

4. Lineaire meerstapsmethoden

In dit hoofdstuk zullen we methoden behandelen welke bij het berekenen van elke stap uit het integratieproces gebruik maken van informatie, die verkregen is bij het berekenen van een aantal vorige stappen. We zullen ons echter beperken tot die methoden waarbij, voor het oplossen van de differentiaalvergelijking

$$(4.1) \quad y'(x) = f(x, y),$$

gebruik gemaakt wordt van een lineaire vorm in y_i en y'_i . Een dergelijke lineaire formule schrijven we, voor een k -stapsmethode, in de algemene vorm

$$(4.2) \quad L(y) \equiv \sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n-i} + \beta_i y'_{n-i} = 0.$$

De coëfficiënten α_i en β_i zullen in het algemeen afhankelijk zijn van de steunpunten x_i . Wanneer echter de steunpunten equidistant gekozen worden, zijn α_i en β_i onafhankelijk van $\{x_n\}$. In dat geval spreekt men van *lineaire meerstapsmethoden met vaste staplengte*. Wanneer de steunpunten niet equidistant liggen, spreekt men van een methode *met variabele staplengte*.

Is in (4.2) de parameter β_0 gelijk aan nul, dan kan y_n direct berekend worden uit y_i en y'_i ($n-k \leq i < n$); (4.2) heet dan een *expliciete* of *open* formule. Is $\beta_0 \neq 0$ dan heet (4.2) een *impliciete* of *gesloten* formule.

In het algemeen wordt bij het berekenen van één stap de formule (4.2) een aantal malen gebruikt. Bijvoorbeeld wordt dan met een open formule eerst een waarde voor y_n "voorspeld", welke daarna één of meerdere malen met een gesloten formule wordt verbeterd (de zogenaamde *predictor-corrector* (P.C.) methoden).

Methoden met vaste staplengte

De begrippen consistentie, convergentie en stabiliteit zullen eerst besproken worden voor methoden met vaste staplengte. In dergelijke gevallen kunnen we met de formule (4.2) een operator L_h associëren van de vorm

$$(4.3) \quad L_h(y(x)) = \sum_{i=0}^k \alpha_i y(x-hi) + h \beta_i y'(x-hi).$$

De *orde van consistentie* van formule (4.2) wordt nu gedefinieerd als het grootste getal p waarvoor geldt

$$(4.4) \quad L_h(y(x)) = O(h^{p+1})$$

voor iedere $p + 1$ maal continu differentieerbare oplossing $y(x)$ van (4.1).

We kunnen met behulp van (4.3) en (4.4) op eenvoudige wijze voorwaarden opstellen voor de constanten α_i en β_i wanneer we de functie $y(x)$ in een Taylorreeks ontwikkelen:

$$(4.5) \quad L_h(y(x)) = \sum_{r=0}^{p+1} C_r y^{(r)}(x) h^r + O(h^{p+2})$$

met

$$(4.6) \quad C_0 = \sum_{i=0}^k \alpha_i,$$

$$C_r = \sum_{i=0}^k \frac{(-i)^r}{r!} \alpha_i + \sum_{i=0}^k \frac{(-1)^{r-1}}{(r-1)!} \beta_i \quad (r > 0).$$

Voor p -de orde consistentie is derhalve noodzakelijk

$$C_r = 0 \quad (0 \leq r \leq p).$$

De coëfficiënten α_i en β_i zijn bepaald op een constante factor na. Wanneer we normaliseren door bijvoorbeeld $\sum_{i=0}^k \beta_i = 1$ te kiezen, is C_{p+1} bruikbaar als foutconstante (d.i. een maat voor de nauwkeurigheid binnen de klasse van formules met dezelfde orde). Bij de constructie van een k -stapsmethode hebben we blijkbaar $2k + 1$ vrijheden om α_i en β_i te kiezen. Hiermee is het mogelijk om aan (4.6) te voldoen voor $0 \leq r \leq 2k$. De aldus ontstane formule is dan van de orde $2k$. Voor $k > 2$ voldoet deze formule echter niet aan de stabiliteitsvoorwaarden (zie stelling (4.3)).

Voorbeeld

De constructie van een 4^{de} orde 2-stapsformule komt neer op het oplossen

van (4.6) voor $k = 2$, $0 \leq r \leq 4$. Het stelsel vergelijkingen luidt dan

$$\begin{aligned}\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 &= 0, \\ \alpha_1 + 2\alpha_2 &= \beta_0 + \beta_1 + \beta_2, \\ \alpha_1 + 4\alpha_2 &= 2(\beta_1 + 2\beta_2), \\ \alpha_1 + 8\alpha_2 &= 3(\beta_1 + 4\beta_2), \\ \alpha_1 + 16\alpha_2 &= 4(\beta_1 + 8\beta_2).\end{aligned}$$

De oplossing luidt:

$$\begin{aligned}\alpha_0 = -\alpha_2 = \alpha & & \alpha_1 &= 0 \\ \beta_0 = \beta_2 = \frac{1}{3}\alpha & & \beta_1 &= \frac{4}{3}\alpha.\end{aligned}$$

Het resultaat is de bekende Milne-Simpson formule

$$(4.7) \quad y_n = y_{n-2} + \frac{1}{3}(y'_n + 4y'_{n-1} + y'_{n-2}).$$

De polynomen $\rho(\zeta)$ en $\sigma(\zeta)$

Een aantal eigenschappen van lineaire meerstapsmethoden met variabele staplengte kan eenvoudig geformuleerd worden door gebruik te maken van de polynomen

$$(4.8) \quad \rho(\zeta) = \sum_{i=0}^k \alpha_i \zeta^{k-i} \quad \text{en} \quad \sigma(\zeta) = \sum_{i=0}^k \beta_i \zeta^{k-i}.$$

Stelling 4.1

De volgende beweringen zijn equivalent:

(1) L is consistent van de orde p.

$$(2) \quad L_h(e^{\lambda x}) = C_{p+1}(h\lambda)^{p+1} e^{\lambda x} + O(h^{p+2}).$$

$$(3) \quad \rho(1+z) + \log(1+z) \sigma(1+z) = C_{p+1} z^{p+1} + o(z^{p+2}).$$

Bewijs

(i) We bewijzen eerst de equivalentie van (1) en (2).

Ontwikkeling van $e^{\lambda x}$ in een Taylorreeks geeft, analoog aan (4.5),

$$(4.9) \quad L_h(e^{\lambda x}) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r (h\lambda)^r e^{\lambda x}.$$

Eenzijds volgt nu uit (4.4) dat (1) equivalent is met

$$(4.10) \quad C_r = 0 \quad 0 \leq r \leq p, \quad C_{p+1} \neq 0.$$

Anderzijds volgt uit (4.9) dat (4.10) equivalent is met (2).

(ii) De equivalentie van (2) en (3) volgt uit

$$\begin{aligned} L_h(e^{\lambda x}) &= \sum_{i=0}^k \alpha_i e^{\lambda x} e^{-i\lambda h} + \lambda h \beta_i e^{\lambda x} e^{-i\lambda h} \\ &= e^{\lambda x - k\lambda h} [\rho(e^{\lambda h}) + \lambda h \sigma(e^{\lambda h})], \end{aligned}$$

zodat

$$\begin{aligned} \rho(e^{\lambda h}) + \lambda h \sigma(e^{\lambda h}) &= e^{-\lambda(x-kh)} [C_{p+1} (h\lambda)^{p+1} e^{\lambda x} + o(h^{p+2})] \\ &= e^{kh\lambda} C_{p+1} (h\lambda)^{p+1} + e^{kh\lambda} o(h^{p+2}) \\ &= C_{p+1} (h\lambda)^{p+1} + o(h^{p+2}). \end{aligned}$$

De substitutie $e^{\lambda h} = 1 + z$ levert direkt (3).

Op dezelfde wijze volgt (2) uit (3).

