'_n(t), z''_1(t), \dots, z''_n(t)$, die hier durch $z(1), \dots, z(n), z'(1), \dots, z'(n), z''(1), \dots, z''(n)$ dargestellt werden, ein. Wahlweise können auch die Vektoren $z, z', z'' := [z(1); z(2); \dots; z(n)], [z'(1); z'(2); \dots; z'(n)], [z''(1); z''(2); \dots; z''(n)]$ verwendet werden.
Die beiden Eingaben
 $z'' - [0.5 \ 0; 0 \ 0.5] / t * z' - [0 \ 1; 0 \ 0] / t^2 * z - [1; 1]$
und
 $[z''(1) - 0.5 * z'(1) / t - z(2) / t^2 - 1; z''(2) - 0.5 * z'(2) / t - 1]$
für unser Problem sind also äquivalent.
7. Geben Sie hier die 1. Randbedingung R_1 ein. $z_i(a) =: za(i), z'_i(a) =: za'(i), z_i(b) =: zb(i), z'_i(b) =: zb'(i)$. Wahlweise kann – ähnlich wie in 6. – auch nur za etc. verwendet werden.
In unserem Fall lautet sie $[za(1) - 3; za(2)]$.
8. Geben Sie hier die 2. Randbedingung R_2 ein.
In unserem Fall lautet sie $[zb'(1); zb(2) - 3]$.

Sollten Sie zum Beispiel aufgrund eines Tippfehlers (vergessene Klammer, etc.) eine Fehlermeldung erhalten, so starten Sie den `bvpfile` Generator einfach erneut und wählen Sie die Datei `last.log`. Die Eingaben, die Sie zuvor gemacht haben, erscheinen erneut und Sie können sie korrigieren. Diese Möglichkeit haben Sie auch für jede nachträgliche Änderung, die Sie vornehmen wollen.

Zum Ausführen geben Sie nun einfach

```
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,1);
```

ein. Sie sehen eine Graphik, die die gefundenen Lösungen für z_1 und z_2 darstellt. Die Änderung der Farbe zeigt die von Ihnen gewählte Intervallteilung (Gitter) an (siehe Abb. 2.2).

```
Die Datei demol.m wurde erstellt bzw. überschrieben!  
Überprüfen Sie gegebenenfalls die Eingaben in dieser Datei!  
Sie können das Kollokationsprogramm nun mit  
[k,xl,w,xltau,wtau,p]=run(@demol,1);  
aufrufen. Optional kann die Graphikausgabe (2. Argument 0) unterdrückt werden bzw.  
zusätzliche Parameter angegeben werden. Siehe Dokumentation des Programms!  
>> [k,xl,w,xltau,wtau,p]=run(@demol,1);  
||F(x)|| = 11.980609  
||F(x)|| = 0.000000  
>>
```

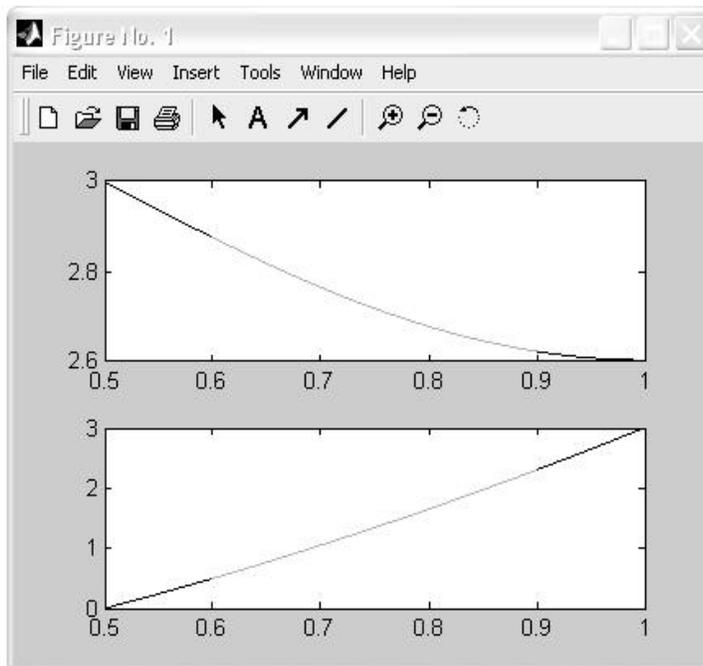


Abbildung 2.2: Ausführen des Programms

2.1.3 Der Befehl *run*

Aufruf mit

```
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(bvpfile,zeichnung,x1,start);
```

Eingabeparameter

- *bvpfile* Schreibweise z.B. @demo1 - jene Datei, die die Problemstellung beinhaltet (mit dem bvpfile Generator (siehe Abschnitt 2.1.2) automatisch generierbar).
- *zeichnung* Geben Sie hier 1 ein, wenn Sie eine automatische graphische Ausgabe wünschen, 0, wenn Sie sie unterdrücken wollen.
- *x1* Hier können Sie das Gitter aus dem bvpfile überschreiben.
- *start* Hier können Sie den Startwert aus dem bvpfile für den Newtonsolver überschreiben (Achten Sie dabei auf die Länge $n \cdot (m + 2) \cdot N$ und darauf, daß es sich um einen Spaltenvektor handelt).

Ausgabeparameter

- *k* Gibt die Koeffizienten bezüglich der Runge-Kutta Basis aus.
- *x1* Gibt das gewählte Gitter aus.
- *w* Gibt die Werte der Lösungen am Gitter aus.
- *x1tau* Gibt das gewählte Gitter und die Kollokationspunkte aus.
- *wtau* Gibt die Werte der Lösungen am Gitter und an den Kollokationspunkten aus.
- *p* Gibt die Koeffizienten der Polynome in den einzelnen Intervallen in der Monombasis aus.

Beispiel

Unser Beispiel wollen wir nun mit einem anderen Gitter berechnen und dann die Werte der Funktion ausgeben lassen.

```
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,0,[0.5 0.7 0.9 1]);
```

```
x1
```

```
x1 =
```

```
    0.5000    0.7000    0.9000    1.0000
```

```
w
```

```
w =
```

```

3.0000    2.7653    2.6230    2.6036
0.0000    1.0479    2.3012    3.0000

```

Die erste Zeile in w sind die Werte von z_1 , die zweite Zeile jene von z_2 . Die graphische Ausgabe wurde hier unterdrückt. Will man die Funktion nachträglich sehen, kann man ganz einfach den Befehl `zeichnepoly(p,x1,2)` verwenden. Das dritte Argument (2) ist die Dimension n des Problems. Möchte man einen Wert außerhalb des Gitters und der Kollokationspunkte (z.B. an 0.8), so geschieht dies mit dem Befehl

```

gleichungen('wert',k,@demo1,x1,0.8)
ans =

    2.6786
    1.6499

```

2.1.4 Der Befehl *neuerstartwert*

Zum Berechnen eines feineren Gitters - aufbauend auf ein grobes Gitter - eignet sich die Routine

```
[x1neu,startneu]=neuerstartwert(bvpfile,x1,start,Inr,rho1);
```

Würde man das Gitter ohne diese Routine verfeinern, müßte man bei jeder Berechnung den Startwert wieder “blind” wählen. Um die Berechnungen schneller und stabiler durchführen zu können, ist es sinnvoll, die schon berechneten Ergebnisse als Grundlage für den nächsten Startwert zu verwenden. Für eine detaillierte Beschreibung zu diesem Vorgehen siehe Abschnitt 3.2.1.

Eingabeparameter

- *bvpfile* Das aktuelle *bvpfile*, das die Problemstellung beinhaltet.
- *x1* Das alte Gitter.
- *start* Die alten Koeffizienten in der Runge-Kutta Basis.
- *Inr* “Intervallnummer”, jenes Intervall (bei 1 beginnend, von links gezählt), das an der Stelle ρ^* geteilt werden soll.
- *rho1* $0 < \rho_1^* < 1$, Teilungspunkt des Intervalls.

Ausgabeparameter

- *x1neu* Das neue Gitter.
- *startneu* Der neue Startwert.

Beispiel

Wir unterteilen zuerst das dritte Intervall und danach das zweite Intervall der zuvor berechneten Lösung an den angegebenen Stellen und lassen uns zur Kontrolle den neuen Gittervektor $x1$ ausgeben.

```
[x1neu,startneu]=neuerstartwert(@demo1,x1,k,3,0.7);
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,1,x1neu,startneu);
||F(x)|| = 0.000011
||F(x)|| = 0.000000
[x1neu,startneu]=neuerstartwert(@demo1,x1,k,2,0.7);
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,1,x1neu,startneu);
||F(x)|| = 0.000488
||F(x)|| = 0.000000
x1
x1 =

    0.5000    0.7000    0.8400    0.9000    0.9700    1.0000
```

Daran, daß $\|F(x)\|$ schon bei der ersten Berechnung sehr klein ist, erkennt man, daß der neue Startwert schon sehr nahe an der Lösung gewählt wurde.

2.1.5 Der Befehl *startprofil*

Kennt man von einer Differentialgleichung nur die Werte einer Näherungslösung ξ (wenn sie zum Beispiel zuvor mit einem anderen Programm berechnet wurde), so eignet sich der Befehl *startprofil*, um die Koeffizienten bezüglich der Runge-Kutta Basispolynome auszurechnen und als neuen Startwert für das Newton-Verfahren zu verwenden. Eine detaillierte Beschreibung zur Vorgehensweise der Routine findet man in Abschnitt 3.2.3.

Die Routine wird mit

```
[x1,start]=startprofil(bvpfile,stellen,werte,x1);
```

aufgerufen.

Eingabeparameter

- *bvpfile* Das aktuelle bvpfile, das die Problemstellung beinhaltet.
- *stelle* Ein Zeilenvektor, der die Stellen, an denen die Werte von ξ bekannt sind, beinhaltet, also $[s_1, s_2, \dots, s_r]$.
- *werte* Eine Matrix der Dimension $n \times r$, die die Werte an den Stellen

s_i beinhaltet, also
$$\begin{pmatrix} \xi_1(s_1) & \xi_1(s_2) & \dots & \xi_1(s_r) \\ \vdots & & & \vdots \\ \xi_n(s_1) & \xi_n(s_2) & \dots & \xi_n(s_r) \end{pmatrix}.$$

- $x1$ Ein Zeilenvektor, der das gewünschte Gitter, für das die Koeffizienten berechnet werden sollen, beinhaltet.

Ausgabeparameter

- $x1$ Das neue Gitter.
- $start$ Der neu berechnete Startwert.

Beispiel

Wir wollen die zuvor berechneten Werte für die Standardeingaben im `bvpfile` als Startprofil für ein Gitter mit 20 äquidistanten Intervallen verwenden.

```
stellen=[0.5 0.7 0.9 1];
werte=[3 2.7653 2.623 2.6036;0 1.0479 2.3012 3];
x1=0.5:0.025:1;
[x1,start]=startprofil(@demo1,stellen,werte,x1);
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,0,x1,start);
||F(x)|| = 3.179082
||F(x)|| = 0.000000
```

Im Vergleich dazu der Aufruf ohne das berechnete Startprofil:

```
[k,x1,w,x1tau,wtau,p]=run(@demo1,0,x1);
||F(x)|| = 26.844586
||F(x)|| = 0.000000
```

2.2 Testläufe

In diesem Abschnitt wird anhand einiger einfach lösbarer Differentialgleichungen die Korrektheit des Programms getestet. Die Konvergenzordnungen werden – sofern diese bekannt ist – durch einen Vergleich mit der exakten Lösung ermittelt. Bezeichnet also ξ die exakte Lösung des Problems und ξ_i die Lösung bezüglich des Gitters mit der Schrittweite $h_i = \frac{1}{2^{i-1}}$ (eines äquidistanten Gitters), so ist die empirische Konvergenzordnung $konv_i$ durch $\frac{\ln \frac{\|\xi - \xi_i\|}{\|\xi - \xi_{i+1}\|}}{\ln 2}$ definiert, wobei $\|\cdot\|_{Gitter}$ die Maximumsnorm bezüglich der Gitterpunkte und $\|\cdot\|_{Gitter+\tau}$ die Maximumsnorm bezüglich der Gitter- und Kollokationspunkte bezeichnet.

Weitere Methoden zur Schätzung der Konvergenzordnung werden in Abschnitt 3.2.4 beschrieben.

Wie die folgenden Beispiele zeigen, entsprechen die Konvergenzordnungen in etwa den in Abschnitt 1.1 beschriebenen theoretischen Überlegungen.

2.2.1 Nichtlineares, singuläres Beispiel (eindimensional)

Es sei die nichtlineare, singuläre Differentialgleichung (vgl. [6]),

$$\begin{aligned} z''(t) + \frac{2}{t}z'(t) + z^5(t) &= 0, \\ z'(0) &= 0, \\ z(1) &= \sqrt{\frac{3}{4}}, \end{aligned}$$

von der die exakte Lösung $\xi(t) = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{t^2}{3}}}$ bekannt ist, gegeben. Die Tabellen 2.1 bis 2.12 geben die Konvergenzordnungen des Verfahrens für verschiedene Wahlen der Kollokationspunkte an. Abbildung 2.3 stellt die Lösungskurve (berechnet mit 5 Gaußpunkten und 16 Teilintervallen) graphisch dar.

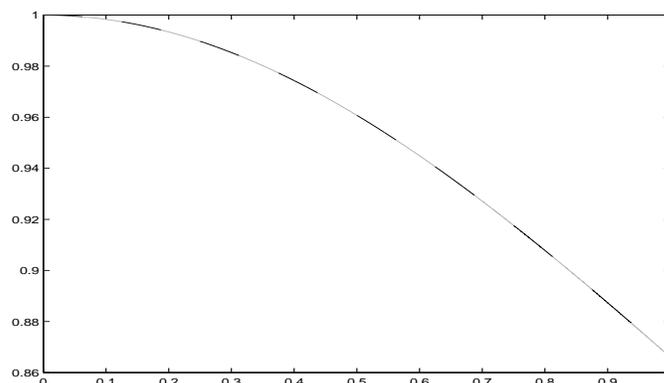


Abbildung 2.3: Numerische Lösung von Beispiel 2.2.1 für 5 Gaußpunkte und 16 Intervalle

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	1.491183e-002	1.826074	1.692130e-002	1.959866
2	4.205601e-003	2.126720	4.349660e-003	2.159074
3	9.629896e-004	2.024707	9.738885e-004	2.036632
4	2.366596e-004	2.005919	2.373679e-004	2.009137
5	5.892264e-005	2.001465	5.896734e-005	2.002285
6	1.471571e-005	2.000365	1.471851e-005	2.000571
7	3.677995e-006	2.000091	3.678170e-006	2.000143
8	9.194407e-007	2.000023	9.194516e-007	2.000036
9	2.298565e-007	2.000006	2.298572e-007	2.000009
10	5.746391e-008	2.000000	5.746395e-008	2.000001
11	1.436598e-008	1.999997	1.436598e-008	1.999998
12	3.591501e-009	1.999991	3.591501e-009	1.999991
13	8.978807e-010	1.999960	8.978807e-010	1.999960
14	2.244764e-010		2.244764e-010	

Tabelle 2.1: Konvergenzordnungen: 1 äquidistanter Punkt, Maximum 8192 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	3.242612e-003	2.158459
3	7.263300e-004	2.030881
4	1.777370e-004	2.007399
5	4.420694e-005	2.001832
6	1.103771e-005	2.000457
7	2.758555e-006	2.000114
8	6.895841e-007	2.000029
9	1.723926e-007	2.000007
10	4.309794e-008	2.000001
11	1.077448e-008	1.999999
12	2.693620e-009	2.000001
13	6.734044e-010	

Tabelle 2.2: Konvergenzordnungen: 1 äquidistanter Punkt, Maximum 8192 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	1.461648e-003	0.5402289	1.461648e-003	0.5402289
2	1.005119e-003	2.508422	1.005119e-003	2.508422
3	1.766474e-004	2.360765	1.766474e-004	2.360765
4	3.439111e-005	2.160616	3.439111e-005	2.160616
5	7.691940e-006	2.056465	7.691940e-006	2.056465
6	1.849176e-006	2.017747	1.849176e-006	2.017747
7	4.566419e-007	2.005284	4.566419e-007	2.005284
8	1.137431e-007	2.001527	1.137431e-007	2.001527
9	2.840570e-008	2.000433	2.840570e-008	2.000433
10	7.099294e-009	2.000120	7.099294e-009	2.000120
11	1.774676e-009	2.000045	1.774676e-009	2.000045
12	4.436551e-010	2.000119	4.436551e-010	2.000119
13	1.109046e-010	2.000046	1.109046e-010	2.000040
14	2.772527e-011		2.772538e-011	

Tabelle 2.3: Konvergenzordnungen: 2 äquidistante Punkte, Maximum 8192 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	8.284718e-004	2.541960
3	1.422563e-004	2.413626
4	2.669917e-005	2.192072
5	5.842764e-006	2.068939
6	1.392534e-006	2.021857
7	3.428988e-007	2.006533
8	8.533741e-008	2.001891
9	2.130640e-008	2.000537
10	5.324618e-009	2.000144
11	1.331021e-009	2.000020
12	3.327506e-010	2.000142
13	8.317946e-011	

Tabelle 2.4: Konvergenzordnungen: 2 äquidistante Punkte, Maximum 8192 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	2.145541e-004	1.749554	3.615204e-004	2.440665
2	6.380702e-005	3.991933	6.659159e-005	4.035921
3	4.010300e-006	3.986487	4.059626e-006	3.999606
4	2.530024e-007	3.996160	2.537959e-007	3.999542
5	1.585479e-008	3.998925	1.586728e-008	3.999777
6	9.916625e-010	3.999675	9.918580e-010	3.999887
7	6.199286e-011	3.999499	6.199596e-011	3.999530
8	3.875900e-012	4.015915	3.876011e-012	4.015288
9	2.395861e-013	3.559779	2.396972e-013	3.544766
10	2.031708e-014	3.608809	2.053913e-014	3.624491
11	1.665335e-015	-1.047306	1.665335e-015	-1.093109
12	3.441691e-015	-1.255257	3.552714e-015	-1.209453
13	8.215650e-015		8.215650e-015	

Tabelle 2.5: Konvergenzordnungen: 3 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	5.979672e-005	3.992299
3	3.757297e-006	3.985838
4	2.371476e-007	3.995976
5	1.486312e-008	3.998875
6	9.296697e-010	3.999687
7	5.811696e-011	3.998367
8	3.636424e-012	4.049557
9	2.196021e-013	3.418445
10	2.053913e-014	2.139064
11	4.662937e-015	-1.162271
12	1.043610e-014	

Tabelle 2.6: Konvergenzordnungen: 3 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	2.406108e-005	3.160407	2.789416e-005	3.373669
2	2.691150e-006	3.481261	2.691150e-006	3.481261
3	2.409761e-007	3.600111	2.409761e-007	3.600111
4	1.987159e-008	3.919878	1.987159e-008	3.919068
5	1.312900e-009	3.979041	1.313638e-009	3.979786
6	8.325707e-011	3.995039	8.326084e-011	3.994982
7	5.221490e-012	4.002180	5.221934e-012	4.001811
8	3.258505e-013	4.084517	3.259615e-013	4.076693
9	1.920686e-014	3.347165	1.931788e-014	3.273018
10	1.887379e-015	0.1805722	1.998401e-015	0.1699250
11	1.665335e-015	-2.159199	1.776357e-015	-2.066089
12	7.438494e-015	-0.2006974	7.438494e-015	-0.2193130
13	8.548717e-015		8.659740e-015	

Tabelle 2.7: Konvergenzordnungen: 4 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	2.801443e-006	3.663370
3	2.211045e-007	3.574562
4	1.855869e-008	3.915614
5	1.229787e-009	3.978133
6	7.803558e-011	3.994530
7	4.895750e-012	3.996373
8	3.067546e-013	4.048316
9	1.854072e-014	2.739848
10	2.775558e-015	-1.443607
11	7.549517e-015	-0.9893528
12	1.498801e-014	

Tabelle 2.8: Konvergenzordnungen: 4 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	3.048310e-006	1.000509	8.925373e-006	2.520438
2	1.523617e-006	6.149058	1.555603e-006	6.168434
3	2.146965e-008	6.005290	2.162794e-008	6.013078
4	3.342355e-010	6.000843	3.348870e-010	6.002916
5	5.219380e-012	6.028888	5.222045e-012	6.025623
6	7.993606e-014	6.169925	8.015810e-014	5.910893
7	1.110223e-015	-1.378512	1.332268e-015	-1.169925
8	2.886580e-015	-1.230298	2.997602e-015	-1.199309
9	6.772360e-015	0.5384199	6.883383e-015	0.5279316
10	4.662937e-015	-0.1622714	4.773959e-015	-0.1884451
11	5.218048e-015	-0.3033921	5.440093e-015	-0.2921808
12	6.439294e-015		6.661338e-015	

Tabelle 2.9: Konvergenzordnungen: 5 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.502148e-006	6.151220
3	2.113541e-008	6.005360
4	3.290161e-010	6.000402
5	5.139444e-012	6.024770
6	7.893686e-014	4.386243
7	3.774758e-015	-0.08246216
8	3.996803e-015	0.08246216
9	3.774758e-015	-0.2700892
10	4.551914e-015	0.03562391
11	4.440892e-015	

Tabelle 2.10: Konvergenzordnungen: 5 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	1.281311e-007	8.369594	2.150786e-006	7.046363
2	3.873966e-010	11.06565	1.627161e-008	7.687678
3	1.807443e-013	8.668885	7.892398e-011	7.924048
4	4.440892e-016	0.4150375	3.249623e-013	6.991645
5	3.330669e-016	-1.736966	2.553513e-015	1.064130
6	1.110223e-015	1.321928	1.221245e-015	0.8744691
7	4.440892e-016	-2.321928	6.661338e-016	-1.807355
8	2.220446e-015	-0.2630344	2.331468e-015	-0.2515388
9	2.664535e-015	-0.4594316	2.775558e-015	-0.4854268
10	3.663736e-015	-0.2775340	3.885781e-015	-0.2282690
11	4.440892e-015	-0.2326608	4.551914e-015	-0.2274105
12	5.218048e-015		5.329071e-015	

Tabelle 2.11: Konvergenzordnungen: 5 Gaußpunkte, Maximum 2048 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	3.872258e-010	1.106412
3	1.808553e-013	8.347843
4	5.551115e-016	-0.8479969
5	9.992007e-016	-0.4150375
6	1.332268e-015	-0.9385995
7	2.553513e-015	-0.7618403
8	4.329870e-015	0.7004397
9	2.664535e-015	-1.544321
10	7.771561e-015	0.5746942
11	5.218048e-015	

Tabelle 2.12: Konvergenzordnungen: 5 Gaußpunkte, Maximum 2048 Intervalle, Schätzverfahren

2.2.2 Nichtlineares, singuläres Beispiel (zweidimensional)

Gegeben sei das nichtlineare, singuläre Differentialgleichungssystem (vgl. [6]),

$$\begin{aligned} -z_1''(t) - \frac{1}{t}z_1'(t) + \frac{1}{t}z_1 + z_1(t)(z_1^2(t) - 1 + z_2^2(t) - \frac{2}{t}z_2(t)) &= 0, \\ -z_2''(t) - \frac{1}{t}z_2'(t) + \frac{1}{t^2}z_2(t) + z_1^2(t) \left(z_2(t) - \frac{1}{t} \right) &= 0, \\ z_1(0) &= 0, \\ z_1'(10) &= 0, \\ z_2(0) &= 0, \\ z_2(10) &= 1. \end{aligned}$$

Da hier keine exakte Lösung bekannt ist, geben die folgenden Tabellen die geschätzten Konvergenzordnungen an. Abbildung 2.4 zeigt die beiden Lösungskurven für 5 Gaußpunkte und 64 Intervalle.

