

Numerische Simulation
von PDE-Modellen in der
Analyse von RF-Schaltungen

Diplomarbeit

von

Roland Pulch



Technische Universität Darmstadt

Fachbereich Mathematik

Aufgabenstellung :

Prof. Dr. P. Rentrop

Betreuung :

Dr. M. Günther

Abgabedatum :

16. Dezember 1999

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Herleitung und Bedeutung der MPDE	5
1.1 Motivation	5
1.2 Multivariate Funktionen	7
1.3 Multirate Partielle Differentialgleichung	8
1.4 Quasi-periodische und m-periodische Lösungen	10
1.5 Enveloppen-modulierte Lösungen	11
2 Untersuchung der MPDE	13
2.1 Umformung des Systems	13
2.2 Charakteristisches Differentialgleichungssystem	15
2.3 m-periodische Lösungen	20
3 Numerische Lösung der MPDE	22
3.1 Finite Differenzen Methode	22
3.2 Hierarchische Randwertproblemlösung	25
3.3 Charakteristikenverfahren	29
3.4 Konvergenztheorie der Verfahren	35
3.5 Vergleich der Verfahren	37
4 Implementierung der Verfahren	40
4.1 Implementierung der Finiten Differenzen Methode	40
4.2 Implementierung der H. Randwertproblemlösung	43
4.3 Implementierung des Charakteristikenverfahrens	49
5 Numerische Ergebnisse	54
5.1 Testbeispiel 1	55
5.2 Testbeispiel 2	59
5.3 Testbeispiel 3	60
5.4 Testbeispiel 4	63
Schlußbemerkungen und Ausblick	67

A Trapezregel bei ODE und Matrix-ODE	69
B Inhalt der beiliegenden Diskette	71
Literaturverzeichnis	72

Einleitung

Die Entwicklung elektrischer Schaltungen basiert heute hauptsächlich auf numerischer Simulation, anstelle Prototypen anzufertigen und experimentell zu untersuchen. Die Schaltungssimulation ermöglicht zahlreiche Tests unter Modifizierungen der Schaltkreiselemente, woraus eine Einsparung von Zeit und Kosten resultiert. Hierfür ist eine mathematische Modellierung der Schaltkreiskomponenten notwendig, mit der häufig das Verhalten der Schaltung in Abhängigkeit von der Zeit analysiert wird. Die Kirchhoffschen Gesetze führen dann auf nichtlineare, steife, implizite Differentialgleichungssysteme, welche extrem groß, aber nur schwach gekoppelt, sind. Dies erfordert ausgereifte numerische Verfahren, um jene Systeme hinreichend genau und innerhalb einer akzeptablen Rechenzeit zu lösen.

In vielen wichtigen Schaltungen, wie z.B. bei Mischern, Filtern, Konvertern u.a., treten sehr unterschiedliche Zeitskalen auf. Besonders häufig kommt dies bei Anwendungen in der Kommunikationselektronik vor, weswegen man auch von Radio Frequency Schaltungen oder kurz RF-Schaltungen spricht. Eine Analyse wird durch dieses Zeitverhalten erschwert, wenn man das gewöhnliche Differentialgleichungssystem, die sog. *Ordinary Differential Equation* oder *ODE*, behandelt, insbesondere falls dort starke Nichtlinearitäten enthalten sind. Um nämlich Informationen über das gesamte Verhalten der Lösung zu gewinnen, müßte man ihren schnellen Anteilen folgen.

Durch einen neuen Ansatz aber können diese Schwierigkeiten vermieden werden. Dabei geht man zu Funktionen mehrerer Veränderlicher, sog. *Multivariater Funktionen* oder *MVFen*, über, welche die Signale hier effizient darstellen, indem jeder der weit separierten Zeitraten eine eigene Variable zugeordnet wird. Dies überführt dann das gewöhnliche Differentialgleichungssystem der Schaltung in ein System partieller Differentialgleichungen, die sog. *Multirate Partielle Differentialgleichung* oder *MPDE*.

Ein derartiger Übergang ist ungewöhnlich, da man oft bestrebt ist, Probleme von partiellen Differentialgleichungen auf Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen zurückzuführen, wie z.B. durch ein charakteristisches Differentialgleichungssystem oder eine Semidiskretisierung. Jedoch erweist sich dieses Modell als vorteilhaft, da die Lösung der MPDE schneller und genauer erfolgen kann als die der korrespondierenden ODE, besonders wenn Nichtlinearitäten vorliegen. Dies machen neue Verfahren möglich, die auch für den nichtlinearen

Fall geeignet sind. Aus der Lösung der MPDE wird schließlich leicht die der ODE erhalten. Zudem hat man mit der kompakteren Darstellung in den MVFen eine neue Interpretation von Signalen, an der man das Verhalten in den einzelnen Zeitraten anschaulich erkennen kann. Sie bewirkt desweiteren auch eine Speicherplatzersparnis.

Die Resultate und Methoden aus der Theorie hier lassen sich auf alle Problemstellungen mit unterschiedlichen Zeitskalen übertragen, derzeit ist aber die Schaltungssimulation die Hauptanwendung.

In dieser Arbeit wird das entstehende partielle Differentialgleichungssystem, also die MPDE, näher untersucht und es werden Verfahren zu dessen numerischer Lösung erläutert, welche hierzu auch implementiert sind. Somit geht die Analysis und die Numerik dieses Differentialgleichungstyps in die Untersuchungen ein.

Das erste Kapitel stellt das Prinzip der MVFen dar und erläutert die Zusammenhänge zwischen ODE und korrespondierender MPDE, insbesondere die Beziehungen zwischen beiden Lösungen. Dazu werden Sätze aus dieser Theorie angeführt.

Im zweiten Kapitel finden nähere Untersuchungen der MPDE als System partieller Differentialgleichungen statt. Hierbei zeigt sich, daß man die Resultate aus dem ersten Kapitel über die Relationen zwischen der MPDE und ihrer zugehörigen ODE allein aus der Struktur der MPDE erhalten kann. Dies wird durch die Formulierung und Analyse von einem charakteristischen Differentialgleichungssystem ersichtlich.

Drei Verfahren zur numerischen Lösung der MPDE werden im dritten Kapitel vorgestellt, nämlich die Finite Differenzen Methode, die sog. Hierarchische Randwertproblemlösung und ein auf der Charakteristikenstruktur aufbauendes Verfahren. Auf Methoden, die das Prinzip der Harmonischen Balance verwenden, wird in dieser Arbeit nicht eingegangen.

Die Implementierung der drei Methoden wird im vierten Kapitel beschrieben. Es beinhaltet auch eine Anleitung, wie die zugehörigen Programme benutzt werden, insbesondere welche Parameter man zu deren Ausführung festzusetzen hat. Jene Programme liegen auf einer Diskette bei.

Im letzten Kapitel sind numerische Ergebnisse von Näherungslösungen zu Testbeispielen für die MPDE dargestellt, die man mit diesen Algorithmen erhält. Die Fehler der einzelnen Verfahren werden dazu in Tabellen zusammengefaßt und durch Grafiken visualisiert.

Den Abschluß bilden Schlußbemerkungen und Ausblicke.

Bedanken möchte ich mich bei Prof. Dr. Rentrop für die interessante Aufgabenstellung. Ich danke auch Dr. Günther, der diese Arbeit sehr gut betreute.

Kapitel 1

Herleitung und Bedeutung der MPDE

In diesem Kapitel finden zunächst einführende Betrachtungen statt, die durch eine Problemstellung aus der Schaltungssimulation motiviert sind. Darauf folgen dann Definitionen, aus welchen sich die grundlegende Theorie ergibt. Die in diesem Abschnitt enthaltenen Sätze können auch in [1] gefunden werden.

1.1 Motivation

In elektrischen Schaltungen treten häufig Signale mit sehr unterschiedlichen Zeitskalen auf. Man betrachte als Beispiel folgende Schaltung, welche aus einem Kondensator der Kapazität C , einem Widerstand der Größe R und einer unabhängigen Stromquelle E besteht.

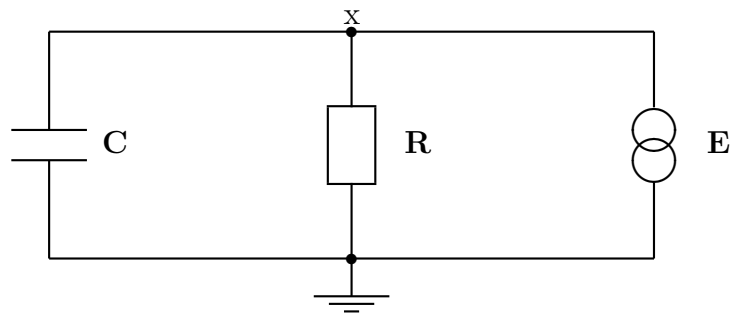


Abbildung 1.1: Beispielschaltung

Die Stromquelle liefere dabei als Eingangssignal eine schnelle Sinusschwingung von z.B. 1 GHz, die durch eine langsame Sinusschwingung von z.B. 1 KHz moduliert ist. Die Gestalt dieses Signals in Abhängigkeit von der Zeit ist damit

$$b(t) = \sin\left(\frac{2\pi}{T_1}t\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T_2}t\right), \quad (1.1)$$

wobei hier $T_1 = 1000T_2$, allgemein $T_1 \gg T_2$, gilt.

Für die zeitabhängige Spannung $x(t)$ an einem der Knoten dieser Schaltung ergibt sich nun nach dem Kirchhoffschen Gesetz die gewöhnliche Differentialgleichung

$$C\dot{x} + \frac{x}{R} + b(t) = 0 \quad (1.2)$$

mit der Ableitung des Ladungsterms $q(x) = Cx$ und der Funktion $f(x) = \frac{x}{R}$ vom Widerstand her.

Diese Spannung besitzt dann im allgemeinen das gleiche Verhalten wie der Erreger b , d.h. sie setzt sich ebenfalls aus einer schnellen Schwingung, moduliert von einer langsamen Schwingung, mit denselben Zeitraten zusammen. Jene Zeitraten T_1 und T_2 seien bekannt. Um jedoch die Lösung $x(t)$ zu einem Anfangswert $x(0) = x_0$ über das Intervall $[0, T_1]$ zu berechnen, müssen dann etwa $\frac{T_1}{T_2}$ einzelne Schwingungen erfaßt werden, deren Anzahl wegen $T_1 \gg T_2$ sehr groß ist. Für dieses Anfangswertproblem sind dadurch bei Anwendung eines numerischen Integrationsverfahrens extrem viele Zeitschritte notwendig. Zudem ist eine vorgegebene Genauigkeit der Näherungslösung dabei kaum einzuhalten. Dies gilt besonders im Falle nichtlinearer Schaltungselemente, also nichtlinearer Funktionen q und f . Durch Übergang zu adäquaten Funktionen mehrerer Veränderlicher, sog. *Multivariater Funktionen* (MVF), und Umformung der gewöhnlichen Dgl. (ODE) in eine partielle Dgl., die sog. *Multirate Partielle Differentialgleichung* (MPDE), kann dies vermieden werden. Dabei wird nun mehr Information aus dem schnellen Schwingungsanteil, insbesondere dessen bekannte Zeirate T_2 , benutzt. Die Lösung dieser MPDE kann durch Verwendung geeigneter Verfahren schneller und genauer erfolgen als die Lösung der korrespondierenden ODE und ist auch bei Nichtlinearitäten in den Gleichungen bestimmbar. Aus der Lösung der MPDE wird schließlich die Lösung der ursprünglichen ODE erhalten.

Die hier folgenden Resultate können auf alle Problemstellungen mit unterschiedlichen Zeitskalen angewendet werden, jedoch ist die Schaltungssimulation die Hauptanwendung.

Näheres über die Vorgehensweisen in der Schaltungssimulation kann aus [2] entnommen werden.

1.2 Multivariate Funktionen

Ist eine zeitabhängige Funktion mit mehreren unterschiedlichen Zeitskalen gegeben, so ist deren zugehörige *Multivariate Funktion* (MVF) jene Funktion von mehreren Veränderlichen, bei der jeder Zeirate eine eigene Variable zugeordnet wird.

Man betrachte als Beispiel wieder das Zwei-Ton Signal

$$b(t) = \sin\left(\frac{2\pi}{T_1}t\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T_2}t\right) \quad (1.3)$$

mit $T_1 \gg T_2$, speziell hier $T_1 = 1ms$, $T_2 = 0.01ms$. Es erfolgen also über die Zeirate T_1 hinweg 100 modulierte Sinusschwingungen.

Wenn k Zwischenpunkte nötig sind, um eine einzelne Schwingung durch Interpolation oder in einem Integrationsverfahren zu erfassen, so sind für das ganze Signal über das Intervall $[0, T_1]$ hinweg hier $k\frac{T_1}{T_2}$ Punkte notwendig, d.h. wegen $T_1 \gg T_2$ eine extrem große Anzahl.