Gevolg

Ontwikkelen we $\rho(1+z) + \log(1+z) \sigma(1+z)$ in een machtreeks, dan blijkt dat voor formules van een bepaalde orde de polynomen ρ en σ aan zekere voorwaar-

den moeten voldoen.

Tabel 4.1. Relaties tussen ρ en σ voor methoden van orde p .

orde	relatie
$p \geq 0$	$\rho(1) = 0$
$p \geq 1$	$\rho'(1) + \sigma(1) = 0$
$p \geq 2$	$\rho''(1) + 2\sigma'(1) - \sigma(1) = 0$

Toepassing

De relatie $\rho(1+z) + \log(1+z) \sigma(1+z) = O(z^{p+1})$ kan gebruikt worden om methoden met een maximale orde te construeren als één van de polynomen ρ of σ gegeven is.

Voorbeeld

Stel dat we een 2-stapsformule willen construeren van de vorm

$$y_n = y_{n-1} + h(\beta_1 y'_{n-1} + \beta_2 y'_{n-2}).$$

Aan de voorwaarde $\sum_{i=0}^k \alpha_i = \rho(1) = 0$ is voldaan, zodat we β_1 en β_2 zodanig kunnen bepalen dat de methode 2-de orde consistent is.

$$\rho(\zeta) = -\zeta^2 + \zeta, \quad \sigma(\zeta) = \beta_1 \zeta + \beta_2$$

$$\rho(1+z) = -(1+z)^2 + (1+z) = -z^2 - z$$

$$\sigma(1+z) = \beta_1 + \beta_1 z + \beta_2$$

$$\log(1+z) = z - \frac{z^2}{2} + O(z^3)$$

zodat β_1 en β_2 moeten voldoen aan

$$-z - z^2 + \beta_1 z + \frac{\beta_1}{2} z^2 + \beta_2 z - \frac{\beta_2}{2} z^2 = O(z^3).$$

Hieruit volgt $\beta_1 = +\frac{3}{2}$ en $\beta_2 = -\frac{1}{2}$.

De gezochte (expliciete) 2-de orde 2-stapsmethode luidt dus

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2}(3y'_{n-1} - y'_{n-2}).$$

Dit is de 2-de orde Adams-Bashforth formule.

Principale en parasitaire wortels

Als we de modelvergelijking $y' = \delta y$ substitueren in de meerstapsmethode (4.2) krijgen we

$$(4.11) \quad \sum_{i=0}^k (\alpha_i + h\delta \beta_i) y_{n-i} = 0.$$

De oplossing van deze differentievergelijking luidt

$$(4.12) \quad y_n = \sum_{i=0}^k A_i \xi_i^n$$

waarin ξ_i ($1 \leq i \leq k$) de wortels voorstellen van de vergelijking

$$(4.13) \quad \sum_{i=1}^k (\alpha_i + h\delta \beta_i) \xi^{k-i} = \rho(\xi) + h\delta \sigma(\xi) = 0.$$

Wanneer meervoudige wortels voorkomen, leveren deze wortels bijdragen tot de som (4.12), welke behalve van de vorm $A_i \xi_i^n$, ook van de vorm $A_i n \xi_i^n$, $A_i n^2 \xi_i^n$, ... zijn. De constanten A_i worden bepaald door de beginwaarden y_i ($0 \leq i < k$) van de differentievergelijking.

Uit stelling (4.1) volgt dat, voor kleine waarden van $h\delta$, er een wortel van (4.13) zal zijn, welke $e^{\delta h}$ benadert. Deze wortel (de *principale wortel*) zorgt er voor dat de oplossing van de differentievergelijking (4.11) een benadering kan zijn voor de oplossing $y_n = Ce^{nh\delta}$ van de differentiaalvergelijking $y' = \delta y$. De overige wortels van (4.13) (de *parasitaire wortels*) dienen zodanig te zijn dat de benadering van de oplossing niet ongunstig beïnvloed wordt.

Stabiliteit

De parasitaire wortels zijn in het bijzonder van belang wanneer we de stabiliteit van een methode beschouwen. Laat y_i^* ($0 < i < n$) de waarde zijn die ontstaat wanneer y_i verstoord wordt, bijvoorbeeld door afrondingsfouten. We definiëren dan de *numerieke fout*

$$(4.14) \quad \epsilon_i = y_i^* - y_i .$$

Wanneer we aannemen dat bij het toepassen van de formule $L(y) = 0$ geen fouten optreden, d.w.z. dat y_n^* exact berekend wordt uit y_i^* , dan zullen de fouten ϵ_i ($n-k < i < n$) toch een verstoring ϵ_n veroorzaken in y_n .

Voor de modelvergelijking

$$(4.15) \quad y' = \delta y + f(x)$$

kunnen we, vanwege de lineariteit in y , de vergelijking opstellen waaruit ϵ_n volgt

$$L(y^*) - L(y) = L(\epsilon) = 0$$

ofwel

$$(4.16) \quad \sum_{i=0}^k (\alpha_i + h\delta \beta_i) \epsilon_{n-i} = 0$$

De oplossing van deze differentievergelijking heeft weer de vorm (4.13). We kunnen nu direkt de volgende stelling formuleren

Stelling 4.2

De numerieke fout, bij het toepassen van (4.2), zal toenemen wanneer de vergelijking

$$\rho(\xi) + h\delta \sigma(\xi) = 0$$

een wortel heeft welke in absolute waarde groter dan 1 is, of wanneer een

wortel met absolute waarde gelijk aan 1 meervoudig is.

In het algemeen eist men voor stabiele problemen ($\text{Re } \delta \leq 0$) dat de parasitaire wortels in absolute waarde kleiner dan 1 zijn (*absolute stabiliteit*). Bij het oplossen van instabiele problemen ($\text{Re } \delta > 0$) is het van belang dat alle parasitaire wortels kleiner zijn dan de principale (*relatieve stabiliteit*).

Stabiliteit voor $h \rightarrow 0$ (stabiliteit in de zin van Dahlquist)

Van een methode zullen we minstens moeten eisen dat de numerieke fout niet toeneemt wanneer we de methode toepassen met kleine staplengte. Aangezien de wortels van een polynoom continue functies zijn van de coëfficiënten van dat polynoom, zullen de wortels van $\rho(\xi) + h\delta \sigma(\xi) = 0$ voor $h\delta \rightarrow 0$ naderen tot de wortels van $\rho(\xi) = 0$ mits de graad van $\sigma(\xi)$ kleiner dan of gelijk aan de graad van $\rho(\xi)$ is.

Definitie. Een methode heet *stabiel in de zin van Dahlquist* wanneer het bijbehorende polynoom $\rho(\xi)$ geen nulpunten heeft welke in absolute waarde groter zijn dan 1 en wanneer de nulpunten met absolute waarde gelijk aan 1 enkelvoudige multipliciteit bezitten.

We moeten opmerken dat, bij een methode met orde $p \geq 0$, de vergelijking $\rho(\xi) = 0$ minstens één wortel heeft die gelijk is aan 1, namelijk de principale wortel (zie tabel 4.1).

Een methode heet *sterk stabiel* wanneer van het polynoom $\frac{\rho(\xi)}{1-\xi}$ alle nulpunten absoluut kleiner dan 1 zijn; bezit dit polynoom ook nulpunten op de eenheidscirkel, dan heet de methode *zwak stabiel*.

Stelling 4.3 [Dahlquist (1956)]

De orde van een stabiele, lineaire k -stapsmethode is voor oneven k maximaal $k + 1$ en voor even k maximaal $k + 2$. Bij een stabiele methode van orde $k + 2$ liggen alle nulpunten van $\rho(\xi)$ op de eenheidscirkel.

Bewijs

Zie Henrici p. 229-232.

