Überblick

Das Buch gliedert sich in acht Kapitel, ein Softwareverzeichnis, ein Literaturverzeichnis und einen Index. Die ersten drei Kapitel legen die Grundlagen der Modellierung, der Analysis und der Numerik. Die folgenden vier Kapitel handeln von Algorithmen für Anfangswertprobleme, darunter zunächst drei Kapitel von Einschrittverfahren, ein Kapitel von Mehrschrittverfahren. Das letzte Kapitel ist den Randwertproblemen gewidmet.

Kapitel 1. Hier gehen wir auf den naturwissenschaftlichen Hintergrund von Differentialgleichungen als Ausdruck deterministischer Modelle ein: Die *Newtonsche Himmelsmechanik* etwa kommt heute bei der Bahnberechnung von Satelliten oder Planetoiden vor. Auch die klassische *Moleküldynamik*, die beim Entwurf von Medikamenten und beim Verständnis von Viruserkrankungen eine zunehmende Rolle spielt, basiert auf der Newtonschen Mechanik. Hier treten zum ersten Mal *Hamiltonsche Systeme* auf. Steife Anfangswertprobleme tauchten historisch zum ersten Mal in der *chemischen Reaktionskinetik* auf, die heute wichtiger Teil der industriellen Verfahrenstechnik ist. Als letztes Anwendungsgebiet stellen wir *elektrische Schaltkreise* dar, die beim Entwurf technischer Geräte vom Mobiltelefon bis zum ABS–Bremssystem in Autos vorkommen. Sie führen in natürlicher Weise auf die Klasse differentiell–algebraischer Anfangswertprobleme.

Kapitel 2. In diesem Kapitel legen wir die Grundlagen der analytischen *Existenz– und Eindeutigkeitstheorie*, jedoch speziell mit Blick auf ihre Anwendung in der *mathematischen Modellierung*. Ausgehend von Punkten, an denen die rechte Seite nicht Lipschitz–stetig ist, entsteht eine interessante Struktur nicht–eindeutiger Lösungen, die in diesem Detailgrad kaum sonstwo dargestellt ist. *Singuläre Störungsprobleme* sind ein schönes und nützliches Hilfsmittel für die Analyse dynamischer Multiskalensysteme und spielen auch für die Numerik eine Rolle. Zu ihrer Erweiterung auf allgemeinere *quasilineare differentiell–algebraische* Probleme führen wir explizite Darstellungen lösungsabhängiger Orthogonalprojektoren ein, die uns edie Charakterisierung eines Index–1–Falles gestatten, der ansonsten in der Literatur meist als Index–2–Fall behandelt werden muß. Diese Charakterisierung hilft später bei der Implementierung von differentiell–algebraischen Einschritt– wie Mehrschrittverfahren. Die Einschränkung auf den Index 1 gilt für das ganze Buch.

Kapitel 3. Hier wenden wir uns der praktisch wichtigen Frage der Numerischen Analysis, die sich mit der Sensitivität gegenüber typischen Eingabedaten befaßt. Ganz im Sinne von Band I, Kapitel 2, definieren wir *Konditionszahlen* für Anfangswertprobleme. *Asymptotische Stabilität* wird zunächst für Spezialfall linear–autonomer Differentialgleichungen untersucht, in dem eine Charakterisierung allein über die Realteile der Eigenwerte möglich ist. Die Übertragung ins Nichtlineare erfolgt für die Umgebung von Fixpunkten durch Zerlegung invarianten Tangentialräume der zugeordneten Mannigfaltigkeiten. Nach dem gleichen Muster werden auch diskrete dynamische Systeme dargestellt, die ja bei Diskretisierung der Differentialgleichungen entstehen: Zunächst untersuchen wir linear–autonome Rekursionen, wo eine erschöpfende Charakterisierung über die Beträge der Eigenwert möglich ist, dann die Übertragung ins Nichtlineare durch die Charakterisierung über die Tangentialräume zu den Fixpunkten. Der Zusammenhang der charakterisierenden Realteile im Kontinuierlichen und der Beträge im Diskreten wird genutzt zur Diskussion der *Vererbung* von Eigenschaften der Matrizenexponentiellen auf approximierende rationale Matrizenfunktionen.

Damit sind die methodischen *Grundlagen* zur Behandlung der numerischen Lösung von Differentialgleichungsproblemen gelegt.