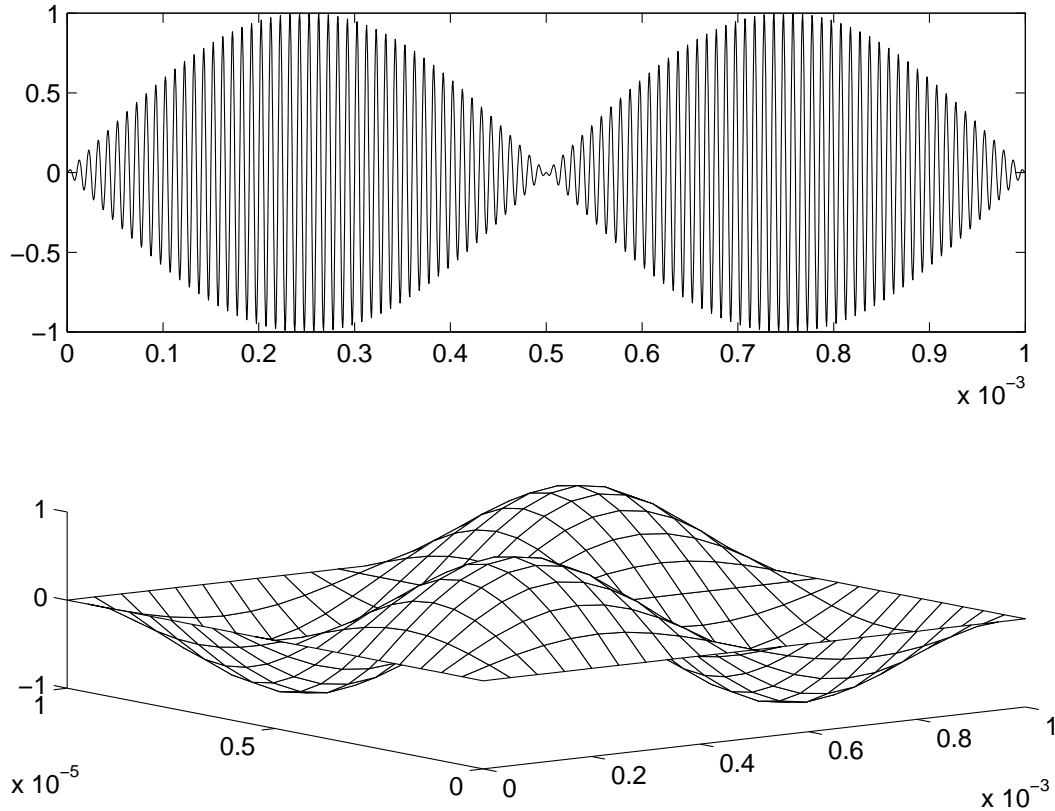
Man kann nun aber von der nur zeitabhängigen Funktion b zu einer Darstellung in mehreren Variablen übergehen. Dabei wird für den langsam verändernden Teil eine Variable t_1 und für den schnell variierenden Teil eine Variable t_2 eingeführt. Damit erhält man die MVF von b , welche folgende Gestalt hat :

$$\hat{b}(t_1, t_2) = \sin\left(\frac{2\pi}{T_1}t_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T_2}t_2\right) \quad (1.4)$$

Es ist also \hat{b} biperiodisch mit den Perioden T_1 und T_2 , wodurch \hat{b} bereits durch seine Werte auf dem Rechteck $[0, T_1[\times [0, T_2[$ bestimmt ist. Obwohl $T_1 \gg T_2$ gilt, besitzt die Funktion \hat{b} nun in beiden Koordinatenrichtungen nur jeweils eine Schwingung auf diesem Rechteck, nämlich einen einzelnen Sinusbogen. Das Verhalten dieser Funktion ist damit in beiden Veränderlichen von gleicher Regelmäßigkeit. Dadurch kann nun die MVF auf diesem Rechteck mit bereits k Punkten in jeder Koordinatenrichtung zu vorgegebener Genauigkeit erfaßt werden, also auf einem Gitter mit insgesamt k^2 Punkten. Dies ist wegen $T_1 \gg T_2$ für nicht zu großes k eine wesentlich geringere Anzahl als $k\frac{T_1}{T_2}$ Punkte.

Die Abbildung 1.2 zeigt die Funktion \hat{b} über dem Intervall $[0, T_1]$ und ihre zugehörige MVF \hat{b} über dem Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$, wobei für jeweils eine Sinusschwingung 20 Punkte zur Darstellung verwendet sind. Damit besteht der Plot der Funktion b aus 2000 Punkten und jener zu der Funktion \hat{b} nur aus 400 Punkten.

Gleichzeitig enthält \hat{b} jedoch alle Informationen, um daraus b vollständig zu rekonstruieren. Es ist nämlich $b(t) = \hat{b}(t, t)$, d.h. die Werte von b sind die von \hat{b} auf der Geraden $t_1 = t_2$ im \mathbb{R}^2 . Diese können allein aus dem Rechteck $[0, T_1[\times [0, T_2[$ wegen der Periodizitäten durch die Identifikation $\{t_i = t \bmod T_i\}$ für $i = 1, 2$ gewonnen werden.

Abbildung 1.2: Funktion b und ihre MVF \hat{b}

Die MVF-Darstellung ermöglicht somit eine kompaktere Beschreibung von Funktionen mit mehreren Zeitraten und bietet eine neue Interpretation von Signalen, an der man gewisse Eigenschaften anschaulich erkennen kann. Insbesondere besitzen quasi-periodische Signale eine MVF-Darstellung (siehe Abschnitt 1.4).

1.3 Multirate Partielle Differentialgleichung

Zugrunde gelegt sei die implizite ODE

$$\dot{q}(x) = f(x) + b(t) \quad (1.5)$$

mit einer stetig differenzierbaren Funktion $q : G_q \rightarrow \mathbb{R}^n$ und einer stetigen Funktion $f : G_f \rightarrow \mathbb{R}^n$ auf den Gebieten $G_q, G_f \subset \mathbb{R}^n$, sowie der gesuchten stetig differenzierbaren Lösung $x : \mathbb{R} \rightarrow G_q \cap G_f$ und $b : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig.

Diese Differentialgleichung soll nun ein Verhalten mit m unterschiedlichen Zeitraten besitzen. Man kann dadurch zu den MVF-Darstellungen $\hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ und

$\hat{b}(t_1, \dots, t_m)$ von $x(t)$ bzw. $b(t)$ übergehen. Es sind also \hat{x} und \hat{b} Funktionen vom \mathbb{R}^m in den \mathbb{R}^n , wobei das Bild von \hat{x} auch in $G_q \cap G_f$ liegen soll.

Die zur ODE (1.5) gehörige *Multirate Partielle Differentialgleichung* (MPDE) wird nun definiert als

$$\frac{\partial q(\hat{x})}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial q(\hat{x})}{\partial t_m} = f(\hat{x}) + \hat{b}(t_1, \dots, t_m), \quad (1.6)$$

wobei \hat{x}, \hat{b} die MVFen und q, f die gleichen Funktionen wie in (1.5) sind.

Der folgende Satz kennzeichnet die Beziehung zwischen der ursprünglichen ODE und der zu ihr korrespondierenden MPDE und spielt damit in dieser Theorie eine Schlüsselrolle.

Satz 1 (MPDE-ODE-Relation) *Erfüllen $\hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ und $\hat{b}(t_1, \dots, t_m)$ die MPDE (1.6), so lösen $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ und $b(t) = \hat{b}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ für feste $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$ die ODE (1.5).*

Beweis :

Wegen $q(x(t)) = q(\hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m))$ hat man mit (1.6) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial q(x(t))}{\partial t} &= \frac{\partial q(\hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m))}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial q(\hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m))}{\partial t_m} \\ &= f(\hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)) + \hat{b}(t + c_1, \dots, t + c_m) \\ &= f(x(t)) + b(t) \end{aligned}$$

Also gilt (1.5). □

Dieser Satz besagt, daß man aus den Lösungswerten der MPDE entlang gewisser Geraden Lösungen der zugehörigen ODE erhalten kann. Dabei ist in diesem Satz noch kein Verhalten mit mehreren verschiedenen Zeitraten vorausgesetzt, jedoch wird dieses Resultat erst bei der Behandlung von solchen Problemen nützlich. Besitzt die Funktion b aus der ODE (1.5) eine MVF-Darstellung \hat{b} mit $b(t) = \hat{b}(t, \dots, t)$, so gewinnt man aus der Lösung \hat{x} der korrespondierenden MPDE (1.6) entlang der Diagonale durch $x(t) = \hat{x}(t, \dots, t)$ eine Lösung der ODE (1.5). Die numerische Lösung der MPDE kann bei Verwendung adäquater Verfahren schneller und genauer erfolgen als die der korrespondierenden ODE, wenn weit separierte Zeitraten vorliegen.

Zur Lösung der MPDE auf einem geeigneten beschränkten Gebiet müssen noch Randwertbedingungen vorgegeben werden, von denen die Gestalt der Lösung abhängt. Dies wird in den folgenden beiden Abschnitten behandelt.

1.4 Quasi-periodische und m -periodische Lösungen

Von der Zeit abhängige quasi-periodische Signale und m -periodische Funktionen mehrerer Variablen sind über die Theorie der ODE (1.5) und ihrer korrespondierenden MPDE (1.6) eng miteinander verbunden.

Zunächst sei deren Definition angeführt.

Def. 1 Eine Funktion $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}^n$ heißt m -Ton quasi-periodisch, wenn sie sich für alle $t \in \mathbb{R}$ darstellen läßt als $x(t) = \sum_{j_1, \dots, j_m = -\infty}^{+\infty} X_{j_1, \dots, j_m} e^{i2\pi(\frac{j_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m}{T_m})t}$ mit reell- oder komplexwertigen Konstanten X_{j_1, \dots, j_m} .

Def. 2 Eine Funktion $\hat{x} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}^n$ heißt m -periodisch, falls reelle Konstanten T_1, \dots, T_m existieren, so daß für alle $t_1, \dots, t_m \in \mathbb{R}$ und $k_1, \dots, k_m \in \mathbb{Z}$ dann $\hat{x}(t_1 + k_1 T_1, \dots, t_m + k_m T_m) = \hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ gilt. Dabei heißt T_j die j -te Periode von \hat{x} .

Zwischen beiden Funktionstypen bestehen folgende Beziehungen :

Lemma 1 Wenn $\hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ m -periodisch ist, dann ist $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ m -Ton quasi-periodisch für alle festen $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$.

Beweis :

Ist $\hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ m -periodisch, so kann es als mehrdimensionale Fourierreihe dargestellt werden :

$$\hat{x}(t_1, \dots, t_m) = \sum_{j_1, \dots, j_m = -\infty}^{+\infty} X_{j_1, \dots, j_m} e^{i2\pi(\frac{j_1 t_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m t_m}{T_m})}$$

Durch die Substitution $t_l = t + c_l$ für $l = 1, \dots, m$ erhält man dann

$$x(t) = \sum_{j_1, \dots, j_m = -\infty}^{+\infty} \left[X_{j_1, \dots, j_m} e^{i2\pi(\frac{j_1 c_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m c_m}{T_m})} \right] e^{i2\pi(\frac{j_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m}{T_m})t},$$

also die Gestalt einer m -Ton quasi-periodischen Funktion. □

Lemma 2 Wenn eine m -Ton quasi-periodische Funktion $x(t)$ und beliebige Konstanten $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$ gegeben sind, dann existiert eine m -periodische Funktion $\hat{x}(t_1, \dots, t_m)$ mit $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$.

Beweis :

Da $x(t)$ quasi-periodisch ist, hat man die Darstellung

$$x(t) = \sum_{j_1, \dots, j_m = -\infty}^{+\infty} X_{j_1, \dots, j_m} e^{i2\pi(\frac{j_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m}{T_m})t}.$$

Damit kann eine m -periodische Funktion angegeben werden durch

$$\hat{x}(t_1, \dots, t_m) = \sum_{j_1, \dots, j_m = -\infty}^{+\infty} \left[X_{j_1, \dots, j_m} e^{-i2\pi(\frac{j_1 c_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m c_m}{T_m})} \right] e^{i2\pi(\frac{j_1 t_1}{T_1} + \dots + \frac{j_m t_m}{T_m})}$$

und es gilt $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$. \square

Aus Satz 1 und Lemma 1 ergibt sich sofort der folgende Satz :

Satz 2 *Ist in der MPDE (1.6) \hat{b} eine m -periodische Funktion und \hat{x} eine m -periodische Lösung, dann ist für beliebige $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$ hier $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ eine m -Ton quasi-periodische Lösung der ODE (1.5) zu der m -Ton quasi-periodischen Funktion $b(t) = \hat{b}(t + c_1, \dots, t + c_m)$.*

Es gilt darüber hinaus sogar die Umkehrung :

Satz 3 *Ist in der ODE (1.5) b eine m -Ton quasi-periodische Funktion und x eine m -Ton quasi-periodische Lösung, dann existieren für beliebige $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$ m -periodische Funktionen \hat{b} und \hat{x} , welche die MPDE (1.6) erfüllen und für die $x(t) = \hat{x}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ sowie $b(t) = \hat{b}(t + c_1, \dots, t + c_m)$ gilt.*

Der Beweis kann in [1] gefunden werden.

Geht man also von der ODE (1.5) mit m -Ton quasi-periodischer Funktion b zu ihrer MVF-Darstellung \hat{b} über und behandelt die zugehörige MPDE (1.6), so erhält man, falls die Bestimmung einer m -periodischen Lösung gelingt, daraus nach Satz 2 eine m -Ton quasi-periodische Lösung der ODE. Existiert eine solche Lösung der ODE (1.5), dann garantiert Satz 3 die Existenz einer m -periodischen Lösung der MPDE (1.6) für geeignete Wahl der MVF \hat{b} .