Convergentie

Een methode heet *convergent* wanneer voor alle oplossingen $y(x)$ van de differentiaalvergelijking welke een voldoende aantal malen differentieerbaar zijn, geldt: $y_1 \rightarrow y(x_1)$ voor $h \rightarrow 0$. Alhoewel consistentie aangeeft in welke mate de formule $L(y) = 0$ de werking van de differentiaalvergelijking benadert voor $h \rightarrow 0$, impliceert consistentie nog geen convergentie.

Stelling 4.4

Noodzakelijke en voldoende voorwaarden voor convergentie van een lineaire meerstapsmethode zijn:

- (i) stabiliteit in de zin van Dahlquist;
- (ii) consistentie van orde $p \geq 1$.

Bewijs

Zie Henrici p. 218, 224, 242-246.

Opmerking. De voorwaarden van convergentie zijn eenvoudig uit te drukken in voorwaarden voor de polynomen ρ en σ :

- (i) de wortels van $\rho(\xi) = 0$ moeten binnen of op de eenheidscirkel liggen;
- (ii) $\rho(1) = 0$;
- (iii) $\rho'(1) + \sigma(1) = 0$.

Stabiliteit voor eindige staplengte

Voor methoden welke bestaan uit het slechts éénmaal toepassen van de formule $L(y) = 0$ kan direkt aangegeven worden voor welke waarden van h stabiliteit gegarandeerd is. Hiertoe beschouwen we de modelvergelijking

(4.15), waarin δ een complexe scalar voorstelt. De wortels van de vergelijking in ξ

$$\rho(\xi) + h\delta \sigma(\xi) = 0$$

dienen nu binnen de eenheidscirkel te liggen. Alle punten $h\delta$ waarvoor dit te realiseren is, vormen een gebied in het $h\delta$ -vlak, dat begrensd wordt door die punten $h\delta$ waarvoor geldt

$$h\delta = - \frac{\rho(e^{i\phi})}{\sigma(e^{i\phi})}, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi.$$

Een stabiliteit gebied is met behulp van deze formule eenvoudig te construeren. De stabiliteit van P.C.-methoden, waarbij meermalen een formule $L(y) = 0$ toegepast wordt, zal in een volgende paragraaf behandeld worden.

Om diverse eigenschappen met betrekking tot stabiliteit voor eindige staplengte aan te geven zijn verschillende begrippen ingevoerd.

Definitie. Een methode heet *A-stabiel*, wanneer hij stabiel is voor iedere $h\delta$ met $\text{Re}(h\delta) < 0$.

Definitie. Een methode heet *A(α)-stabiel*, wanneer hij stabiel is voor iedere $h\delta$ met $|\arg(-h\delta)| < \alpha$.

Definitie. Een methode heet "*stiffly-stable*", wanneer hij stabiel is voor iedere $h\delta$ met $\text{Re}(h\delta) < M$ en bovendien in de rechthoek $\{M \leq \text{Re}(h\delta) < 0, -\alpha < \text{Im}(h\delta) < \alpha\}$.

We noemen nu enige stellingen die relevant zijn voor het oplossen van stijve differentiaalvergelijkingen.

Stelling [Dahlquist (1963)]

Een expliciete k-stepsformule $L(y)$ kan niet A stabiel zijn.

Stelling [Dahlquist (1963)]

De maximale orde van een A-stabiele lineaire meerstapsmethode bedraagt 2. De A-stabiele 2-de orde methode met de kleinste foutconstante is de trapeziumregel.

Stelling [Widlund (1967)]

Voor alle $\alpha \in [0, \pi/2)$ bestaan er $A(\alpha)$ -stabiele p -de orde k -stapsmethodes met $k = p = 3$ en $k = p = 4$.

Voor het bewijs van deze stellingen zij verwezen naar de oorspronkelijke literatuur.

Meerstapsmethoden als proces

Het uitvoeren van één stap van het integratie proces kan gezien worden als het toepassen van een operator E , welke de informatie, die gebruikt wordt bij het uitvoeren van die stap, overvoert in de informatie welke beschikbaar gesteld wordt nadat de stap is uitgevoerd. Deze informatie, die beschikbaar is na de n -de stap, geven we aan met een vector \vec{y}_n . Het uitvoeren van een stap wordt nu weergegeven door

$$\vec{y}_{n+1} = E(\vec{y}_n).$$

We gaan het deelproces, dat bestaat uit het eenmaal toepassen van deze operator E (hetzij met behulp van een formule $L(y) = 0$, hetzij met behulp van een predictor-corrector paar), nu nader beschouwen.

Stelling 4.8

Met iedere open of gesloten formule (4.2) en met iedere predictor-corrector-methode kan een proces geassocieerd worden van de volgende vorm:

$$\begin{aligned}
 \vec{y}_n &= B \vec{y}_{n-1} \\
 (4.17) \quad {}^{(m+1)}\vec{y}_n &= {}^m\vec{y}_n + \vec{c}(\text{hf}({}^m y_n) - h {}^m y'_n) \\
 \vec{y}_n &= M \vec{y}_{n-1} .
 \end{aligned}$$

Hierin is

$$\begin{aligned}
 \vec{y}_n &= (y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k}, hy'_n, hy'_{n-1}, \dots, hy'_{n-k})^T, \\
 {}^m\vec{y}_n &= ({}^m y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-k}, h {}^m y'_n, hy'_{n-1}, \dots, hy'_{n-k})^T, \\
 {}^m y_n &\text{ is de } m\text{-de versie van } y_n, \\
 \vec{c} &= (\beta_0^*, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T,
 \end{aligned}$$

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_1, \dots, \alpha_k, \beta_1, \dots, \beta_k \\ 1 & & & 0 & & \\ & \searrow & & & & 0 \\ 0 & & 1 & 0 & & \\ \gamma_1, \dots, \gamma_k, \delta_1, \dots, \delta_k \\ & & & & 1 & 0 \\ & 0 & & & & \searrow \\ & & & & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Bewijs

De werking van het proces is als volgt:

$$\begin{aligned}
 {}^1 y_n &= {}^0 y_n + \beta_0^* (\text{hf}({}^0 y_n) - h {}^0 y'_n) \\
 (4.18) \quad &= \sum_{i=1}^k \{ (\alpha_i - \beta_0^* \gamma_i) y_{n-i} + (\beta_i - \beta_0^* \delta_i) h y'_{n-i} \} + \beta_0^* \text{hf}({}^0 y_n) \\
 &= \sum_{i=1}^k (\alpha_i^* y_{n-i} + \beta_i^* h y'_{n-i}) + \beta_0^* \text{hf}({}^0 y_n) .
 \end{aligned}$$

(De laatste regel gedefinieerd in feite α_i^* en β_i^* .)

$$\begin{aligned}
 h \, {}_1 y'_n &= hf({}_0 y_n) \\
 (4.19) \quad ({}_{m+1} y_n) &= {}_m y_n + \beta_0^* (hf({}_m y_n) - h \, {}_m y'_n) \quad (m > 0) \\
 &= {}_1 y_n + \beta_0^* (hf({}_m y_n) - h \, {}_1 y'_n) \\
 &= \sum_{i=1}^k (\alpha_i^* y_{n-i} + h \beta_i^* y'_{n-i}) + \beta_0^* hf({}_m y_n) \\
 h \, ({}_{m+1} y'_n) &= hf({}_m y_n).
 \end{aligned}$$

We bewijzen de stelling nu in drie delen.

(i) Wanneer $\beta_0^* = 0$ worden (4.18) en (4.19)

$$(4.20) \quad {}_m y_n = \sum_{i=1}^k (\alpha_i y_{n-i} + \beta_i h y'_{n-i})$$

$$h \, {}_m y'_n = hf({}_0 y_n) \quad m \geq 1.$$

Na een correctieslag ($m=1$) verandert de waarde van y_n niet meer. Het proces komt blijkbaar overeen met het toepassen van een enkele expliciete meerstapsformule. De waarden van γ_i en δ_i zijn irrelevant.