Kapitel 4. In diesem Kapitel werden explizite *Einschrittverfahren* für *nichtsteife* Anfangswertprobleme zusammfassend dargestellt. Die Notation berücksichtigt von Anfang an den adaptiven Fall, also nichtuniforme Gitter. Durch die Einschritt–Diskretisierung geht die Evolution des Differentialgleichungssystems über in eine *diskrete Evolution*, die Konditionszahlen entsprechend in *diskrete Konditionszahlen*. Der Vergleich von kontinuierlichen und diskreten Konditionszahlen legt schließlich auf äußerst einfache Weise den Begriff *Steifheit* von Anfangswertproblemen dar, selbst für eine einzige skalare Differentialgleichung. In Taylorentwicklungen, die beim Aufstellen der Bedingungsgleichungen für die Koeffizienten von *Runge–Kutta–Verfahren* auftreten, schreiben wir höhere Ableitungen sowie anfallende Koeffizientenprodukte konsequent als multilineare Abbildungen. Damit können wir die Butcher'schen Wurzelbäume indexfrei als Darstellung der Einsetzungsstruktur in die multilinearen Abbildungen deuten. Durch besonders transparente Darstellung sowie suggestive Bezeichnungsweise hoffen wir, speziell diesen nicht ganz einfach zugänglichen Stoff lesbar gemacht zu haben. *Explizite Extrapolationsverfahren* mit einer asymptotischen τ^2–Entwicklung des Diskretisierungsfehlers werden über die Reversibilität der diskreten Evolution charakterisiert (Stetter–Trick). Die asymptotische Energieerhaltung der Störmer/Verlet–Diskretisierung wird diskutiert an Hand des chaotischen Verhaltens *Hamiltonscher Systeme*; ein tieferes Verständnis gelingt erst über die

Analyse der Kondition dieser Anfangswertprobleme.

Kapitel 5. Die *adaptive Steuerung* von Schrittweite und Verfahrensordnung in numerischen Integratoren ist bei stark variierender Dynamik von zentraler Bedeutung für den Rechenaufwand. Dieses Kapitel behandelt zunächst nur Einschrittverfahren. Zum tieferen Verständnis machen wir einen methodischen Ausflug in die Theorie der Regelungstechnik und interpretieren die Schrittweitensteuerung als diskreten Regler. Aus dieser Sicht erhalten wir eine äußerst brauchbare Stabilitätsbedingung, die das empirisch bekannte robuste Abschneiden der Schrittweitensteuerung in Verfahren höherer Ordnung auch bei Ordnungsabfall theoretisch untermauert. Damit ist die Brücke zu steifen Integratoren gebaut.

Kapitel 6. Hierin behandeln wir *Einschrittverfahren* für *steife* und *differentiell–algebraische* Anfangswertprobleme. Dazu analysieren wir die Vererbung von Eigenschaften eines kontinuierlichen Phasenflusses auf die diskreten Flüsse. Unter den rationalen Approximationen der komplexen Exponentialfunktion, die im Punkt $z = \infty$ ein wesentliche Singularität besitzt, wählen wir diejenigen aus, die im Punkt $z = \infty$ verschwinden, und kommen so zum tragenden Konzept der *L–Stabilität*. Die Annäherung an die wesentliche Singularität längs der imaginären Achse, die ja nicht zum wert 0 führt, behandeln wir im Zusammenhang der *isometrischen* Struktur von Phasenflüssen. Nach dieser Analyse verzweigt unsere Darstellung in natürlicher Weise in implizite und linear–implizite Einschrittverfahren. Im Runge–Kutta–Rahmen von Butcher führt dies zu den *impliziten Runge–Kutta–Verfahren*, bei denen *nichtlineare* Gleichungssysteme zu lösen sind. Unter diesen Verfahren richten wir unser Hauptinteresse auf *Kollokationsverfahren*, die sich durch transparente Beweismethoden und schöne Vererbungseigenschaften auszeichnen. Darüberhinaus bilden sie eine wichtige Klasse von Verfahren zur Lösung von Randwertproblemen (siehe weiter unten). Die direkte Umsetzung des Konzeptes der Störung von linearen Phasenflüssen führt uns zu den *linear–impliziten Einschrittverfahren*, bei denen lediglich *lineare* Gleichungssysteme zu lösen sind. Unter diesen Verfahren legen wir die Betonung auf das extrapolierte linear–implizite Euler–Verfahren, da es derzeit die einzige brauchbare W–Methode höherer und sogar variabler Ordnung darstellt; es eignet sich für quasilineare differentiell–algebraische Probleme nur bis zum Index 1 — eine Einschränkung, die ohnehin im ganzen Buch durchgehalten ist. Die letztere Klasse von Verfahren wird insbesondere bei *Linienmethoden* für *partielle Differentialgleichungen* mit Erfolg angewendet. Darüberhinaus bilden sie eine bequeme Basis für die Realisierung einer *numerischen singulären Störungsrechnung*, die neuerdings bei der dynamischen Elimination schneller Freiheitsgrade eine wichtige Rolle spielt, insbesondere im Kontext einer Modellreduktion bei zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen vom

Diffusions–Reaktions–Typ.

Damit ist die Darstellung von Einschrittverfahren abgeschlossen.