1.5 Enveloppen-modulierte Lösungen

Man kann bei der Lösung der ODE (1.5) auch an Enveloppen-modulierten Funktionen interessiert sein. Deren Definition lautet :

Def. 3 *Eine Funktion $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}^n$ heißt Enveloppen-moduliert, wenn sie sich für alle $t \in \mathbb{R}$ darstellen läßt als $x(t) = \sum_{j_1, \dots, j_{m-1} = -\infty}^{+\infty} X_{j_1, \dots, j_{m-1}}(t) e^{i2\pi(\frac{j_1 t_1}{T_1} + \dots + \frac{j_{m-1} t_{m-1}}{T_{m-1}})t}$ mit reell- oder komplexwertigen Funktionen $X_{j_1, \dots, j_{m-1}}(t)$.*

Eine solche Funktion hat die Form einer Fourierreihe mit zeitabhängigen Koeffizienten, den Enveloppen.

Eine MVF-Darstellung zu einer Enveloppen-modulierten Funktion lautet daher :

$$\hat{x}(t_1, \dots, t_{m-1}, t_m) = \sum_{j_1, \dots, j_{m-1} = -\infty}^{+\infty} X_{j_1, \dots, j_{m-1}}(t_m) e^{i2\pi(\frac{j_1 t_1}{T_1} + \dots + \frac{j_{m-1} t_{m-1}}{T_{m-1}})t_m} \quad (1.7)$$

Somit ist \hat{x} periodisch in allen Variablen außer t_m .

Lösungen der MPDE (1.6) von der Gestalt (1.7) kann man durch eine Kombination aus einer Anfangswertbedingung und periodischen Randwertbedingungen erhalten. Es gilt dann sogar die Eindeutigkeit einer solchen Lösung bei eindeutiger Lösbarkeit der korrespondierenden ODE (1.5) :

Satz 4 *Besitzt die ODE (1.5) zu einer Anfangswertbedingung stets eine eindeutige Lösung über ganz \mathbb{R} , so ist eine Lösung \hat{x} der zugehörigen MPDE (1.6) eindeutig bestimmt für das Rand-Anfangswertproblem*

$$\begin{aligned}\hat{x}(t_1 + T_1, \dots, t_{m-1} + T_{m-1}, t_m) &= \hat{x}(t_1, \dots, t_{m-1}, t_m) \\ \hat{x}(t_1, \dots, t_{m-1}, 0) &= h(t_1, \dots, t_{m-1})\end{aligned}$$

mit einer auf $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[$ definierten Funktion h .

Beweis :

Es sei \hat{x} eine Lösung von (1.6), welche das obige Rand-Anfangswertproblem für eine feste Funktion h erfüllt. Nach Satz 1 sind die Lösungswerte von \hat{x} entlang einer Geraden $(t + c_1, \dots, t + c_{m-1}, t); t \in \mathbb{R}$ im Definitionsbereich genau die Lösungen der korrespondierenden ODE mit $b(t) = \hat{b}(t + c_1, \dots, t + c_{m-1}, t)$ zu dem Anfangswert $\hat{x}(c_1, \dots, c_{m-1}, 0)$. Auf dem Bereich $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{0\}$ ist \hat{x} durch h festgelegt und daher ist die Lösung der MPDE auf den durch dieses Hyperebenenstück laufenden Geraden der besagten Form eindeutig bestimmt, da nach Voraussetzung die zugehörige ODE mit entsprechendem Anfangswert eindeutig lösbar ist. Mit der Periodizität in den Variablen t_1, \dots, t_{m-1} kann jeder Punkt im \mathbb{R}^m mit einem Punkt identifiziert werden, der in einer jener Geraden enthalten ist. Somit hat man hier schon die Eindeutigkeit der Lösung \hat{x} auf dem gesamten \mathbb{R}^m . \square

Die in diesem Abschnitt dargestellten Resultate spiegeln sich in der Struktur der Charakteristiken dieser MPDE wider, wie sie im nächsten Kapitel dargestellt ist.

Kapitel 2

Untersuchung der MPDE

Hier wird nun die im vorhergehenden Kapitel definierte MPDE näher untersucht. Dabei ergeben sich jetzt Aussagen durch die Struktur der MPDE als partielles Differentialgleichungssystem allein, ohne dazu auf die korrespondierende ODE zurückzugreifen.

2.1 Umformung des Systems

Gegeben sei die folgende MPDE aus n partiellen Differentialgleichungen

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial q(x)}{\partial t_m} = f(x) + b(t_1, \dots, t_m), \quad (2.1)$$

wobei $q : G_q \rightarrow \mathbb{R}^n$ und $f : G_f \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbare Funktionen auf den Gebieten $G_q, G_f \subset \mathbb{R}^n$ sind und $x : G \rightarrow G_q \cap G_f$ die gesuchte stetig differenzierbare Lösung der unabhängigen Veränderlichen t_1, \dots, t_m aus einem Gebiet $G \subset \mathbb{R}^m$ ist, sowie $b : G \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetig differenzierbare Funktion.

Dieses nichtlineare System von erster Ordnung enthält genau so viele Gleichungen wie unbekannte Komponenten der gesuchten Funktion und ist daher weder über- noch unterbestimmt.

Durch Ausführung der Differentiation ergibt sich nach der Kettenregel das zu (2.1) äquivalente System

$$\frac{\partial q}{\partial x}(x) \frac{\partial x}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial q}{\partial x}(x) \frac{\partial x}{\partial t_m} = f(x) + b(t_1, \dots, t_m). \quad (2.2)$$

Für die in diesem Kapitel folgenden Betrachtungen sei vorausgesetzt, daß die Funktionalmatrix $\frac{\partial q}{\partial x}$ in allen hier auftretenden Lösungswerten x regulär ist.

Durch Invertierung dieser Funktionalmatrix erhält man dann das zu (2.2) äquivalente System

$$\frac{\partial x}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial x}{\partial t_m} = \left(\frac{\partial q}{\partial x}(x)\right)^{-1} (f(x) + b(t_1, \dots, t_m)). \quad (2.3)$$

Dieses System stellt formal eine hyperbolische Differentialgleichung, nämlich eine Erhaltungsgleichung mit Quellterm (siehe [6]), dar. Bei jenem Differentialgleichungstyp ist jedoch meistens eine Variable als Zeit ausgezeichnet, während die übrigen Ortsvariablen sind. Im System (2.3) aber liegen alle unabhängigen Veränderlichen gleichberechtigt vor, da es sich um die einzelnen Zeitraten handelt. Damit sind übliche Ansätze zur Lösung dieser Differentialgleichung, wie man sie z.B. in [6] findet, ungeeignet oder unnötig aufwendig. Hier kann nämlich die bei diesem speziellen System vorliegende Form des Informationstransports, wie sie im nächsten Abschnitt erläutert wird, effizient eingesetzt werden.

Die rechte Seite des Systems (2.3) ist stetig differenzierbar nach den Veränderlichen t_1, \dots, t_m . Für die weiteren Untersuchungen ist es teilweise notwendig, daß diese rechte Seite auch stetig differenzierbar von der gesuchten Lösung x abhängt. Diesbezüglich gilt das folgende hinreichende Kriterium.

Lemma 3 *Für $q \in C^2(G_q)$ und $f \in C^1(G_f)$ liegt die rechte Seite des Systems (2.3) in einer Umgebung der Punkte $x_0 \in G_q \cap G_f$, in denen $\frac{\partial q}{\partial x}(x_0)$ regulär ist, stetig differenzierbar nach x vor.*

Beweis :

Nach dem Satz über die Umkehrabbildung aus der Analysis (siehe [14]) ist zu einem Punkt $x_0 \in G_q \cap G_f$ mit $q \in C^2(G_q)$ und der Regularität von $\frac{\partial q}{\partial x}(x_0)$ dann q zwischen geeigneten offenen Umgebungen U von x_0 und V von $y_0 = q(x_0)$ bijektiv und die zugehörige Umkehrabbildung $q^{-1} : V \rightarrow U$ ebenfalls aus C^2 , wobei $\frac{\partial q^{-1}}{\partial y}(y_0) = (\frac{\partial q}{\partial x}(x_0))^{-1}$ gilt.

Da eine invertierbare Funktion stets eine reguläre Funktionalmatrix besitzt, hat man für jedes $x \in U$ die gleiche Aussage, d.h. $\frac{\partial q^{-1}}{\partial y}(q(x)) = (\frac{\partial q}{\partial x}(x))^{-1}$.

Die Matrix $\frac{\partial q^{-1}}{\partial y}$ enthält die partiellen Ableitungen von q^{-1} und wegen $q^{-1} \in C^2$ sind diese stetig differenzierbar. Da q ebenfalls stetig differenzierbar ist, hängen die Komponenten von $(\frac{\partial q}{\partial x}(x))^{-1}$ stetig differenzierbar von x ab.

Somit ist auch die rechte Seite des Systems (2.3) in der Umgebung U stetig differenzierbar nach x . \square

Analog läßt sich zeigen, daß für $q \in C^1(G_q)$ und $f \in C(G_f)$ die rechte Seite des Systems (2.3) in einer Umgebung der Punkte $x_0 \in G_q \cap G_f$, in denen $\frac{\partial q}{\partial x}(x_0)$ regulär ist, stetig von x abhängt.

2.2 Charakteristisches Differentialgleichungssystem

Sind x_1, \dots, x_n die Komponenten der gesuchten Lösung x , so kann man die i -te Gleichung des Systems (2.3) formal schreiben als

$$\frac{\partial x_i}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial x_i}{\partial t_m} = g_i(t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n), \quad (2.4)$$

wobei g_i die i -te Komponente der rechten Seite des Systems bezeichnet.

In dieser Form läßt sich nun die Theorie des charakteristischen Differentialgleichungssystems für eine einzelne partielle Dgl. erster Ordnung, wie sie z.B. in [12] dargestellt ist, auf dieses System verallgemeinern. Dies ist möglich, weil aufgrund der beim System (2.2) vor allen Ableitungen nach den unabhängigen Veränderlichen auftretenden Matrix $\frac{\partial q}{\partial x}$ das System auf der linken Seite durch Invertierung entkoppelt wird, d.h. im System (2.3) sind in der i -ten Gleichung auch nur Ableitungen der i -ten Komponente der gesuchten Lösung vorhanden.

Das charakteristische Differentialgleichungssystem der i -ten Gleichung lautet

$$\dot{t}_1 = 1, \dots, \dot{t}_m = 1 \quad \dot{x}_i = g_i(t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n), \quad (2.5)$$

in dem die Größen t_1, \dots, t_m und x_1, \dots, x_n nun von einem Parameter τ abhängen und die Differentiation nach diesem Parameter erfolgt.

Die Lösungen des Systems $\dot{t}_1 = 1, \dots, \dot{t}_m = 1$ bezeichnet man als charakteristische Grundkurven. Die charakteristischen Grundkurven sind daher für alle n Gleichungen hier genau diejenigen Geraden bzw. Geradenstücke in $G \subset \mathbb{R}^m$, deren Steigung in allen Koordinatenrichtungen 1 ist.

Eine Lösung $(t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n)$, welche alle $i = 1, \dots, n$ Systeme (2.5) erfüllt, soll hier Charakteristik genannt werden. Auch hierbei handelt es sich um Kurven. Für die weitere Notation seien die Veränderlichen t_1, \dots, t_m im Spaltenvektor t zusammengefaßt. Zudem bezeichne e denjenigen Spaltenvektor des \mathbb{R}^m , dessen Komponenten sämtlich 1 sind.

Eine Charakteristik ist daher Lösung des folgenden charakteristischen Systems aus $m + n$ Gleichungen :

$$\begin{aligned} \dot{t} &= e \\ \dot{x} &= \left(\frac{\partial q}{\partial x}(x)\right)^{-1}(f(x) + b(t)) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Es läßt sich hier ein Resultat aus der Theorie der Charakteristiken für eine einzelne quasilinear Dgl. auf das System (2.3) übertragen.

Satz 5 *Bei stetiger rechter Seite des Systems (2.3) ist eine stetig differenzierbare Funktion $y : G \rightarrow \mathbb{R}^n$ genau dann Lösung dieses Systems, wenn durch jeden Punkt $(t_0, y(t_0)) \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ mit $t_0 \in G$ eine Charakteristik verläuft, die ganz in $\{(t, y(t)) | t \in G\}$ liegt.*

Beweis :

Sei y Lösung von (2.3), d.h. es gilt für ihre Komponenten

$$\frac{\partial y_i}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial y_i}{\partial t_m} = g_i(t_1, \dots, t_m, y_1, \dots, y_n); \quad i = 1, \dots, n.$$

Man betrachte nun ein $t_0 \in G$. Das System $\dot{t}_1 = 1, \dots, \dot{t}_m = 1$ besitzt zu t_0 als Anfangswert nach dem Peanoschen Existenzsatz (siehe [11]) eine Lösung $t(\tau)$ mit $t(\tau_0) = t_0$, welche ganz in G verläuft. Dadurch folgt mit $x(\tau) := y(t(\tau))$ für die Komponenten $i = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} \dot{x}_i(\tau) &= \dot{y}_i(t(\tau)) \\ &= \left(\frac{\partial y_i}{\partial t_1}(t(\tau)) \dots \frac{\partial y_i}{\partial t_m}(t(\tau)) \right) (\dot{t}_1(\tau) \dots \dot{t}_m(\tau))^T \\ &= \left(\frac{\partial y_i}{\partial t_1}(t(\tau)) \dots \frac{\partial y_i}{\partial t_m}(t(\tau)) \right) (1 \dots 1)^T \\ &= \frac{\partial y_i}{\partial t_1}(t(\tau)) + \dots + \frac{\partial y_i}{\partial t_m}(t(\tau)) \\ &= g_i(t_1(\tau), \dots, t_m(\tau), y_1(t(\tau)), \dots, y_n(t(\tau))) \\ &= g_i(t_1(\tau), \dots, t_m(\tau), x_1(\tau), \dots, x_n(\tau)) \end{aligned}$$

Zudem gilt $x(\tau_0) = y(t(\tau_0)) = y(t_0)$. Somit verläuft durch $(t_0, y(t_0))$ die Charakteristik $(t(\tau), x(\tau))$, welche ganz in der besagten Menge liegt.