(ii) Wanneer het proces, met $\beta_0^* \neq 0$, wordt voortgezet tot dat convergentie bereikt is, geldt

$$(4.21) \quad y_n = \sum_{i=1}^k (\alpha_i^* y_{n-i} + \beta_i^* h y'_{n-i}) + \beta_0^* h y'_n$$

$$h \, y'_n = hf(y_n).$$

Het proces komt overeen met een impliciete formule. De voorwaarde voor convergentie van het proces volgt direkt uit (4.19):

$$(4.22) \quad |\beta_0^* h f_y(y_n)| < 1.$$

(iii) Laat een willekeurig predictor-corrector paar gegeven zijn

$$(4.23) \quad {}_0y_n = \sum_{i=1}^k (\alpha_i y_{n-i} + \beta_i h y'_{n-i})$$

$$(4.24) \quad ({}_{m+1})y_n = \beta_0^* hf({}_m y_n) + \sum_{i=1}^k (\alpha_i^* y_{n-i} + \beta_i^* h y'_{n-i}).$$

Zijn γ_i en δ_i gedefinieerd door $\alpha_i - \beta_0^* \gamma_i = \alpha_i^*$ en $\beta_i - \beta_0^* \delta_i = \beta_i^*$, dan volgt uit (4.23) en (4.24)

$$(4.25) \quad {}_1y_n - {}_0y_n = \beta_0^* (hf({}_0y_n) - h {}_0y'_n)$$

met

$$(4.26) \quad h {}_0y'_n = \sum_{i=1}^k (\gamma_i y_{n-i} + \delta_i h y'_{n-i}).$$

Bovendien volgt uit (4.24) voor $m > 0$

$$(4.27) \quad ({}_{m+1})y_n - y_{n,(m)} = \beta_0^* (hf({}_m y_n) - h {}_m y'_n)$$

met

$$(4.28) \quad h {}_m y'_n = hf({}_{(m-1)}y_n).$$

De formules (4.23), (4.25), (4.27), (4.26) en (4.28) zijn juist equivalent met het proces (4.17).

De beweringen welke bewezen zijn onder (i), (ii) en (iii) vormen samen het bewijs van stelling 4.8.

Nauwkeurigheid voor predictor-corrector methoden

Stelling 4.9

Wanneer een P.C.-paar (4.23), (4.24) gegeven is, waarbij de predictor- en corrector-formule respectievelijk de orde van consistentie p en q bezitten, dan is de orde van dit P.C.-paar

$$\min(p+m, q),$$

waarin m het aantal correctieslagen aangeeft.

Bewijs

Laten de exacte waarden van y_{n-i} beschreven worden door \tilde{y}_{n-i} . We berekenen $\tilde{y}_n - y_n$ in het geval dat $\tilde{y}_{n-i} = y_{n-i}$ ($1 \leq i \leq k$). Substitutie van \tilde{y}_i en y_i in (4.20) en (4.21) levert

$$i) \quad \tilde{y}_n - {}_0y_n = O(h^{p+1})$$

$$ii) \quad \tilde{y}_n - ({}_{m+1})y_n = \beta_0^* h(f(\tilde{y}_n) - f({}_m y_n)) + O(h^{q+1}).$$

Wanneer we, zoals gebruikelijk, aannemen dat f aan een Lipschitz voorwaarde voldoet, laat men met volledige inductie eenvoudig zien dat geldt

$$\tilde{y}_n - {}_m y_n = O(h^{p+m+1}) + O(h^{q+1}).$$

Stabiliteit voor predictor-corrector methoden

We beschouwen P.C.-methoden als een proces van de vorm (4.17) en we gaan na op welke wijze een verstoring in de vector \vec{y}_n doorwerkt in de vector \vec{y}_{n+1} . We passen de methode weer toe op de modelvergelijking

$$y' = \delta y + f(x)$$

waarin δ een willekeurig complex getal is. Laat \vec{y}_n^* de vector zijn die ontstaat door verstoring van \vec{y}_n (bijvoorbeeld door afrondingsfouten).

We definiëren nu

$$\vec{\epsilon}_n = \vec{y}_n^* - \vec{y}_n$$

en we nemen aan dat bij de uitvoering van het proces geen nieuwe fouten optreden. Nu wordt $\vec{\epsilon}_{n+1}$ berekend met (4.17)

$$\begin{aligned} \vec{\varepsilon}_{n+1}^0 &= B \vec{\varepsilon}_n \\ (m+1) \vec{\varepsilon}_{n+1} &= \vec{m} \vec{\varepsilon}_{n+1} + \vec{c}(h\delta) \vec{m} \varepsilon_{n+1} - h \vec{m} \varepsilon'_{n+1} \\ \vec{\varepsilon}_{n+1} &= \vec{M} \vec{\varepsilon}_{n+1}. \end{aligned}$$

Dit kunnen we formuleren als

$$(4.29) \quad \vec{\varepsilon}_{n+1} = (I + cp^T(h\delta))^M B \vec{\varepsilon}_n$$

waarin $p^T(h\delta) = (h\delta, 0, \dots, 0, -1, 0, \dots, 0)$.

Voor stabiliteit van een P.C.-methode moet de spectraalradius van de matrix

$$(I + cp^T(h\delta))^M B$$

kleiner zijn dan 1. Het stabiliteitsgebied van de methode wordt begrensd door gedeelten van de kromme in het $h\delta$ -vlak die bepaald wordt door

$$\det((I + cp^T(h\delta))^M B - e^{i\phi} I) = 0 \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi.$$

Dit is een gesloten kromme welke in het algemeen een aantal dubbelpunten zal bezitten.

P(EC)^M en P(EC)^M_E methoden

De laatste correcties die in (4.17) worden uitgevoerd luiden

$$\begin{aligned} y_n &= (M-1)y_n + \beta_0^* (hf_{(M-1)y_n} - h (M-1)y_n'), \\ h y_n' &= h (M-1)y_n' + (hf_{(M-1)y_n} - h (M-1)y_n'). \end{aligned}$$

Hierin wordt y_n bepaald met behulp van de laatst geëvalueerde functiewaarde $f_{(M-1)y_n}$, welke waarde tevens als y_n' wordt gebruikt. Deze wijze van handelen wordt aangegeven met P(EC)^M: éénmaal wordt een predictie uitgevoerd en vervolgens worden M malen een functie-evaluatie en een correctieslag uitgevoerd. Een kleine wijziging kan hierop worden aangebracht door na de laatste

correctie nog eenmaal een functie-evaluatie uit te voeren, waarna uitsluitend y'_n gewijzigd wordt. Dit wordt aangegeven met $P(EC)^M_E$. Door deze laatste functie-evaluatie wordt ook de stabiliteit beïnvloed. Het analogon van (4.29) luidt

$$\vec{\epsilon}_{n+1} = (I + c^* p^T(h\delta))(I + cp^T(h\delta))^M B \vec{\epsilon}_n,$$

waarin $c^* = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ met een 1 op de $(k+2)$ -de plaats. Hierdoor is het stabiliteitsgedrag van de $P(EC)^M_E$ methoden vastgelegd.

Convergentieversnelling

Een noodzakelijke voorwaarde voor de bruikbaarheid van (4.17) is de convergentie van het iteratieve proces. De convergentievoorwaarde was reeds gevonden in (4.22). We merken op dat deze voorwaarde overeenkomt met de eis dat de matrix $I + cp^T(h\delta)$ uit formule (4.29) uitsluitend eigenwaarden binnen de eenheidscirkel heeft.

Een geschikte methode om het iteratieve proces te versnellen wordt gevonden in de Newton-Raphson- of de gewijzigde Newton-Raphson-methode voor het oplossen van (zie (4.17))

$$\vec{y}_n - {}_m\vec{y}_n = \vec{c}(hf(y_n) - h {}_m y'_n).$$

Bij het toepassen van deze methoden is het echter noodzakelijk dat men over de partiële afgeleide $\delta = \frac{\partial f}{\partial y}$ beschikt en dat men in iedere iteratieslag een lineaire vergelijking of stelsel vergelijkingen oplost.