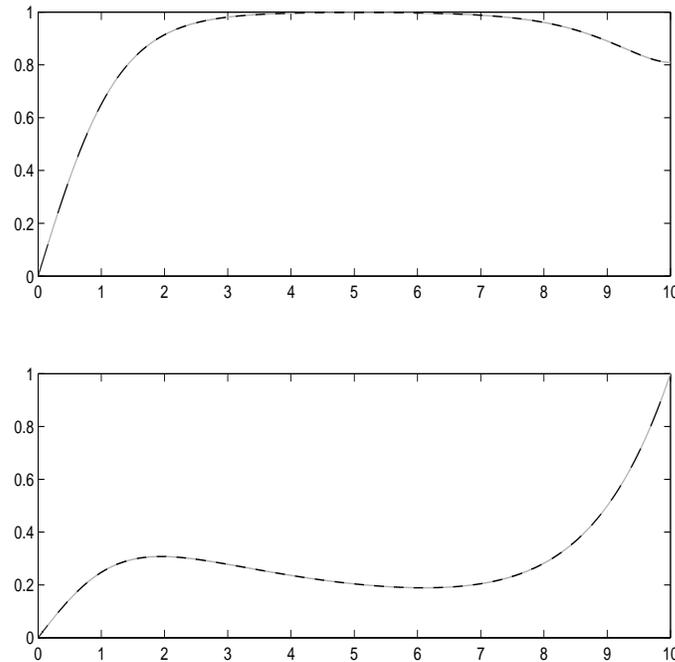


Abbildung 2.4: Numerische Lösung von Beispiel 2.2.2 für 5 Gaußpunkte und 64 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.652107e-001	0.5279514
3	1.145801e-001	1.326609
4	4.568357e-002	1.696233
5	1.409753e-002	1.916261
6	3.735002e-003	1.977323
7	9.485439e-004	1.994173
8	2.380956e-004	1.998532
9	5.958449e-005	1.999632
10	1.489992e-005	1.999908
11	3.725217e-006	1.999977
12	9.313192e-007	

Tabelle 2.13: Konvergenzordnungen z_1 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	9.474900e-003	-3.106408
3	8.160120e-002	2.871519
4	1.115021e-002	1.590666
5	3.702072e-003	2.453324
6	6.759595e-004	2.129520
7	1.544796e-004	2.019002
8	3.811458e-005	2.010653
9	9.458546e-006	2.002946
10	2.359813e-006	2.000807
11	5.896231e-007	2.000185
12	1.473869e-007	

Tabelle 2.14: Konvergenzordnungen z_2 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	6.665162e-002	0.2459038
3	5.620647e-002	1.702134
4	1.727400e-002	1.959917
5	4.440166e-003	1.981670
6	1.124235e-003	1.993932
7	2.822433e-004	1.998357
8	7.064126e-005	1.999580
9	1.766545e-005	1.999895
10	4.416685e-006	1.999974
11	1.104192e-006	1.999993
12	2.760491e-007	

Tabelle 2.15: Konvergenzordnungen z_1 : 2 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.203847e-002	0.5369729
3	8.297101e-003	-0.1875612
4	9.449045e-003	2.484705
5	1.688174e-003	2.221570
6	3.619578e-004	2.056407
7	8.701974e-005	2.006427
8	2.165823e-005	2.004700
9	5.396949e-006	2.001156
10	1.348157e-006	2.000051
11	3.370273e-007	2.000074
12	8.425248e-008	

Tabelle 2.16: Konvergenzordnungen z_2 : 2 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	8.740002e-002	1.690821
3	2.707222e-002	3.029077
4	3.316506e-003	3.320986
5	3.318673e-004	3.720887
6	2.516900e-005	3.916845
7	1.666395e-006	3.978061
8	1.057456e-007	3.994432
9	6.634660e-009	3.998576
10	4.150756e-010	3.999363
11	2.595368e-011	

Tabelle 2.17: Konvergenzordnungen z_1 : 3 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	3.968616e-003	-2.066688
3	1.662547e-002	3.835080
4	1.164930e-003	3.809964
5	8.305896e-005	3.843619
6	5.785513e-006	3.929382
7	3.797344e-007	3.980564
8	2.405530e-008	3.992594
9	1.511194e-009	3.998777
10	9.452972e-011	3.999363
11	5.910716e-012	

Tabelle 2.18: Konvergenzordnungen z_2 : 3 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	6.603024e-002	2.909323
3	8.789202e-003	3.433520
4	8.134991e-004	3.384784
5	7.788174e-005	3.771267
6	5.703889e-006	3.933791
7	3.732346e-007	3.982665
8	2.360915e-008	3.995609
9	1.480070e-009	3.998893
10	9.257539e-011	3.999843
11	5.786593e-012	

Tabelle 2.19: Konvergenzordnungen z_1 : 4 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	8.404006e-003	0.4896492
3	5.985318e-003	3.661948
4	4.728585e-004	4.760501
5	1.744527e-005	4.563707
6	7.376747e-007	3.924662
7	4.857624e-008	4.026195
8	2.981388e-009	4.006325
9	1.855216e-010	3.998918
10	1.160380e-011	4.002400
11	7.240319e-013	

Tabelle 2.20: Konvergenzordnungen z_2 : 4 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	3.182350e-002	4.077837
3	1.884503e-003	2.321571
4	3.769938e-004	5.776109
5	6.879425e-006	5.571457
6	1.446693e-007	5.871853
7	2.470431e-009	5.965714
8	3.952882e-011	5.984059
9	6.245005e-013	4.253066
10	3.275158e-014	

Tabelle 2.21: Konvergenzordnungen z_1 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.337717e-002	4.180042
3	7.379825e-004	1.699998
4	2.271411e-004	6.943358
5	1.845597e-006	5.678809
6	3.602839e-008	5.895936
7	6.050501e-010	5.971320
8	9.643730e-012	5.999186
9	1.507683e-013	2.724273
10	2.281508e-014	

Tabelle 2.22: Konvergenzordnungen z_2 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	9.589236e-004	4.580505
3	4.007877e-005	6.273219
4	5.181878e-007	8.761238
5	1.194240e-009	9.248094
6	1.963985e-012	6.445311
7	2.253753e-014	0.6653359
8	1.421085e-014	0.9776322
9	7.216450e-015	0.3499425
10	5.662137e-015	

Tabelle 2.23: Konvergenzordnungen z_1 : 5 Gaußpunkte, Maximum 1024 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	4.089576e-006	-2.244043
3	1.937325e-005	5.741024
4	3.622280e-007	9.134845
5	6.443469e-010	10.08125
6	5.947881e-013	5.404317
7	1.404432e-014	0.6431436
8	8.992806e-015	0.9135852
9	4.773959e-015	0.6983443
10	2.942091e-015	

Tabelle 2.24: Konvergenzordnungen z_2 : 5 Gaußpunkte, Maximum 1024 Intervalle

2.2.3 Implizites Beispiel

Das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{1}{t}(z''(t))^5 + z''(t)z'(t) + 4z(t) - \frac{1}{t}e^{5t} - e^{2t} - 4e^t &= 0, \\ z(0) &= 1, \\ z(1) &= e \end{aligned}$$

soll die Leistungsfähigkeit des Programms bei Problemen, die in impliziter Form gestellt sind und nicht auf explizite Form gebracht werden können, demonstrieren.

Das Beispiel wurde so konstruiert, daß es die exakte Lösung $\xi(t) = e^t$ hat.

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i,Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i,Gitter+\tau}$
1	2.110617e-003	0.000000	4.549635e-003	1.108086
2	2.110617e-003	1.973728	2.110617e-003	1.973728
3	5.373512e-004	1.993351	5.373512e-004	1.993351
4	1.349584e-004	1.991534	1.349584e-004	1.991534
5	3.393818e-005	1.997322	3.393818e-005	1.997322
6	8.500312e-006	1.999594	8.500312e-006	1.999594
7	2.125676e-006	1.999770	2.125676e-006	1.999770
8	5.315039e-007	1.999994	5.315039e-007	1.999994
9	1.328766e-007	1.999983	1.328766e-007	1.999983
10	3.321954e-008	2.000000	3.321954e-008	2.000000
11	8.304887e-009	2.000004	8.304887e-009	2.000004
12	2.076215e-009	2.000012	2.076215e-009	2.000012
13	5.190497e-010	1.999975	5.190497e-010	1.999975
14	1.297646e-010		1.297646e-010	

Tabelle 2.25: Konvergenzordnungen: 1 äquidistanter Punkt, Maximum 8192 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_{est_i}$
2	1.573266e-003	1.967086
3	4.023928e-004	1.991682
4	1.011799e-004	1.991117
5	2.545121e-005	1.997219
6	6.375081e-006	1.999568
7	1.594248e-006	1.999763
8	3.986274e-007	1.999992
9	9.965740e-008	1.999982
10	2.491466e-008	1.999998
11	6.228672e-009	2.000002
12	1.557166e-009	2.000024
13	3.892850e-010	

Tabelle 2.26: Konvergenzordnungen: 1 äquidistanter Punkt, Maximum 8192 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	1.468741e-003	0.000000	1.832753e-003	0.3194319
2	1.468741e-003	1.998833	1.468741e-003	1.998833
3	3.674825e-004	1.999691	3.674825e-004	1.999691
4	9.189030e-005	1.993606	9.189030e-005	1.993606
5	2.307461e-005	1.997462	2.307461e-005	1.997462
6	5.778809e-006	1.999816	5.778809e-006	1.999769
7	1.444886e-006	1.999732	1.444934e-006	1.999779
8	3.612887e-007	2.000000	3.612887e-007	2.000000
9	9.032221e-008	2.000000	9.032221e-008	1.999998
10	2.258055e-008	1.999994	2.258058e-008	1.999996
11	5.645162e-009	1.999997	5.645162e-009	1.999997
12	1.411293e-009	2.000012	1.411293e-009	2.000012
13	3.528202e-010	2.000030	3.528202e-010	2.000026
14	8.820322e-011		8.820344e-011	

Tabelle 2.27: Konvergenzordnungen: 2 äquidistante Punkte, Maximum 8192 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.101259e-003	1.998546
3	2.755922e-004	1.999614
4	6.891649e-005	1.993587
5	1.730588e-005	1.997457
6	4.334102e-006	1.999815
7	1.083664e-006	1.999731
8	2.709665e-007	2.000000
9	6.774166e-008	2.000000
10	1.693541e-008	1.999995
11	4.233869e-009	1.999992
12	1.058473e-009	2.000007
13	2.646170e-010	

Tabelle 2.28: Konvergenzordnungen: 2 äquidistante Punkte, Maximum 8192 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	1.180269e-005	0.0000005	8.298751e-005	2.813779
2	1.180268e-005	3.983548	1.180268e-005	3.916176
3	7.461281e-007	3.995903	7.817977e-007	4.007400
4	4.676561e-008	3.992501	4.861236e-008	4.021486
5	2.938083e-009	3.997303	2.993360e-009	4.008564
6	1.839737e-010	3.999721	1.859777e-010	4.007434
7	1.150058e-011	3.998719	1.156386e-011	4.002190
8	7.194245e-013	3.968291	7.216450e-013	3.965784
9	4.596323e-014	3.108524	4.618528e-014	3.000000
10	5.329071e-015	0.000000	5.773160e-015	0.000000
11	5.329071e-015	0.4150375	5.773160e-015	0.3785116
12	3.996803e-015	-1.637430	4.440892e-015	-1.485427
13	1.243450e-014		1.243450e-014	

Tabelle 2.29: Konvergenzordnungen: 3 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.105656e-005	3.982718
3	6.993625e-007	3.995698
4	4.384069e-008	3.992450
5	2.754419e-009	3.997290
6	1.724749e-010	3.999773
7	1.078138e-011	4.000802
8	6.734613e-013	4.019635
9	4.152234e-014	3.087463
10	4.884981e-015	-0.4474590
11	6.661338e-015	-0.9510904
12	1.287859e-014	

Tabelle 2.30: Konvergenzordnungen: 3 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	2.797427e-006	-0.0000005	8.470292e-006	1.598311
2	2.797428e-006	4.001441	2.797428e-006	4.001441
3	1.746647e-007	4.000375	1.746647e-007	4.000375
4	1.091371e-008	3.993775	1.091371e-008	3.993775
5	6.850562e-010	3.997490	6.850562e-010	3.997490
6	4.289058e-011	3.999955	4.289058e-011	3.999836
7	2.680745e-012	3.995347	2.680967e-012	3.993562
8	1.680878e-013	3.756795	1.683098e-013	3.758699
9	1.243450e-014	2.000000	1.243450e-014	1.807355
10	3.108624e-015	0.000000	3.552714e-015	0.000000
11	3.108624e-015	-1.000000	3.552714e-015	-0.9068906
12	6.217249e-015	0.1069152	6.661338e-015	0.09953567
13	5.773160e-015		6.217249e-015	

Tabelle 2.31: Konvergenzordnungen: 4 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	2.622763e-006	4.001512
3	1.637510e-007	4.000394
4	1.023164e-008	3.993781
5	6.422403e-010	3.997477
6	4.021028e-011	4.000279
7	2.512657e-012	4.008696
8	1.560974e-013	3.702493
9	1.199041e-014	1.584963
10	3.996803e-015	-0.6880560
11	6.439294e-015	-0.5343364
12	9.325873e-015	

Tabelle 2.32: Konvergenzordnungen: 4 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i,Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i,Gitter+\tau}$
1	1.700303e-008	-0.000127	3.223459e-007	4.244619
2	1.700453e-008	5.981983	1.700453e-008	5.924674
3	2.690346e-010	6.009682	2.799367e-010	6.023539
4	4.175549e-012	6.170923	4.303224e-012	6.192432
5	5.795364e-014	2.818453	5.884182e-014	2.801921
6	8.215650e-015	-0.07594885	8.437695e-015	-0.1096245
7	8.659740e-015	-0.1740294	9.103829e-015	-0.1343011
8	9.769963e-015	-0.06413034e	9.992007e-015	-0.06273576
9	1.021405e-014	-0.06140054	1.043610e-014	-0.08926734
10	1.065814e-014	0.7269815	1.110223e-014	0.7369656
11	6.439294e-015	-1.408806	6.661338e-015	-1.378512
12	1.709743e-014		1.731948e-014	

Tabelle 2.33: Konvergenzordnungen: 5 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_{est_i}$
2	1.673549e-008	5.981542
3	2.648590e-010	6.007201
4	4.117817e-012	5.959574
5	6.616929e-014	4.634206
6	2.664535e-015	-0.2223924
7	3.108624e-015	0.000000
8	3.108624e-015	-0.1926451
9	3.552714e-015	-0.1459432
10	9.769963e-015	-0.5405684
11	1.421085e-014	

Tabelle 2.34: Konvergenzordnungen: 5 äquidistante Punkte, Maximum 2048 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	8.304468e-014	0.0510394	3.958833e-008	6.708200
2	8.015810e-014	7.495855	3.786149e-010	6.851850
3	4.440892e-016	-3.584963	3.277822e-012	6.942710
4	5.329071e-015	2.584963	2.664535e-014	4.321928
5	8.881784e-016	0.000000	1.332268e-015	0.000000
6	8.881784e-016	0.4150375	1.332268e-015	0.000000
7	6.661338e-016	-1.000000	1.332268e-015	-0.4150375
8	1.332268e-015	-1.584963	1.776357e-015	-1.321928
9	3.996803e-015	-0.6374299	4.440892e-015	-0.5849625
10	6.217249e-015	0.3479233	6.661338e-015	0.3219281
11	4.884981e-015	-0.4474590	5.329071e-015	-0.5025003
12	6.661338e-015		7.549517e-015	

Tabelle 2.35: Konvergenzordnungen: 5 Gaußpunkte, Maximum 2048 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	7.971401e-014	4.028408
3	4.884981e-015	-0.0641303
4	5.107026e-015	3.523562
5	4.440892e-016	-1.321928
6	1.110223e-015	-0.2630344
7	1.332268e-015	-1.584963
8	3.996803e-015	-0.4150375
9	5.329071e-015	-0.6629650
10	8.437695e-015	-0.3959287
11	1.110223e-014	

Tabelle 2.36: Konvergenzordnungen: 5 Gaußpunkte, Maximum 2048 Intervalle, Schätzverfahren

2.2.4 Lineares, reguläres Beispiel

Das lineare, reguläre Demonstrationsbeispiel aus Abschnitt 2.1 wird nun numerisch untersucht. Die exakte Lösung des Problems ist

$$\begin{aligned}\xi_1(t) &= \frac{1}{18(\sqrt{2}-4)}(-108 \ln(t)t^{3/2} + 272t^{3/2} + 36t^2\sqrt{2} - 144t^2 - \\ &\quad -12 \ln t - 24 \ln t\sqrt{2} - 32t^{3/2}\sqrt{2} - 51 \ln 2\sqrt{2} - \\ &\quad -164 - 23\sqrt{2} - 12 \ln 2, \\ \xi_2(t) &= \frac{t^2\sqrt{2} - 4t^2 - 9t^{3/2} + 1 + 2\sqrt{2}}{\sqrt{2} - 4}.\end{aligned}$$

Die Berechnungen wurden für 1 und für 5 äquidistante Punkte durchgeführt.

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	3.333431e-002	1.608288	3.333431e-002	1.608288
2	1.093323e-002	1.868416	1.093323e-002	1.868416
3	2.994327e-003	1.962941	2.994327e-003	1.962941
4	7.680601e-004	1.990388	7.680601e-004	1.990388
5	1.932985e-004	1.997573	1.932985e-004	1.997573
6	4.840598e-005	1.999392	4.840598e-005	1.999392
7	1.210660e-005	1.999848	1.210660e-005	1.999848
8	3.026969e-006	1.999962	3.026969e-006	1.999962
9	7.567621e-007	1.999990	7.567621e-007	1.999990
10	1.891918e-007	1.999998	1.891918e-007	1.999998
11	4.729802e-008	2.000000	4.729802e-008	2.000000
12	1.182450e-008	2.000005	1.182450e-008	2.000005
13	2.956116e-009		2.956116e-009	

Tabelle 2.37: Konvergenzordnungen z_1 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_{i_Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_{i_Gitter+\tau}$
1	4.440892e-016	-38.700719	1.122020e-003	2.499594
2	1.984027e-004	1.809162	1.984027e-004	1.809162
3	5.661554e-005	1.948841	5.661554e-005	1.948841
4	1.466480e-005	1.968511	1.466480e-005	1.968511
5	3.747099e-006	1.996625	3.747099e-006	1.996625
6	9.389691e-007	1.999155	9.389691e-007	1.999155
7	2.348798e-007	1.999687	2.348798e-007	1.999687
8	5.873269e-008	1.999910	5.873269e-008	1.999910
9	1.468409e-008	1.999984	1.468409e-008	1.999984
10	3.671063e-009	2.000000	3.671063e-009	2.000000
11	9.177659e-010	1.999980	9.177659e-010	1.999980
12	2.294447e-010	1.999892	2.294447e-010	1.999887
13	5.736545e-011		5.736567e-011	

Tabelle 2.38: Konvergenzordnungen z_2 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	7.938905e-003	1.834313
3	2.226267e-003	1.953591
4	5.747615e-004	1.987980
5	1.448925e-004	1.996966
6	3.629938e-005	1.999240
7	9.079630e-006	1.999810
8	2.270207e-006	1.999952
9	5.675704e-007	1.999988
10	1.418938e-007	1.999997
11	3.547352e-008	1.999999
12	8.868388e-009	

Tabelle 2.39: Konvergenzordnungen z_1 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.417872e-004	1.756959
3	4.195074e-005	1.935760
4	1.096523e-005	1.965254
5	2.808130e-006	1.995780
6	7.040893e-007	1.998944
7	1.761513e-007	1.999634
8	4.404898e-008	1.999896
9	1.101304e-008	1.999979
10	2.753300e-009	2.000008
11	6.883212e-010	2.000007
12	1.720795e-010	

Tabelle 2.40: Konvergenzordnungen z_2 : 1 äquidistanter Punkt, Maximum 4096 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	1.918889e-004	4.902753	1.918889e-004	4.902753
2	6.414669e-006	5.558879	6.414669e-006	5.558879
3	1.360771e-007	5.861553	1.360771e-007	5.861553
4	2.340355e-009	5.962062	2.340355e-009	5.962062
5	3.754241e-011	5.958983	3.754241e-011	5.958983
6	6.035172e-013	4.823367	6.035172e-013	4.823367
7	2.131628e-014	0.263034	2.131628e-014	0.227410
8	1.776357e-014	0.415037	1.820766e-014	0.403356
9	1.332268e-014	-0.378512	1.376677e-014	-0.367732
10	1.731948e-014	-0.802061	1.776357e-014	-0.786596
11	3.019807e-014		3.064216e-014	

Tabelle 2.41: Konvergenzordnungen z_1 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter}$	$konv_i_{Gitter}$	$\ \xi - \xi_i\ _{Gitter+\tau}$	$konv_i_{Gitter+\tau}$
1	4.440892e-016	-28.093052	8.803912e-007	2.791596
2	1.271515e-007	5.577858	1.271515e-007	5.577858
3	2.662067e-009	5.832402	2.662067e-009	5.826804
4	4.671874e-011	5.976080	4.690037e-011	5.979738
5	7.421841e-013	6.662318	7.431833e-013	6.558906
6	7.327472e-015	-0.084889	7.882583e-015	0.020464
7	7.771561e-015	0.605721	7.771561e-015	0.485427
8	5.107026e-015	-0.902703	5.551115e-015	-0.815575
9	9.547918e-015	-0.188445	9.769963e-015	-0.212994
10	1.088019e-014	0.614710	1.132427e-014	0.672425
11	7.105427e-015		7.105427e-015	

Tabelle 2.42: Konvergenzordnungen z_2 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle, globaler Fehler ermittelt bezüglich der exakten Lösung

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	6.278592e-006	5.552973
3	1.337367e-007	5.859855
4	2.302813e-009	5.962113
5	3.693890e-011	5.985281
6	5.830891e-013	6.188726
7	7.993606e-015	-0.222392
8	9.325873e-015	0.070389
9	8.881784e-015	-1.232661
10	2.087219e-014	

Tabelle 2.43: Konvergenzordnungen z_1 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle, Schätzverfahren

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$
2	1.246224e-007	5.573478
3	2.617049e-009	5.830812
4	4.597933e-011	5.967161
5	7.349676e-013	5.715336
6	1.398881e-014	1.977280
7	3.552714e-015	-0.700440
8	5.773160e-015	0.115477
9	5.329071e-015	-0.736966
10	8.881784e-015	

Tabelle 2.44: Konvergenzordnungen z_2 : 5 äquidistante Punkte, Maximum 1024 Intervalle, Schätzverfahren

Kapitel 3

Quasilineare parabolische Gleichungen

Wir wenden nun unser neues Programm `kollimplizitor2` auf ein Beispiel an, das vor allem in der Physik praktische Anwendungen findet (vgl. [3]).

3.1 Problemstellung

3.1.1 Gleichung

Gegeben sei die gewöhnliche Differentialgleichung

$$(z^\sigma(\tau)z'(\tau))' - m\tau z'(\tau) - \frac{1}{\beta-1}z(\tau) + z^\beta(\tau) = 0, \quad \tau > 0, \quad (3.1)$$

mit den Randbedingungen

$$z'(0) = 0, \quad (3.2a)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} z(\tau)\tau^{1/m(\beta-1)} = C, \quad (3.2b)$$

wobei C eine passende Konstante ist und m mit

$$m = \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{2\beta-2} > 0 \quad (3.3)$$

angenommen wird (vgl. [3]).

Wegen

$$(z^\sigma(\tau)z'(\tau))' = z(\tau)^{\sigma-1}\sigma(z'(\tau))^2 + z(\tau)^\sigma z''(\tau)$$

läßt sich die Gleichung auch in der Form

$$z''(\tau)z(\tau)^\sigma + z(\tau)^{\sigma-1}\sigma(z'(\tau))^2 - m\tau z'(\tau) - \frac{1}{\beta-1}z(\tau) + z^\beta(\tau) = 0, \quad \tau \in (0, \infty),$$

schreiben.

3.1.2 Transformation auf das Intervall [0,1]

Zur numerischen Lösung wird das Problem vom Intervall $\tau \in (0, \infty)$ auf das Intervall $t \in (0, 1]$ transformiert.

Man setze dazu

$$z_1(t) := z(\tau). \quad (3.4)$$

Die Funktion $z_1(t)$ repräsentiert die Funktion $z(\tau)$ für $\tau \in (0, 1]$. Die erste Gleichung im transformierten Gleichungssystem lautet also

$$z_1''(t) = \frac{-z_1(t)^{\sigma-1} \sigma (z_1'(t))^2 + m t z_1'(t) + \frac{1}{\beta-1} z_1(t) - z_1^\beta(t)}{z_1(t)^\sigma}.$$

Für $\tau \in (1, \infty)$ wird $z(\tau)$ durch die Variable

$$z_2(t) := z\left(\frac{1}{t}\right) \quad (3.5)$$

$$(3.6)$$

dargestellt. Aus

$$z_2'(t) = \frac{dz\left(\frac{1}{t}\right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z' \left(\frac{1}{t} \right)$$

und

$$\left(z' \left(\frac{1}{t} \right) \right)' = \frac{dz' \left(\frac{1}{t} \right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z'' \left(\frac{1}{t} \right)$$

erhält man schließlich

$$\left(z' \left(\frac{1}{t} \right) \right)' = \frac{-z_2(t)^{\sigma-1} \sigma (z_2'(t))^2 + m \frac{1}{t} z_2'(t) + \frac{1}{\beta-1} z_2(t) - z_2^\beta(t)}{-t^2 z_2(t)^\sigma}.$$

Wegen

$$z' \left(\frac{1}{t} \right) = -t^2 z_2'(t) \Rightarrow \left(z' \left(\frac{1}{t} \right) \right)' = -2t z_2'(t) - t^2 z_2''(t)$$

bekommt man nun mit $t \in (0, 1]$ das transformierte Gleichungssystem

$$z_1''(t) z_1(t)^\sigma + z_1(t)^{\sigma-1} \sigma (z_1'(t))^2 - \quad (3.7a)$$

$$-m t z_1'(t) - \frac{1}{\beta-1} z_1(t) + z_1^\beta(t) = 0,$$

$$-t^2 (-2t z_2'(t) - t^2 z_2''(t)) \cdot z_2(t)^\sigma + \quad (3.7b)$$

$$+ z_2(t)^{\sigma-1} \sigma (-t^2 z_2'(t))^2 + m t z_2'(t) - \frac{1}{\beta-1} z_2(t) + z_2^\beta(t) = 0,$$

bzw. für die Gleichung (3.7b) mit der Division durch t^2

$$\begin{aligned} (2tz_2'(t) + t^2 z_2''(t)) z_2(t)^\sigma + t^2 z_2(t)^{\sigma-1} \sigma (z_2'(t))^2 + \\ + m \frac{z_2'(t)}{t} - \frac{1}{\beta-1} \frac{z_2(t)}{t^2} + \frac{z_2^\beta(t)}{t^2} = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die Darstellung (3.8) ist sinnvoll, da hohe negative t -Potenzen vermieden werden und somit höhere numerische Stabilität im Kollokationsprogramm gewährleistet wird.

Für $\beta > \sigma + 1$ gilt für die Randbedingungen

$$z_1'(0) = 0, \quad (3.9a)$$

$$z_2(0) = 0, \quad (3.9b)$$

$$z_1(1) = z_2(1) \quad \text{und} \quad (3.9c)$$

$$z_1'(1) = -z_2'(1). \quad (3.9d)$$

3.2 Numerische Lösung mit Hilfe des Kollokationsprogramms kollimplizitord2

3.2.1 Allgemeine Bemerkungen

Für die Konvergenz des Newtonverfahrens, ist die Wahl eines geeigneten Startwertes entscheidend. In den weiteren Abschnitten wird das Startprofil auf folgende Art ermittelt:

Ersetzt man die Bedingung (3.9b) durch $z_1(0) = \alpha$, so erhält man ein Gleichungssystem, das – wie die Erfahrung zeigt – bezüglich des Startwertes weniger empfindlich ist. Entscheidend ist hierbei allerdings die Wahl eines geeigneten α , welches möglichst nahe an der exakten Lösung für $z_1(0)$ liegen sollte.

Im Verlauf der Arbeit hat sich herausgestellt, daß das Programm für die meisten Werte von σ und β auch mit dem Startprofil $z_1(t) = c$ und $z_2(t) = c \cdot t$ konvergiert, wobei c eine passende Konstante ist (vgl. Abschnitt 3.2.12).

3.2.2 Verfeinerung des Gitters

Um ein grobes Gitter zu verfeinern und die Lösung auf dem vorhergehenden Gitter als Startwert für das nächste zu benutzen, kann man folgendermaßen vorgehen (vgl. auch Abschnitt 3.2.3):

Man nehme an, das Kollokationsprogramm würde als Basis für die zu berechnenden Koeffizienten die Monombasis benutzen. Sei dann $p(x) = k_{m+1}x^{m+1} + k_m x^m + \dots + k_0$ ein Polynom $(m+1)$ -ten Grades (wobei m wie üblich die Anzahl der Kollokationspunkte bezeichnet), welches vom Kollokationsprogramm als Lösung für das Intervall $[a, b]$ ermittelt wurde. Die Koeffizienten

$[k_{m+1}, k_m, \dots, k_0]$ wären also der optimale Startwert für dieses Intervall. Ausgehend von dieser Lösung ist nun ein geeigneter Startwert für die Intervalle $[a, t]$ und $[t, b]$ mit $a < t < b$ gesucht. Wegen der Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms bietet sich hier $[k_{m+1}, k_m, \dots, k_0, k_{m+1}, k_m, \dots, k_0]$ an.

Will man diese Überlegungen nun auf die Runge-Kutta Basis übertragen, so hat man zu bedenken, daß die Basispolynome auf jedem Intervall anders definiert sind (vergleiche (1.5)). Daher hat man noch eine Basistransformation durchzuführen.

Seien $J_{(i,m+1)}, J_{(i,m)}, \dots, J_{(i,0)}$ die Koeffizienten des i -ten Basispolynom der Basis A und $K_{(i,m+1)}, K_{(i,m)}, \dots, K_{(i,0)}$ jene zum i -ten Basispolynom der Basis B , so lassen sich unter Kenntnis der Koeffizienten k_{m+1}, k_m, \dots, k_0 bezüglich der Basis B die Koeffizienten bezüglich der Basis A durch

$$\begin{pmatrix} J_{(1,m+1)} & \cdots & J_{(m+2,m+1)} \\ J_{(1,m)} \\ \vdots \\ J_{(1,0)} & \cdots & J_{(m+2,0)} \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} K_{(1,m+1)} & \cdots & K_{(m+2,m+1)} \\ K_{(1,m)} \\ \vdots \\ K_{(1,0)} & \cdots & K_{(m+2,0)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_{m+1} \\ k_m \\ \vdots \\ k_0 \end{pmatrix}$$

bestimmen.