Sei nun umgekehrt zu einer stetig differenzierbaren Funktion $y : G \rightarrow \mathbb{R}^n$ durch $(t_0, y(t_0))$ für $t_0 \in G$ eine Charakteristik $(t(\tau), x(\tau))$ mit $t(\tau_0) = t_0$ und $x(\tau) = y(t(\tau))$ gegeben.

Da diese das charakteristische Differentialgleichungssystem erfüllt, gilt

$$\dot{t}_j = 1; \quad j = 1, \dots, m \quad \dot{x}_i = g_i(t_1, \dots, t_m, x_1, \dots, x_n); \quad i = 1, \dots, n$$

und dadurch folgt für y durch Schritte wie im ersten Teil des Beweises für $i = 1, \dots, n$

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_i}{\partial t_1}(t(\tau)) + \dots + \frac{\partial y_i}{\partial t_m}(t(\tau)) &= \dots = \dot{y}_i(t(\tau)) = \dot{x}_i(\tau) \\ &= g_i(t_1(\tau), \dots, t_m(\tau), x_1(\tau), \dots, x_n(\tau)) \\ &= g_i(t_1(\tau), \dots, t_m(\tau), y_1(t(\tau)), \dots, y_n(t(\tau))). \end{aligned}$$

Da diese Gleichung speziell für τ_0 besteht, erfüllt somit die Funktion y das System (2.3) in t_0 . \square

Die Lösungen des Systems (2.3) setzen sich also aus Charakteristiken zusammen.

Ebenso kann man nun das Cauchysche Anfangswertproblem für das System (2.3) formulieren. Hierzu sei $\mathcal{F}_0 : t = v(\tau_2, \dots, \tau_m)$ die Parameterdarstellung einer doppelpunktfreien $(m - 1)$ -dimensionalen Fläche im m -dimensionalen t -Raum, also v eine in einem Gebiet des Raums der $m - 1$ Parameter τ_2, \dots, τ_m stetig differenzierbare und injektive \mathbb{R}^m -wertige Funktion, deren Funktionalmatrix überall den Höchststrang $m - 1$ besitzt.

Die Fläche $\mathcal{F} : t = v(\tau_2, \dots, \tau_m) \quad x = w(\tau_2, \dots, \tau_m)$, wobei w eine stetig differenzierbare \mathbb{R}^n -wertige Funktion ist, soll ganz in $G \times (G_q \cap G_f)$ verlaufen.

Es heie \mathcal{F} Anfangsmannigfaltigkeit und \mathcal{F}_0 Anfangsgrundmannigfaltigkeit der Cauchyschen Anfangswertaufgabe, die darin besteht, eine Lösung y des Systems (2.3) zu finden, welche die Anfangsmannigfaltigkeit enthält, d.h. für die dann hier $y(v(\tau_2, \dots, \tau_m)) = w(\tau_2, \dots, \tau_m)$ gilt.

Um dieses Anfangswertproblem zu untersuchen, wird zunächst noch mittels des Spaltenvektors $e \in \mathbb{R}^m$, dessen Komponenten sämtlich 1 sind, folgende Determinante definiert :

$$\Delta(\tau_2, \dots, \tau_m) = \det \left(e, \frac{\partial v}{\partial \tau_2}(\tau_2, \dots, \tau_m), \dots, \frac{\partial v}{\partial \tau_m}(\tau_2, \dots, \tau_m) \right) \quad (2.7)$$

Auch hier kann man den Satz über das Cauchysche Anfangswertproblem für eine einzelne quasilineare Dgl. aus [12] auf das System (2.3) verallgemeinern.

Satz 6 *Bei sowohl nach den unabhängigen Veränderlichen als auch nach der gesuchten Lösung stetig differenzierbarer rechten Seite des Systems (2.3) ist für dieses das Cauchysche Anfangswertproblem mit der Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{F} in denjenigen Punkten von \mathcal{F} lokal eindeutig lösbar, in denen $\Delta \neq 0$ gilt.*

Beweis :

Aufgrund der stetigen Differenzierbarkeit der rechten Seite des Systems (2.3) ist auch die rechte Seite des charakteristischen Differentialgleichungssystems (2.6) stetig differenzierbar nach den Größen t_1, \dots, t_m und x_1, \dots, x_n . Damit gilt für dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen nicht nur der Existenz-, sondern auch der Eindeutigkeitssatz (siehe [13]). Durch jeden Punkt der Anfangsmannigfaltigkeit \mathcal{F} verläuft daher genau eine Charakteristik. Wenn τ die unabhängige Veränderliche dieser Kurven ist, kann man die Komponenten dieser Charakteristiken in Abhängigkeit von den Anfangswerten schreiben als:

$$t = t(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m) \quad x = x(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m)$$

Da das charakteristische System (2.6) autonom ist, darf der Parameter τ durch Addition einer Konstanten abgeändert werden und man kann daher voraussetzen, daß die Anfangswerte auf \mathcal{F} stets für $\tau = 0$ angenommen werden:

$$t(0, \tau_2, \dots, \tau_m) = v(\tau_2, \dots, \tau_m) \quad x(0, \tau_2, \dots, \tau_m) = w(\tau_2, \dots, \tau_m)$$

Dem Beweis des Existenzsatzes von Picard-Lindelöf (siehe [13]) kann man entnehmen, daß zu einem festen Punkt im Gebiet der Parameter τ_2, \dots, τ_m dort eine Umgebung dieses Punkts existiert, zu der die Lösungen t und x für alle Parameterwerte aus dieser Umgebung über einen festen Bereich $\tau \in [-\epsilon, \epsilon]$ mit $\epsilon > 0$ existieren.

Wieder mit der stetigen Differenzierbarkeit der rechten Seite hat man, daß die Lösungen des charakteristischen Systems (2.6) stetig differenzierbar von den Anfangswerten abhängen (siehe [7] Kap. I.14) und diese Anfangswerte sind hier stetig differenzierbar nach τ_2, \dots, τ_m . Dadurch sind die Funktionen $t(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m)$ und $x(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m)$ ebenfalls stetig differenzierbar. Da $t(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m)$ Lösung des ersten Teils des charakteristischen Systems (2.6) ist, gilt $\frac{\partial t}{\partial \tau}(\tau) = e$. Für $\tau = 0$ hat man zudem $\frac{\partial t}{\partial \tau_j}(0, \tau_2, \dots, \tau_m) = \frac{\partial v}{\partial \tau_j}(\tau_2, \dots, \tau_m)$ für $j = 2, \dots, m$. Ist nun $\Delta(\tau_2^0, \dots, \tau_m^0) \neq 0$, so folgt

$$\begin{aligned} & \left[\det \left(\frac{\partial t}{\partial \tau}, \frac{\partial t}{\partial \tau_2}, \dots, \frac{\partial t}{\partial \tau_m} \right) \right]_{\tau=0, \tau_2=\tau_2^0, \dots, \tau_m=\tau_m^0} \\ &= \left[\det \left(e, \frac{\partial v}{\partial \tau_2}, \dots, \frac{\partial v}{\partial \tau_m} \right) \right]_{\tau_2=\tau_2^0, \dots, \tau_m=\tau_m^0} \neq 0. \end{aligned}$$

Mit dem Satz über die Umkehrabbildung aus der Analysis folgt, daß für die Punkte der Anfangsgrundmannigfaltigkeit, in denen $\Delta \neq 0$ ist, das Gleichungssystem $t = t(\tau, \tau_2, \dots, \tau_m)$ lokal nach den Parametern $\tau, \tau_2, \dots, \tau_m$ aufgelöst werden kann, d.h. man erhält in einer offenen Umgebung U eines solchen Punkts die Darstellung $\tau = \tau(t), \tau_j = \tau_j(t); j = 2, \dots, m$. Dieses in die Lösung x des zweiten Teils des charakteristischen Systems (2.6) eingesetzt, ergibt die Funktion $x(\tau(t), \tau_2(t), \dots, \tau_m(t))$, welche nun von den Veränderlichen t_1, \dots, t_m abhängt. Nach Konstruktion geht durch jeden Punkt $(t_0, x(t_0))$ mit $t_0 \in U$ eine ganz in $\{(t, x(t)) | t \in U\}$ verlaufende Charakteristik, wodurch nach Satz 5 auch x Lösung des Systems (2.3) ist. Aufgrund des Eindeutigkeitsatzes für gewöhnliche Differentialgleichungen ist x dann auch die einzige Funktion in U , welche die Anfangswertaufgabe löst. Somit existiert lokal eine eindeutige Lösung. \square

Aus diesem Satz ersieht man, daß im Falle einer Anfangsgrundmannigfaltigkeit, in deren sämtlichen Punkten $\Delta \neq 0$ gilt, das Cauchysche Anfangswertproblem korrekt gestellt ist.

Zu einem Cauchyschen Anfangswertproblem ist die Lösung über das charakteristische Differentialgleichungssystem (2.6) gegeben. Will man diese entlang einer charakteristischen Grundkurve $t = \tau e + c$ mit dem Parameter $\tau \in \mathbb{R}$ und der Konstanten $c \in \mathbb{R}^m$ bestimmen, so ist dafür das gewöhnliche Differentialgleichungssystem

$$\dot{x} = \left(\frac{\partial q}{\partial x}(x) \right)^{-1} (f(x) + b(\tau e + c))$$

zu lösen. Dieses System kann mittels Invertierung übergeführt werden in

$$\frac{\partial q}{\partial x}(x) \dot{x} = f(x) + b(\tau e + c)$$

und durch Anwendung der Kettenregel ergibt sich schließlich

$$\dot{q}(x) = f(x) + b(\tau e + c). \quad (2.8)$$

Es ist also ein implizites System gewöhnlicher Differentialgleichungen zu lösen.

Bemerkenswert ist nun, daß die hier dargestellte Form der Charakteristiken und des durch sie bedingten Informationstransports für ein System (2.1), welches als MPDE zu einer ODE vorliegt, sich dann in der Darstellung der MVF und in der korrespondierenden ODE widerspiegelt. Bereits in Satz 1 über die MPDE-ODE-Relation stellt sich nämlich heraus, daß die Lösungswerte der MPDE entlang der Geraden mit der Steigung 1 in jeder Koordinatenrichtung des Definitionsbereichs, also genau der charakteristischen Grundkurven, Lösungen der zugehörigen ODE sind. Dies erklärt auch, warum hier die Gleichung (2.8) aus dem charakteristischen System gerade die Gestalt der korrespondierenden ODE hat. Die Cauchysche Anfangswertaufgabe für die MPDE entspricht damit einer Schar von Anfangswertaufgaben der ursprünglichen ODE. Dies findet sich auch im Beweis der Eindeutigkeit einer Enveloppen-modulierten Lösung (Satz 4) wieder, der so als eine Anwendung des Cauchyschen Anfangswertproblems interpretierbar ist. Man kann dadurch einen Teil der obigen Resultate bereits aus der MPDE-ODE-Relation erhalten.

Die hier hergeleitete Theorie der Charakteristiken ist jedoch allgemeiner, da sie auch für ein System (2.1) gilt, welches nicht als MPDE zu einer ODE besteht. Die Resultate dieses Abschnitts gelten nämlich für jedes System (2.1), dessen in ihm enthaltenen Funktionen die anfangs geforderten Eigenschaften besitzen. Mehr noch braucht die Abhängigkeit der rechten Seite des Systems (2.1) von der gesuchten Lösung und den unabhängigen Veränderlichen nicht wie dort in den Funktionen f und b separiert zu sein. Die hier formulierten Sätze gelten auch für eine beliebige rechte Seite, solange sie nur stetig bzw. stetig differenzierbar nach allen Variablen ist.

Jedoch ist die Voraussetzung, daß $\frac{\partial q}{\partial x}(x)$ für alle Lösungswerte regulär ist, eine deutliche Einschränkung. Sie bedeutet gerade, daß die korrespondierende gewöhnliche Differentialgleichung keine differential-algebraische Gleichung (siehe [8]) darstellt. Diese Bedingung wird für die Sätze aus Kapitel 1 nicht benötigt. Im Falle der Singularität dieser Funktionalmatrizen geht aber die stetig differenzierbare Abhängigkeit von Anfangswerten im üblichen Sinn verloren.

Bei der näherungsweise Lösung der MPDE werden später teilweise Randwertprobleme von einer ODE der Gestalt (2.8) auftreten. Für deren Behandlung ist hilfreich, daß die Ableitung der Lösung nach den Anfangswerten selbst einer impliziten Matrixdifferentialgleichung folgt.