Het iteratieve proces wordt dan beschreven door

$$(4.31) \quad ({}_{m+1})\vec{y}_n = {}_m\vec{y}_n + \vec{c}(1-h\delta \beta_0^*)^{-1} (hf({}_m y_n) - h {}_m y'_n).$$

De stabiliteit van dit nieuwe proces wordt berekend op dezelfde wijze als van proces (4.17). Het analogon van (4.29) luidt

$$(4.32) \quad \vec{\epsilon}_{n+1} = (I + (1-h\delta \beta_0^*)^{-1} cp^T(h\delta))^M B \vec{\epsilon}_n.$$

Er geldt nu voor $I + (1-h\delta \beta_0^*)^{-1} \text{cp}^T(h\delta)$, in tegenstelling tot de overeenkomstige matrix in (4.29), dat alle eigenwaarden in absolute waarde kleiner dan of gelijk aan 1 zijn.

Equivalente beschrijving

Nordsieck heeft in 1962 een algorithmen voor een lineaire meerstapsmethode gepubliceerd, die de informatie over het verleden niet in de vorm \vec{y}_n gebruikt. Later heeft Gear (1967) er op gewezen dat het voor iedere lineaire meerstapsmethode mogelijk is een beschrijving te geven die niet de waarden y_{n-i} en $h y'_{n-i}$ zelf, maar een lineaire combinatie van y_{n-i} en $h y'_{n-i}$ gebruikt. Laat T een niet singuliere matrix zijn, dan worden \vec{z}_n en ${}_m \vec{z}_n$ gedefinieerd door

$$\vec{z}_n = T \vec{y}_n \quad \text{en} \quad {}_m \vec{z}_n = T {}_m \vec{y}_n .$$

Laat T bovendien zodanig zijn dat

$$z_n = y_n \quad \text{en} \quad h z'_n = h y'_n$$

dan beschrijft

$$(4.33) \quad \begin{aligned} {}_0 \vec{z}_n &= TBT^{-1} \vec{z}_{n-1} \\ (m+1) \vec{z}_n &= {}_m \vec{z}_n + T \vec{c}(hf({}_m \vec{z}_n) - h {}_m \vec{z}'_n) \\ \vec{z}_n &= M \vec{z}_n \end{aligned}$$

een methode die equivalent is met (4.17). Hoewel de analytische eigenschappen van equivalente methoden gelijk zijn, is het mogelijk dat de implementatie in het ene geval aantrekkelijker is dan in het andere geval.

De bovengenoemde methode van Nordsieck (1962) is equivalent met de Adams-Moulton methode. De vector

$$\vec{y}_n = (y_n, hy'_n, hy'_{n-1}, \dots, hy'_{n-k})$$

van de Adams-Moulton methode is hierbij getransformeerd tot de vector

$$\vec{z}_n = (y_n, hy_n', h^2 y_n'', \dots, h^{k+1} y_n^{(k+1)}) / ((k+1)!).$$

Deze transformatie heeft het voordeel dat betrekkelijk eenvoudig op een andere (vaste) staplengte overgeschakeld kan worden.

Lineaire meerstapsmethoden met variabele staplengte

We zullen ons bij de behandeling van lineaire meerstapsmethoden met variabele staplengte beperken tot de formules van het Adams-Bashforth-, Adams-Moulton- en Curtiss-Hirschfelder-type. Deze methoden onderscheiden zich daardoor, dat met een minimale hoeveelheid informatie uit het verleden (d.w.z. met een korte vector \vec{y}_n) een maximale orde van consistentie verkregen wordt. De Adams-Moulton-methoden zijn sterk stabiele k-stapsmethoden met de maximaal bereikbare orde $k + 1$. De methoden van het type zoals voorgesteld door Curtiss en Hirschfelder (1952), zijn instabiel voor orde $p > 6$ (Mitchell en Craggs, 1953) en zijn (daarom?) tot 1968 praktisch niet gebruikt. Gear (1968) heeft echter aangetoond dat deze methoden, voor orde $p \leq 6$, "stiffly-stable" zijn, waardoor ze bijzonder geschikt zijn voor het oplossen van stijve differentiaalvergelijkingen.

De genoemde methoden laten zich eenvoudig karakteriseren door de keuze van sommige coëfficiënten in de algemene formule voor lineaire meerstapsmethoden (4.2). We geven deze coëfficiënten in tabel 4.2

Tabel 4.2

methode	coëfficiënten	orde
Adams-Bashforth	$\alpha_i = 0 \ (2 \leq i \leq k) \ \beta_0 = 0$	k
Adams-Moulton	$\alpha_i = 0 \ (2 \leq i \leq k)$	k + 1
Curtiss-Hirschfelder	$\beta_i = 0 \ (1 \leq i \leq k)$	k

De niet in tabel 4.2 genoemde coëfficiënten worden allen bepaald door de (maximale) orde voor deze k-stapsmethoden.

De Adams-Bashforth- en Adams-Moulton-methoden kunnen beschouwd worden als methoden waarbij de afgeleide $y'(x)$ benaderd wordt door een $(k-1)$ ste resp. k -de graads polynoom $h(x)$ dat bepaald wordt door

$$y'_i = h(x_i) \quad n-k \leq i < n \quad (\text{resp. } n-k \leq i \leq n).$$

De Curtiss-Hirschfelder-methoden benaderen de oplossing $y(x)$ met een k -de graads polynoom $h(x)$ door de punten y_i ($n-k \leq i < n$); de vrijheid die overblijft bij de constructie van dit polynoom wordt gebruikt om aan de relatie $y'_n = h'(x_n) = f(x_n, y_n)$ te voldoen.

Benadering van een functie door een polynoom

Men kan een polynoom $h(x)$, waarvan de waarde voor een aantal steunpunten vastligt, beschrijven door gebruik te maken van Newton's interpolatieformule met differentiequotienten. Om deze beschrijving op eenvoudige wijze te kunnen geven gebruiken we een vectornotatie.

Definities. Laten x_i ($n-k \leq i \leq n$) de steunpunten voor een k -stapsmethode zijn; we definiëren dan de rij-vectoren $H(x)$ en $G(x)$ als volgt:

$$H(x) = (1, (x-x_{n-1}), (x-x_{n-1})^2, \dots, (x-x_{n-1})^k),$$

$$G(x) = (1, (x-x_{n-1}), (x-x_{n-1})(x-x_{n-2}), \dots, (x-x_{n-1})(x-x_{n-2}) \dots (x-x_{n-k})).$$

Een k -de graads polynoom $h(x)$ waarvan de waarden bekend zijn voor de steunpunten x_i ($n-k \leq i \leq n$) laat zich nu schrijven als produkt van $G(x)$ en de kolomvector van differentiequotienten a :

$$(4.34) \quad h(x) = G(x) \cdot a$$

met $a = (h[x_{n-1}], h[x_{n-1}, x_{n-2}], \dots, h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}], h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n])^T$
waarin

$$(4.35) \quad \begin{cases} h[x_i] = h(x_i) & \text{en} \\ h[x_i, \dots, x_j] = (h[x_i, \dots, x_{j-1}] - h[x_{i+1}, \dots, x_j]) / (x_i - x_j). \end{cases}$$

Het polynoom $h(x)$ kan ook geschreven worden als produkt van $H(x)$ met een kolomvector p

$$(4.36) \quad h(x) = H(x) \cdot p$$

met $p = (h(x_{n-1}), h'(x_{n-1}), h''(x_{n-1})/2!, \dots, h^{(k)}(x_{n-1})/k!)$. Deze vector p heeft als componenten de Taylor-coëfficiënten in het punt x_{n-1} .