3.2.3 Startprofil

Kennt man von einem Differentialgleichungssystem die Werte einer Näherungslösung, nicht aber die Koeffizienten bezüglich der Runge-Kutta Basis, so können diese folgendermaßen ermittelt werden:

Mit den Bezeichnungen aus Abschnitt 1.2.3 sei

$$A_i := \begin{pmatrix} \Phi_{i1}(x_i) & \Phi_{i2}(x_i) & \cdots & \Phi_{i(m+2)}(x_i) \\ \Phi_{i1}(\tau_{i1}) & \Phi_{i2}(\tau_{i1}) & \cdots & \Phi_{i(m+2)}(\tau_{i1}) \\ \Phi_{i1}(\tau_{i2}) & \Phi_{i2}(\tau_{i2}) & \cdots & \Phi_{i(m+2)}(\tau_{i2}) \\ \vdots & & & \vdots \\ \Phi_{i1}(x_{i+1}) & \Phi_{i2}(x_{i+1}) & \cdots & \Phi_{i(m+2)}(x_{i+1}) \end{pmatrix}.$$

Sind nun die Werte $P_{i0}, \dots, P_{i(m+1)}$ an den Stellen $x_i, \tau_{i1}, \tau_{i2}, \dots, x_{i+1}$ bekannt (diese kann man zum Beispiel durch Splineinterpolation der bekannten Näherungslösung ermitteln), so erhält man (unter der Voraussetzung, daß A_i invertierbar ist) die Koeffizienten bezüglich der Runge-Kutta Basis durch

$$A_i^{-1} \cdot \begin{pmatrix} P_{i0} \\ P_{i1} \\ \vdots \\ P_{i(m+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \\ \vdots \\ z_{im} \end{pmatrix}.$$

3.2.4 Konvergenzordnung

Da für dieses Problem keine exakte Lösung bekannt ist, wird die Konvergenzordnung folgendermaßen geschätzt:

Für ein äquidistantes Gitter mit Schrittweite $h_i = \frac{1}{2^{i-1}}$ wird die numerische Lösung mit ξ_i bezeichnet. Wenn ξ die exakte Lösung ist und ξ_{i+1} und ξ_{i+2} die numerischen Approximationen auf den Gittern mit Schrittweite $h_i/2$ und $h_i/4$ sind, so nehmen wir

$$\begin{aligned} \xi_i - \xi &\approx Ch_i^p, \\ \xi_{i+1} - \xi &\approx Ch_i^p \frac{1}{2^p}, \\ \xi_{i+2} - \xi &\approx Ch_i^p \frac{1}{4^p}, \end{aligned}$$

mit $p \in \mathbf{N}$ an. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \xi_i - \xi_{i+1} &= Ch_i^p \left(1 - \frac{1}{2^p}\right), \\ \xi_{i+1} - \xi_{i+2} &= Ch_i^p \left(1 - \frac{1}{2^p}\right) \frac{1}{2^p}. \end{aligned}$$

Die Konvergenzordnung kann somit mit

$$konv_est_i \approx \frac{\ln \frac{\|\xi_i - \xi_{i+1}\|}{\|\xi_{i+1} - \xi_{i+2}\|}}{\ln 2} \quad (3.10)$$

geschätzt werden. Dabei bezeichnet $\|\cdot\|$ die Maximumsnorm auf dem Raum der Gittervektoren.

Um die Ergebnisse zu verifizieren, wird noch eine zweite Art, um die Konvergenzordnung zu bestimmen, verwendet. Dazu wird eine (ebenfalls numerisch berechnete) Referenzlösung ξ_{ref} für ξ gewählt, welche schon viel genauer ist als jene Lösungen, für die die Konvergenzordnung ermittelt wird.

Die Konvergenzordnung berechnet sich dann aus

$$konv_ref_i \approx \frac{\ln \frac{err_i}{err_{i+1}}}{\ln 2}, \quad (3.11)$$

mit

$$err_i := \|\xi_i - \xi_{ref}\| \gg \|\xi_{ref} - \xi\|.$$

3.2.5 Berechnung mit 3 äquidistanten Kollokationspunkten

Die experimentellen Untersuchungen mit `kollimplizitor2` von Abschnitt 3.2.5 bis Abschnitt 3.2.10 für die transformierten Gleichungen (3.7)-(3.9) sind wie in [5] mit den Parametern $\beta = 2$ und $\sigma = 0.1$ durchgeführt.

Als Referenzlösung ξ_{ref} wird eine Lösung mit 5 Gaußknoten und 128 Intervallen gewählt, die in Abschnitt 3.2.9 untersucht wird.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$	err_i	$konv_ref_i$
2	2.046441e-001	2.378020	1.710750e-001	2.349425
3	3.936804e-002	2.752908	3.356906e-002	2.533263
4	5.840308e-003	7.271236	5.798974e-003	7.132321
5	3.780729e-005	3.514868	4.133411e-005	3.550893
6	3.307461e-006	4.007521	3.526820e-006	4.007000
7	2.056415e-007		2.193594e-007	3.999160
8			1.371795e-008	

Tabelle 3.1: Konvergenzordnungen z_1

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$	err_i	$konv_ref_i$
2	2.783419e-001	2.887227	2.464827e-001	2.032926
3	3.762154e-002	-0.8579792	6.023026e-002	-0.1813000
4	6.818896e-002	5.750599	6.829540e-002	5.728809
5	1.266518e-003	3.881084	1.287799e-003	3.981858
6	8.595845e-005	2.419198	8.150602e-005	2.470785
7	1.607080e-005		1.470311e-005	2.221823
8			3.151910e-006	

Tabelle 3.2: Konvergenzordnungen z_2

Allgemein erkennt man in den Tabellen 3.1 und 3.2, daß die beiden unterschiedlich berechneten Konvergenzordnungen nur marginal voneinander abweichen. Für z_1 stellt sich die Konvergenzordnung ab $i \geq 5$ sehr schön bei ≈ 4 ein (was auch der klassischen Konvergenzordnung für dieses Kollokationsverfahren entspricht). Bei z_2 sieht die Tabelle leider nicht mehr so schön aus. Für $i = 4$ und $i = 5$ entsprechen die Konvergenzordnungen den Erwartungen. Warum ab $i \geq 6$ eine Ordnungsreduktion auf ≈ 2.22 vorliegt (vgl. auch Tab. 3.3), müßte man noch näher untersuchen.

Interessant ist aber vor allem, wie die negative Ordnung an $i = 3$ zustande kommt. Dazu sieht man sich am besten die Graphik Abb. 3.5 (besonders z_1) an. Man erkennt, daß die Lösungen ξ_2 und ξ_3 rein vom äußeren Erscheinungsbild (bzw. der "Form") stark von den Lösungen für größeres i

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
7	2.056415e-007	3.999130	1.607080e-005	2.214519
8	1.286034e-008	3.999582	3.462588e-006	2.210529
9	8.040044e-010	4.000218	7.481096e-007	2.218615
10	5.024270e-011	4.010758	1.607295e-007	2.221353
11	3.116840e-012	3.476594	3.446687e-008	2.222028
12	2.799982e-013		7.387622e-009	

Tabelle 3.3: Fortsetzung der Tabellen 3.1 und 3.2, ohne Vergleich zur Referenzlösung, Maximum 4096 Intervalle

abweichen. Das könnte darauf hindeuten, daß die hier gefundenen Lösungen nur ganz speziell für diese Art der Intervallteilung existieren, aber bei feinerem Gitter nicht gegen die exakte Lösung konvergieren. Die Lösungen ξ_2 und ξ_3 sind mit den übrigen also nicht vergleichbar.

Bei asymptotischen Aussagen muß man sich im Klaren sein, daß sie für genügend kleines h gelten. Die Konvergenzordnung ist eine Aussage für $h \rightarrow 0$, d.h. für große Werte von h kann man keine sinnvolle Aussage über die Ordnung machen.

In den folgenden Graphiken stellt die obige Zeichnung immer z_1 , die untere z_2 dar. Die Abbildungen 3.2 und 3.3 beziehen sich noch auf das Problem mit der Anfangsbedingung $z_1(0) = \alpha$, wobei hier 1.04 gewählt wurde. Letztendlich konnte das Programm selbständig einen guten Näherungswert für $z_1(0)$, nämlich 1.02656200888933, finden, was auch den Ausführungen in [5] mit $\alpha = 1.0265620225916$ entspricht.

Wie bereits in Abschnitt 3.1.2 erwähnt, sollte man das α in der ersten Anfangsbedingung möglichst nahe am tatsächlichen Wert für $z_1(0)$ wählen. Wählt man einerseits $\alpha > 1.06$, konvergiert das Verfahren nicht. Wählt man das α andererseits zu nahe bei 1, läuft man bei dieser Parameterwahl Gefahr, in die triviale Lösung $z \equiv 1$ der Differentialgleichung zu "rutschen", die natürlich bei der Bedingung $z_2(0) = 0$ keine richtige Lösung sein kann und somit zwangsläufig zu Divergenz des Newtonverfahrens führt (siehe Abbildung 3.1).

Wie in Abschnitt 3.2.1 bereits erwähnt, hat sich herausgestellt, daß auch die Wahl des Startprofils $z_1(t) = 0$ und $z_2(t) = t$ für jede beliebige Intervallteilung (mit mindestens zwei Intervallen) zur Konvergenz des Verfahrens führt. Für die berechneten Werte macht dies allerdings keinen substantiellen Unterschied.

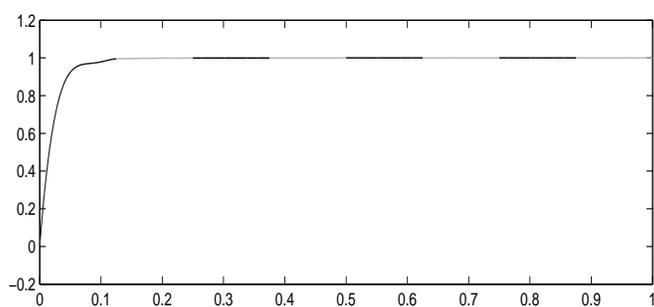
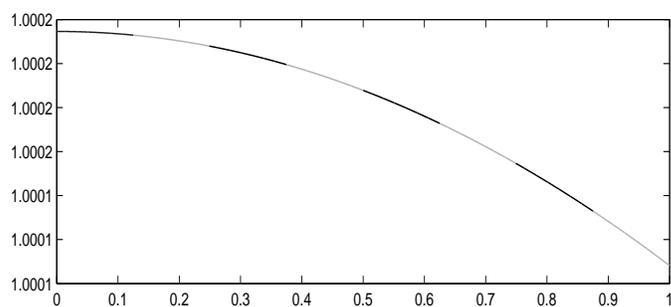


Abbildung 3.1: "Lösung" für α zu nahe bei 1 (1.015)

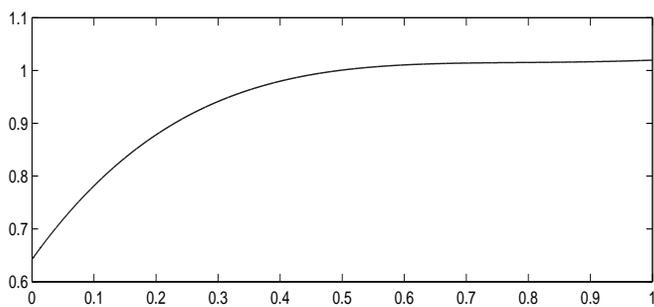
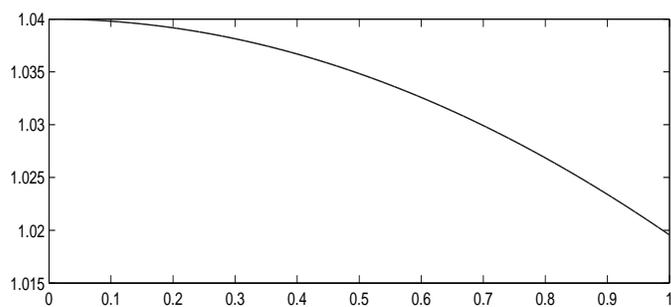


Abbildung 3.2: $z_1(0) = 1.04$, ein Intervall

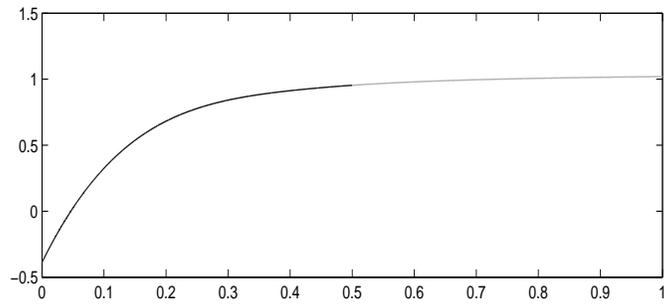
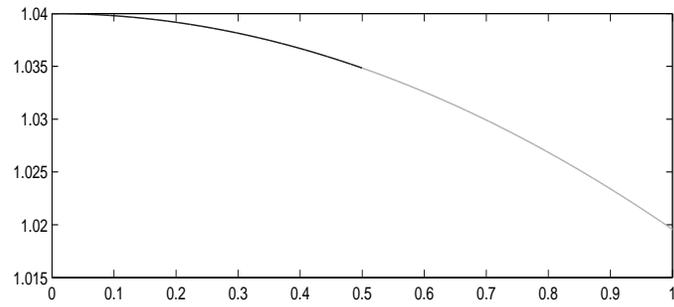


Abbildung 3.3: $z_1(0) = 1.04$, 2 Intervalle

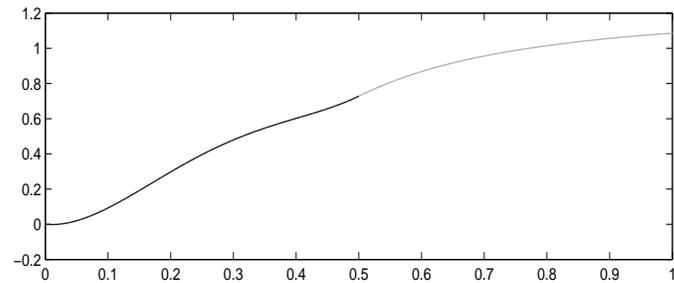
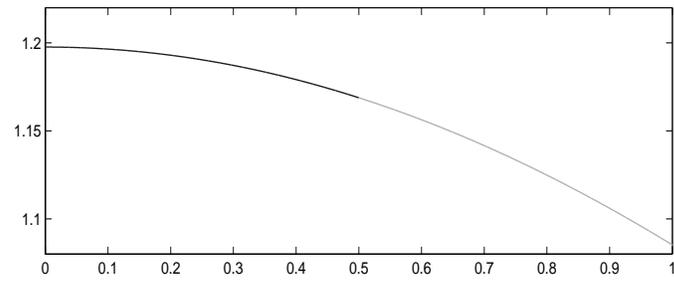


Abbildung 3.4: $\xi_2, z_2(0) = 0$, 2 Intervalle

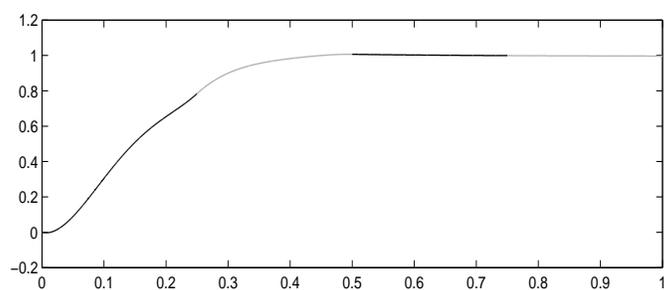
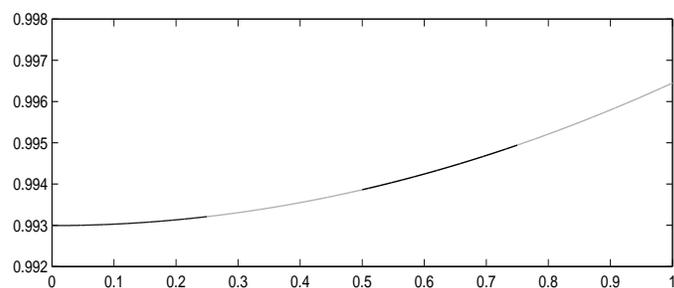


Abbildung 3.5: ξ_3 , 4 Intervalle

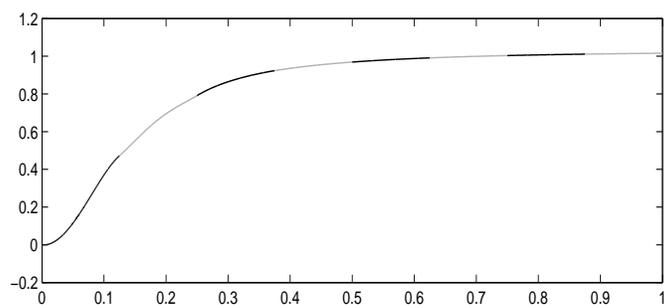
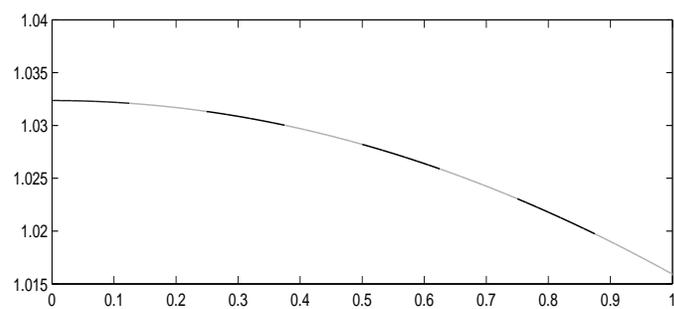


Abbildung 3.6: ξ_4 , 8 Intervalle

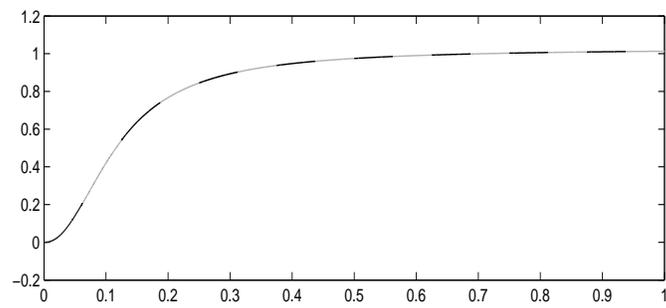
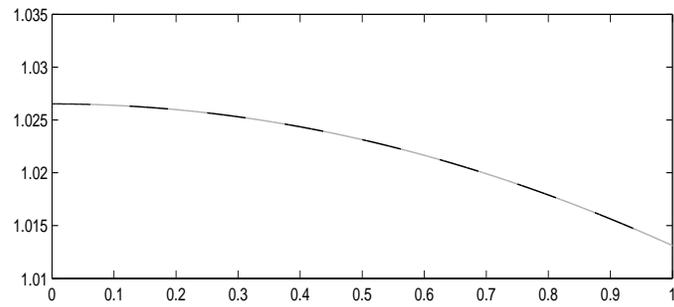


Abbildung 3.7: ξ_5 , 16 Intervalle

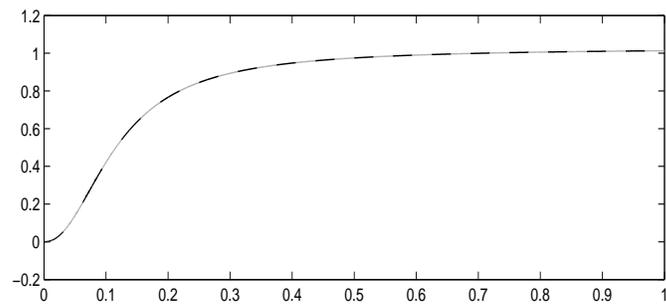
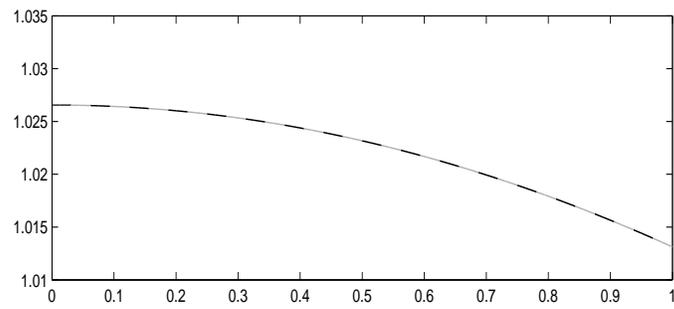


Abbildung 3.8: ξ_6 , 32 Intervalle

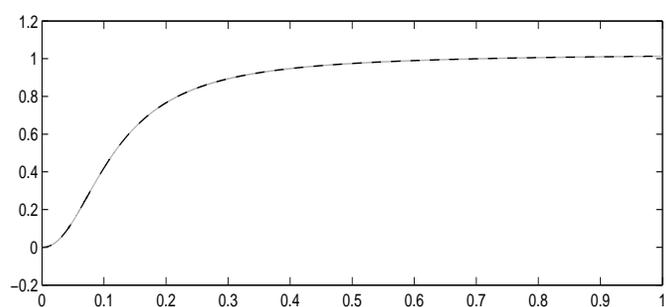
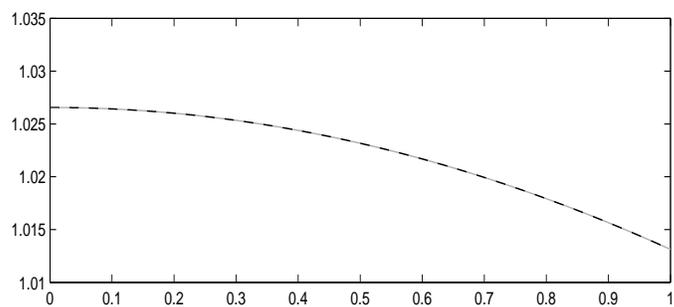


Abbildung 3.9: ξ_7 , 64 Intervalle

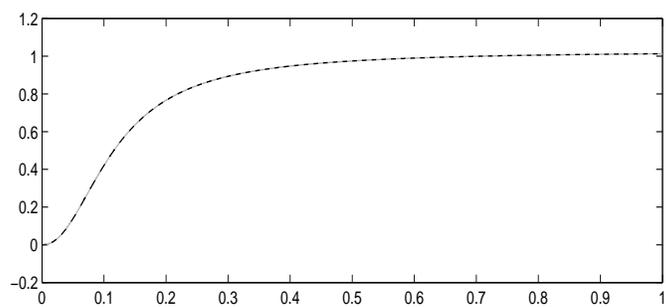
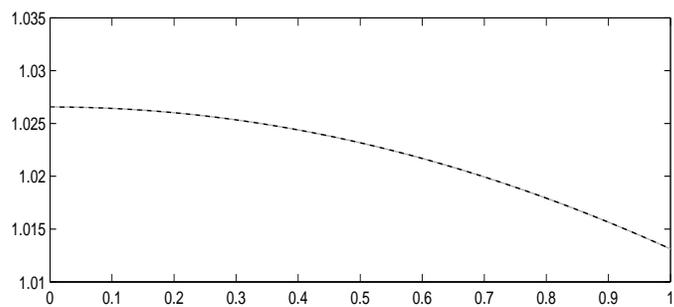


Abbildung 3.10: ξ_8 , 128 Intervalle

3.2.6 Berechnung mit 4 äquidistanten Kollokationspunkten

Die Referenzlösung wird wie in 3.2.5 gewählt. Wie in Tabelle 3.2 scheint hier eine Ordnungsreduktion vorzuliegen. Auch hier führt das Startprofil $z_1(t) = 1$ und $z_2(t) = t$ für jede beliebige Intervallteilung (mindestens 2 Intervalle) zum Erfolg. Die Abbildungen 3.11-3.14 stellen 4 ausgewählte Lösungskurven graphisch dar.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$	err_i	$konv_ref_i$
2	1.834426e-001	2.517999	2.091219e-001	2.512860
3	3.202632e-002	2.799347	3.663981e-002	2.989482
4	4.600655e-003	8.547402	4.613489e-003	8.489747
5	1.229689e-005	4.610816	1.283396e-005	4.578701
6	5.032704e-007	3.989723	5.370745e-007	3.989851
7	3.167926e-008		3.380413e-008	3.991752
8			2.124873e-009	

Tabelle 3.4: Konvergenzordnungen z_1

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ $	$konv_est_i$	err_i	$konv_ref_i$
2	1.995535e-001	0.3849559	2.221375e-001	0.2833177
3	1.528185e-001	1.435318	1.825302e-001	1.683993
4	5.650699e-002	7.628227	5.680707e-002	7.280564
5	2.856124e-004	2.000048	3.653712e-004	2.195647
6	7.140073e-005	2.363803	7.975879e-005	2.222482
7	1.387161e-005		1.709011e-005	2.131868
8			3.899318e-006	

Tabelle 3.5: Konvergenzordnungen z_2

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
7	3.167926e-008	3.991321	1.387161e-005	2.151775
8	1.991901e-009	3.998234	3.121607e-006	2.051792
9	1.246463e-010	3.997938	7.528824e-007	1.994331
10	7.801537e-012	3.918227	1.889616e-007	1.962121
11	5.160317e-013		4.849716e-008	

Tabelle 3.6: Fortsetzung der Tabellen 3.4 und 3.5, ohne Vergleich zur Referenzlösung, Maximum 2048 Intervalle

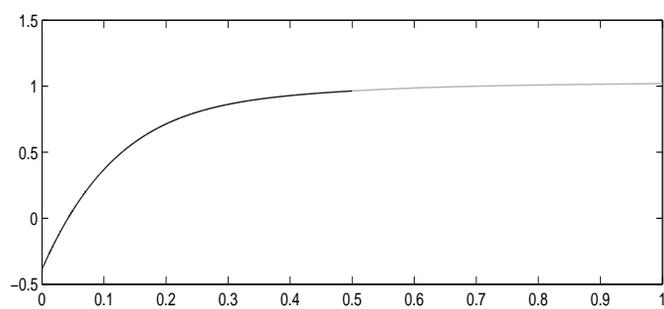
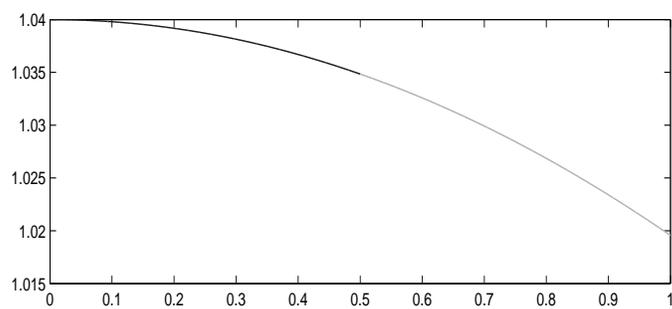