Lemma 4 *Gegeben sei die Dgl. $\frac{\partial q(x(\tau))}{\partial \tau} = f(\tau, x(\tau))$ mit nach der \mathbb{R}^n -wertigen Lösung $x(\tau)$ stetig differenzierbaren Abbildungen q und f in den \mathbb{R}^n , sowie f stetig bzgl. der Variable τ . Ist dann die Lösung x zu Anfangswerten $x(\tau_0) = s$ ste-*

stetig differenzierbar nach diesen, so folgt die Sensitivitätsmatrix $\frac{\partial x}{\partial s}$ der Matrixdgl. $\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} \right) = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s}$ mit der Einheitsmatrix als Anfangswert.

Beweis :

Man betrachte zunächst die Ableitung der Lösung nach dem j -ten Anfangswert. Da die Funktionen stetig differenzierbar gefordert sind, ist die folgende Vertauschung der Differentiation und die Anwendung der Kettenregel erlaubt.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial q}{\partial x}(x(\tau, s)) \frac{\partial x(\tau, s)}{\partial s_j} \right) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial q(x(\tau, s))}{\partial s_j} = \frac{\partial}{\partial s_j} \frac{\partial q(x(\tau, s))}{\partial \tau} \\ &= \frac{\partial}{\partial s_j} f(\tau, x(\tau, s)) = \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, x(\tau, s)) \frac{\partial x(\tau, s)}{\partial s_j} \end{aligned}$$

Zudem folgt aus $x(\tau_0, s) = s$ dann $\frac{\partial x(\tau_0, s)}{\partial s_j} = e_j$.

Dies in Matrixform zusammengefaßt ergibt die Behauptung. \square

Auch wenn die ODE nichtlinear ist, besitzt die zugehörige Matrixdifferentialgleichung linearen Charakter, wodurch deren Lösung vereinfacht ist.

2.3 m-periodische Lösungen

Betrachtet wird wieder das System (2.1) aus n partiellen Dgln.

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial q(x)}{\partial t_m} = f(x) + b(t_1, \dots, t_m),$$

hier mit stetig differenzierbaren Funktionen $q : G_q \rightarrow \mathbb{R}^n$, $f : G_f \rightarrow \mathbb{R}^n$, $b : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ und der gesuchten Lösung $x : \mathbb{R}^m \rightarrow G_q \cap G_f$.

Es soll vorausgesetzt werden, daß die rechte Seite des äquivalenten Systems (2.3) stetig differenzierbar nach allen Variablen ist, so daß neben Satz 5 auch Satz 6 gilt.

Jetzt sei b m -periodisch mit den Perioden T_1, \dots, T_m , d.h. für alle $t_1, \dots, t_m \in \mathbb{R}$ gilt $b(t_1, \dots, t_m) = b(t_1 + T_1, \dots, t_m + T_m)$. Dies läßt die Existenz einer m -periodischen Lösung mit den gleichen Perioden T_1, \dots, T_m erwarten. Zumindest ist m -periodisches b notwendig für diese Existenz, denn ist x eine m -periodische Lösung des Systems (2.1), so sind auch die Verkettungen $q(x)$, $f(x)$ und deren Ableitungen m -periodisch, wodurch aus der Gleichung des Systems folgt, daß auch b m -periodisch ist. Eine solche m -periodische Funktion ist bereits durch ihre Werte auf dem halboffenen Quader $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_m[$ bestimmt.

Es sollen nun Anfangswerte auf einer Hyperebene $\mathcal{F}_0 : t_j = 0$ für ein $j \in \{1, \dots, m\}$ vorgegeben werden. O.B.d.A. sei $j = m$. Eine Parameterdarstellung von \mathcal{F}_0 ist dann $t = (\tau_2, \dots, \tau_m, 0)^T$ für $(\tau_2, \dots, \tau_m) \in \mathbb{R}^{m-1}$. Bezeichnet e_j den j -ten Einheitsvektor des \mathbb{R}^m und e den Vektor des \mathbb{R}^m , dessen Komponenten sämtlich 1 sind, so ist wegen

$$\Delta = \det \left(e, \frac{\partial t}{\partial \tau_2}, \dots, \frac{\partial t}{\partial \tau_m} \right) = \det(e, e_1, \dots, e_{m-1}) = (-1)^{m-1} \neq 0 \quad (2.9)$$

nach Satz 6 das Cauchysche Anfangswertproblem mit \mathcal{F}_0 als Anfangsgrundmannigfaltigkeit lokal eindeutig lösbar. Man erhält also lokal eine Lösung um diese Hyperebene, die sich entlang der Geraden mit Steigung e aufbaut.

Existiert nun genau eine m -periodische Lösung des Systems (2.1) mit den Perioden T_1, \dots, T_m , so ist diese bereits durch ihre Werte auf der Hyperebene $t_m = 0$ eindeutig bestimmt. Denn nach Satz 6 gibt es bei Vorgabe dieser Werte auf jener Anfangsgrundmannigfaltigkeit lokal eine eindeutige Lösung. Diese Lösung aus dem Cauchyschen Anfangswertproblem kann auf den ganzen \mathbb{R}^m fortgesetzt werden, nämlich durch die Werte der m -periodischen Lösung selbst. Eine solche Fortsetzung ist aufgrund der stetigen Differenzierbarkeit der rechten Seite des charakteristischen Systems (2.6), welche hier gefordert wird, auch eindeutig entlang der charakteristischen Grundkurven nach dem Eindeutigkeitssatz für gewöhnliche Differentialgleichungen (siehe [13]). Weil die charakteristischen Grundkurven den ganzen \mathbb{R}^m durchsetzen und eine jede von ihnen genau einen Punkt der Hyperebene $t_m = 0$ enthält, ist die Lösung damit eindeutig gegeben.

Da die Werte auf der Hyperebene $t_m = 0$ periodisch in t_1, \dots, t_{m-1} sind, wird die m -periodische Lösung sogar eindeutig durch ihre Werte auf dem Hyperebenenstück $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{0\}$ festgelegt. Diese bestimmen dann die Lösung entlang der charakteristischen Grundkurven, also hier der Geraden mit Steigung 1 in jeder Koordinatenrichtung, und dadurch ist sie in dem halboffenen Parallelogramm, welches von den Vektoren $(T_1, 0, \dots, 0)^T, (0, T_2, 0, \dots, 0)^T, \dots, (0, \dots, 0, T_{m-1}, 0)^T, (T_m, T_m, \dots, T_m, T_m)^T$ aufgespannt wird, eindeutig bestimmt. Mit der m -Periodizität kann man die Lösung durch Identifizierung auf ganz \mathbb{R}^m erhalten.

Somit ist das Problem der Bestimmung der m -periodischen Lösung des Systems (2.1) unter der Bedingung der Existenz und Eindeutigkeit, sowie der anfangs verlangten Regularität von besagter Funktionalmatrix und der stetigen Differenzierbarkeit der rechten Seite des äquivalenten Systems (2.3), reduzierbar zu der Ermittlung ihrer Werte auf dem Hyperebenenstück $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{0\}$. Jene können dann als Anfangswerte entlang der charakteristischen Grundkurven hochintegriert werden und man erhält wie beschrieben die gesamte m -periodische Lösung.

Dieser Umstand macht ein numerisches Verfahren zur Bestimmung der hier gesuchten m -periodischen Lösung möglich, wie es in Abschnitt 3.3 dargestellt ist.

Kapitel 3

Numerische Lösung der MPDE

In diesem Kapitel werden drei numerische Verfahren zur Bestimmung einer Näherung zur m -periodischen Lösung der MPDE beschrieben. Dies erfolgt jeweils am Beispiel einer Gleichung mit zwei Zeitraten. Jedoch lassen sich die Vorgehensweisen ohne weiteres auf den höherdimensionalen Fall übertragen.

3.1 Finite Differenzen Methode

Um eine m -periodische Lösung der MPDE mit den Perioden T_1, \dots, T_m näherungsweise zu bestimmen, wird bei dieser Methode der Quader $[0, T_1] \times \dots \times [0, T_m]$ im Raum der unabhängigen Veränderlichen t_1, \dots, t_m mit einem Gitter überzogen. Die Differentialquotienten in der MPDE werden dann auf diesem Gitter diskretisiert, d.h. man ersetzt sie durch Differenzenquotienten, die nur auf Lösungswerte an den Gitterpunkten zurückgreifen. Dabei müssen auch Punkte außerhalb des betrachteten Quaders einbezogen werden, welche dann mittels der Periodizitätsbedingungen mit Gitterpunkten innerhalb des Quaders zu identifizieren sind. Dies führt auf ein nichtlineares System algebraischer Gleichungen für die

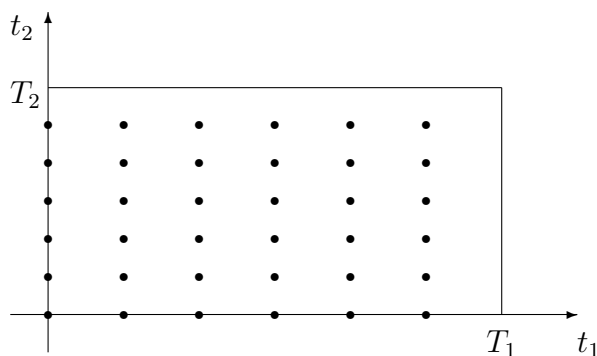


Abbildung 3.1: Gitter für die Finite Differenzen Methode

unbekannten Lösungswerte in den Gitterpunkten. Sind die Funktionen q und f in der MPDE stetig differenzierbar, so besteht bei den gängigen Differenzenformeln dann eine stetig differenzierbare Abhängigkeit von den Unbekannten in den Gleichungen. Damit kann dieses nichtlineare Gleichungssystem mit Verfahren vom Newton-Typ (siehe [9]) gelöst werden. Da das Gleichungssystem im allgemeinen extrem groß, aber dünn besetzt ist, empfiehlt es sich, die dabei auftretenden linearen Gleichungssysteme mit speziellen Lösern oder Iterationsverfahren zu behandeln. Auch sollte man spezielle Methoden für große dünnbesetzte nichtlineare Systeme in Betracht ziehen.

Es sei noch erwähnt, daß für Funktionen q und f aus der MPDE, die affin-linear von der Lösung x abhängen, dann das entstehende algebraische Gleichungssystem linear ist.

Als Beispiel betrachte man eine MPDE für zwei Zeitskalen :

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1} + \frac{\partial q(x)}{\partial t_2} = f(x) + b(t_1, t_2) \quad (3.1)$$

Dabei seien $q : G_q \rightarrow \mathbb{R}^k$ und $f : G_f \rightarrow \mathbb{R}^k$ stetig differenzierbare Funktionen auf den Gebieten $G_q, G_f \subset \mathbb{R}^k$, $x : \mathbb{R}^2 \rightarrow G_q \cap G_f$ die gesuchte stetig differenzierbare Lösung und $b : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^k$ stetig. Dazu sei eine biperiodische Randbedingung, d.h. $x(t_1 + T_1, t_2 + T_2) = x(t_1, t_2)$, verlangt.

Auf dem Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ wird nun ein uniformes Gitter eingeführt mit den Gitterpunkten $\bar{t}_{j,i} = (t_{1j}, t_{2i})$, wobei $t_{1j} = (j - 1)h_1$, $t_{2i} = (i - 1)h_2$ mit $1 \leq j \leq n_1$, $1 \leq i \leq n_2$ und $h_1 = \frac{T_1}{n_1}$, $h_2 = \frac{T_2}{n_2}$ ist.

Auf diesem Gitter werden nun die Differentialquotienten durch den zentrierten Differenzenquotienten ersetzt, der diese von zweiter Ordnung approximiert.

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1}(\bar{t}_{j,i}) \approx \frac{q(x(\bar{t}_{j+1,i})) - q(x(\bar{t}_{j-1,i}))}{2h_1}$$

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_2}(\bar{t}_{j,i}) \approx \frac{q(x(\bar{t}_{j,i+1})) - q(x(\bar{t}_{j,i-1}))}{2h_2}$$

Dadurch entstehen in allen $n_1 \cdot n_2$ Gitterpunkten jetzt Systeme aus jeweils k algebraischen Gleichungen :

$$F_{j,i} = \frac{\bar{q}_{j+1,i} - \bar{q}_{j-1,i}}{2h_1} + \frac{\bar{q}_{j,i+1} - \bar{q}_{j,i-1}}{2h_2} - \bar{f}_{j,i} - \bar{b}_{j,i} = 0 \quad j = 1, \dots, n_1; \quad i = 1, \dots, n_2$$

Dabei ist $\bar{q}_{j,i} = q(x(\bar{t}_{j,i}))$, $\bar{f}_{j,i} = f(x(\bar{t}_{j,i}))$, $\bar{b}_{j,i} = b(\bar{t}_{j,i})$.

Die in diesen Formeln auftretenden Unbekannten $x(\bar{t}_{0,i})$, $x(\bar{t}_{j,0})$, $x(\bar{t}_{n_1+1,i})$ und $x(\bar{t}_{j,n_2+1})$ außerhalb des Gitters werden über die Periodizitätsbedingung eliminiert.

$$x(\bar{t}_{0,i}) = x(\bar{t}_{n_1,i}) \quad x(\bar{t}_{n_1+1,i}) = x(\bar{t}_{1,i})$$

$$x(\bar{t}_{j,0}) = x(\bar{t}_{j,n_2}) \quad x(\bar{t}_{j,n_2+1}) = x(\bar{t}_{j,1})$$

Damit hat man ein System von $n_1 \cdot n_2 \cdot k$ Gleichungen für die $n_1 \cdot n_2 \cdot k$ unbekanntenen Lösungskomponenten in den Gitterpunkten.