Wanneer we in de volgende paragraaf de formules (4.34) en (4.36) toepassen, is in eerste instantie de functiewaarde $h(x_n)$ onbekend. In dat geval is, van de vector a , alleen de laatste component niet bepaald. Van de vector p daarentegen kan, behalve de eerste, geen enkele component berekend worden.

Door het definitie-gebied van de functie $h(x)$ te beperken tot de steunpunten x_i ($n-k \leq i \leq n$) kunnen we een vector h definiëren:

$$h \stackrel{d}{=} (h(x_{n-1}), h(x_{n-2}), \dots, h(x_{n-k}), h(x_n))^T.$$

Op dezelfde wijze definiëren we de matrices H en G door uitsluitend de functiewaarden $H(x)$ en $G(x)$ voor de argumenten x_i ($n-k \leq i \leq n$) te beschouwen.

Voorbeeld voor $k = 3$

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 (x_{n-2} - x_{n-1}) & 0 & 0 & 0 \\ 1 (x_{n-3} - x_{n-1}) (x_{n-3} - x_{n-1}) (x_{n-3} - x_{n-2}) & 0 & 0 & 0 \\ 1 (x_n - x_{n-1}) (x_n - x_{n-1}) (x_n - x_{n-2}) (x_n - x_{n-1}) (x_n - x_{n-2}) (x_n - x_{n-3}) \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 (x_{n-2} - x_{n-1}) (x_{n-2} - x_{n-1})^2 (x_{n-2} - x_{n-1})^3 \\ 1 (x_{n-3} - x_{n-1}) (x_{n-3} - x_{n-1})^2 (x_{n-3} - x_{n-1})^3 \\ 1 (x_n - x_{n-1}) (x_n - x_{n-1})^2 (x_n - x_{n-1})^3 \end{pmatrix}$$

Direct hieruit volgt nu het gediscretiseerde analogon van (4.34) en (4.36)

$$Ga = h = Hp.$$

De vector p kan nu uitgedrukt worden in a , G en H

$$(4.37) \quad p = H^{-1}Ga.$$

We definiëren de matrix A door

$$(4.38) \quad A \stackrel{d}{=} H^{-1}G.$$

Deze matrix heeft de eigenschap dat

$$(4.39) \quad h(x) = G(x)a = H(x)Aa.$$

Een andere eigenschap maakt het mogelijk de matrix A eenvoudig te construeren. Deze eigenschap luidt:

De matrix A is een bovendriehoeksmatrix waarvan de elementen worden bepaald door

$$\begin{aligned} A_{00} &= 1, \quad A_{0j} = 0 && (j \neq 0), \\ A_{ij} &= s_{j-1} A_{i,j-1} + A_{i-1,j-1} && (0 < i \leq j); \\ \text{waarin } s_j &= x_{n-1} - x_{n-j-1}. \end{aligned}$$

Voor het bewijs van deze eigenschap zij verwezen naar Hemker (1971).

Voorbeeld voor $k = 3$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & s_1 & s_1 s_2 \\ 0 & 0 & 1 & s_1 + s_2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

We merken op dat in de matrix A uitsluitend de afstanden tussen de steunpunten x_i ($n-k \leq i < n-1$) voorkomen.

De formules van Curtiss-Hirschfelder voor variabele staplengte

Voor het uitvoeren van een stap van het integratieproces volgens de methode van Curtiss en Hirschfelder staan de waarden y_{n-k}, \dots, y_{n-1} ter beschikking en dient y_n te voldoen aan

$$(4.40) \quad h'(x_n) = f(x_n, y_n),$$

waarbij $h(x)$ het k -de graads polynoom is, dat bepaald wordt door $h(x_i) = y_i$ ($n-k \leq i \leq n$). Behalve het laatste differentiequotiënt $h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n]$ kunnen de componenten van de vector a eenvoudig berekend worden (zie (4.35)). We splitsen de vector a daarom in een bekend deel

$$a_{n-1} = (y_{n-1}, h[x_{n-1}, x_{n-2}], \dots, h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}], 0)^T$$

en een onbekend deel

$$a - a_{n-1} = (0, \dots, 0, 1)^T h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n]$$

zodat uit (4.39) volgt

$$(4.41) \quad h(x) = H(x)A a_{n-1} + H(x)A \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n].$$

We definiëren p_{n-1} , de vector van Taylor-coëfficiënten in het punt x_{n-1} van het $(k-1)$ -de-graads polynoom door y_{n-1}, \dots, y_{n-k} , door

$$(4.42) \quad p_{n-1} \stackrel{d}{=} A a_{n-1},$$

en we geven met A_n de laatste kolom van A aan:

$$(4.43) \quad A_n \stackrel{d}{=} A \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

We mogen (4.41) nu schrijven als

$$(4.44) \quad h(x) = H(x) p_{n-1} + H(x) A_n h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n].$$

We noteren de differentiaaloperator d/dx met D .

Differentiëren van (4.44) levert

$$(4.45) \quad D^j h(x) = D^j H(x) p_{n-1} + D^j H(x) A_n h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n]$$

$$(j=0, 1, 2, \dots).$$

We gebruiken de eerste term van het rechterlid voor het berekenen van een "voorspelling" van $y_n^{(j)}$:

$$(4.46) \quad D^j h(x_n)^{\text{pred}} \stackrel{\text{d}}{=} D^j H(x_n) p_{n-1},$$

waarbij later een "correctie" $\Delta D^j h(x_n)$ zal worden opgeteld:

$$(4.47) \quad \Delta D^j h(x_n) \stackrel{\text{d}}{=} D^j H(x_n) A_n h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n].$$

Het differentiequotient $h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}, x_n]$ is onbekend; door herhaald toe-
passen van formule (4.47) volgt echter

$$(4.48) \quad \Delta D^j h(x_n) = \frac{D^j H(x_n) A_n}{D H(x_n) A_n} \Delta D h(x_n),$$

en uit (4.45) en (4.40) volgt

$$(4.49) \quad \begin{aligned} \Delta D h(x_n) &= D h(x_n) - D h(x_n)^{\text{pred}} \\ &= f(x_n, y_n) - D h(x_n)^{\text{pred}}, \end{aligned}$$

zodat we nu een iteratieschema kunnen opstellen om y_n op te lossen uit (4.49). Dit iteratieschema bestaat, evenals (4.17), uit een predictie, een aantal correcties en de definitie van de berekende waarde y_n .

$$(4.50) \quad y_n^{(j)} = D^j H(x_n) p_{n-1} \quad (0 \leq j \leq k)$$

$$(4.51) \quad \begin{cases} (m+1)y_n = m y_n + \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} (f(x_n, m y_n) - m y_n') \\ (m+1)y_n' = m y_n' + (f(x_n, m y_n) - m y_n') \end{cases}$$

$$(4.52) \quad \begin{cases} y_n = M y_n \\ y_n' = M y_n \\ y_n^{(j)} = 0 y_n + \frac{D^j H(x_n)A_n}{D H(x_n)A_n} (y_n' - 0 y_n') \quad j = 2, 3, \dots, k \\ p_n = (y_n, y_n', \dots, y_n^{(k)}) / k! \end{cases}$$

De quotiënten $\frac{D^j H(x_n)A_n}{D H(x_n)A_n}$ zijn functies van de waarden x_i ($n-k < i < n$). We merken op dat voor de berekening van A_n alleen de waarden $s_j = x_{n-1} - x_{n-j-1}$ nodig zijn, terwijl voor de berekening van $D^j H(x_n)$ alleen de laatste staplengte $x_n - x_{n-1}$ nodig is. Wanneer we aannemen dat alle staplengten van dezelfde orde van grootte zijn, volgt na enige berekening

$$D^j H(x_n)A_n = O(h^{k-j}).$$

Voorbeeld

Als illustratie voeren we de berekening van de quotiënten $\frac{D^j H(x_n)A_n}{D H(x_n)A_n}$ uit

voor $k = 3$, $s_j = jh$ en $x_n - x_{n-1} = h$.