Abbildung 3.11: $z_1(0) = 1.04$, 2 Intervalle

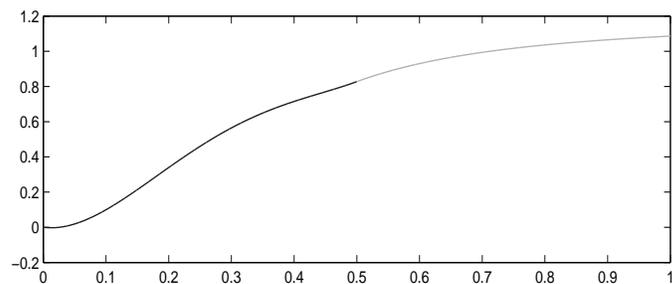
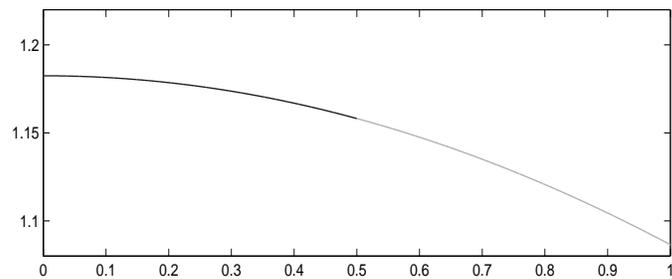


Abbildung 3.12: $\xi_2, z_2(0) = 0$, 2 Intervalle

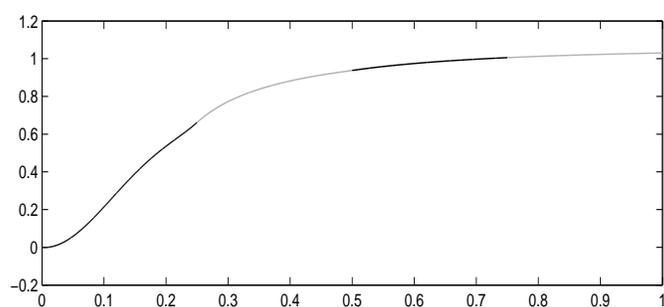
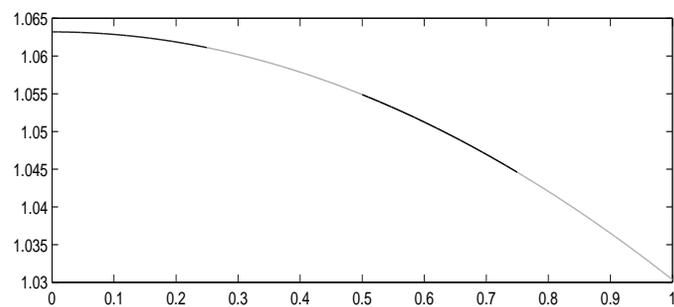


Abbildung 3.13: ξ_3 , 4 Intervalle

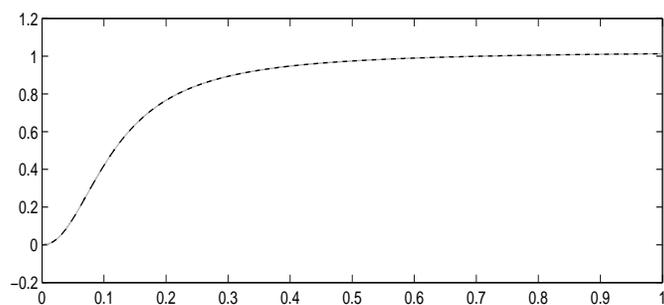
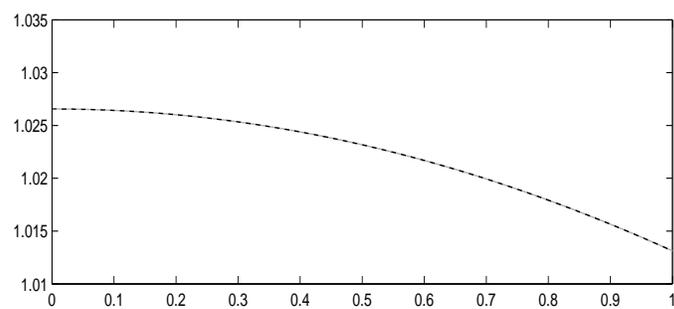


Abbildung 3.14: ξ_8 , 128 Intervalle

3.2.7 Berechnung mit 5 äquidistanten Kollokationspunkten

Die Konvergenzordnungen mit 5 äquidistanten Kollokationspunkten wurden nur mit dem Schätzverfahren bestimmt. Besonders interessant ist hier, daß sich die Ordnung für z_2 – genau wie bei 3 äquidistanten Punkten – wieder bei ≈ 2.22 einpendelt. Auch die Vorgabe des Startprofils $z_1(t) = 0$ und $z_2(t) = t$ führte hier zur Konvergenz des Verfahrens.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
3	9.604632e-003	3.797801	7.167969e-002	3.311467
4	6.906034e-004	11.105157	7.220133e-003	7.146757
5	3.135042e-007	6.542527	5.095150e-005	1.332190
6	3.363153e-009	5.637715	2.023614e-005	2.140513
7	6.754997e-011	6.053929	4.589540e-006	2.205843
8	1.016742e-012	5.857036	9.948197e-007	2.218710
9	1.754152e-014	0.946229	2.137204e-007	2.221464
10	9.103829e-015	-1.271805	4.582671e-008	2.222059
11	2.198242e-014		9.822276e-009	

Tabelle 3.7: Konvergenzordnungen für 5 äquidistante Kollokationspunkte, Maximum 2048 Intervalle

3.2.8 Berechnung mit 1 bzw. 2 Kollokationspunkten

Die Berechnung für einen Gaußpunkt liefert grundsätzlich sehr schöne Konvergenzordnungen. Damit das Newtonverfahren aber überhaupt gegen die richtige Lösung konvergiert, ist es notwendig, das erste Startprofil bereits mit vielen Intervallen, sehr nahe an der exakten Lösung zu wählen, was folgende Ursachen hat:

Betrachtet man Abbildung 3.15, so sieht man, daß die (nahezu) exakte Lösung für z_2 im Intervall $[0, \frac{1}{2}]$ einen Wendepunkt besitzt.

Die Polynome, durch die die Intervalle für einen Gaußpunkt interpoliert werden, haben aber nur Grad 2 und somit keinen Wendepunkt. Wie man in den Abbildungen 3.16 und 3.17 feststellen kann, können die ersten Näherungen also die Gestalt der Lösung nicht wiedergeben. Stattdessen “rutscht” der Newtonsolver - ähnlich wie bei der Wahl von α zu nahe bei 1 in Abschnitt 3.2.5 - in die konstante Lösung $z = 1$ der Differentialgleichung (für diese Parameterwahl), die wegen der Randbedingung (3.2b) selbstverständlich nicht richtig sein kann.

Um in den Konvergenzbereich zu gelangen sind – wie die Erfahrung zeigt – im Startprofil mindestens 32 Intervalle notwendig. Dieses ist ausgehend

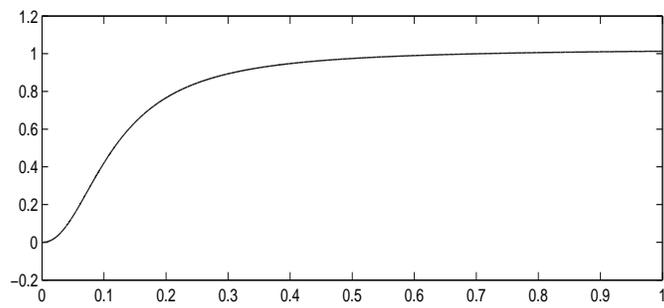
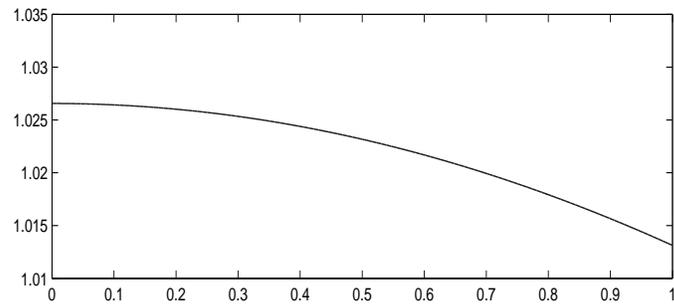


Abbildung 3.15: Nahezu exakte Lösung

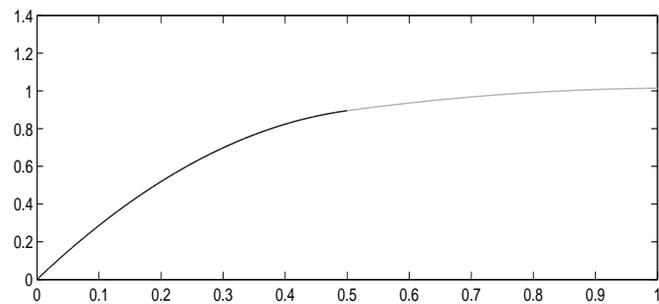
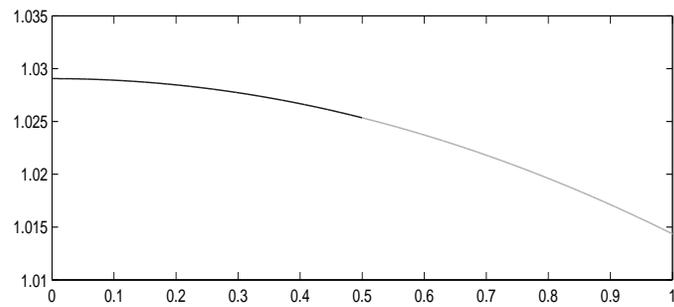


Abbildung 3.16: 2 Intervalle, 1 Gaußpunkt

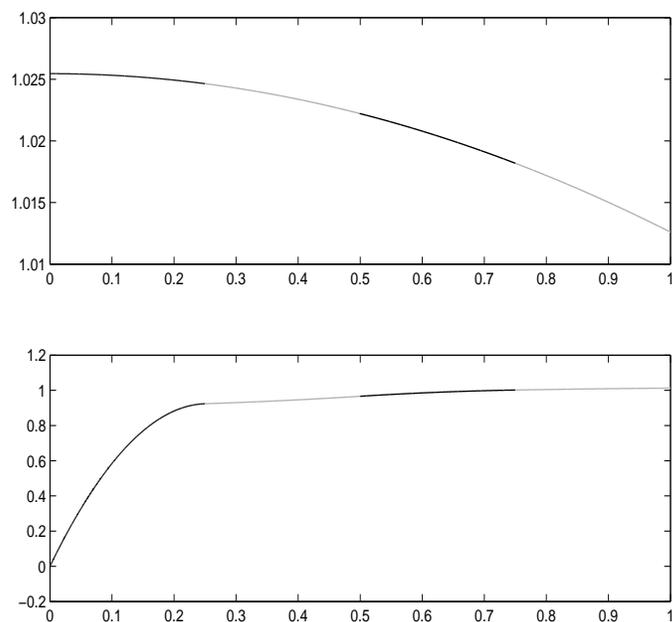


Abbildung 3.17: 4 Intervalle, 1 Gaußpunkt

von einer Berechnung mit 5 Gaußpunkten ermittelt worden, wobei – wie sich später herausgestellt hat – auch das Startprofil $z_1(t) = 1$ und $z_2(t) = t$ ausreichend ist.

In Tabelle 3.8 sieht man, daß sich die Konvergenzordnung sehr schön bei 2 einpendelt, was auch wieder der klassischen Konvergenzordnung für dieses Kollokationsverfahren entspricht.

Tabelle 3.9 zeigt die Berechnungen für zwei äquidistante Punkte, wobei hier bereits 16 Intervalle für den ersten Startwert ausreichen.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
6	1.593837e-003	2.024246	1.551828e-002	2.061222
7	3.918188e-004	2.006746	3.718383e-003	2.021616
8	9.749774e-005	2.001714	9.157710e-004	2.005185
9	2.434549e-005	2.000430	2.281214e-004	2.001622
10	6.084556e-006	2.000108	5.696628e-005	2.000392
11	1.521026e-006	2.000027	1.423770e-005	2.000076
12	3.802493e-007		3.559238e-006	

Tabelle 3.8: Konvergenzordnungen für einen Gaußpunkt, Maximum 4096 Intervalle

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
5	1.872525e-003	2.127135	1.419605e-002	2.143112
6	4.286433e-004	2.042378	3.213857e-003	1.969998
7	1.040589e-004	2.012706	8.203481e-004	1.987081
8	2.578661e-005	2.003220	2.069317e-004	1.998443
9	6.432279e-006	2.000806	5.178880e-005	1.999751
10	1.607171e-006	2.000202	1.294943e-005	1.999903
11	4.017367e-007	2.000051	3.237575e-006	1.999985
12	1.004306e-007		8.094020e-007	

Tabelle 3.9: Konvergenzordnungen für 2 äquidistante Punkte, Maximum 4096 Intervalle

3.2.9 Berechnung mit 5 Gaußpunkten

Auch bei der Verwendung von Gaußpunkten liegt eine Ordnungsreduktion bei z_2 , diesmal auf ≈ 3 , vor. Auch hier führt das Startprofil $z_1(t) = 1$ und $z_2(t) = t$ zum Erfolg.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
2	3.2591194e-003	2.9105021	3.1842502e-003	0.13387948
3	4.3346281e-004	7.9076113	2.9020537e-003	4.5580435
4	1.8051930e-006	11.709699	1.2319628e-004	4.1572475
5	5.3895554e-010	9.8369249	6.9046457e-006	2.1302707
6	5.8930638e-013	6.9816352	1.5771246e-006	2.6474363
7	4.6629367e-015	-1.2223928	2.5171451e-007	3.0375897
8	1.0880185e-014	0.66051353	3.0655091e-008	2.90063097
9	6.8833827e-015		4.1051184e-009	

Tabelle 3.10: Konvergenzordnungen z_1 und z_2 , Maximum: 512 Intervalle

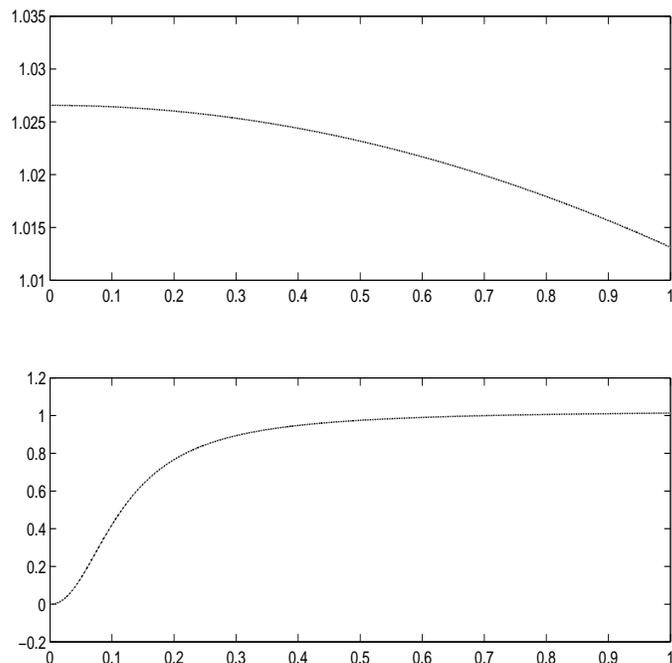


Abbildung 3.18: 5 Gaußpunkte, 512 Intervalle, $z_1(0) = 1.02656202260728$

3.2.10 Graphische Rücktransformation

In Abbildung 3.19 wird die Lösung für die ursprüngliche Differentialgleichung (ohne Transformation auf das Intervall $[0,1]$, ermittelt durch ein Schießverfahren) ζ_1 (Intervall $[0,8]$, 4 Gaußknoten und 128 Teilintervalle) mit der Lösung ζ_2 (5 Gaußknoten, 64 Intervalle (im transformierten Bereich $[0,1]$)), die mit Hilfe der Transformation berechnet wurde, graphisch verglichen, um nochmals die Korrektheit des Programms zu verifizieren.

Das Intervall $[0,8]$ wird deswegen gewählt, weil sich in diesem Bereich ζ_1 noch stabil berechnen läßt, während dies für größere Intervalle unmöglich wird. Hier wird die Stärke der Berechnungsmethode mit Transformation und Kollokation, wo ja die Lösung im Intervall $[0, \infty]$ berechnet werden kann, deutlich.

In Abbildung 3.19 stellt die im Vordergrund befindliche, durchgehend schwarze Kurve, im Intervall $[0,8]$ ζ_1 dar. Offensichtlich kann man keinen Unterschied zwischen den beiden Kurven feststellen.

In Abbildung 3.20 wird das Intervall $[0,10]$ gewählt, um zu demonstrieren, daß die Lösung in der Nähe von 10 stark zu wachsen beginnt.

Die Abbildungen 3.21 bzw. 3.22 sollen veranschaulichen, wie die transformiert berechnete Lösung (256 Intervalle, 5 Gaußpunkte) auf dem Intervall $[0, \infty]$ (hier eingeschränkt auf $[0, \approx 25]$ bzw. $[0, \approx 65]$) aussieht.

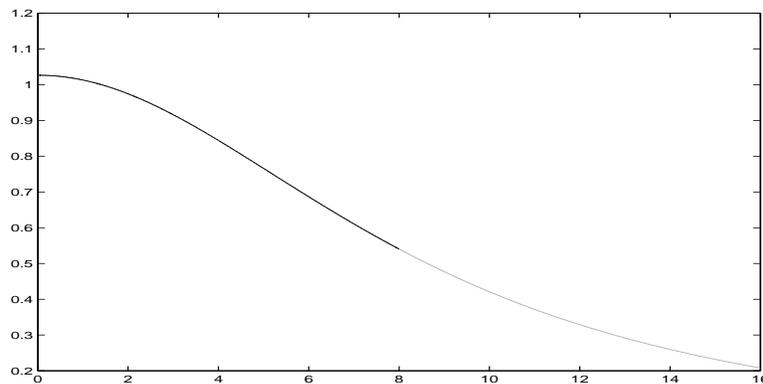


Abbildung 3.19: Vergleich ζ_1 , ζ_2

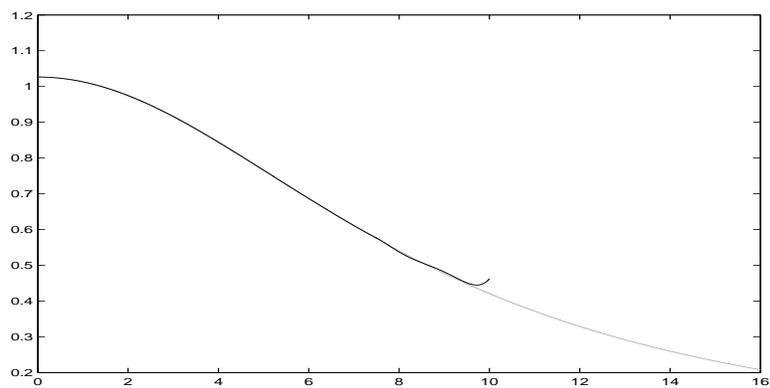


Abbildung 3.20: Vergleich auf dem Intervall $[0,10]$

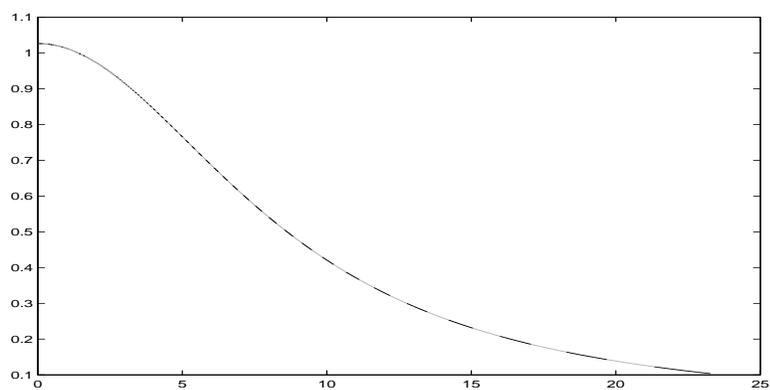


Abbildung 3.21: Veranschaulichung der Rücktransformation

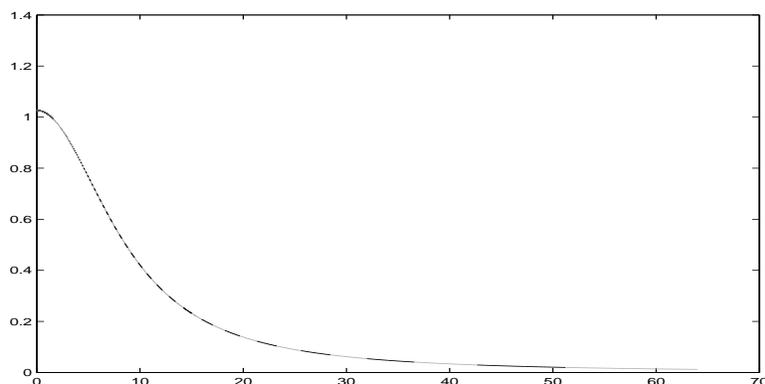


Abbildung 3.22: Veranschaulichung der Rücktransformation

3.2.11 Variation von σ

Beispiel für $\sigma = 0.5$

Wählt man α im Bereich $[1.1, 1.15]$, so konvergiert das Verfahren (in diesem Beispiel für 5 Gaußpunkte und einem Maximum von 256 Intervallen) und berechnet für $z_1(0)$ den Wert 1.151199734107605 im Vergleich zu 1.15119 in [5]. Leider gab es Probleme mit der Konvergenz im Falle von äquidistanten Kollokationspunkten. Teilt man das Intervall $[0, 1]$ im ersten Schritt an 0.5, so konvergiert das Verfahren leider nicht. Eine kleine Modifikation schafft hier Abhilfe: Man unterteilt das Intervall $[0, 1]$ an der Stelle 0.3. Die Gitterpunkte sind also nun in den Intervallen $[0, 0.3]$ und $[0.3, 1]$ gleichverteilt (siehe Abbildung 3.23).

Es stellte sich heraus, daß auch hier das Startprofil $z_1(t) = 1$ und $z_2(t) = t$ zur Konvergenz führt, allerdings erst ab einem Minimum von 4 Intervallen.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
2	2.1133195e-004	5.7198382	2.6201858e-004	2.2402236
3	4.0097961e-006	10.214320	5.5457154e-005	8.1064422
4	3.3752465e-009	6.6253315	2.0122193e-007	5.2695096
5	3.4188652e-011	9.7647029	5.2166878e-009	6.8079555
6	3.9301895e-014	3.2976805	4.6558184e-011	6.8670031
7	3.9968029e-015	-1.2223924	3.9886160e-013	5.6013693
8	9.3258734e-015		8.2156504e-015	

 Tabelle 3.11: Konvergenzordnungen z_1 und z_2 für $\sigma = 0.5$, Maximum: 256 Intervalle

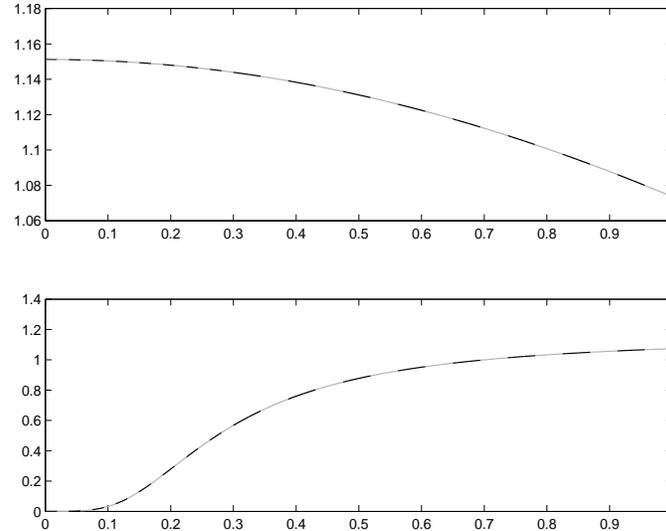


Abbildung 3.23: Lösung für $\sigma = 0.5$, 32 Intervalle

Beispiel für $\sigma = 1$

Es wird hier eine Demonstration zum interessanten Grenzfall $\sigma = 1$, also $\beta = \sigma + 1$, diskutiert. In der Randbedingung (3.2b) ist $\lim_{\sigma \rightarrow 1} 1/m(\beta - 1) = \infty$, und somit gilt

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} z(\tau)\tau^\infty = C.$$

Die Lösung muß also exponentiell gegen 0 streben (siehe Abbildung 3.24). Die Berechnung wurde mit 5 Gaußpunkten und einem Maximum von 256 Intervallen durchgeführt. Der Wert $z_1(0)$ wird bei einer ersten Schätzung von 1.3 mit 1.33333333333279 berechnet, was in etwa dem in [5] gefundenen Wert $(\frac{4}{3})$ entspricht.

Das Startprofil $z_1(t) = 1.3$ und $z_2(t) = 1.3t$ führt hier nur für 2, 4, 16, 32 und 64 Intervalle zur Konvergenz, nicht aber für 8 oder mehr als 64 Intervalle, wobei die so berechnete Lösung als neues Startprofil für ein feineres Gitter verwendet werden kann (siehe Abbildungen 3.25 und 3.26).