Diese seien nun zu Spaltenvektoren zusammengefaßt :

$$\begin{aligned} F &= (F_{1,1}, \dots, F_{n_1,1}, F_{1,2}, \dots, F_{n_1,n_2-1}, F_{1,n_2}, \dots, F_{n_1,n_2})^T \\ X &= (x(\bar{t}_{1,1}), \dots, x(\bar{t}_{n_1,1}), x(\bar{t}_{1,2}), \dots, x(\bar{t}_{n_1,n_2-1}), x(\bar{t}_{1,n_2}), \dots, x(\bar{t}_{n_1,n_2}))^T \end{aligned}$$

Gelöst wird nun das Gleichungssystem $F(X) = 0$ mit z.B. dem Newton-Raphson-Verfahren.

Die dabei auftretende Funktionalmatrix von F hat folgende Blockstruktur :

$$\frac{\partial F}{\partial X} = \begin{pmatrix} D_1 & L_2 & & & -L_{n_1} \\ -L_1 & D_2 & L_3 & & \\ & -L_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & L_{n_1-1} \\ & & & -L_{n_1-2} & D_{n_1-1} & L_{n_1} \\ L_1 & & & & -L_{n_1-1} & D_{n_1} \end{pmatrix}$$

Die Blöcke haben selbst wieder eine Blockgestalt :

$$D_i = \begin{pmatrix} -f'_{1,i} & \frac{1}{2h_1} q'_{2,i} & & & & -\frac{1}{2h_1} q'_{n_1,i} \\ -\frac{1}{2h_1} q'_{1,i} & -f'_{2,i} & \frac{1}{2h_1} q'_{3,i} & & & \\ & -\frac{1}{2h_1} q'_{2,i} & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \frac{1}{2h_1} q'_{n_1-1,i} & \\ & & & -\frac{1}{2h_1} q'_{n_1-2,i} & -f'_{n_1-1,i} & \frac{1}{2h_1} q'_{n_1,i} \\ \frac{1}{2h_1} q'_{1,i} & & & & -\frac{1}{2h_1} q'_{n_1-1,i} & -f'_{n_1,i} \end{pmatrix}$$

$$L_i = \frac{1}{2h_2} \begin{pmatrix} q'_{1,i} & & & & & \\ & q'_{2,i} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & q'_{n_1-1,i} & \\ & & & & & q'_{n_1,i} \end{pmatrix}$$

Hierbei sind $q'_{j,i}$ und $f'_{j,i}$ die Funktionalmatrizen der Funktionen q bzw. f ausgewertet an der Näherung zum Gitterpunkt $\bar{t}_{j,i}$.

Die Funktionalmatrix $\frac{\partial F}{\partial X}$ ist somit dünn besetzt und hat eine regelmäßige Struktur.

3.2 Hierarchische Randwertproblemlösung

Um bei dieser Methode eine m -periodische Lösung zu erhalten, wird die MPDE als eine gewöhnliche Differentialgleichung in Variablen aus einem Funktionenraum interpretiert.

Dies sei am Beispiel der MPDE (3.1) mit zwei Zeitraten dargestellt, wobei die Funktionen aus dieser Gleichung wieder die üblichen Voraussetzungen erfüllen sollen. Gesucht ist eine biperiodische Lösung mit den Perioden T_1 und T_2 .

Man kann x und b auch als Funktionen einer Variable ansehen, welcher dann eine vektorwertige Funktion zugeordnet wird, d.h. man betrachtet $\tilde{x} : \mathbb{R} \rightarrow C^1(\mathbb{R})$, $t_2 \mapsto x(\cdot, t_2)$ und \tilde{b} für b analog. Dann werden q und f als Abbildungen von dem Raum dieser Funktionen in sich interpretiert durch $\tilde{q}(\tilde{x}(t_2)) = q(x(\cdot, t_2))$ und \tilde{f} für f analog.

Dadurch ergibt sich für die MPDE eine gewöhnliche Differentialgleichung für diese funktionswertigen Variablen

$$\frac{d\tilde{q}(\tilde{x})}{dt_2} = \tilde{f}(\tilde{x}) + \tilde{b}(t_2) - \mathcal{D}_{t_1}(\tilde{q}(\tilde{x})), \quad (3.2)$$

wobei \mathcal{D}_{t_1} hier den Differentialoperator auf den Funktionen aus $C^1(\mathbb{R})$ nach deren Variable t_1 bezeichnet.

Zu einer Anfangsfunktion $\tilde{x}_0 = \tilde{x}(0)$ ist dann $\tilde{x}(t_2)$ die nach der Gleichung (3.2) aus dieser Anfangsfunktion erhaltene Funktion an einer Stelle $t_2 > 0$. Die Abhängigkeit vom Anfangswert soll gekennzeichnet werden durch die Schreibweise $\tilde{x}(t_2; \tilde{x}_0)$.

Um Periodizität in t_2 zu erhalten, ist daher die Anfangsfunktion so zu bestimmen, daß die Gleichung

$$\tilde{x}(T_2; \tilde{x}_0) - \tilde{x}_0 = 0 \quad (3.3)$$

erfüllt wird, welche die Übereinstimmung von zwei Funktionen bedeutet.

Die Funktionalmatrix der linken Seite von (3.3) bezüglich der unbekanntem An-

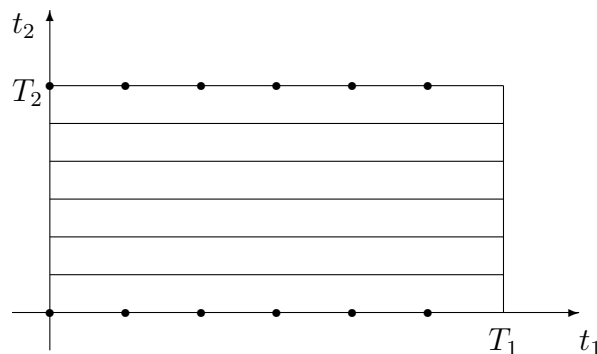


Abbildung 3.2: Prinzip bei der Semidiskretisierung

fangsfunktion stellt hier einen linearen Operator auf dem Raum dieser vektorwertigen Funktionen aus $C^1(\mathbb{R})$ dar. Jede Berechnung von $\tilde{x}(T_2; \tilde{x}_0)$ erfordert die Lösung einer Anfangswertaufgabe der Differentialgleichung (3.2). Dies erfolgt durch Diskretisierung an den Stellen $t_{2,i}; i = 1, 2, \dots$ mit z.B. dem impliziten Eulerverfahren. Dabei ergibt sich die Formel

$$\frac{\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) - \tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i}))}{t_{2,i+1} - t_{2,i}} = \tilde{f}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) + \tilde{b}(t_{2,i+1}) - \mathcal{D}_{t_1}(\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1}))). \quad (3.4)$$

Dieser Ausdruck ist selbst eine gewöhnliche Differentialgleichung, kurz ODE, in der Variablen t_1 :

$$\frac{d\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1}))}{dt_1} = -\frac{\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) - \tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i}))}{t_{2,i+1} - t_{2,i}} + \tilde{f}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) + \tilde{b}(t_{2,i+1}) \quad (3.5)$$

Um die Unbekannte $\tilde{x}(t_{2,i+1})$ zu bestimmen und dabei Periodizität in t_1 zu erhalten, ist diese ODE mit der periodischen Randwertbedingung $\tilde{x}(t_{2,i+1})(0) = \tilde{x}(t_{2,i+1})(T_1)$ zu lösen. Natürlich muß dabei bereits die Anfangsfunktion \tilde{x}_0 auch T_1 -periodisch sein.

Das Vorgehen hier entspricht also einer Semidiskretisierung der MPDE auf dem Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$. Zur Auswertung der Gleichung (3.3) des äußeren periodischen Randwertproblems zur Dgl. (3.2) für eine Anfangsfunktion sind dann schichtweise innere periodische Randwertprobleme der ODE (3.5) zu lösen. Dies erklärt den Namen „Hierarchische Randwertproblemlösung“.

Ist die Anfangsfunktion so bestimmt, daß sie Gleichung (3.3) erfüllt, so erhält man durch erneute Lösung der Dgl. (3.2) mit diesen Anfangswerten dann in den einzelnen Schichten der Semidiskretisierung über jeweils ein periodisches Randwertproblem hier eine Näherungslösung der gesuchten biperiodischen Lösung.

Sucht man eine Enveloppen-modulierte Lösung (siehe Abschnitt 1.5), so ist dazu bereits die Anfangsfunktion vorzugeben, d.h. man braucht die Gleichung (3.3) nicht zu erfüllen, sondern kann zu den Anfangswerten direkt eine Näherungslösung wie eben beschrieben berechnen.

Zur Durchführung dieses Verfahrens wird hier folgender Ansatz gemacht :

Man betrachte das Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$. Auf dem Intervall $[0, T_1] \times \{0\}$ werden äquidistant die Punkte $\bar{t}_j = ((j-1)h_1, 0)$ für $1 \leq j \leq n_1 + 1$ mit $h_1 = \frac{T_1}{n_1}$ gewählt. Für $j = 1, \dots, n_1$ gebe man in diesen Punkten jeweils Startwerte $s_j \in \mathbb{R}^k$ vor. Aufgrund der Periodizitätsbedingung in t_1 überträgt sich der Wert in \bar{t}_1 auf den Punkt \bar{t}_{n_1+1} , wodurch die Startwerte s_j für $j = 1, \dots, n_1 + 1$ vorliegen. Als Anfangsfunktion nehme man dann eine T_1 -periodische Funktion, welche die Startwerte an den zugehörigen Punkten interpoliert. Dazu eignet sich auch die lineare Interpolierende, obwohl diese nicht überall stetig differenzierbar ist.

Dann setze man eine Anzahl n_2 von äquidistanten Schichten der Semidiskretisierung fest, d.h. es liegt eine Schrittweite $h_2 = \frac{T_2}{n_2}$ in t_2 vor. Um jetzt die Näherungslösung zu der Anfangsfunktion zu bestimmen, müssen sukzessive die

Schichten $t_2 = ih_2$ für $i = 1, \dots, n_2$ berechnet werden, wobei jeweils ein periodisches Randwertproblem zu lösen ist. Dabei wird in einer Diskretisierung die periodische Lösung in einer Schicht auch nur in einzelnen Punkten näherungsweise bestimmt, so daß man als Funktion in dieser Schicht wieder eine Interpolierende verwendet. Sind diese Punkte in allen Schichten äquidistant mit der Schrittweite h_1 gewählt, so wird von einem Differenzenverfahren zur näherungsweisen Lösung der ODE, welches ihre rechte Seite nur an diesen Stellen auswertet, dann auch nur auf bereits berechnete Werte zugegriffen, d.h. es ist keine Interpolation nötig und damit können keine zusätzlichen Interpolationsfehler auftreten.

Sind in den ersten Schichten Näherungslösungen bestimmt, so kann man auch für die Semidiskretisierung eine BDF-Formel höherer Ordnung (siehe [10]) verwenden, welche dann zur Berechnung der aktuellen Schicht auf mehrere vorhergehende Schichten, deren Anzahl der Ordnung entspricht, zurückgreift.

Sind schließlich die Näherungswerte x_j der Lösung zur letzten Schicht $t_2 = T_2$ in den äquidistanten Punkten $((j-1)h_1, T_2)$ mit $j = 1, \dots, n_1 + 1$ bestimmt, so wähle man als Endfunktion die Interpolierende des gleichen Typs wie bei der Anfangsfunktion. Beide Funktionen sind daher genau dann gleich, wenn ihre Werte in den einzelnen gegenüberliegenden Punkten übereinstimmen. Es muß also für die T_2 -Periodizität $s_j = x_j$ für $j = 1, \dots, n_1$ gelten. Faßt man die Startwerte und die Endwerte in den Spaltenvektoren $S = (s_1, \dots, s_{n_1})^T$, $X = (x_1, \dots, x_{n_1})^T$ zusammen, so hat man für die Periodizitätsbedingung (3.3) das Nullstellenproblem folgender Funktion im \mathbb{R}^{kn_1} zu lösen :

$$F(S) = X(S) - S = 0 \quad (3.6)$$

Es läßt sich nun zeigen, daß die Endwerte X stetig differenzierbar von den Anfangswerten S abhängen :

Seien in der i -ten Schicht Werte in den Punkten $((j-1)h_1, ih_2)$; $j = 1, \dots, n_1 + 1$ gegeben. Die nächste Schicht wird nun nach der ODE (3.5) berechnet.

$$\frac{d\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1}))}{dt_1} = -\frac{1}{h_2}\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) + \tilde{f}(\tilde{x}(t_{2,i+1})) + b(t_1, (i+1)h_2) + \frac{1}{h_2}\tilde{q}(\tilde{x}(t_{2,i}))$$

Dabei wird im letzten Term der rechten Seite auf die vorhergehende i -te Schicht zugegriffen und für $\tilde{x}(t_{2,i})$ wird eine Interpolierende der gegebenen Punkte verwendet. Betrachtet man die Werte in jenen Punkten als Parameter der interpolierenden Funktion, so ist diese im allgemeinen stetig differenzierbar nach diesen Parametern. Bei z.B. der linearen Interpolierenden, die selbst nicht überall differenzierbar ist, liegt eine stetig differenzierbare Abhängigkeit von den einzelnen interpolierten Werten vor und sie besitzt als partielle Ableitungen nach diesen dann Dachfunktionen. Damit ist die gesamte rechte Seite der ODE (3.5) stetig differenzierbar nach diesen Parametern. Mit einem Satz über die Parameterabhängigkeit von Lösungen einer ODE (siehe [7] Kap. I.14), der hier unter der Voraussetzung gilt, daß stets $\frac{\partial q}{\partial x}$ invertierbar auftritt, ist deshalb ein Lösungswert

von (3.5) stetig differenzierbar nach jenen Parametern. Insbesondere sind dann die neuen äquidistant liegenden Werte der T_1 -periodischen Lösung stetig differenzierbar nach den in der vorhergehenden Schicht auftretenden Parametern. Somit ergibt sich durch Verkettung dieser Abhängigkeiten, daß die Endwerte stetig differenzierbar nach den Anfangswerten sind. Bei einer Semidiskretisierung höherer Ordnung, welche zur Berechnung der aktuellen Schicht auf mehrere vorhergehende Schichten zurückgreift, folgt dies analog, da man in diesen Schichten jeweils eine Interpolierende verwendet, so daß hier nur eine größere Anzahl von Parametern vorliegt. Natürlich gilt diese stetig differenzierbare Abhängigkeit auch bei nicht äquidistanter und in jeder Schicht verschiedener Wahl der Stützstellen für die Interpolation.