A_n is de kolomvector $(A_{ij})_{j=3}$:

$$A_n = (0, s_1 s_2, s_1 + s_2, 1)^T = (0, 2h^2, 3h, 1)^T.$$

Uit definitie van $H(x)$ volgt

$$\begin{aligned} H(x_n) &= (1, h, h^2, h^3) \quad \text{zodat} \quad H(x_n)A_n = 6h^3, \\ D H(x_n) &= (0, 1, 2h, 3h^2) \quad D H(x_n)A_n = 11h^2, \\ D^2 H(x_n) &= (0, 0, 2, 6h) \quad D^2 H(x_n)A_n = 12h, \\ D^3 H(x_n) &= (0, 0, 0, 6) \quad D^3 H(x_n)A_n = 6. \end{aligned}$$

De quotiënten $\frac{D^j H(x_n)A_n}{D H(x_n)A_n}$ zijn dus voor $j = 0, 1, 2, 3$ respectievelijk

$\frac{6}{11}h$, 1 , $\frac{12}{11}h^{-1}$ en $\frac{6}{11}h^{-2}$.

Uit (4.51) volgt direkt de voorwaarde voor convergentie:

$$\left| \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} \right| < 1.$$

Voor het oplossen van stijve differentiaalvergelijkingen is dit iteratieproces ongeschikt omdat grote waarden van $|\partial f/\partial y|$ een kleine waarde van $\frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n}$ en daarmee een kleine staplengte noodzakelijk maken. We versnellen het proces daarom met de (gewijzigde) Newton-Raphson methode. De iteratie (4.51) wordt dan vervangen door

$$(4.53) \quad \begin{cases} (m+1)y_n = m y_n + \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} \left(I - \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} (f(x_n, m y_n) - m y_n') \\ (m+1)y_n' = m y_n' + \left(I - \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} (f(x_n, m y_n) - m y_n'). \end{cases}$$

Dit kan men direkt afleiden uit

$$\begin{aligned} (m+1)y_n' - m y_n' &= f(x_n, m y_n) - m y_n' + ((m+1)y_n - m y_n) \frac{\partial f}{\partial y} \\ &= f(x_n, m y_n) - m y_n' + \frac{H(x_n)A_n}{DH(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} ((m+1)y_n' - m y_n'). \end{aligned}$$

De Adams-Bashforth-Moulton formules voor variabele staplengte

Het formularium voor de Adams-Bashforth-Moulton methoden verschilt slechts weinig van dat van de Curtiss-Hirschfelder methoden. Hier wordt niet $y(x)$, maar $y'(x)$ benaderd door een polynoom $h(x)$ zodat $h(x_i) = y_i'$ $n-k \leq i \leq n$. Met de volgende definitie van de vector der differentiequotienten:

$$a_{n-1} = (y'_{n-1}, h[x_{n-1}, x_{n-2}], \dots, h[x_{n-1}, \dots, x_{n-k}], 0)^T,$$

blijven (4.41) t/m (4.48) onveranderd geldig. De formules (4.45) t/m (4.48) gelden tevens voor $j = -1$ wanneer de integratieoperator D^{-1} gebruikt wordt

voor integratie van x_{n-1} tot x_n en wanneer bovendien de juiste integratieconstante gekozen wordt. Zo wordt de predictie van $y_n^{(j)}$ gegeven door (vgl. (4.46))

$$(4.54) \quad \begin{cases} y_n^{\text{pred}} = y_{n-1} + D^{-1} H(x_n) p_{n-1} \\ y_n^{(j)\text{pred}} = D^{j-1} H(x_n) p_{n-1} \quad (j > 0). \end{cases}$$

Deze predictor is juist de Adams-Bashforth formule voor variabele staplengte.

Uit (4.40) volgt nu, anders dan bij de Curtiss-Hirschfelder-methoden, - vergelijk (4.49) -, dat

$$(4.55) \quad \begin{aligned} \Delta h(x_n) &= h(x_n) - h(x_n)^{\text{pred}} \\ &= f(x_n, y_n) - h(x_n)^{\text{pred}}, \end{aligned}$$

zodat hier het iteratieproces luidt:

$$(4.56) \quad \begin{cases} {}_0 y_n = y_{n-1} + D^{-1} H(x_n) p_{n-1} \\ {}_0 y_n^{(j)} = D^{j-1} H(x_n) p_{n-1} \quad (j > 0) \end{cases}$$

$$(4.57) \quad \begin{cases} (m+1) y_n = m y_n + \frac{D^{-1} H(x_n) A_n}{H(x_n) A_n} (f(x_n, m y_n) - m y_n') \\ (m+1) y_n' = m y_n' + (f(x_n, m y_n) - m y_n') \end{cases}$$

$$(4.58) \quad \begin{cases} y_n = M y_n \\ y_n' = M y_n' \\ y_n^{(j)} = {}_0 y_n^{(j)} + \frac{D^{j-1} H(x_n) A_n}{H(x_n) A_n} (y_n' - {}_0 y_n') \quad (j > 1) \\ p_n = (y_n', y_n'', \dots, y_n^{(k+1)}) / k!. \end{cases}$$

Ook hier kan de convergentie versneld worden met de (gewijzigde) Newton-Raphson methode; (4.57) wordt dan

$$(4.59) \left\{ \begin{array}{l} (m+1)y_n = m y_n + \frac{D^{-1}H(x_n)A_n}{H(x_n)A_n} \left(I - \frac{D^{-1}H(x_n)A_n}{H(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} (f(x_n, m y_n) - m y_n') \\ (m+1)y_n' = m y_n' + \left(I - \frac{D^{-1}H(x_n)A_n}{H(x_n)A_n} \frac{\partial f}{\partial y} \right)^{-1} (f(x_n, m y_n) - m y_n'). \end{array} \right.$$

Stabiliteit en nauwkeurigheid voor de processen (4.50) en (4.56)

De analyse van de stabiliteit verloopt voor methoden met variabele staplengte op dezelfde wijze als voor de methoden met vaste staplengte, zoals die gegeven werd naar aanleiding van proces (4.17). De resultaten geven geen essentieel nieuwe gezichtspunten. Voor een uitgebreide behandeling en voor afbeeldingen van een aantal stabiliteitsgebieden zij verwezen naar Hemker (1971).

We merken op dat bij een iteratieschema zoals gegeven in (4.50), (4.51) en (4.52) of in (4.56), (4.57) en (4.58) de orde van consistentie voor de predictorformule één lager is dan voor de correctorformule. Zoals is aangetoond in stelling 4.9, is dan slechts één iteratieslag voldoende om de orde van consistentie van het proces gelijk te maken aan die van de correctorformule. Wanneer echter een beperkt aantal iteratieslagen wordt uitgevoerd, is de keuze van deze predictorformule gunstig met betrekking tot de stabiliteit. Als illustratie geven we in figuur 4.1 een aantal stabiliteitsgebieden voor Adams-Bashforth-Moulton-PECE-methoden en voor Curtiss-Hirschfelder-PEC-methoden. Telkens is in het complexe $h\delta$ -vlak het stabiliteitsgebied getekend van een predictor-corrector-paar met gelijke orde en van een predictor-corrector-paar waarbij de orde van de predictor één lager is dan van de corrector. Telkens blijkt het stabiliteitsgebied voor de laatstgenoemde combinatie groter te zijn dan voor de eerstgenoemde.

Figuur 4.1

Stabiliteitsgebieden voor predictor-corrector methoden

Linkerzijde: Adams-Bashforth-Moulton-PECE-methoden.

Rechterzijde: Curtiss-Hirschfelder-PEC-methoden.