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
2	3.3176039e-002	11.738718	3.3005579e-002	4.2698178
3	9.7077451e-006	1.9279078	1.7109768e-003	0.64138676
4	2.5512927e-006	2.0610049	1.0969011e-003	2.3356131
5	6.1141486e-007	8.7408196	2.1730907e-004	2.8359084
6	1.4291805e-009	3.1799736	3.0435775e-005	2.4750002
7	1.5769563e-010	8.9918124	5.4743816e-006	0.017409587
8	3.0975222e-013		5.4087170e-006	

Tabelle 3.12: Konvergenzordnungen z_1 und z_2 für $\sigma = 1$, Maximum: 256 Intervalle

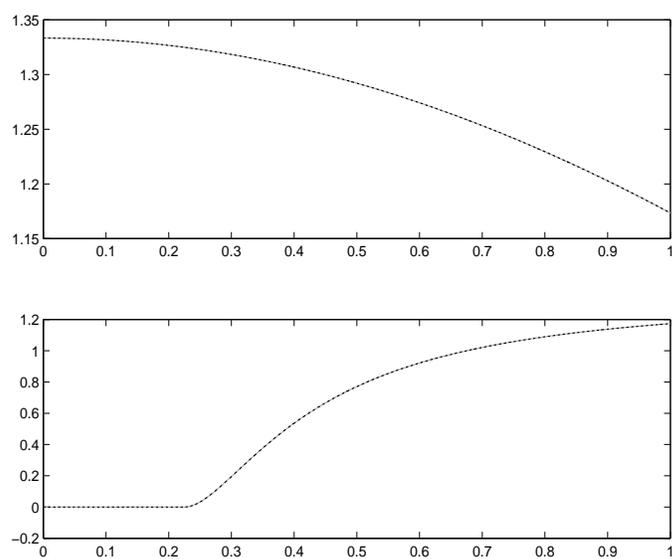


Abbildung 3.24: Lösung für $\sigma = 1$, 256 Intervalle

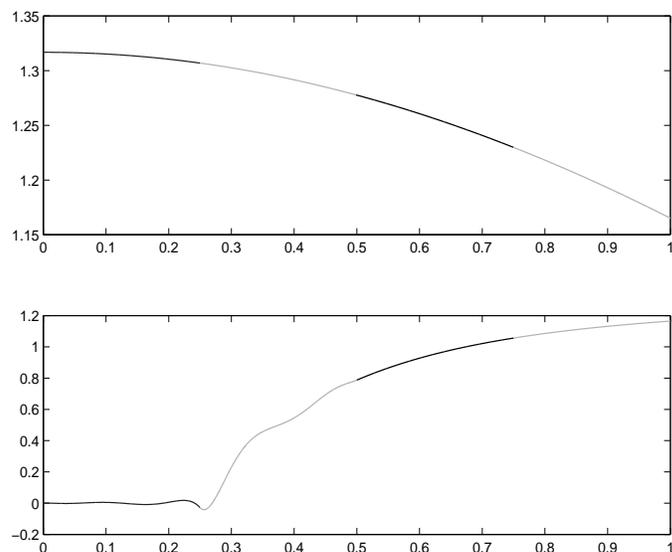


Abbildung 3.25: Lösung für $\sigma = 1$, 4 Intervalle, Startprofil $z_1(t) = 1.3$ und $z_2(t) = 1.3t$

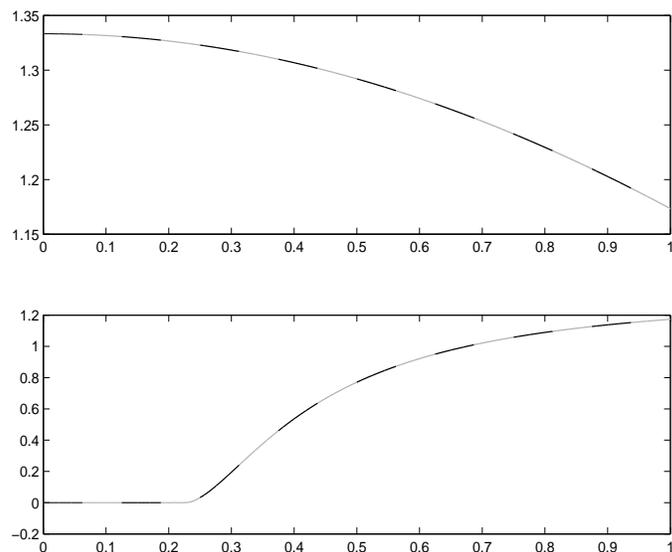


Abbildung 3.26: Lösung für $\sigma = 1$, 16 Intervalle, Startprofil $z_1(t) = 1.3$ und $z_2(t) = 1.3t$

3.2.12 Variation von β

Heuristik zum Auffinden eines geeigneten α

Für $\beta = 2$ wurde die erste Schätzung α für $z_1(0)$ im wesentlichen der Wert aus der Tabelle in [5] herangezogen. Um auch für andere Werte von $\beta > 1 + \sigma$ gute Startwerte zu finden, kann folgende heuristische Überlegung hilfreich sein:

Ignoriert man die Randbedingung (3.2b), so lassen sich für die Differentialgleichung (3.1) konstante Lösungen z_{konst} (wenn man von der trivialen Lösung $z \equiv 0$ absieht) durch

$$0 = 0 - 0 - \frac{1}{\beta - 1} z_{konst} + z_{konst}^\beta, \quad \text{also} \quad (3.12a)$$

$$z_{konst} = e^{\frac{\ln(\beta-1)}{1-\beta}} \quad (3.12b)$$

finden. Um einen geeigneten Wert für α zu bekommen, muß wegen $z'(0) = 0$ die Bedingung

$$z''(0)\alpha^\sigma - \frac{1}{\beta - 1}\alpha + \alpha^\beta = 0 \quad (3.13)$$

erfüllt sein. Die Erfahrung zeigt, daß $z''(0)$ in der Regel “klein” und negativ ist. Um nun die Gleichung (3.13) unter diesen Bedingungen zu erfüllen, muß α “etwas größer” als z_{konst} sein; je größer σ , desto größer sollte auch α gewählt werden. Diese heuristische Wahl führt in den meisten Fällen zum Erfolg, wie anhand der folgenden Beispiele demonstriert wird, vgl. auch die vorhergehenden Beispiele mit $\beta = 2$ und daher $z_{konst} \equiv 1$.

Auch für die Wahl von c im Startprofil $z_1(t) = c$ und $z_2(t) = c \cdot t$ kann diese Überlegung verwendet werden.

Beispiel für $\beta = 3$, $\sigma = 0.1$

Für diese Parameterwahl ist gemäß (3.12b) $z_{konst} \equiv \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0.707106781$. Die Wahl von $\alpha = 0.709$ hat in diesem Fall zur Konvergenz des Verfahrens geführt. Der mit dem Programm berechnete Wert für $z_1(0)$ beträgt ungefähr 0.7132389065040919, was in etwa der heuristischen Überlegung aus 3.2.12 entspricht.

Die Berechnung erfolgt wieder mit 5 Gaußpunkten und einem Maximum von 256 Intervallen, die graphische Veranschaulichung findet man in Abbildung 3.27. Die Wahl des Startprofils $z_1(t) = 0.707$ und $z_2(t) = 0.707t$ führt ebenfalls zur Konvergenz des Verfahrens (Minimum: 2 Intervalle). Mit der einfachen Wahl von $z_1(t) = 1$ und $z_2(t) = t$ erreicht man zum Beispiel keine Konvergenz.

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
2	4.2718521e-003	2.5425534	4.5789019e-003	-0.20432903
3	7.3321502e-004	5.5061715	5.2755836e-003	2.2379900
4	1.6132756e-005	10.127125	1.1183259e-003	2.4016285
5	1.4425806e-008	8.7792037	2.1164410e-004	1.7621167
6	3.2834957e-011	12.926096	6.2395918e-005	0.99628944
7	4.2188475e-015	-1.8813555	3.1278302e-005	1.8722140
8	1.5543122e-014		8.5437905e-006	

Tabelle 3.13: Konvergenzordnungen z_1 und z_2 für $\sigma = 0.1$, $\beta = 3$, Maximum: 256 Intervalle

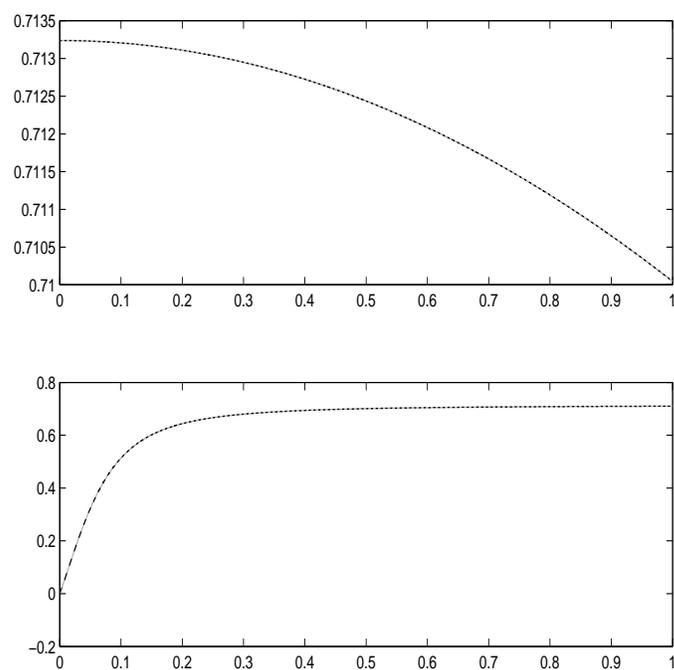


Abbildung 3.27: $\sigma = 0.1$, $\beta = 3$, 256 Intervalle

Beispiel für $\beta = 1.5$, $\sigma = 0.1$

Je näher β an 1 liegt, desto schwieriger wird es, die Parameter so zu wählen, daß die Berechnungen erfolgreich sind. Für $\beta = 1.5$ und daher der konstanten Lösung $z_{konst} \equiv 4$ ist dies mit $\alpha = 4.4$, einer kleinen Verschiebung des Gitters (es ist also – ähnlich wie in Abschnitt 3.2.11 – nicht mehr äquidistant) und einer Verringerung der absoluten und relativen Genauigkeit des Newtonsolvers (von $1e-10$ auf $1e-8$) gelungen. Der Wert $z_1(0)$ wurde mit $\approx 4.291106374204863$ (wieder mit 5 Gaußpunkten) berechnet. Die Kurve wird in Abbildung 3.28 dargestellt.

Die Wahl des Startprofils $z_1(t) = 4.4$ und $z_2(t) = 4.4t$ führt ebenfalls zur Konvergenz des Verfahrens (Minimum: 2 Intervalle).

i	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_1)$	$konv_est_i(z_1)$	$\ \xi_i - \xi_{i+1}\ (z_2)$	$konv_est_i(z_2)$
2	2.2375627e-001	9.3229606	1.6679365e-001	4.6020500
3	3.4936904e-004	6.2655579	6.8679069e-003	5.9563803
4	4.5411258e-006	10.452741	1.1060513e-004	6.9028414
5	3.2402241e-009	9.1762313	9.2430000e-007	6.6172876
6	5.6008531e-012	8.3745819	9.4147958e-009	6.7728299
7	1.6875390e-014	-0.83953533	8.6096592e-011	6.2922995
8	3.0198066e-014		1.0985379e-012	

Tabelle 3.14: Konvergenzordnungen z_1 und z_2 für $\sigma = 0.1$, $\beta = 1.5$, Maximum: 256 Intervalle

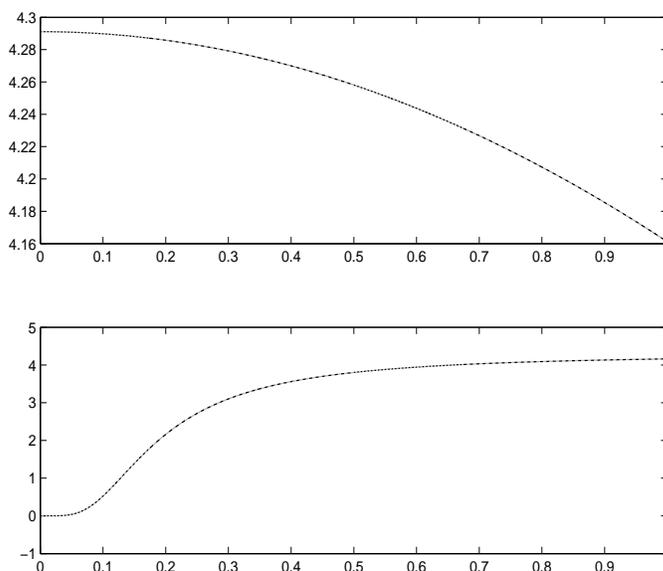


Abbildung 3.28: $\sigma = 0.1$, $\beta = 1.5$, 256 Intervalle

Gute Werte für α bei $\sigma = 0.1$

Um die Heuristik aus Abschnitt 3.2.12 nochmals zu verifizieren, werden in Tabelle 3.15 ein paar “gute” Werte für α (bzw. c) in Abhängigkeit von β , sowie der vom Programm gefundene Wert $z_1(0)$ angegeben.

β	z_{konst}	α	$z_1(0)$
1.7	1.664518071	1.76	1.73978649986601
1.8	1.321714079	1.34	1.37085731540303
1.9	1.124195018	1.145	1.15924643609817
2	1	1.04	1.02656202260728
2.5	0.7631428284	0.765	0.77381693907163
3	0.7071067810	0.709	0.71323890650409

Tabelle 3.15: α in Abhängigkeit von β , $\sigma = 0.1$ **3.3 Vergleich mit dem Matlab-Solver bvp4c**

Der Solver `bvp4c` ist ein Kollokationscode, vgl. Matlab-Hilfe zu `bvp4c`. Die Ordnung des Verfahrens ist auf $p = 4$ fixiert (“stage order” ist $m = 3$). Als Kollokationspunkte werden Lobattopunkte benützt.

3.3.1 Berechnung im Intervall $[0, T]$

Da das Programm nur für Probleme erster Ordnung, die in expliziter Form gestellt sind, geeignet ist, formt man das Gleichungssystem (3.1) zu

$$\begin{aligned} z_1'(\tau) &= z_2(\tau), \\ z_2'(\tau) &= \frac{-z_1(\tau)^{(\sigma-1)}\sigma z_2(\tau)^2 + m\tau z_2(\tau) + \frac{1}{\beta-1}z_1(\tau) - z_1^\beta(\tau)}{z_1(\tau)^\sigma} \end{aligned}$$

um, wobei für die folgenden numerischen Berechnungen $\beta = 2$ und $\sigma = 0.1$ gesetzt werden. Die Berechnung wird mit dem Schießverfahren durchgeführt; die Randbedingungen lauten

$$\begin{aligned} z_1(0) &= \alpha, \\ z_2(0) &= 0, \end{aligned}$$

wobei α auf den Wert ≈ 1.02656202 gesetzt wird. Die Berechnungen haben bis zu einem Wert von $T = 8.7$ gut funktioniert, wie die Abbildung 3.29 sowie die Tabelle 3.16 zeigen. Für größere Werte von T ist die Berechnung fehlgeschlagen. Auch die Methode, die in Abschnitt 3.6 noch genauer beschrieben wird, hat mit `bvp4c` keine brauchbaren Ergebnisse geliefert. Abhängig vom

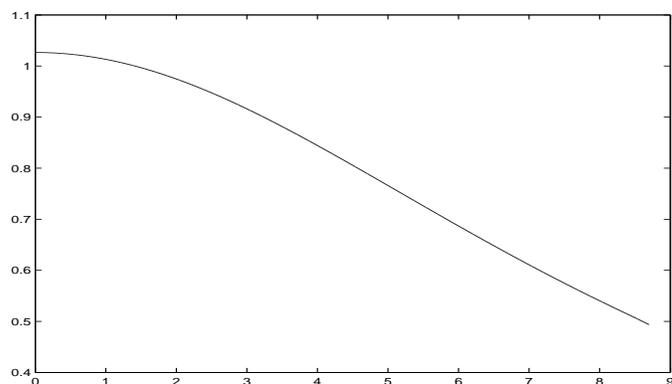


Abbildung 3.29: Berechnung bis $T = 8.7$

Startwert findet das Programm entweder die konstante Lösung 1, die dann bei T stark abfällt, oder die Kurve schwingt sehr stark.

τ	$z(\tau)$	$z_{bvp4c}(\tau)$
0.25	1.025712782540700	1.02571278158863
0.50	1.023172724814404	1.02317272485796
1.00	1.013126119820861	1.01312611912241
2.00	0.9746786584081491	0.97467866342912
3.20	0.9026978515091303	0.90269786128624
4.00	0.8444219054019293	0.84442191444824
5.33	0.7395280760447449	0.73952803573354
6.40	0.6558999931147093	0.65589930423691
7.11	0.6027363733144325	0.60273084674660
8.00	0.5405707574064785	0.54045739921709

Tabelle 3.16: Vergleich kollimplizitor2 (mit Transformation auf $[0,1]$) mit bvp4c

3.3.2 Transformation auf das Intervall [0,1]

Das transformierte Gleichungssystem (3.7) wird wie folgt modifiziert:

$$z_1'(t) = z_2(t), \quad (3.14a)$$

$$z_2'(t) = \frac{-z_1(t)^{\sigma-1}\sigma z_2(t)^2 + mtz_2(t) + \frac{1}{\beta-1}z_1(t) - z_1^\beta(t)}{z_1(t)^\sigma}, \quad (3.14b)$$

$$z_3'(t) = z_4(t), \quad (3.14c)$$

$$z_4'(t) = \left(\frac{-2}{t}z_4(t)z_3(t)^\sigma - z_3(t)^{\sigma-1}\sigma z_4(t)^2 - m\frac{z_4(t)}{t^3} + \frac{1}{\beta-1}\frac{z_3(t)}{t^4} - \frac{z_3^\beta(t)}{t^4} \right) \cdot \frac{1}{z_3(t)^\sigma}. \quad (3.14d)$$

Die Randbedingungen lauten:

$$z_2(0) = 0, \quad (3.15a)$$

$$z_3(0) = 0, \quad (3.15b)$$

$$z_1(1) - z_3(1) = 0, \quad (3.15c)$$

$$z_2(1) + z_4(1) = 0. \quad (3.15d)$$

Die unabhängige Variable t kann nicht aus dem Bereich $[0, 1]$ gewählt werden, da sonst die rechte Seite von (3.14) an der Stelle $t = 0$ ausgewertet werden müßte. Daher wird sie aus dem Bereich $[\varepsilon, 1]$ mit $\varepsilon \approx 0$ gewählt. Für ein zufällig gewähltes Startprofil hat dieses Programm keine sinnvollen Lösungen ermittelt (siehe z.B. Abb. 3.30). Auch das Schießverfahren, mit dem für das implizite Kollokationsproblem immer recht gute Startprofile gefunden worden sind, ist hier fehlgeschlagen.

Erst mit der Wahl eines schon ziemlich nahe an der exakten Lösung liegenden Startprofils¹ findet man eine bessere Lösung, die aber bei z_3 im Bereich $t < 0.1$ stark schwingt. Die Abbildungen 3.31-3.33 veranschaulichen die Lösung von `bvp4c` mit der Wahl $\varepsilon = 0.007813$, $z_2(\varepsilon) = -0.0002124833970043512$ und $z_3(\varepsilon) = 0.00262997408617$, die sich aus der (nahezu) exakten Lösung ergibt². Auch der Versuch, für $t = 0$ eine alternative Auswertung der rechten Seite von (3.14) vorzuschreiben, um die rechte Seite des Gleichungssystems nicht an 0 auswerten zu müssen, ist fehlgeschlagen.

In allen Berechnungen der folgenden Graphiken wurde von `bvp4c` abgebrochen, da die Toleranzen³ nicht erreicht werden konnten, und das Ergebnis des zuletzt berechneten Gitters ausgegeben.

¹hier 128 Intervalle, 5 Gaußpunkte (für die Ableitungsfunktionen z_2 und z_4 wird das Startprofil konstant 0 gesetzt), berechnet mit `kollimplizitor2`

²`kollimplizitor2` konvergiert mit dieser Parameterwahl zur richtigen Lösung.

³Standard: 1e-6 (absolut), 1e-3 (relativ)

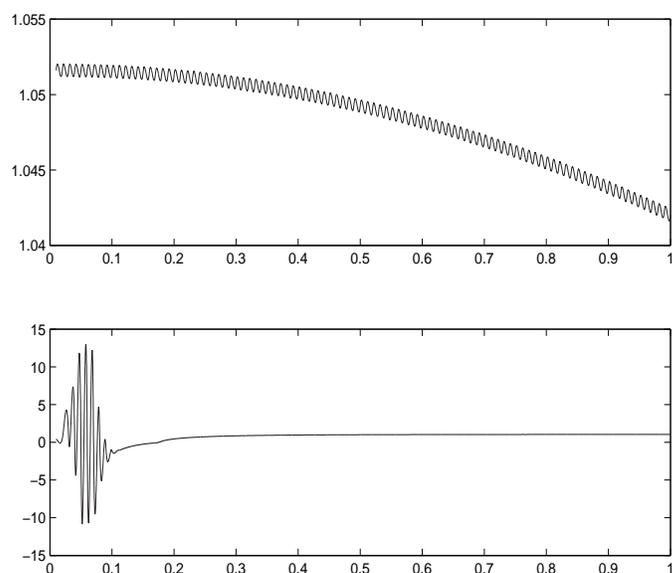


Abbildung 3.30: Lösung von `bvp4c`, Startprofil konstant 1, $\varepsilon = 0.01$, mesh: 100 Punkte

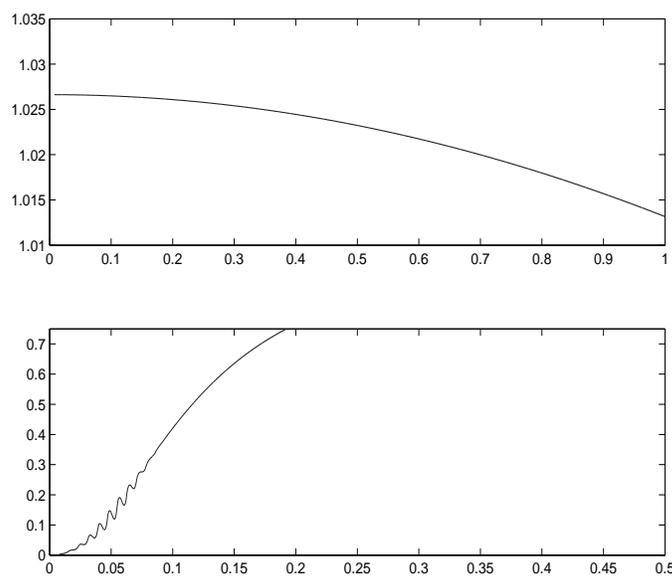


Abbildung 3.31: Lösung von `bvp4c`, Startprofil berechnet mit `kollimplizitord2` (128 Intervalle, 5 Gaußpunkte), $\varepsilon = 0.007813$, mesh: 128 Punkte, z_3 vergrößert

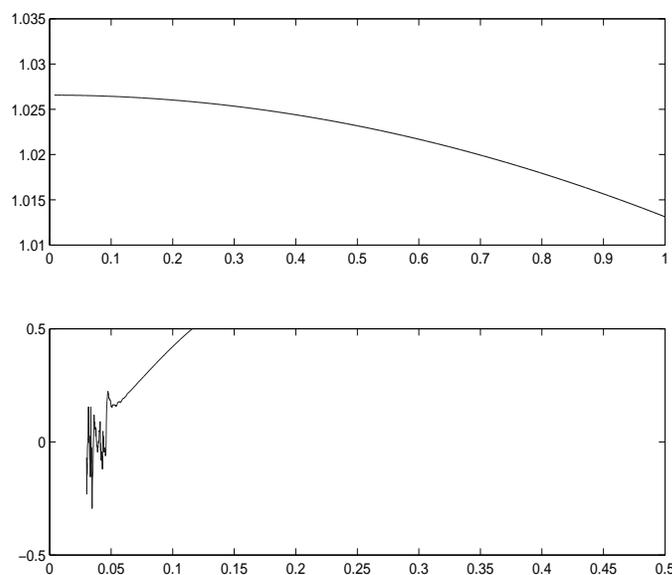


Abbildung 3.32: Lösung von `bvp4c`, Startprofil berechnet mit `kollimplizitor2` (128 Intervalle, 5 Gaußpunkte), $\varepsilon = 0.007813$, mesh: 322 Punkte, z_3 gezeichnet ab 0.03

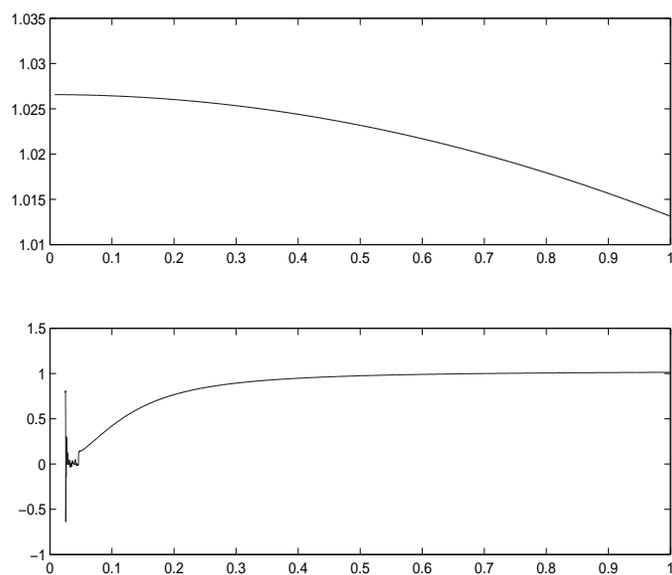


Abbildung 3.33: Lösung von `bvp4c`, Startprofil berechnet mit `kollimplizitor2` (128 Intervalle, 5 Gaußpunkte), $\varepsilon = 0.007813$, mesh: 1170 Punkte, z_3 gezeichnet ab 0.025

3.4 Vergleich mit dem Fortran-Programm colnew

Der FORTRAN 90 code `colnew` löst ein Mehrpunkt-Randwertproblem für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen gemischter Ordnung. Die Methode zur Approximation der Lösung ist Kollokation in den Gaußpunkten mit stückweise polynomialen Funktionen. Das verwendete Verfahren ist dem von unserem Programm zwar sehr ähnlich, es ist aber nur für Differentialgleichungen in expliziter Form geeignet.

3.4.1 Berechnung im Intervall $[0, T]$

Das Gleichungssystem (3.1) wird also auf explizite Form gebracht, eine Transformation auf erste Ordnung ist hier nicht notwendig. Die Berechnungen werden genau wie in Abschnitt 3.3.2 durchgeführt. Auch hier zeigt sich, daß die Berechnung ohne Transformation nur bis zu einem Wert von $T \approx 8$ möglich ist, vgl. Abbildung 3.34 und Tabelle 3.17. Für größere T bzw. mit der Methode, die in Abschnitt 3.6 noch genauer beschrieben wird, haben die Berechnungen mit `colnew` nicht zum Erfolg geführt.

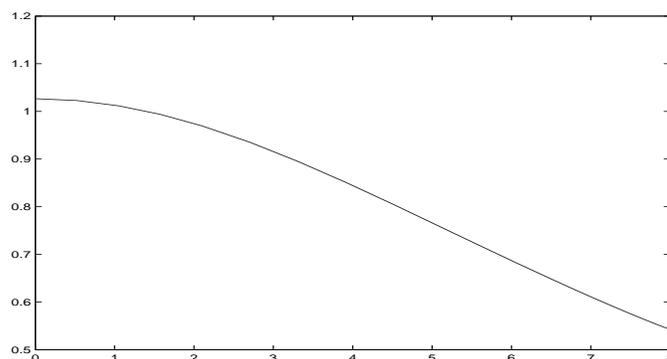


Abbildung 3.34: Berechnung bis $T = 8$

τ	$z(\tau)$	$z_{colnew}(\tau)$
0.25	1.025712782540700	1.02572017824329
0.50	1.023172724814404	1.02317317393603
1.00	1.013126119820861	1.01312538134412
2.00	0.9746786584081491	0.97467850010578
3.20	0.9026978515091303	0.90269800915527
4.00	0.8444219054019293	0.84442243084976
5.33	0.7395280760447449	0.73979488109823
6.40	0.6558999931147093	0.65591124675729
7.11	0.6027363733144325	0.60290026141530
8.00	0.5405707574064785	0.54226510000000

Tabelle 3.17: Vergleich kollimplizitor2 (mit Transformation auf $[0,1]$) mit colnew auf $[0,T]$

3.4.2 Transformation auf das Intervall $[0,1]$

Auch das transformierte Gleichungssystem (3.7) wird auf explizite Form gebracht, wobei auch hier im Gegensatz zu `bvp4c` eine Transformation auf das System 1. Ordnung nicht notwendig ist.