Die algebraische Gleichung (3.6) kann dadurch mit Verfahren vom Newton-Typ gelöst werden. Dabei tritt die Funktionalmatrix von F auf, welche die Gestalt

$$\frac{\partial F}{\partial S} = \frac{\partial X}{\partial S} - I \quad (3.7)$$

mit der Einheitsmatrix I hat.

Es muß also bestimmt werden, wie die Endwerte von den Anfangswerten differenziell abhängen. Ein Startwert $s_{j_0}; j_0 \in \{1, \dots, n_1\}$ geht bei der Lösung des inneren Randwertproblems in der nächsten Schicht durch die Interpolation in die rechte Seite der zugehörigen ODE ein und beeinflusst damit, da es sich um ein Randwertproblem handelt, die gesamte Lösung dieser Schicht. Analog bestimmt ein zur Interpolation verwendeter Wert aus einer beliebigen Schicht die Lösung des Randwertproblems der folgenden Schicht. Somit gehen in die Berechnung eines Endwerts $x_{i_0}; i_0 \in \{1, \dots, n_1\}$ alle Startwerte $s_j; j = 1, \dots, n_1$ ein. Die Funktionalmatrix $\frac{\partial X}{\partial S}$ ist dadurch voll besetzt. Um diese für gewisse Startwerte durch numerische Differentiation mit dem gewöhnlichen Differenzenquotienten näherungsweise zu bestimmen, sind dann die zu ihnen gehörigen Endwerte nach der beschriebenen Methode zu berechnen und dann muß jeder Startwert jeweils komponentenweise gestört werden, um mit den daraus erhaltenen Endwerten den Differenzenquotienten zu bilden, d.h. man hat $kn_1 + 1$ Auswertungen zu Anfangswerten durchzuführen.

Es sei noch erwähnt, daß bei der Lösung des inneren Randwertproblems in einer Schicht mit z.B. einer Mehrzielmethode ein dabei verwendetes Differenzenverfahren aufgrund des Informationstransports nicht beliebig gewählt werden kann. Aus Abschnitt 2.2 entnimmt man nämlich, daß sich bei der MPDE die Information aus Anfangswerten entlang charakteristischer Grundkurven im Definitionsgebiet, welche hier Geraden der Steigung 1 sind, propagiert. Ist dann h_1 die Schrittweite eines Differenzenverfahrens in einer Schicht und h_2 die Schrittweite zwischen den Schichten, so schneidet im Fall $h_1 \gg h_2$ die charakteristische Grundkurve durch einen Punkt, zu dem eine Näherungslösung bestimmt werden soll, die vorhergehenden Schichten, die zur Interpolation verwendet werden, an Stellen mit einer t_1 -Koordinate nahe der des Punkts. Aus diesem Grund sind hier

Mehrschrittverfahren und explizite Einschrittverfahren instabil, da diese stark auf Werte zu Punkten mit viel geringerer t_1 -Koordinate als der des betrachteten Punkts zurückgreifen. Umgekehrt sind dann diese Verfahren für den Fall $h_1 \ll h_2$ besonders geeignet, weil hier die charakteristische Grundkurve nahe der dabei einbezogenen Punkte verläuft. Die Trapezregel als Differenzenverfahren erweist sich in beiden Fällen als günstig. Da die MPDE gerade für Probleme mit sehr unterschiedlichen Größenordnungen der Perioden entwickelt ist, treten dabei automatisch auch äußerst verschiedene Schrittweiten in den jeweiligen Koordinatenrichtungen auf, so daß dies zu beachten ist.

3.3 Charakteristikenverfahren

Die Theorie aus Abschnitt 2.3 ermöglicht ein Verfahren zur näherungsweise Bestimmung der gesuchten m -periodischen Lösung der MPDE. Neben der Existenz und Eindeutigkeit einer m -periodischen Lösung mit den Perioden T_1, \dots, T_m seien daher noch die dortigen Voraussetzungen gefordert und insbesondere, daß die lokale Lösung einer Cauchyschen Anfangswertaufgabe mit der Hyperebene $t_m = 0$ als Anfangsgrundmannigfaltigkeit auf den Bereich $\mathbb{R}^{m-1} \times [0, T_m]$ eindeutig fortgesetzt werden kann.

Gibt man auf der Hyperebene $t_m = 0$ dann eine stetig differenzierbare Anfangsfunktion $x(t_1, \dots, t_{m-1}, 0)$ vor, welche $(m-1)$ -periodisch mit den Perioden T_1, \dots, T_{m-1} ist, so erhält man aus diesem Cauchyschen Anfangswertproblem eine Lösung x des Systems (2.8) bis zur Hyperebene $t_m = T_m$ hin. Gilt dann $x(t_1, \dots, t_{m-1}, 0) = x(t_1, \dots, t_{m-1}, T_m)$ für alle $t_1, \dots, t_{m-1} \in \mathbb{R}$, so liegt die m -periodische Lösung über den Bereich $\mathbb{R}^{m-1} \times [0, T_m]$ vor. Dies kommt daher, daß wegen der Periodizität der Funktion b in t_m das charakteristische Differentialgleichungssystem für die Lösung mit der Hyperebene $t_m = kT_m$ als Anfangsgrundmannigfaltigkeit für jedes $k \in \mathbb{Z}$ dasselbe ist und dadurch die Lösungen über die Bereiche $\mathbb{R}^{m-1} \times [kT_m, (k+1)T_m]$ für gleiche Anfangsfunktionen identisch sind. Es ist also die Anfangsfunktion $x(t_1, \dots, t_{m-1}, 0)$ so zu bestimmen, daß für die daraus als Cauchysches Anfangswertproblem erhaltene Lösung hier $x(t_1, \dots, t_{m-1}, 0) = x(t_1, \dots, t_{m-1}, T_m)$ für alle $t_1, \dots, t_{m-1} \in \mathbb{R}$ gilt. Aufgrund der Periodizität in t_1, \dots, t_{m-1} sind dabei sogar nur die Anfangswerte auf dem Hyperebenenstück $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{0\}$ zu ermitteln.

Man überziehe nun dieses Hyperebenenstück mit einem Gitter. Das gegenüberliegende Hyperebenenstück $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{T_m\}$ wird dann gerade mit dem um T_m in t_m -Richtung verschobenen Gitter versehen. Als Periodizitätsbedingung in t_m wird jetzt die Übereinstimmung der Werte einer Lösung des Systems in den sich entsprechenden Gitterpunkten verlangt.

Gibt man in den Gitterpunkten des Hyperebenenstücks mit $t_m = 0$ Anfangswerte vor, so kann man, wie es in Abschnitt 2.3 beschrieben wird, entlang der charakteristischen Grundkurven das charakteristische System (2.8) integrieren und die

zugehörige Lösung bis hin zu den Punkten, in denen diese Geraden die Hyperebene $t_m = T_m$ durchstoßen, bestimmen. Mit der Periodizität in t_1, \dots, t_{m-1} können diese Lösungswerte auf die zugehörigen Punkte im Bereich $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{T_m\}$ übertragen werden. Die Lösungswerte in den Gitterpunkten dieses Bereichs erhält man dann näherungsweise aus jenen durch Interpolation.

Es müssen also die Anfangswerte derart bestimmt werden, daß die daraus berechneten Näherungslösungen in den entsprechenden Gitterpunkten mit ihnen übereinstimmen.

Sind erst diese Anfangswerte der m -periodischen Lösung ermittelt, so kann man sich leicht eine Näherungslösung zu einem beliebigen Punkt verschaffen, indem man ihn zunächst mittels der Periodizität in t_m mit einem Punkt, der eine t_m -Koordinate aus $[0, T_m[$ besitzt, identifiziert. Dann wird der Schnittpunkt der charakteristischen Grundkurve durch diesen Punkt mit der Hyperebene $t_m = 0$ bestimmt und mit den Periodizitäten in t_1, \dots, t_{m-1} auf einen Punkt in dem Hyperbenenstück $[0, T_1[\times \dots \times [0, T_{m-1}[\times \{0\}$ übertragen. Zu diesem wird die Lösung aus den gegebenen Anfangswerten interpoliert. Das Ergebnis dient jetzt als Anfangswert für die Integration des charakteristischen Systems, wodurch man eine Näherungslösung in dem gewünschten Punkt erhält. Es besteht auch die Möglichkeit, zu allen Anfangswerten die zugehörigen charakteristischen Systeme bis zur Hyperbenen $t_m = T_m$ zu lösen und die dabei an Zwischenstellen erhaltenen Werte zu tabellieren, so daß man einen Satz von Näherungslösungen bereitgestellt hat, mit dem man die Lösung in einem beliebigen Punkt unter Verwendung der Periodizitäten interpolieren kann.

Dieses Verfahren wird nun am Beispiel der zweiratigen MPDE (3.1) verdeutlicht, wobei die Funktionen wieder die üblichen Eigenschaften haben sollen und eine biperiodische Lösung mit den Perioden T_1 und T_2 gesucht ist.

Im Intervall $[0, T_1[\times \{0\}$ werden nun äquidistant die Punkte $\bar{t}_j = (t_{1j}, 0)$ mit $t_{1j} = (j-1)h_1$ für $j = 1, \dots, n_1$ und $h_1 = \frac{T_1}{n_1}$ gewählt. In diesen seien jeweils Startwerte $s_j \in \mathbb{R}^k$ vorgegeben. Das charakteristische System wird dann entlang der Grundkurve $(t_{1j} + \tau, \tau)$ für $\tau \in [0, T_2]$ zum Anfangswert s_j gelöst, d.h. man integriert die Dgl. $\dot{q}(x) = f(x) + b(t_{1j} + \tau, \tau)$. Die dabei für $\tau = T_2$ erhaltenen Ergebnisse sind dann Lösungswerte der MPDE in den Punkten $(t_{1j} + T_2, T_2)$; $j = 1, \dots, n_1$ und seien jeweils mit y_j bezeichnet. Durch die Periodizität in t_1 kann man diese Werte auf das Intervall $[0, T_1[\times \{T_2\}$ übertragen und dort mit ihnen die Lösungen x_j der MPDE an den Stellen (t_{1j}, T_2) für $j = 1, \dots, n_1$ interpolieren.

Um Periodizität in t_2 zu erhalten, wird dann $s_j = x_j$ für alle $j = 1, \dots, n_1$ gefordert. Faßt man die Startwerte und die Lösungswerte in den Spaltenvektoren $S = (s_1, \dots, s_{n_1})^T$ bzw. $X = (x_1, \dots, x_{n_1})^T$ des \mathbb{R}^{kn_1} zusammen, so ist

$$F(S) = X(S) - S = 0 \quad (3.8)$$

als Nullstellenproblem zu lösen. Dieses entspricht dem Gleichungssystem (3.6) bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung, nur werden jetzt die Endwerte

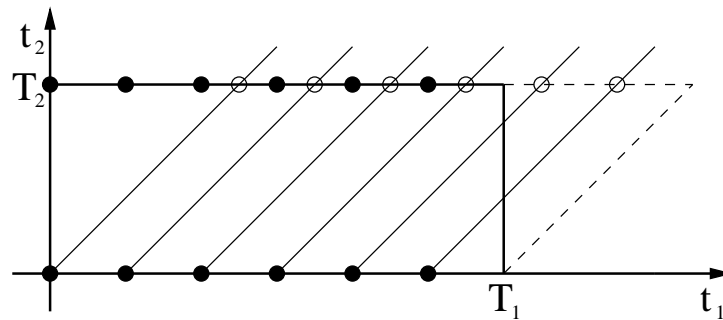


Abbildung 3.3: Prinzip des Charakteristikenverfahrens

X in einer anderen Weise aus den Anfangswerten S bestimmt.