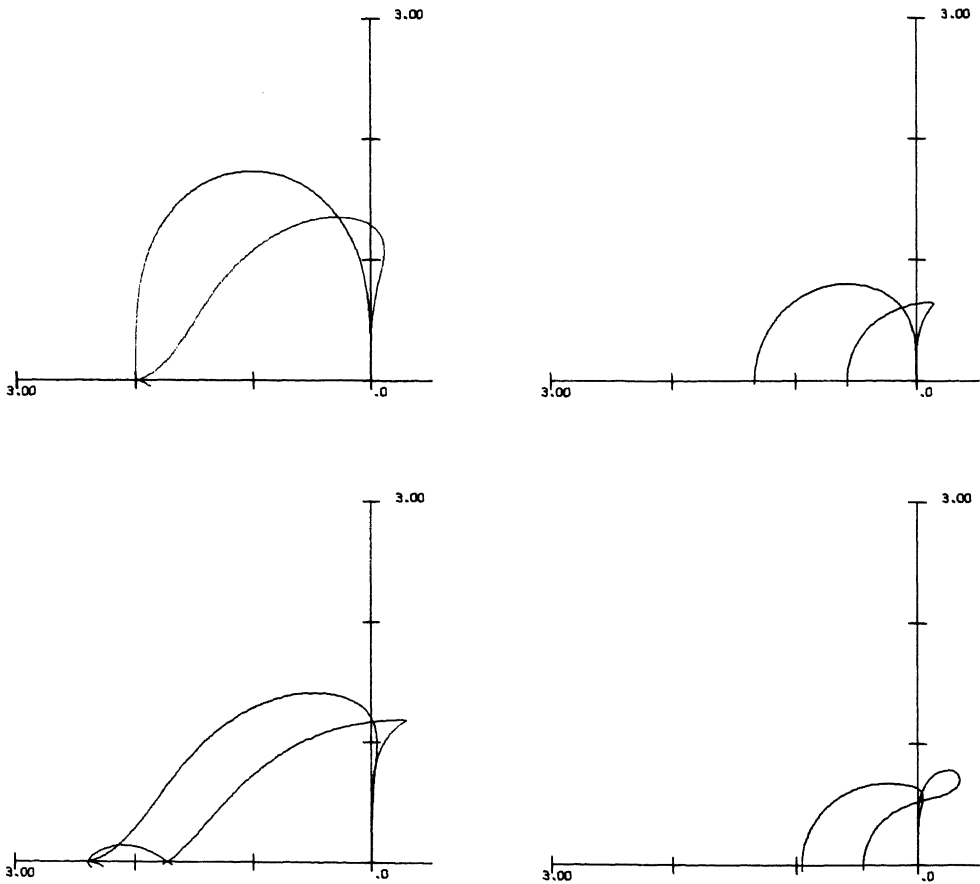
Van boven naar beneden: orde van consistentie

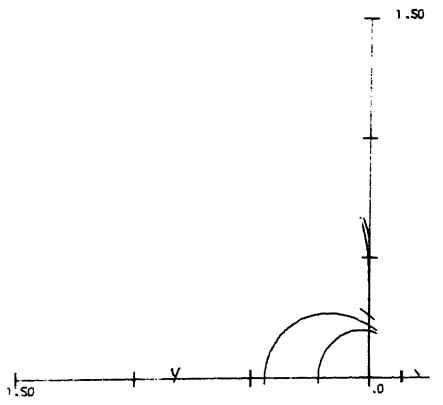
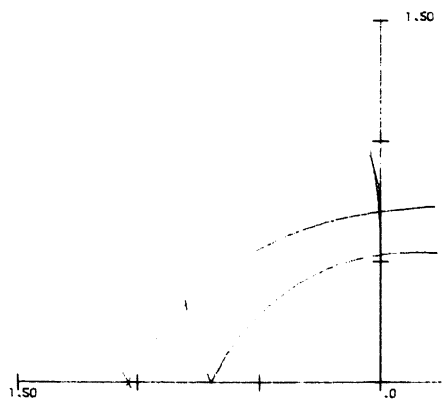
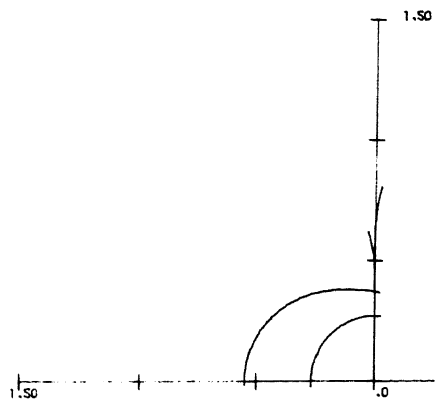
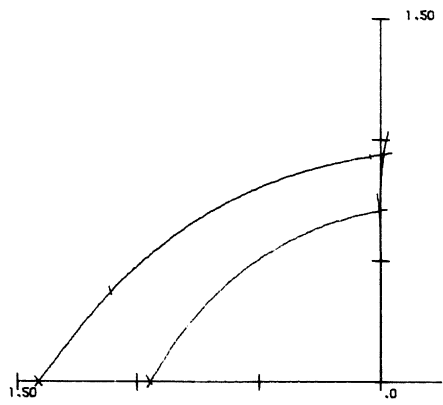
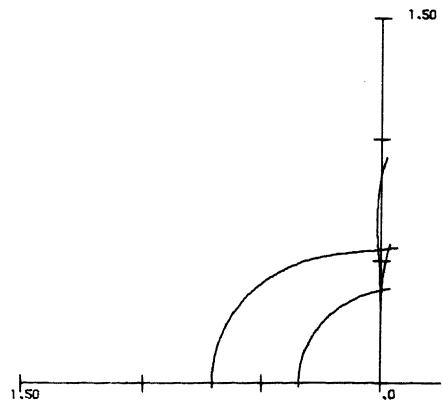
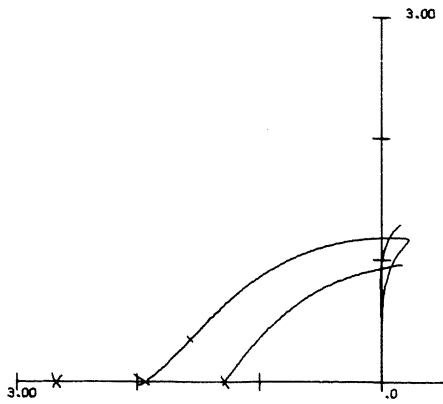
2, 3, 4, 5 en 6.

In elk figuur:

het kleine gebied: predictor en corrector van gelijke orde;

het grote gebied: predictor één orde lager.





Literatuur

Curtiss, C.F. and Hirschfelder, J.O.

Integration of stiff equations.

Proc. Nat. Acad. Sci. U.S. 38 (1952) 235.

Dahlquist, G.

Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations.

Math. Scand. 4 (1956) 33.

Dahlquist, G.

A special stability problem for linear multistep methods.

BIT 3 (1963) 27.

Gear, C.W.

The numerical integration of ordinary differential equations.

Math. Comp. 21 (1967) 146.

Gear, C.W.

The automatic integration of stiff ordinary differential equations.

Proc. IFIP Congr. 1968 p. 187.

Gear, C.W.

Numerical initial value problems in ordinary differential equations.

Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1971.

Hemker, P.W.

Lineaire meerstapsmethoden met variabele staplengte.

Rapport NR 15/71, Mathematisch Centrum, Amsterdam.

Henrici, P.

Discrete variable methods in ordinary differential equations.

John Wiley and Sons, New York, 1962.

Mitchell, A.R. and Craggs, J.W.

Stability of difference relations in the solution of ordinary differential equations.

Math. Comp. 7 (1953) 127.

Nordsieck, A.

On numerical integration of ordinary differential equations.
Math. Comp. 16 (1962) 22.

Widlund, O.B.

A note on unconditionally stable linear multistep methods.
BIT 7 (1967) 65.