Für die Berechnungen werden 3 Gaußpunkte (mit 4 bzw. 5 Gaußpunkten sind sie fehlgeschlagen) und eine absolute und relative Toleranz von $1e-10$ gewählt; die Jakobimatrix wird analytisch bestimmt. Um diese Toleranz zu erreichen, ist ein Gitter mit 161 Gitterpunkten notwendig. Die Ergebnisse sind mit unserem Programm identisch, wie Abbildung 3.35 und Tabelle 3.18 zeigen.

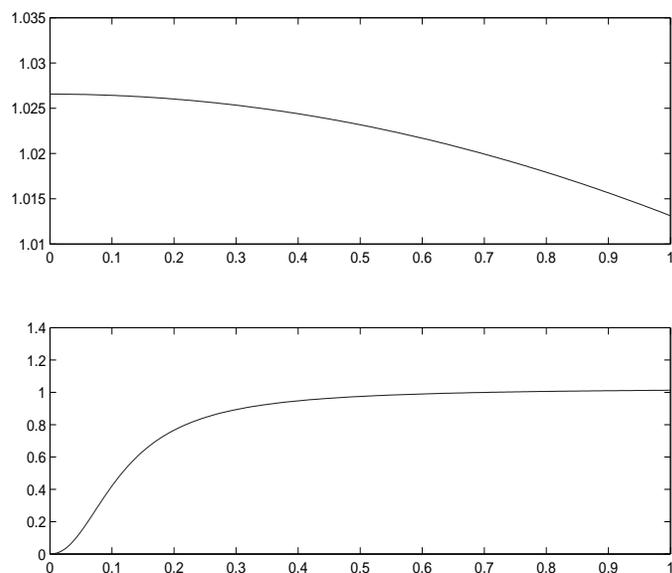


Abbildung 3.35: Transformation auf $[0,1]$

t	$z_1(t)$	$z_{1(colnew)}(t)$	$z_2(t)$	$z_{2(colnew)}(t)$
0	1.026562	1.026562	0.000000	0.000000
0.125	1.02635	1.02635	0.5405707	0.5405707
0.25	1.025713	1.025713	0.8444219	0.8444219
0.375	1.024653	1.024653	0.9375303	0.9375303
0.5	1.023173	1.023173	0.9746787	0.9746787
0.625	1.021275	1.021275	0.9927952	0.9927952
0.75	1.018965	1.018965	1.0028960	1.0028960
0.875	1.016246	1.016246	1.0090770	1.0090770
1	1.013126	1.013126	1.0131260	1.0131260

Tabelle 3.18: Vergleich kollimplizitor2 mit colnew (beides mit Transformation auf $[0,1]$), gerundet

3.5 Vergleich mit DDASSL und Maple

In diesem Abschnitt wird `kollimplizitord2` mit dem Fortran 77 Paket DDASSL⁴ sowie mit Maple⁵ verglichen. Wir betrachten hier das Gleichungssystem (3.1) ohne Transformation auf $[0,1]$.

Leider ist dies bei DDASSL nur bis $\tau \approx 2$ sinnvoll, da DDASSL dann in die konstante Lösung z_{konst} , die für die Randbedingungen natürlich falsch ist, "rutscht". Mit dem in Maple implementierten Runge-Kutta-Fehlberg Verfahren lassen sich die Werte bis $\tau \approx 8$ berechnen, bevor die Lösung, wie in Abbildung 3.36 dargestellt, exponentiell zu wachsen beginnt (vgl. auch Abb. 3.20).

In Tabelle 3.19 werden $\alpha = 1.02656202260728$, $\sigma = 0.1$ und $\beta = 2$ gewählt ($z_{konst} \equiv 1$). $z(\tau)$ bezeichnet die vom Kollokationsprogramm gefundene Lösung (transformiert auf $[0,1]$, 5 Gaußpunkte, 512 Intervalle).

τ	$z(\tau)$	$z_{DDASSL}(\tau)$	$z_{Maple}(\tau)$
0.25	1.025712782540700	1.025717138019435	1.025712786930751
0.50	1.023172724814404	1.023242445986013	1.023172737592233
1.00	1.013126119820861	1.014201612575574	1.013126152060015
2.00	0.9746786584081491	0.9895708748260493	0.9746787402054921
3.20	0.9026978515091303	0.9761401389005060	0.9026981618919460
4.00	0.8444219054019293	0.9844233783954052	0.8444225686428945
5.33	0.7395280760447449	1.009445860913683	0.7395333329725850
6.40	0.6558999931147093	1.016086377875403	0.6559587698689221
7.11	0.6027363733144325	1.010902377573158	0.6031924609505008
8.00	0.5405707574064785	1.000012853298321	0.54986111111063573
9.14	0.4687300823563831	0.9914600756160024	1.244617142226666
⋮	⋮	⋮	⋮
64.0	0.01214334361552126	1.000000000000012	

Tabelle 3.19: Vergleich mit DDASSL und Maple

Auch mit anderen Werten von σ und β sind die Berechnungen in DDASSL fehlgeschlagen, die Lösung konvergiert immer gegen z_{konst} . Nach Abschnitt 3.2.12 liegt dies daran, daß der Wert von $z_1(0)$ immer sehr nahe an z_{konst} liegt.

⁴Solver DDASSL (Unterprogramm), Autor: L. Petzold, offizieller Link: <http://www.netlib.org/ode/ddassl.f>, Hauptprogramm zum Beispiel auf <http://pitagora.dm.uniba.it/~testset/>

⁵Maple 9.01, Jul 9 2003

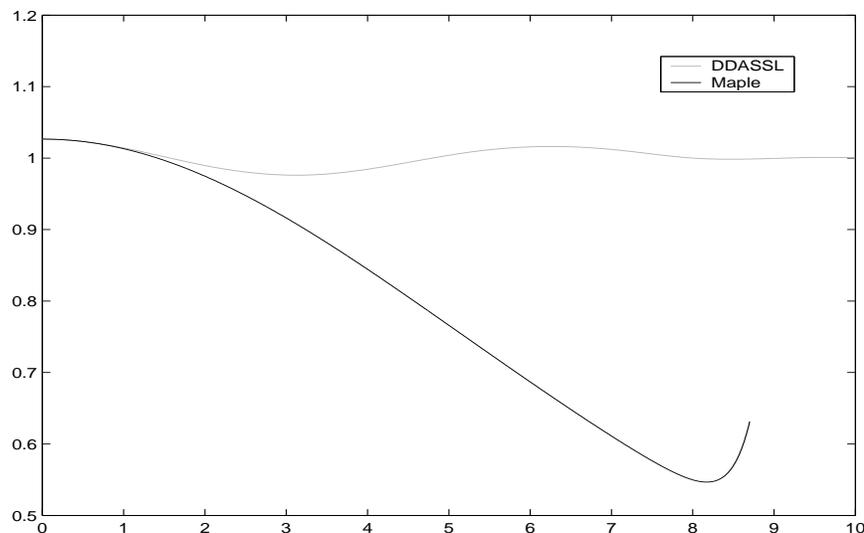


Abbildung 3.36: Vergleich Maple – DDASSL

3.6 Randwertproblem ohne Transformation

In diesem Abschnitt geht es um eine Methode, die Gleichung (3.1) zu lösen, ohne dabei auf das Intervall $[0, 1]$ zu transformieren. Man behandelt sie dabei nicht, wie bereits in Abschnitt 3.2.10 für das Intervall $[0, 8]$ gezeigt wurde, als Anfangswertproblem, sondern als Randwertproblem. Da man die Bedingung für die rechte Intervallgrenze an ∞ natürlich nicht stellen kann, versucht man dies näherungsweise durch $z(b) = \varepsilon$ mit $\varepsilon \geq 0$ “sehr klein” und $0 \ll b < \infty$ zu modellieren.

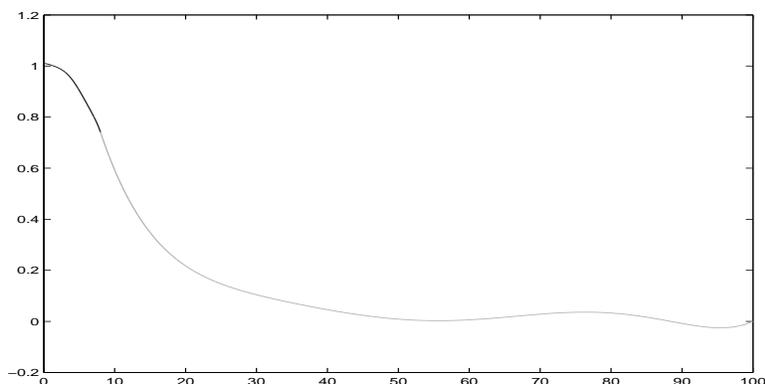
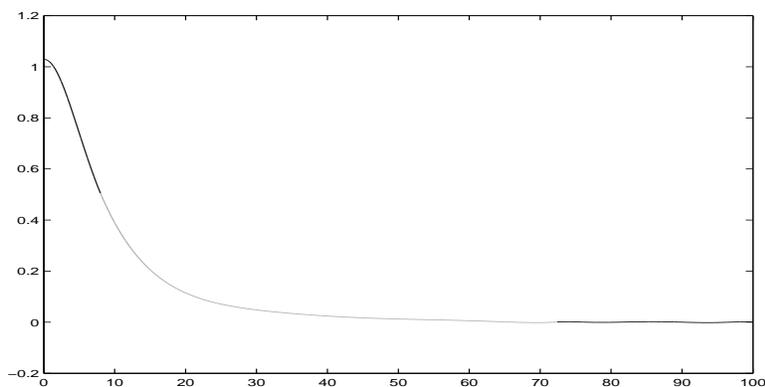
Bei größeren Werten für b ist es bei dieser Methode eher schwierig, in den Konvergenzbereich zu gelangen. Gelingt dies, so gerät die Lösung bei mehreren Intervallen in starke Schwingungen, was letztendlich zu Divergenz führt, wie nun am Beispiel mit der Randbedingung $z(100) = 0$ demonstriert wird (Berechnung immer mit 5 Gaußpunkten).

Abbildung 3.37 zeigt den ersten Schritt mit Intervallteilung $[0, 8, 100]$, motiviert durch die Ergebnisse des Abschnitts 3.2.10 – die Lösung im Intervall $[0, 8]$ kann leicht berechnet werden.

Abbildungen 3.38 und 3.39 zeigen, daß die Kurve bei wenigen Intervallen noch schön “glatt” ist, bei weiterer Unterteilung aber in Schwingungen gerät und das Verfahren dann nicht mehr konvergiert.

Als nächstes wird b etwas kleiner gewählt, mit $z(64) = 0$.

Die Abbildungen 3.40 bis 3.42 zeigen die Entwicklung der Lösungskurve, wobei das Newtonverfahren letztendlich nicht mehr konvergiert.


 Abbildung 3.37: $z(100) = 0$

 Abbildung 3.38: $z(100) = 0$, 3 Intervalle

Weitaus bessere Ergebnisse erzielt man, wenn man den Wert der rechten Intervallgrenze nicht 0, sondern sehr nahe am richtigen Wert der Lösung wählt. Aus Abschnitt 3.5 wissen wir ja, daß der Wert an $b = 64$ am besten mit $z(64) = 0.01214334361552126$ gewählt werden sollte. Stellt man diese Bedingung, so bekommt man offenbar ganz brauchbare Ergebnisse, wie die Abbildungen 3.43 und 3.44 zeigen.

Da sich insgesamt die Berechnung für $z(b) = 0$ bei großem b als schwierig herausgestellt hat und man im Normalfall den richtigen Wert an der Stelle b nicht kennt, ist diese Methode weniger praktikabel als die Transformation auf das Intervall $[0,1]$. Das betrifft – wie bereits gezeigt – nicht nur `kollimplizitord2`, sondern auch die untersuchte Standardsoftware.

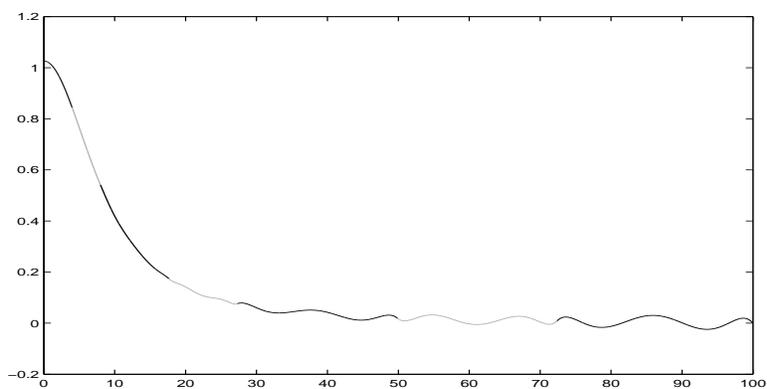


Abbildung 3.39: $z(100) = 0$, 7 Intervalle

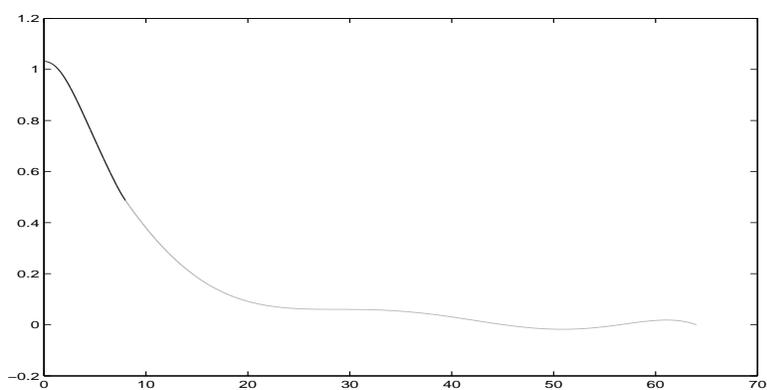


Abbildung 3.40: $z(64) = 0$, 2 Intervalle

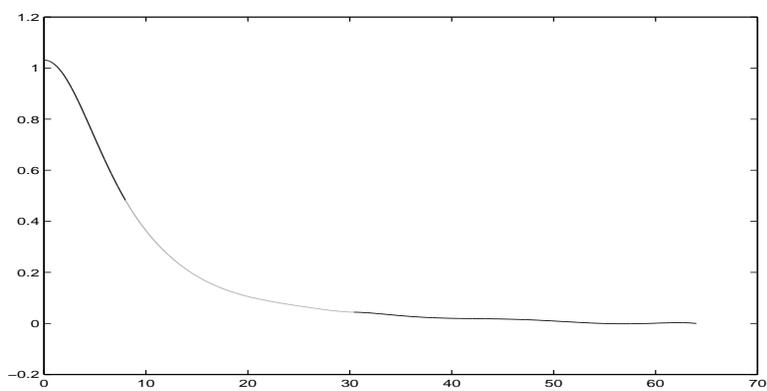


Abbildung 3.41: $z(64) = 0$, 3 Intervalle

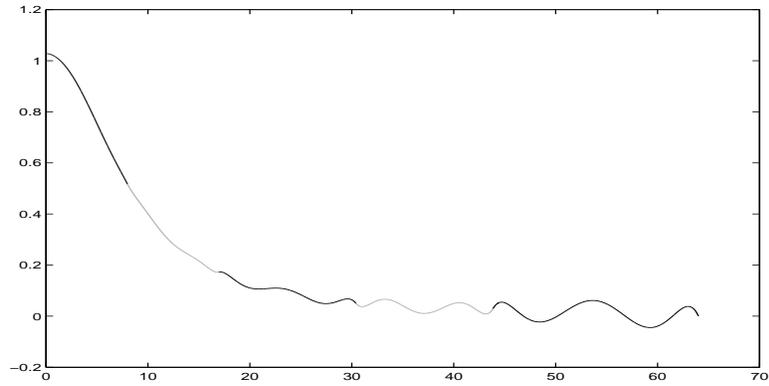


Abbildung 3.42: $z(64) = 0$, 5 Intervalle

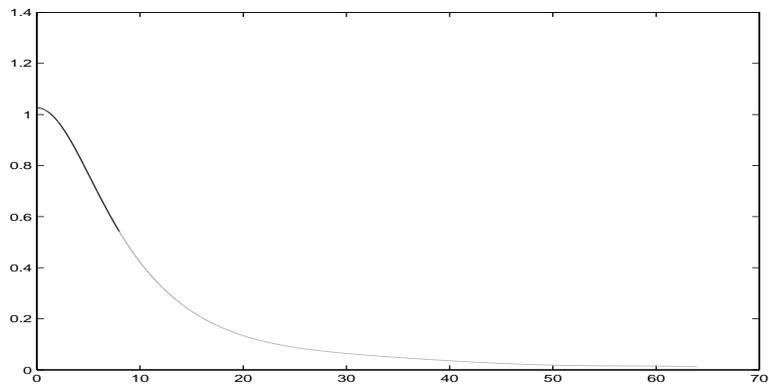


Abbildung 3.43: $z(64) \approx 0.0121$, 2 Intervalle

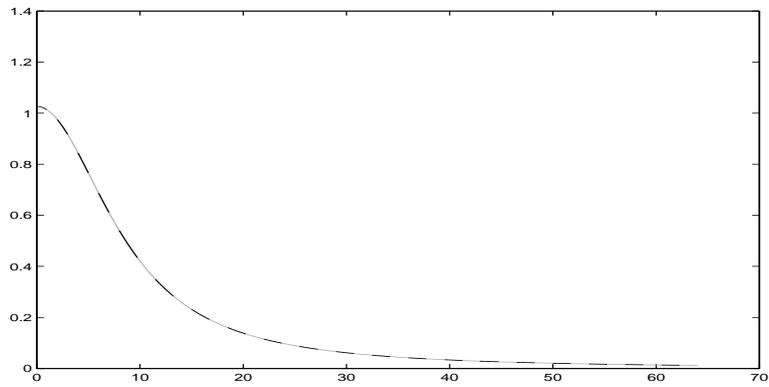


Abbildung 3.44: $z(64) \approx 0.0121$, 40 Intervalle

3.7 Originalgleichung

Wie in [3], Kapitel 3, beschrieben, wird die Lösung $z(\tau)$ der Differentialgleichung aus Abschnitt 3.1.1 zur Darstellung der Lösung eines Problems aus der Physik (auf das hier nicht im Detail eingegangen wird), welche die Gestalt

$$u(x, t) = \frac{z(\tau)}{(T-t)^{1/(\beta-1)}} \quad \text{mit } \tau = \frac{|x-x_*|}{(T-t)^m} \quad (3.16)$$

hat, benötigt.

Zur graphischen Veranschaulichung werden $\beta = 2$, $\sigma = 0.1$, $x_* = 0$ und $T = 20$ gewählt. Die Referenzlösung von $z(\tau)$ ist mit 5 Gaußpunkten und 256 Intervallen bestimmt worden.

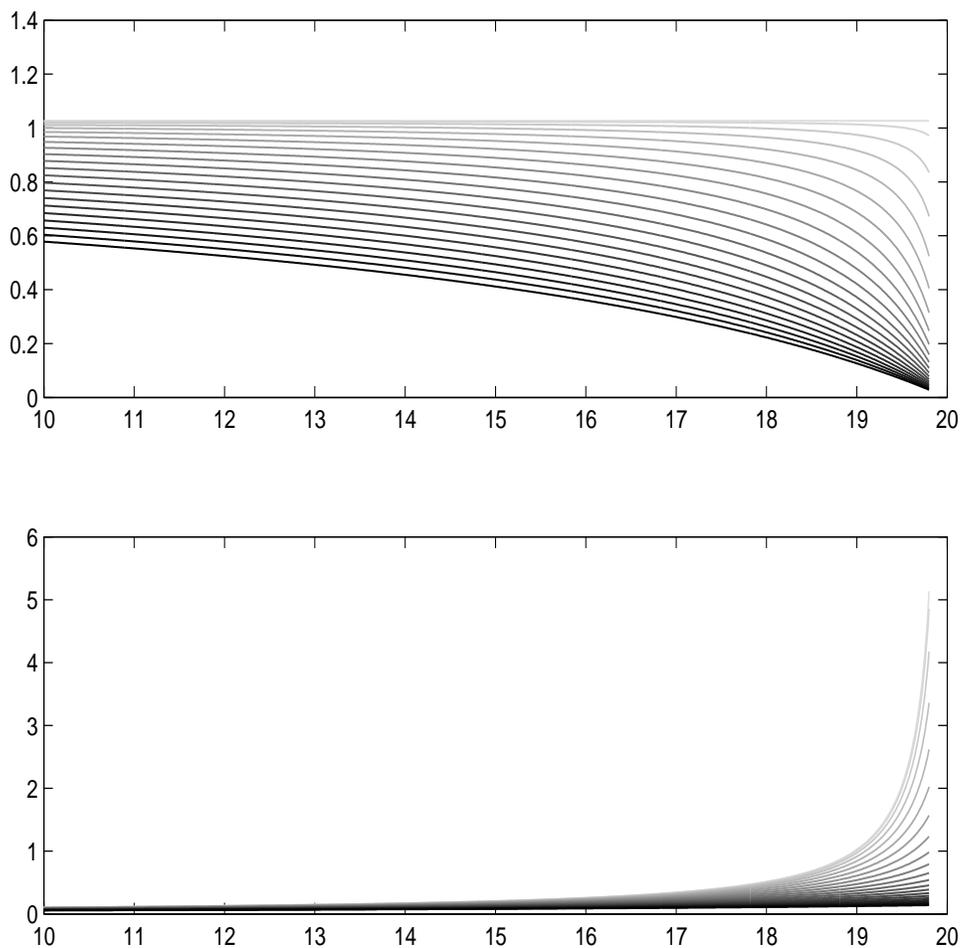


Abbildung 3.45: $z(\tau)(x, t)$, $u(x, t)$

Die untere Graphik in Abbildung 3.45 veranschaulicht $u(x, t)$, wobei auf der horizontalen Achse $t \in [10, 19.8]$ und auf der vertikalen Achse $u(x, t)$ aufgetragen ist. Die Graustufen stellen $x \in \{0, 1, 2, \dots, 21\} =: \{\text{hell}, \dots, \text{dunkel}\}$ dar.

Die obere Graphik zeigt $z(\tau)$ (vertikal) in Abhängigkeit von t (horizontal) und x (Graustufen).

$\tau(x, t)$ nimmt mit diesen Parametern seinen maximalen Wert bei $x = 21$ und $t = 19.8$ mit $\tau \approx 43.33$ an.

Abbildung 3.46 stellt die gleiche Graphik dar, wobei diesmal $t \in \{0, 1, 2, \dots, 19, 19.5, 19.7, 19.8\} =: \{\text{hell}, \dots, \text{dunkel}\}$ durch Graustufen dargestellt und $x \in [-21, 21]$ auf der horizontalen Achse aufgetragen wird.

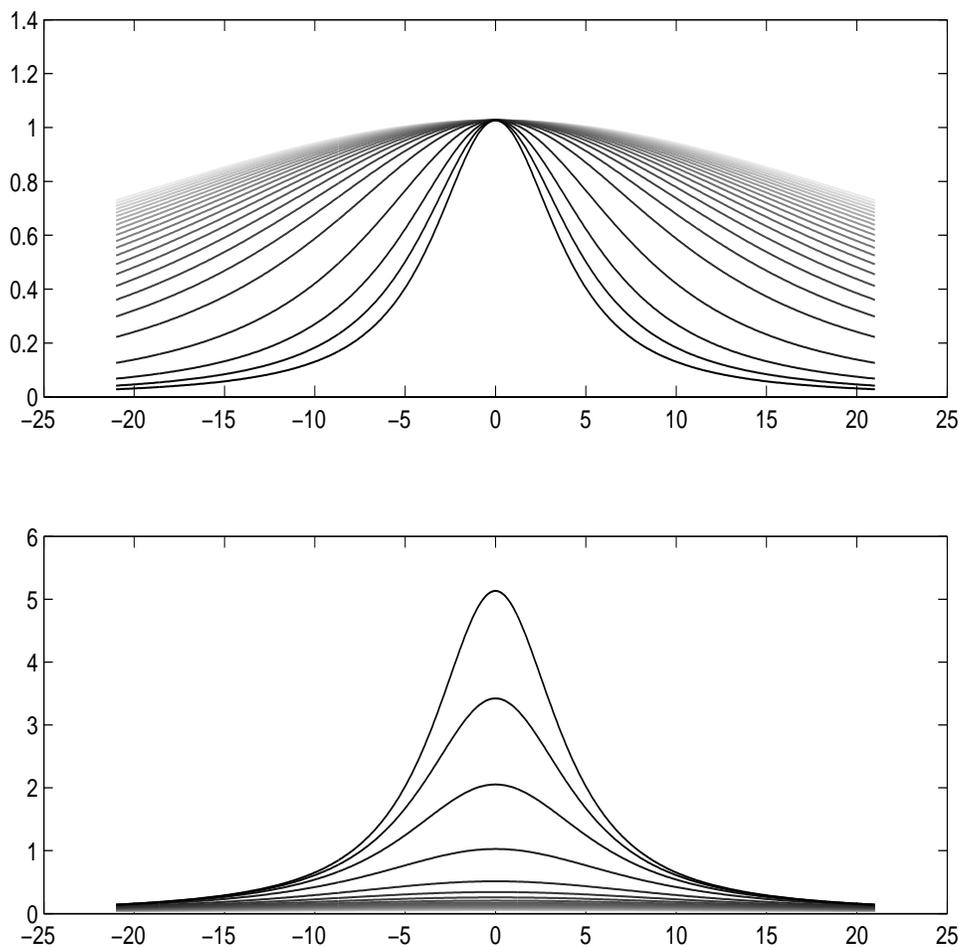


Abbildung 3.46: $z(\tau)(x, t)$, $u(x, t)$

Zur noch besseren Visualisierung der Lösung $u(x, t)$ dienen die dreidimensionalen Abbildungen 3.47-3.49 sowie die dreidimensionale Darstellung 3.50 von $z(\tau)(x, t)$.