Kapitel 7. In diesem Kapitel werden *Mehrschrittverfahren* für *nichtsteife* und *steife* Anfangswertprobleme parallel abgehandelt. Zunächst wird die klassische Konvergenztheorie über *äquidistantem* Gitter dargestellt. Der übliche Weg geht über die die formale Interpretation von k–Schrittverfahren als Einschrittverfahren k–facher Dimension, was jedoch unhandlichen Norm führt, die über eine Jordansche Normalform definiert ist. Stattdessen entwickeln wir einen recht einfachen *Folgenkalkül*, der Abschätzungen in der Maximumnorm gestattet. Strukturell nimmt unser Folgenkalkül eine alte Idee von Henrici wieder auf, wobei wir allerdings die für diesen großen Klassiker der numerischen Differentialgleichungen typischen Gebrauch komplexer Analysis vermieden haben. Der Gesichtspunkt der Vererbung der Stabilität eines Phasenflusses schält wiederum die wesentliche Struktur von Mehrschrittverfahren für nichtsteife und steife Probleme simulatn heraus: Über die Stabilität bei $z = 0$ gelangen wir direkt zu Adams–Verfahren, während uns die Stabilität bei $z = \infty$ in vergleichbarer Weise zu den BDF–Verfahren führt. Die Familie der Adams–Verfahren läßt sich als numerische Integration interpretieren, ausgehend von einer Interpolation des Richtungsfeldes. Die Familie der BDF–Verfahren hingegen läßt sich als numerische Differentiation interpretieren, ausgehend von einer Interpolation der Lösung. Beide Verfahren werden einheitlich über *variablem* Gitter und auch in Nordsieck–Form dargestellt bis hin zu wichtigen Details der *adaptiven* Steuerung von Schrittweiten und Ordnung. Durch unsere Herleitung ergibt sich die Erweiterung der BDF–Verfahren auf quasilineare differentiell–algebraische Probleme unmittelbar.

Die vier Kapitel über *Anfangswertprobleme* orientieren sich strikt in Richtung auf wenige wesentliche numerische Integrationsmethoden:

- für *nichtsteife* Probleme auf
  - (a) die expliziten Runge–Kutta–Verfahren von Dormand und Prince,
  - (b) die expliziten Extrapolationsverfahren zur Mittelpunktsregel und zur Störmer/Verlet–Diskretisierung,
  - (c) das Adams–Verfahren in verschiedenen Implementierungen;
- für *steife und differentiell–algebraische* Probleme auf
  - (a) das Radau–Kollokationsverfahren von Hairer und Wanner,
  - (b) das Extrapolationsverfahren auf Basis der linear–impliziten Euler–Diskretisierung von Deuflhard und Nowak,
  - (c) das BDF–Verfahren oder auch Gear–Verfahren in verschiedenen Implementierungen.

Kapitel 8. Auch bei *Randwertproblemen* gehen wir von analytischen Aussagen zur (lokalen) Eindeutigkeit aus. Sie stellen die Basis der Definition von *Konditionszahlen* für Randwertprobleme dar, die invariant gegen affine Transformation der Randbedingungen sind. Der Vergleich mit Anfangswertproblemen legt eine Unterscheidung in zeit– und raumartige Probleme nahe. Bei *zeitartigen* Randwertproblemen existiert eine klar ausgezeichnete Vorzugsrichtung, in der das Anfangswertproblem gutkonditioniert ist; die unabhängige Variable ist typischerweise als Zeit interpretierbar. Bei *raumartigen* Randwertproblemen existiert keine solche Vorzugsrichtung; die unabhängige Variable ist typischerweise als Raumvariable interpretierbar, oft entsteht dieser Problemtyp durch Reduktion von Randwertproblemen bei partiellen Differentialgleichungen auf eine Raumdimension. Dem entspricht eine klare Orientierung in Richtung auf zwei effiziente Verfahrensklassen:

- für *zeitartige* Probleme auf die *Mehrzielmethode*,
- für *raumartige* Probleme auf adaptive *Kollokationsmethoden*.

In beiden Verfahrensklassen ergibt sich jeweils die Definition *diskreter Konditionszahlen* unmittelbar. Sie taucht zugleich auf in der Analyse von Eliminationsverfahren für die auftretenden *zyklischen* linearen Gleichungssysteme. Neben den klassischen Zweipunkt–Randwertproblemen geben wir noch einen Einblick in unterbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Berechnung periodischer Orbits*, und in überbestimmte Probleme, hier am Beispiel der *Paramteridentifizierung* in Differentialgleichungen. Zum Abschluß erwähnen wir noch, in gebotener Kürze, Probleme der *Variationsrechnung* und der *optimalen Steuerung*, die in der Regel auf Mehrpunkt–Randwertprobleme führen.