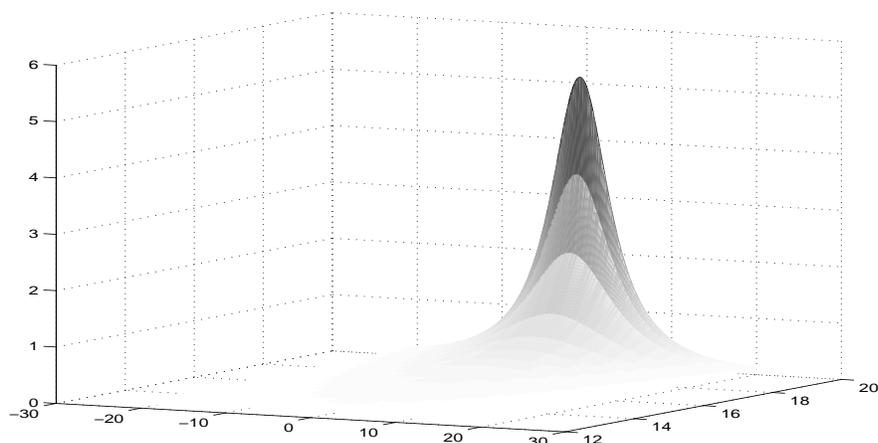


Abbildung 3.47: $u(x, t)$

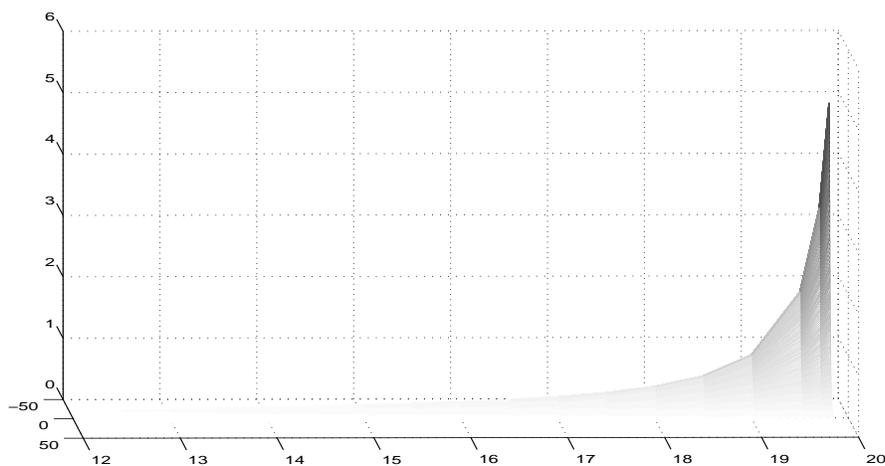


Abbildung 3.48: $u(x, t)$

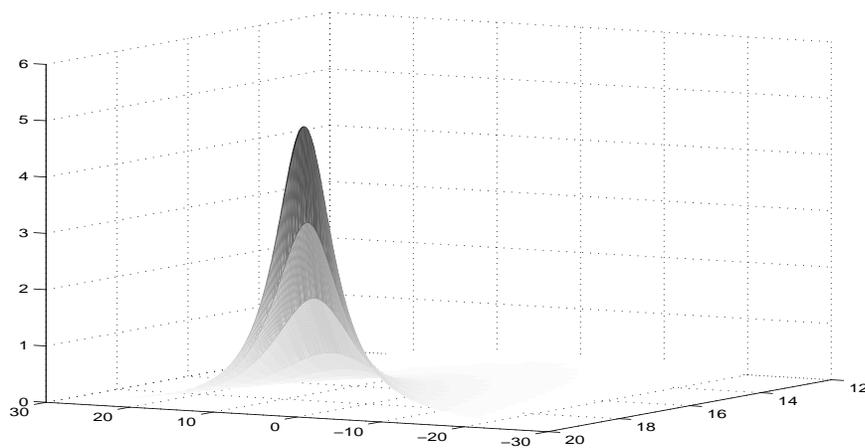


Abbildung 3.49: $u(x, t)$

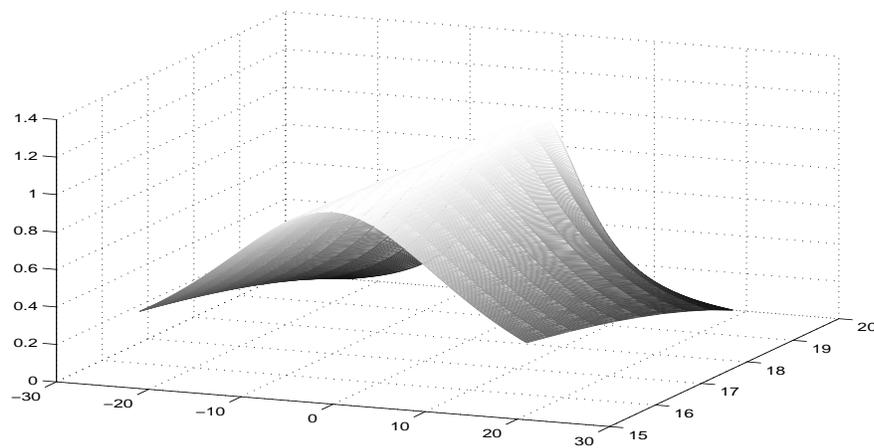


Abbildung 3.50: $z(\tau)(x, t)$

Kapitel 4

Die nichtlineare Schrödingergleichung

4.1 Problemstellung

4.1.1 Gleichung

Gegeben sei die komplexwertige, gewöhnliche Differentialgleichung

$$\begin{aligned} z''(\tau) + \frac{d-1}{\tau} z'(\tau) - z(\tau) + ia \cdot (\tau z(\tau))' + \\ + |z(\tau)|^2 z(\tau) = 0, \quad \tau > 0 \end{aligned} \quad (4.1)$$

mit den Randbedingungen

$$z'(0) = 0, \quad (4.2a)$$

$$\Im z(0) = 0, \quad (4.2b)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau z'(\tau) = 0 \quad (4.2c)$$

(vgl. [3]).

Da a eine unbekannt reelle Konstante ist, können wir, um ein wohlgestelltes Randwertproblem von gewöhnlichen Differentialgleichungen zu erhalten, das System um die triviale Gleichung

$$a'(\tau) = 0 \quad (4.3)$$

erweitern und erhalten somit

$$z''(\tau) + \frac{d-1}{\tau} z'(\tau) - z(\tau) + ia(\tau)(\tau z(\tau))' + \quad (4.4a)$$

$$+ |z(\tau)|^2 z(\tau) = 0, \quad \tau > 0,$$

$$a'(\tau) = 0. \quad (4.4b)$$

4.1.2 Trennung von Real- und Imaginärteil

Zur numerischen Behandlung des Systems (4.4) mit `kollimplizitor2` werden die Gleichungen für den Real- und Imaginärteil von z hergeleitet, wodurch sich ein reelles System von Differentialgleichungen ergibt.

Sei

$$\begin{aligned} z_R(\tau) &:= \Re z(\tau) \quad \text{und} \\ z_I(\tau) &:= \Im z(\tau), \end{aligned}$$

womit

$$z(\tau) = z_R(\tau) + iz_I(\tau)$$

gilt, so läßt sich das Gleichungssystem (4.4) auch in der Form

$$\begin{aligned} (z_R(\tau) + iz_I(\tau))'' + \frac{d-1}{\tau}(z_R(\tau) + iz_I(\tau))' - (z_R(\tau) + iz_I(\tau)) + \quad (4.5) \\ + ia(\tau)(\tau(z_R(\tau) + iz_I(\tau)))' + \left(\sqrt{z_R(\tau)^2 + z_I(\tau)^2}\right)^2 (z_R(\tau) + iz_I(\tau)) = 0, \quad \tau > 0, \end{aligned}$$

angeben. Daraus erhält man

$$\begin{aligned} z_R''(\tau) + iz_I''(\tau) + \frac{d-1}{\tau}z_R'(\tau) + i\frac{d-1}{\tau}z_I'(\tau) - z_R(\tau) - iz_I(\tau) + \quad (4.6) \\ + ia(\tau)z_R(\tau) - a(\tau)z_I(\tau) + i\tau a(\tau)z_R'(\tau) - \tau a(\tau)z_I'(\tau) + \\ z_R^3(\tau) + z_I^2(\tau)z_R(\tau) + iz_R^2(\tau)z_I(\tau) + iz_I^3(\tau) = 0, \quad \tau > 0. \end{aligned}$$

Nun lassen sich Real- und Imaginärteil leicht trennen, was zum Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} z_R''(\tau) + \frac{d-1}{\tau}z_R'(\tau) - z_R(\tau) - a(\tau)z_I(\tau) - \tau a(\tau)z_I'(\tau) + \quad (4.7a) \\ + z_R^3(\tau) + z_R(\tau)z_I^2(\tau) = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z_I''(\tau) + \frac{d-1}{\tau}z_I'(\tau) - z_I(\tau) + a(\tau)z_R(\tau) + \tau a(\tau)z_R'(\tau) + \quad (4.7b) \\ + z_I^3(\tau) + z_I(\tau)z_R^2(\tau) = 0, \end{aligned}$$

$$a'(\tau) = 0 \quad (4.7c)$$

mit den Randbedingungen

$$z_R'(0) = 0, \quad (4.8a)$$

$$z_I'(0) = 0, \quad (4.8b)$$

$$z_I(0) = 0, \quad (4.8c)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau z_R'(\tau) = 0, \quad (4.8d)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau z_I'(\tau) = 0 \quad (4.8e)$$

führt.

4.1.3 Transformation auf das Intervall [0,1]

Wie in Abschnitt 3.1.2 detailliert beschrieben, wird nun auch das Gleichungssystem (4.7) auf das Intervall [0,1] transformiert.

Man setzt dazu

$$z_1(t) := z_R(t), \quad (4.9a)$$

$$z_2(t) := z_R(1/t), \quad (4.9b)$$

$$z_3(t) := z_I(t), \quad (4.9c)$$

$$z_4(t) := z_I(1/t), \quad (4.9d)$$

$$z_5(t) := a(t) \quad \text{und} \quad (4.9e)$$

$$z_6(t) := a(1/t). \quad (4.9f)$$

Da a eine konstante Funktion ist, gilt natürlich $a(t) = a(1/t)$, also $z_5 = z_6$. Es gilt weiters

$$z_2'(t) = \frac{dz_R\left(\frac{1}{t}\right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z_R'\left(\frac{1}{t}\right)$$

und

$$\left(z_R'\left(\frac{1}{t}\right)\right)' = \frac{dz_R'\left(\frac{1}{t}\right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z_R''\left(\frac{1}{t}\right)$$

sowie analog für z_4

$$z_4'(t) = \frac{dz_I\left(\frac{1}{t}\right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z_I'\left(\frac{1}{t}\right)$$

und

$$\left(z_I'\left(\frac{1}{t}\right)\right)' = \frac{dz_I'\left(\frac{1}{t}\right)}{dt} = -\frac{1}{t^2} z_I''\left(\frac{1}{t}\right).$$

Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \left(z_R'\left(\frac{1}{t}\right)\right)' &= -\frac{1}{t^2} \left(-\frac{d-1}{1/t} z_R'\left(\frac{1}{t}\right) + z_R\left(\frac{1}{t}\right) + a\left(\frac{1}{t}\right) z_I\left(\frac{1}{t}\right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{t} a\left(\frac{1}{t}\right) z_I'\left(\frac{1}{t}\right) - z_R^3\left(\frac{1}{t}\right) - z_R\left(\frac{1}{t}\right) z_I^2\left(\frac{1}{t}\right) \right) \quad \text{und} \\ \left(z_I'\left(\frac{1}{t}\right)\right)' &= -\frac{1}{t^2} \left(-\frac{d-1}{1/t} z_I'\left(\frac{1}{t}\right) + z_I\left(\frac{1}{t}\right) - a\left(\frac{1}{t}\right) z_R\left(\frac{1}{t}\right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{t} a\left(\frac{1}{t}\right) z_R'\left(\frac{1}{t}\right) - z_I^3\left(\frac{1}{t}\right) - z_I\left(\frac{1}{t}\right) z_R^2\left(\frac{1}{t}\right) \right). \end{aligned}$$

Substituiert man (4.9) sowie

$$\begin{aligned} z'_R \left(\frac{1}{t} \right) &= -t^2 z'_2(t) \quad \Rightarrow \\ \left(z'_R \left(\frac{1}{t} \right) \right)' &= -2tz'_2(t) - t^2 z''_2(t) \quad \text{und} \\ z'_I \left(\frac{1}{t} \right) &= -t^2 z'_4(t) \quad \Rightarrow \\ \left(z'_I \left(\frac{1}{t} \right) \right)' &= -2tz'_4(t) - t^2 z''_4(t), \end{aligned}$$

so erhält man

$$\begin{aligned} -2tz'_2(t) - t^2 z''_2(t) &= -t(d-1)z'_2(t) - \frac{1}{t^2} z_2(t) - \frac{1}{t^2} z_5(t)z_4(t) + \\ &\quad + \frac{1}{t} z_5(t)z'_4(t) + \frac{1}{t^2} z_2^3(t) + \frac{1}{t^2} z_2(t)z_4^2(t) \quad \text{bzw.} \\ -2tz'_4(t) - t^2 z''_4(t) &= -t(d-1)z'_4(t) - \frac{1}{t^2} z_4(t) + \frac{1}{t^2} z_5(t)z_2(t) - \\ &\quad - \frac{1}{t} z_5(t)z'_2(t) + \frac{1}{t^2} z_4^3(t) + \frac{1}{t^2} z_4(t)z_2^2(t). \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich das transformierte Gleichungssystem

$$z''_1(t) + \frac{d-1}{t} z'_1(t) - z_1(t) - z_5(t)z_3(t) - \quad (4.10a)$$

$$-tz_5(t)z'_3(t) + z_1^3(t) + z_1(t)z_3^2(t) = 0,$$

$$t^2 z''_2(t) + t(3-d)z'_2(t) - \frac{1}{t^2} z_2(t) - \frac{1}{t^2} z_5(t)z_4(t) + \quad (4.10b)$$

$$+ \frac{1}{t} z_5(t)z'_4(t) + \frac{1}{t^2} z_2^3(t) + \frac{1}{t^2} z_2(t)z_4^2(t) = 0,$$

$$z''_3(t) + \frac{d-1}{t} z'_3(t) - z_3(t) + z_5(t)z_1(t) + \quad (4.10c)$$

$$+tz_5(t)z'_1(t) + z_3^3(t) + z_3(t)z_1^2(t) = 0,$$

$$t^2 z''_4(t) + t(3-d)z'_4(t) - \frac{1}{t^2} z_4(t) + \frac{1}{t^2} z_5(t)z_2(t) - \quad (4.10d)$$

$$- \frac{1}{t} z_5(t)z'_2(t) + \frac{1}{t^2} z_4^3(t) + \frac{1}{t^2} z_4(t)z_2^2(t) = 0,$$

$$z''_5(t) = 0 \quad (4.10e)$$

mit den Randbedingungen

$$z_1'(0) = 0, \quad (4.11a)$$

$$z_1(1) = z_2(1), \quad (4.11b)$$

$$z_1'(1) = -z_2'(1), \quad (4.11c)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} -tz_2'(t) = 0, \quad (4.11d)$$

$$z_3'(0) = 0, \quad (4.11e)$$

$$z_3(0) = 0, \quad (4.11f)$$

$$z_3(1) = z_4(1), \quad (4.11g)$$

$$z_3'(1) = -z_4'(1), \quad (4.11h)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} -tz_4'(t) = 0, \quad (4.11i)$$

$$z_5'(0) = 0. \quad (4.11j)$$

Die Gleichung (4.10e) und die Bedingung (4.11j) ergeben sich deswegen, da das Problem mit einem Kollokationsprogramm für Systeme von Differentialgleichungen (ausschließlich) zweiter Ordnung gelöst wird.

Offensichtlich sind die Bedingungen (4.11d) und (4.11i) für $z_2'(0)$ und $z_4'(0)$ nicht direkt umsetzbar. Die Werte der Ableitungen können entweder beliebig und endlich sein oder $|z_2'|$ bzw. $|z_4'|$ dürfen für $t \rightarrow 0$ nur langsamer als linear wachsen, was man in Form von Randbedingungen ebenfalls nicht ausdrücken kann.

Daß die Ableitung einer Funktion und die Ableitung ihrer Transformaten an $t = 0$ unterschiedlich sein können (wie in 4.1.3 im Kontext bewiesen), wird nun am Beispiel $f(x) := \frac{1}{x}$ demonstriert:

Wir transformieren die Funktion im Bereich $x \in [1, \infty]$ auf das Intervall $[0, 1]$, also $g(t) := f(1/t)$ mit $t \in [0, 1]$, d.h. $g(t) = t$. Es ist also $\lim_{x \rightarrow \infty} f'(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x^2} = 0$, während $g'(0) = 1$ ist.

Auch die Überlegung, wegen

$$-\varepsilon z_2'(\varepsilon) = 0 \quad \Rightarrow \quad z_2'(\varepsilon) = 0, \quad \varepsilon > 0$$

$z_2'(0) := 0$ zu setzen, ist nicht sinnvoll, wie sich anhand dieses Beispiels zeigen läßt:

Angenommen $f(x)$ ist die (noch unbekannt) Lösung eines Differentialgleichungssystems auf $x \in [1, \infty]$ mit der Randbedingung $\lim_{x \rightarrow \infty} x f'(x) = 0$, d.h. $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} f'(1/t) = 0$. Bekanntlich gilt $f'(1/t) = -t^2 g'(t)$; nach obiger Überlegung müßte wegen $-\varepsilon g'(\varepsilon) = 0$ nun $g'(0) := 0$ gewählt werden, was aber natürlich in Widerspruch zu $g'(0) = 1$ stünde.

Es werden daher die schwächeren Bedingungen aus [3],

$$z_2(0) = 0 \quad \text{und} \quad (4.12a)$$

$$z_4(0) = 0, \quad (4.12b)$$

die nicht hinreichend für (4.11d) und (4.11i) sind, verwendet und das Verhalten von $tz_2'(t)$ und $tz_4'(t)$ beobachtet.

Das folgende Beispiel zeigt, daß die Bedingungen (4.12) im allgemeinen zu schwach sind, um (4.11d) und (4.11i) zu garantieren:

Wir transformieren die Funktion $f(x) := \frac{\sin x}{x}$ auf das Intervall $[0, 1]$, also $g(t) := f(1/t) = t \sin \frac{1}{t}$. Der Grenzwert für $t \rightarrow 0$ ist also

$$\lim_{t \rightarrow 0} t \sin \frac{1}{t} = 0.$$

Betrachten wir nun die Ableitung $g'(t) = \sin \frac{1}{t} - \frac{1}{t} \cos \frac{1}{t}$. Es gilt

$$\lim_{t \rightarrow 0} g'(t) \doteq [-\infty, \infty],$$

und damit ist die Bedingung $\lim_{t \rightarrow 0} tg'(t) = 0$ wegen

$$\lim_{t \rightarrow 0} tg'(t) \doteq [-1, 1]$$

verletzt (dabei steht \doteq für “undefiniert in”).

4.2 Numerische Lösung mit Hilfe des Kollokationsprogramms kollimplizitord2

In diesem Abschnitt werden die Berechnungen mit 5 Gaußpunkten durchgeführt. Als erster Startwert wird die in [4] berechnete Lösung mit $z_5 \equiv 0.9$ (siehe Abbildung 4.1) verwendet. Die Abbildungen 4.2 - 4.5 zeigen, wie sich die 4 Komponenten der Lösung mit zunehmender Anzahl der Intervalle entwickeln.

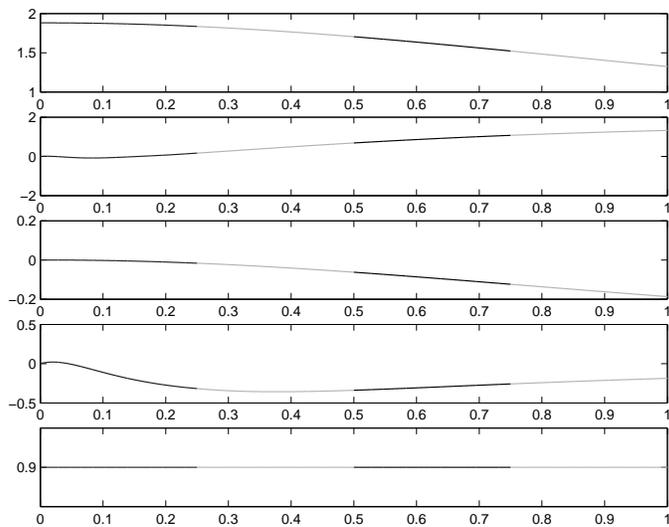


Abbildung 4.1: Startprofil, 4 Intervalle

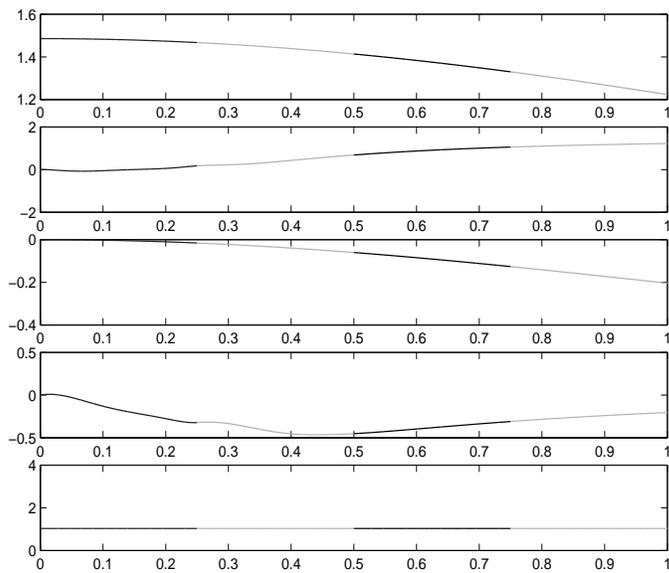


Abbildung 4.2: Lösung mit 4 Intervallen

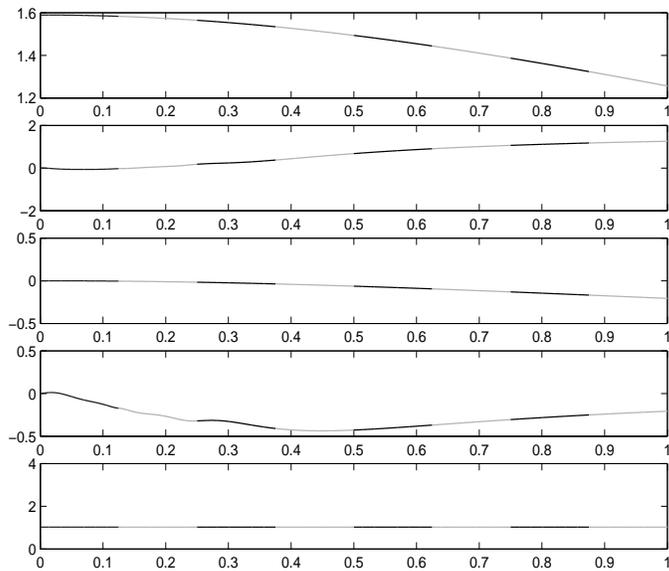


Abbildung 4.3: Lösung mit 8 Intervallen

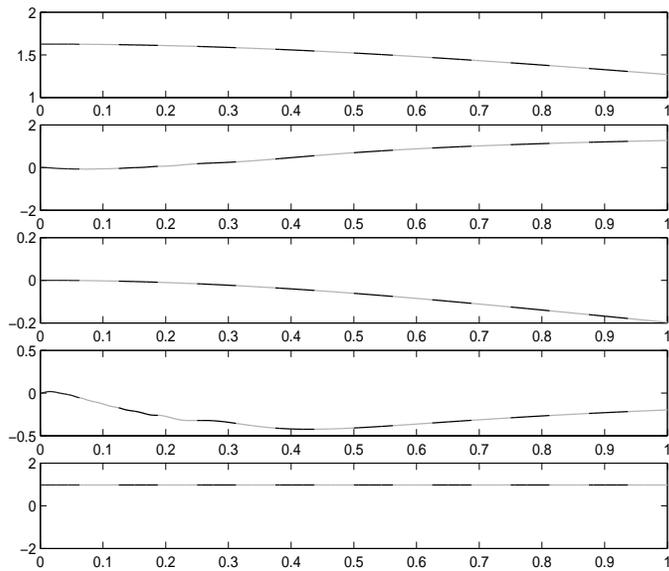


Abbildung 4.4: Lösung mit 16 Intervallen

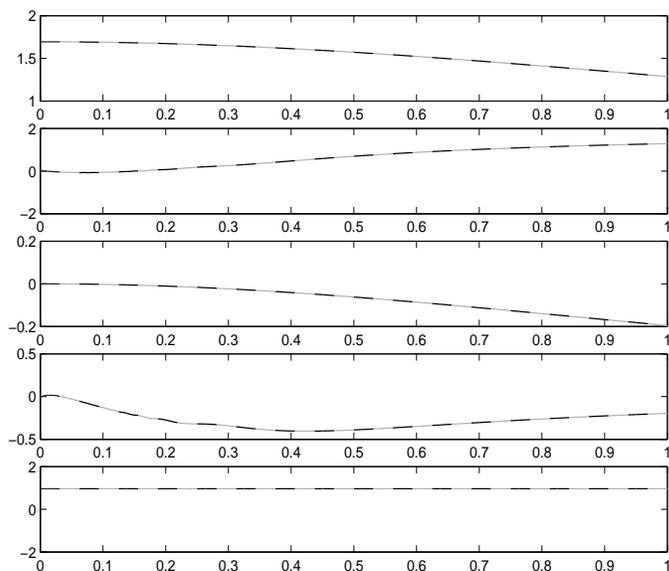


Abbildung 4.5: Lösung mit 32 Intervallen

Nun ist es aber noch nicht gesichert, daß die Bedingungen (4.11d) und (4.11i) auch tatsächlich erfüllt sind. Daher betrachten wir in Abbildung 4.6 die Ableitungen der transformierten Lösung z'_1, \dots, z'_5 . Es handelt sich hierbei nicht um die Transformierte der Ableitung der Lösung $z'_R(1/t)$ und $z'_I(1/t)$. Um diese zu erhalten, müßte man mit $-t^2$ multiplizieren, vgl. Abschnitt 4.1.3.

Offensichtlich geraten z'_2 und z'_4 in der Nähe von 0 in Schwingungen, was die Randbedingungen (4.11d) und (4.11i) nur dann verletzen könnte, wenn z'_2 und z'_4 an 0 unbeschränkt wären. Abbildung 4.7 zeigt, daß $\lim_{t \rightarrow 0} -tz'_2(t)$ und $\lim_{t \rightarrow 0} -tz'_4(t)$ zumindest numerisch betrachtet gegen 0 gehen.

Die Abbildungen 4.8 – 4.17 zeigen den weiteren Verlauf der Berechnungen und das numerische Verhalten der Ableitungen.

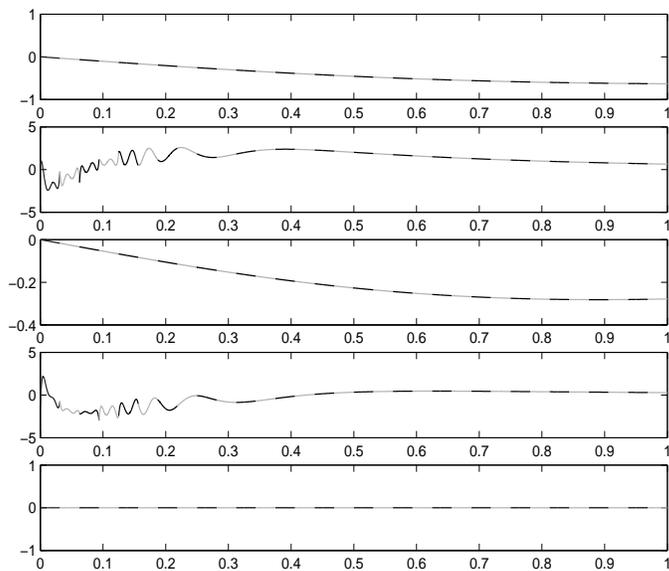


Abbildung 4.6: Ableitung der transformierten Lösung mit 32 Intervallen

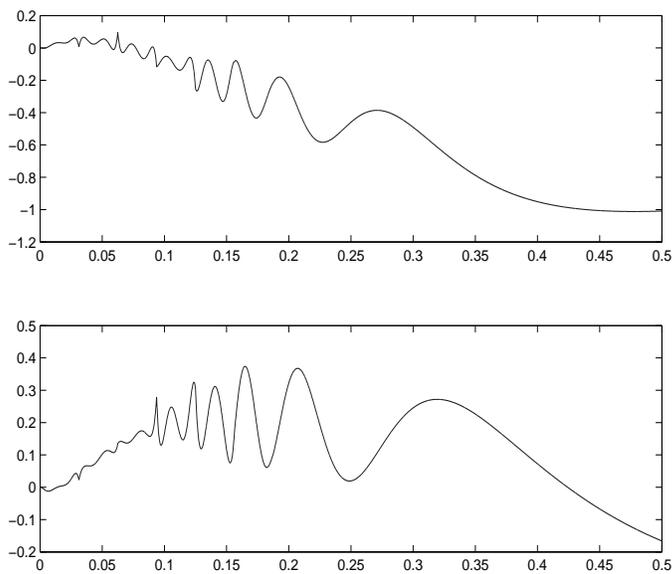


Abbildung 4.7: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 32 Intervallen

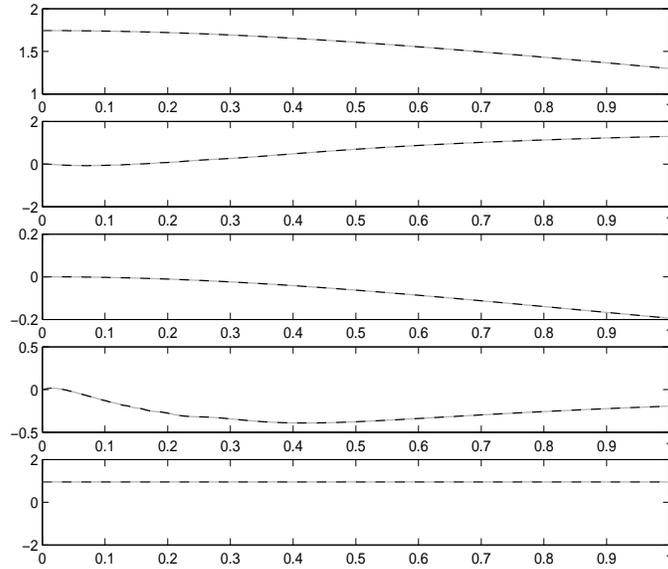


Abbildung 4.8: Lösung mit 64 Intervallen

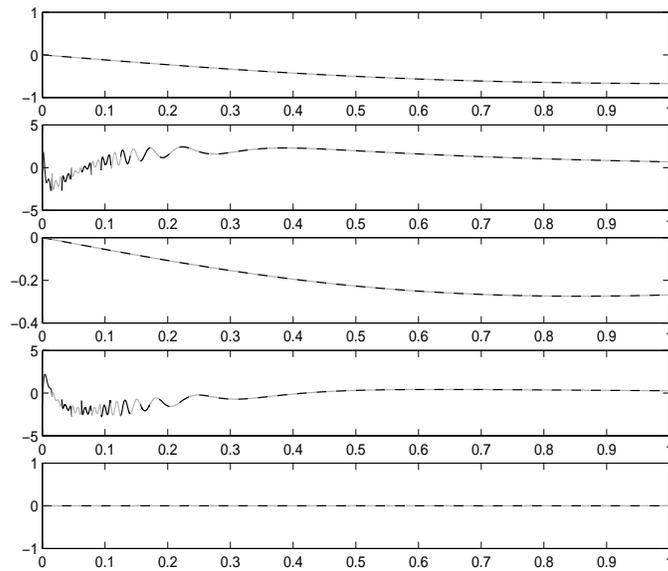


Abbildung 4.9: Ableitung der transformierten Lösung mit 64 Intervallen

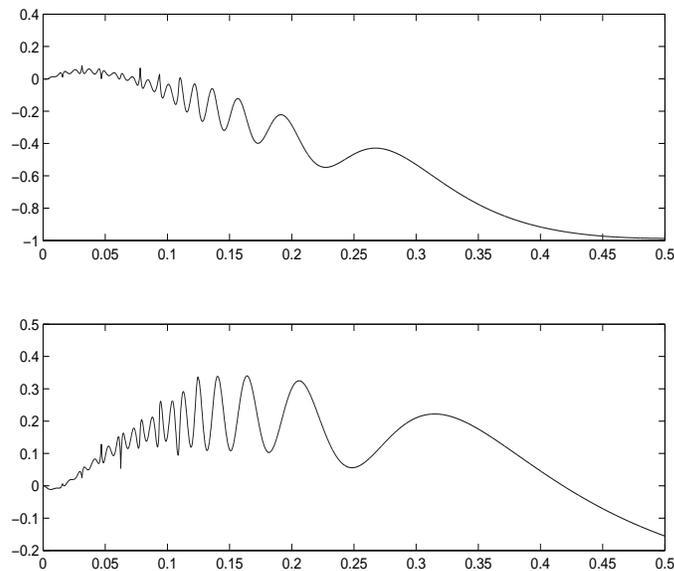


Abbildung 4.10: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 64 Intervallen

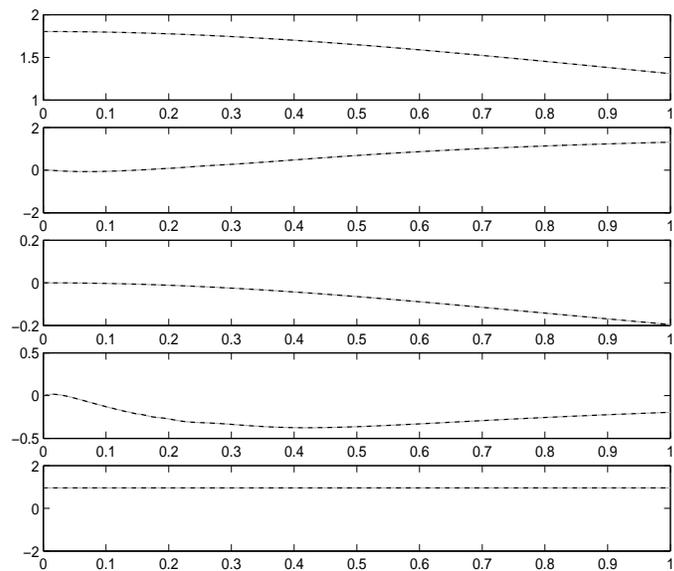


Abbildung 4.11: Lösung mit 128 Intervallen

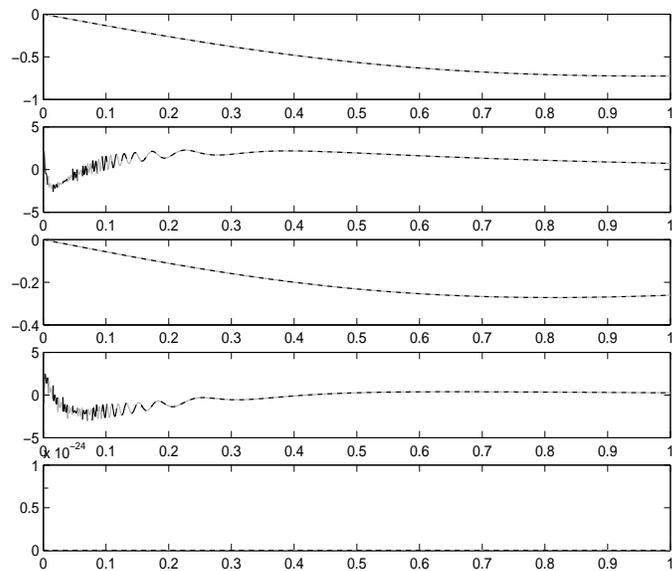


Abbildung 4.12: Ableitung der transformierten Lösung mit 128 Intervallen

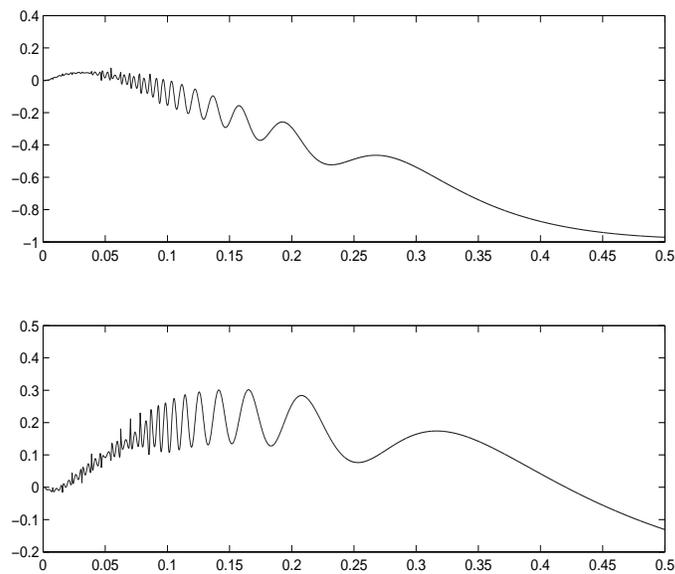


Abbildung 4.13: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 128 Intervallen

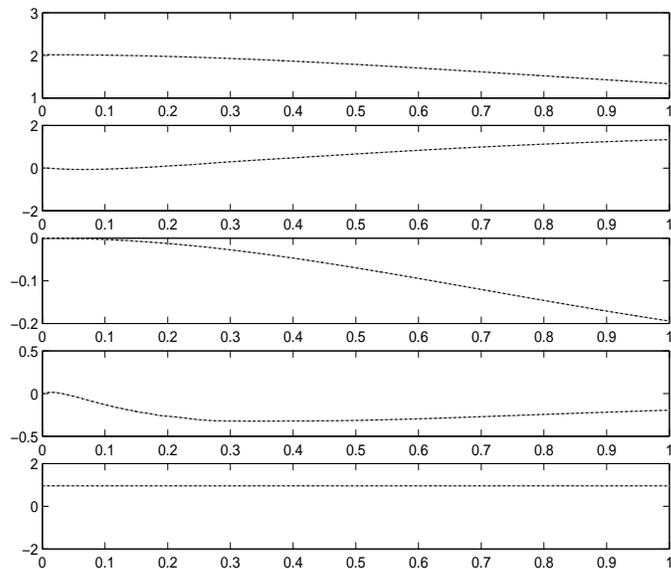


Abbildung 4.14: Lösung mit 256 Intervallen

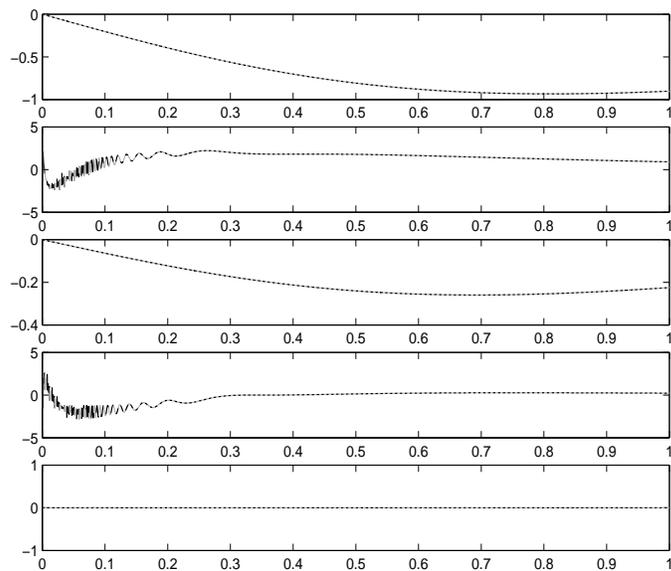


Abbildung 4.15: Ableitung der transformierten Lösung mit 256 Intervallen

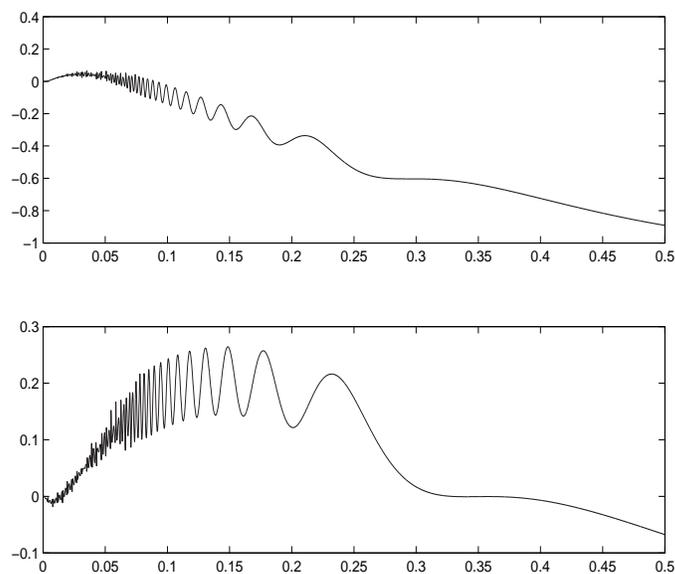


Abbildung 4.16: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 256 Intervallen

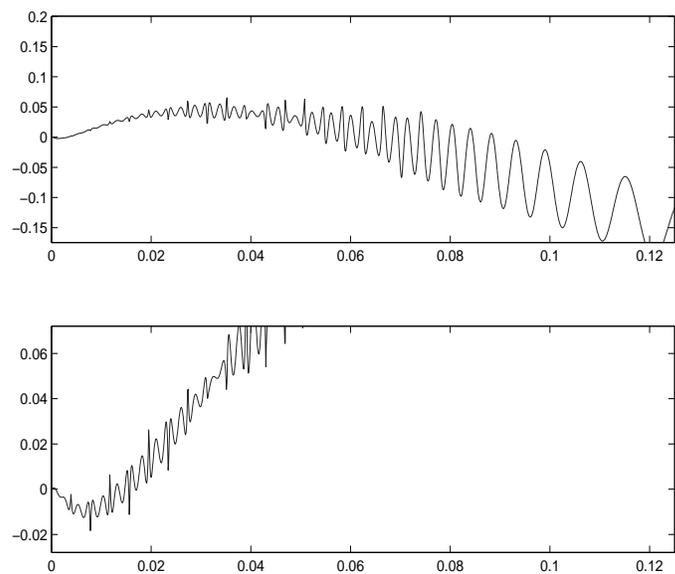


Abbildung 4.17: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 256 Intervallen, vergrößert

Wie die Graphiken zeigen, variiert der Wert von $z_1(0)$ sehr stark, was darauf hindeutet, daß in diesem Bereich mehrere Lösungen existieren und das Programm nicht fix zu einer bestimmten konvergiert. Daher lassen sich auch keine sinnvollen Konvergenzordnungen berechnen.

Abbildung 4.18 zeigt eine Lösung für 256 Intervalle – allerdings mit der Lösung aus [4] als Startwert. Der Wert von $z_1(0)$ variiert also nicht nur in Abhängigkeit von der Anzahl der Intervalle, sondern auch vom Startwert.

Abbildung 4.21 zeigt die Lösung für 512 Intervalle mit dem Startwert aus [4]. Offensichtlich ist der Wert $z_1(0)$ wieder an einer völlig anderen Stelle.

Es hat sich also gezeigt, daß die numerischen Resultate dieses Ansatzes (im Gegensatz zum Beispiel aus Kapitel 3) leider nicht sehr verläßlich sind.

Die wichtige Frage der korrekten Randbedingungen auf dem Intervall $[0,1]$ muß noch weiter untersucht werden.

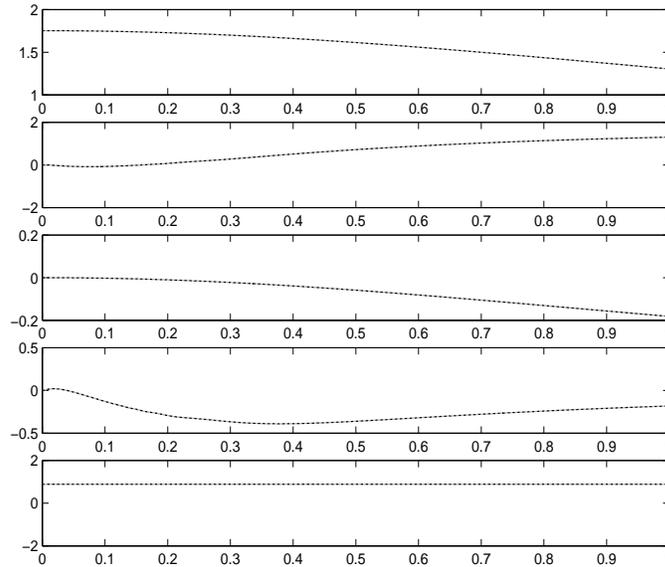


Abbildung 4.18: Lösung mit 256 Intervallen, anderer Startwert

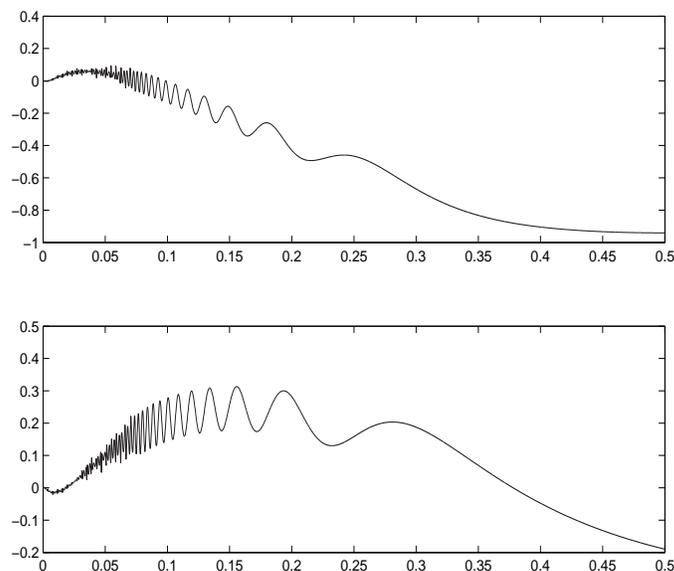


Abbildung 4.19: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 256 Intervallen, anderer Startwert

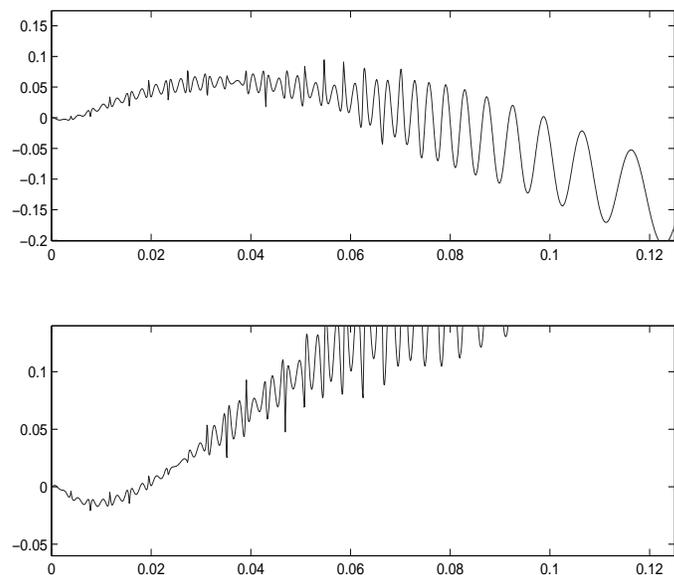


Abbildung 4.20: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 256 Intervallen, anderer Startwert, vergrößert

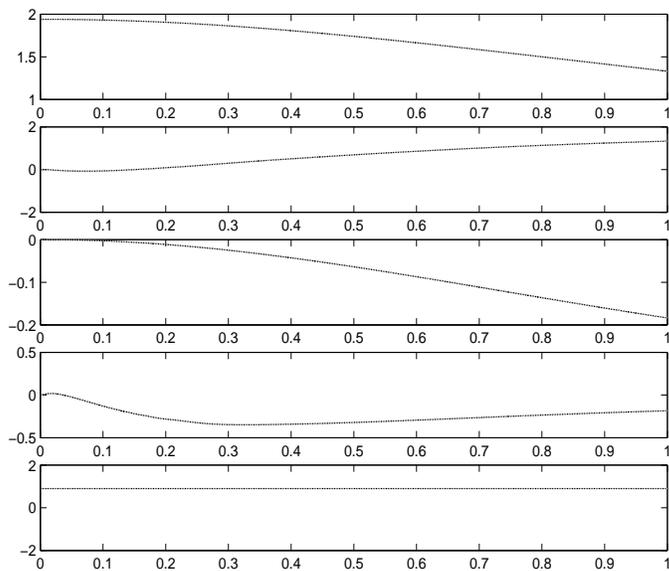


Abbildung 4.21: Lösung mit 512 Intervallen

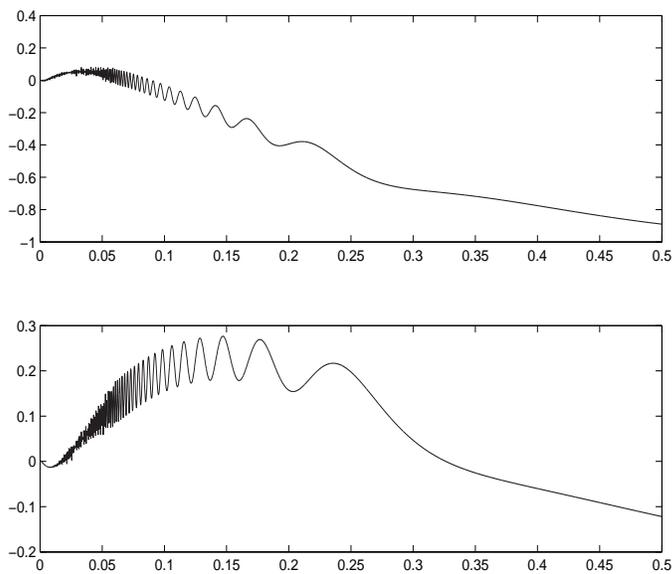


Abbildung 4.22: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 512 Intervallen

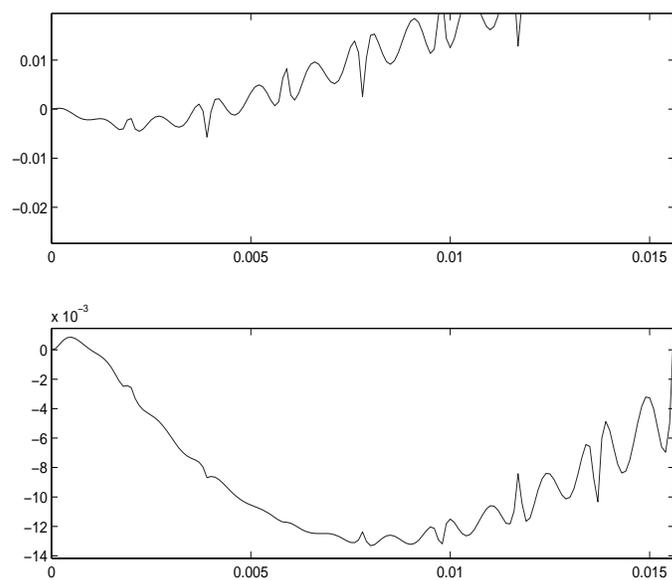


Abbildung 4.23: $-tz'_2(t)$ und $-tz'_4(t)$ mit 512 Intervallen, vergrößert

Literaturverzeichnis

- [1] W. Auzinger, G. Kneisl, O. Koch, E. B. Weinmüller: *A Solution Routine for Singular Boundary Value Problems*, Techn. Rep., ANUM Preprint No. 1/02, Vienna University of Technology (2002).
- [2] R. Plato: *Numerische Mathematik kompakt*, Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 2000.
- [3] C. J. Budd, O. Koch, E. B. Weinmüller: *Self-similar blow-up in nonlinear PDEs*, Techn. Rep., AURORA TR 2004-07.
- [4] C. J. Budd, O. Koch, E. B. Weinmüller: *Computation of Self-Similar Solution Profiles for the Nonlinear Schrödinger Equation*, Vienna University of Technology, Preprint submitted to Elsevier Science.
- [5] C. J. Budd, G. J. Collins, V. A. Galaktionov: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 97 (1998), pp. 51-80.
- [6] Z. Bashir-Ali: *Numerical Solution of Parameter Dependent Two-Point BVP Using Iterated Deferred Correction*, Ph.D.Thesis, Imperial College, London, 1998.
- [7] W. Auzinger, G. Kneisl, O. Koch, E. B. Weinmüller: *SBVP 1.0 - A MATLAB Solver for Singular Boundary Value Problems*, ANUM Preprint No. 02/02, Vienna University of Technology (2002).
- [8] W. Auzinger, O. Koch, E. B. Weinmüller: *Efficient collocation schemes for singular boundary value problems*, Numer. Algorithms, 31 (2002), pp. 525.
- [9] U. Ascher, R. Mattheij, R. Russell: *Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1988.
- [10] U. Ascher, J. Christiansen, R. Russell: *A collocation solver for mixed order systems of boundary values problems*, Math. Comp. 33 (1978) 659–679.

- [11] C. Budd, V. A. Galaktionov, J. F. Williams: *Self-similar blow-up in higher-order semilinear parabolic equations*, Preprint 02/10, Dept. Math. Sci., Univ. of Bath (2002).
- [12] C. Budd, V. A. Galaktionov: *Stability and spectra of blow-up in problems with quasi-linear gradient diffusivity*, Proc. R. Soc. Lond. A 45A (1998) 2371–2407.
- [13] C. Budd, G. J. Collins, V. A. Galaktionov: *An asymptotic and numerical description of self-similar blow-up in quasilinear parabolic equations*, J. Comput. Appl. Math. 97 (1998) 51–80.
- [14] C. Budd, O. Koch, E. B. Weinmüller: *From the nonlinear Schrödinger equation to singular BVPs*, AURORA TR-2004-02, Inst. for Anal. and Sci. Comput., Vienna Univ. of Technology, Austria, available at <http://www.vcpc.univie.ac.at/aurora/publications/> (2004).
- [15] D. A. Frank-Kamenetskii: *Towards temperature distributions in a reaction vessel and the stationary theory of thermal explosion*, Doklady Akad. Nauk SSSR 18 (1938) 411–412.
- [16] E. Hairer, S. Nørsett, G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations I*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1987.
- [17] L. Petzold: *A description of DASSL: A differential algebraic system solver*, Report SAND82-8637, Amer. Math. Soc., Sandia National Labs (1982).
- [18] L. Shampine, J. Kierzenka, M. Reichelt: *Solving Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations in MATLAB with `bvp4c`*, available at <ftp://ftp.mathworks.com/pub/doc/papers/bvp/> (2000).
- [19] L. Shampine: *Singular boundary value problems in ODEs*, Appl. Math. Comput. 138 (2003) 99–112.
- [20] C. J. Budd, V. Rottschäfer, F. F. Williams: *Multi-bump, blow-up, self-similar solutions of the Complex Ginzburg-Landau equation*, submitted to Nonlinearity.
- [21] N. V. Zmitrenko, S. P. Kurdyumov, A. P. Mikhailov, A. A. Samarskii: *Localization of thermonuclear combustion in a plasma with electronic thermal conductivity*, JETP Lett. 26 (1977) 469–472.