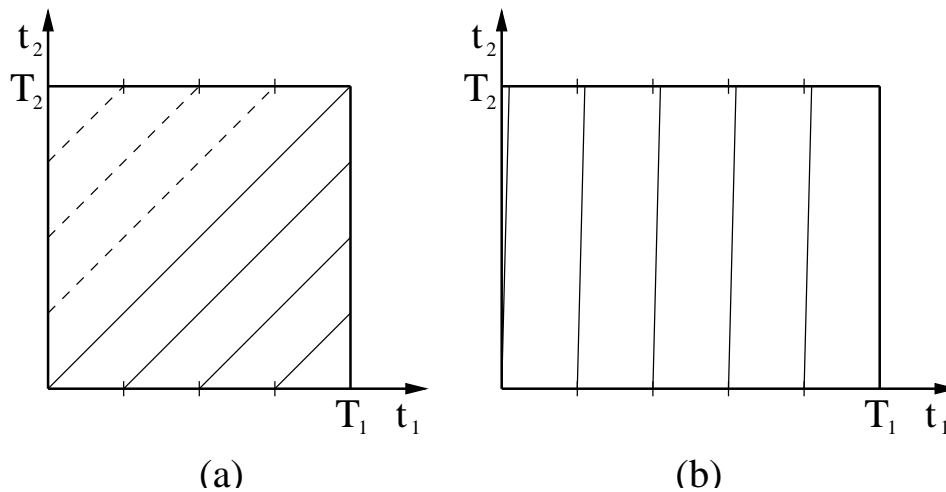
Auch hier sind die mit dieser Methode erhaltenen Lösungswerte in X stetig differenzierbar nach den Startwerten in S . Die Größe y_{j_0} liegt für ein festes $j_0 \in \{1, \dots, n_1\}$ als Lösung der ODE (2.8) zum Anfangswert s_{j_0} nach dem Satz über die Abhängigkeit von Anfangswerten (siehe [7] Kap. I.14) stetig differenzierbar nach diesem vor, falls noch $\frac{\partial q}{\partial x}$ für alle hier betrachteten Lösungswerte regulär ist, was vorausgesetzt wird. Eine Abhängigkeit von y_{j_0} zu anderen Startwerten s_j mit $j \neq j_0$ besteht nicht, d.h. es gilt $\frac{\partial y_{j_0}}{\partial s_j} = 0$ für $j \neq j_0$. Werden dann die Lösungswerte x_j durch eine Polynominterpolation aus den y_j bestimmt, z.B. mit linearer Interpolation, so sind diese stetig differenzierbar nach den Variablen y_j . Durch Verkettung der beiden Abhängigkeiten hat man, daß die Lösungswerte x_j stetig differenzierbar nach den Startwerten s_j sind.

Damit kann das algebraische Gleichungssystem (3.8) mit Verfahren vom Newton-Typ gelöst werden. Die Funktionalmatrix dieses Systems hat wieder die Gestalt

$$\frac{\partial F}{\partial S} = \frac{\partial X}{\partial S} - I \quad (3.9)$$

mit der Einheitsmatrix I .

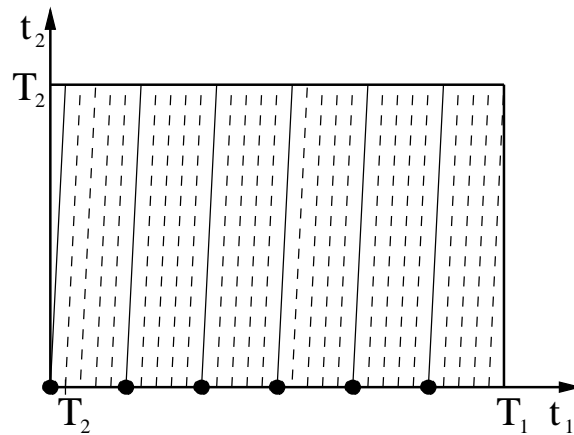
Hier kann aber die Funktionalmatrix $\frac{\partial X}{\partial S}$ sehr günstig berechnet werden und zeigt auch eine Bandstruktur. Dies erklärt sich daraus, daß die gesamte Matrix aus den Blöcken $\frac{\partial x_i}{\partial s_j}$; $i, j = 1, \dots, n_1$ zusammengesetzt ist. Zum einen wird nun für die polynomiale Interpolation eines Lösungswerts x_i im allgemeinen nur auf eine geringe Anzahl der Größen y_j zugegriffen, wie z.B. bei der linearen Interpolation nur auf zwei benachbarte Werte. Dadurch ist bereits $\frac{\partial x_i}{\partial y_j}$ bei festem i nur für wenige, meist aufeinanderfolgende $j \in \{1, \dots, n_1\}$ ungleich der Nullmatrix. Zum anderen kann die Ableitung $\frac{\partial y_i}{\partial s_j}$ für festes i nur bei $i = j$ nicht verschwinden. Damit folgt nach der Kettenregel, daß $\frac{\partial x_i}{\partial s_j}$ bei festem i auch nur für wenige $j \in \{1, \dots, n_1\}$ ungleich der Nullmatrix auftritt.

Abbildung 3.4: Spezialfälle $T_1 = T_2$ und $T_1 \gg T_2$

x_{j_0} . Es ist daher keine Interpolation mehr nötig und zudem zerfällt die Periodizitätsbedingung (3.8) in n_1 separate Randwertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen, wodurch die Funktionalmatrix von F Blockdiagonalstruktur annimmt.

Für den Fall, daß eine Periode viel größer gegenüber der anderen vorliegt, welcher erst, wie in Kapitel 1 ausgeführt ist, eine Problemstellung in Form einer MPDE gegenüber der korrespondierenden ODE vorteilhaft macht, kann man analoges erhalten. Es sei o.B.d.A. $T_1 \gg T_2$. Die charakteristische Grundkurve zu einem der Punkte $(t_{1j_0}, 0)$ mit $j_0 \in \{1, \dots, n_1\}$ verläuft durch die Stelle $(t_{1j_0} + T_2, T_2)$. Da der Abstand der Punkte $(t_{1j}, T_2); j = 1, \dots, n_1$ zueinander in diesem Fall meist viel größer im Vergleich zu T_2 gewählt ist, wie es in Abbildung 3.4 b verdeutlicht wird, lohnt sich eine Interpolation nicht und es reicht aus, den jeweils benachbarten Lösungswert y_{j_0} in $(t_{1j_0} + T_2, T_2)$ für den Wert x_{j_0} in (t_{1j_0}, T_2) zu übernehmen. Dabei hängt der entstehende Fehler jedoch nur vom Verhalten der Lösung in diesem Bereich ab und kann nicht durch Erhöhung der Anzahl der Anfangswerte reduziert werden. Auch hierbei geht dann die Periodizitätsbedingung (3.8) in ein System aus n_1 unabhängigen Randwertproblemen gewöhnlicher Differentialgleichungen über und die Funktionalmatrix von F nimmt wieder Blockdiagonalstruktur an.

Bei diesen beiden Fällen ist daher das Charakteristikenverfahren vereinfacht und insbesondere der Rechenaufwand bei den zugehörigen linearen Gleichungssystemen erheblich reduziert.

Abbildung 3.5: Relation im Fall $T_1 \gg T_2$

Ist man an der Lösung der zur MPDE korrespondierenden ODE interessiert, so sind die Beziehungen zwischen diesem Charakteristikenverfahren und der direkten Behandlung der ODE für den Fall $T_1 \gg T_2$ bemerkenswert. Die Verhältnisse hierbei skizziert die Abbildung 3.5.

Nach Satz 1 über die MPDE-ODE-Relation enthalten die Geraden der Steigung 1 im Definitionsgebiet einer Lösung der MPDE gerade Lösungswerte der zugehörigen ODE. Betrachtet man dabei die Hauptdiagonale $t_1 = t_2$, so kann man diese aufgrund der Periodizität in t_2 mit verschobenen Diagonalen im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ identifizieren. Diese sind in Abbildung 3.5 durch gestrichelte Linien dargestellt. Bei einer Integration der ODE müßte allen diesen Geradenstücken gefolgt werden, wobei auf jedem einzelnen eine Schwingung zu erfassen wäre.

Ziel ist es nun, zu wenigen Punkten in dem besagten Rechteck eine geeignete Näherungslösung der MPDE zu bestimmen und mit dieser die Lösung der ODE auf den Diagonalen dennoch hinreichend genau zu interpolieren. Beim Charakteristikenverfahren geschieht dies dadurch, daß nur zu einigen Anfangswerten die charakteristischen Systeme integriert werden. In Abbildung 3.5 sind die zugehörigen charakteristischen Grundkurven mit durchgezogenen Linien gezeichnet, die jeweils eines der obigen Geradenstücke überdecken. Nach den Aussagen in Abschnitt 2.2 entsprechen diese charakteristischen Systeme der ursprünglichen ODE. Somit kann diese Methode dahingehend interpretiert werden, daß man die ODE nicht über das ganze Intervall, auf dem die Lösung zu bestimmen ist, integriert, sondern nur Teilintervalle mit geeigneten Randbedingungen behandelt. Die Werte in den Zwischenbereichen können dann bei einem gleichmäßigen Verhalten der Lösung der MPDE aus den gegebenen Größen mit akzeptabler Genauigkeit interpoliert werden, wobei man ihre Lage im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ berücksichtigt.

3.4 Konvergenztheorie der Verfahren

Den drei in diesem Abschnitt dargestellten Verfahren liegt ein gemeinsames Prinzip zugrunde, welches nun beschrieben werden soll.

Man will an vorgegebenen diskreten Stellen im Definitionsbereich die zugehörigen Werte der m -periodischen Lösung bestimmen. Dies waren bei der Finiten Differenzen Methode die Funktionswerte in Gitterpunkten und bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung sowie dem Charakteristikenverfahren gewisse Anfangswerte. Diese Werte der exakten m -periodischen Lösung seien in dem Spaltenvektor $\hat{X} \in \mathbb{R}^n$ zusammengefaßt.

Zu ihrer näherungsweise Bestimmung wird nun bei den Verfahren jeweils eine Funktion $F : G \rightarrow \mathbb{R}^n$, $G \subset \mathbb{R}^n$ aufgestellt. Es ist F , ausgewertet an den exakten Daten \hat{X} , dann $F(\hat{X}) = E$, wobei $E \in \mathbb{R}^n$ einen Spaltenvektor bezeichnet, der die Verfahrensfehler enthält.

Dabei besteht E in der Finiten Differenzen Methode aus den Diskretisierungsfehlern bei der Ersetzung der Differentialquotienten, bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung aus den Fehlern durch die Semidiskretisierung sowie durch Interpolation und im Charakteristikenverfahren aus Fehlern bei der Interpolation der Endwerte. Hier wird bei den letzten beiden Verfahren davon ausgegangen, daß die zur Auswertung von F benötigten gewöhnlichen Differentialgleichungen exakt gelöst werden können. Dies ist im allgemeinen nicht möglich, wodurch man F wiederum nur näherungsweise berechnen kann. Die dabei entstehenden Fehler gehen aber in der Theorie hier nicht in den Fehlervektor E ein. Durch eine Störungsrechnung können diese Fehler noch zusätzlich einbezogen werden.

Um nun \hat{X} näherungsweise zu erhalten, löst man das Nullstellenproblem $F(X) = 0$ für $X \in \mathbb{R}^n$. Die Existenz und Eindeutigkeit dieser Nullstelle sei vorausgesetzt. Bei einem regelmäßigen Verhalten der Funktion F kann man erwarten, daß mit der Lösung \tilde{X} des Nullstellenproblems dann $\tilde{X} \approx \hat{X}$ gilt, solange man die Verfahrensfehler in E klein hält. Dies ist motiviert durch folgenden Satz, wobei man o.B.d.A. die euklidische Norm auf dem \mathbb{R}^n betrachte.

Satz 7 *Ist $F : G \rightarrow \mathbb{R}^n$, $G \subset \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar und injektiv und zudem eine ganze Umgebung von 0 im Bild von F enthalten, dann gibt es $c, r > 0$, so daß für die eindeutige Nullstelle \tilde{X} von F hier $\|\tilde{X} - \hat{X}\| \leq c \|F(\hat{X})\|$ für alle \hat{X} mit $\|F(\hat{X})\| < r$ gilt.*

Beweis :

Nach Voraussetzung existiert eine offene Kugel $B(0, \rho)$ um den Nullpunkt mit Radius $\rho > 0$, welche ganz im Bild von F liegt. Damit kann man zu einem r mit $0 < r < \rho$ übergehen. Ist dann $\|F(\hat{X})\| < r$, so liegt die ganze Verbindungsstrecke zwischen diesem Funktionswert und dem Nullpunkt in $B(0, \rho)$. Da F injektiv und stetig differenzierbar ist, existiert die Umkehrabbildung F^{-1} und ist ebenfalls stetig differenzierbar. Durch Anwendung des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung (siehe [14]) erhält man dann mit einem $\theta \in [0, 1]$ die

Abschätzung:

$$\begin{aligned}\|\hat{X} - \tilde{X}\| &= \|F^{-1}(F(\hat{X})) - F^{-1}(0)\| = \left\| \frac{\partial F^{-1}}{\partial X}(\theta F(\hat{X})) F(\hat{X}) \right\| \\ &\leq \left\| \frac{\partial F^{-1}}{\partial X}(\theta F(\hat{X})) \right\| \|F(\hat{X})\|\end{aligned}$$

Die Norm der Funktionalmatrix läßt sich nun gleichmäßig auf der kompakten Kugel vom Radius r um den Nullpunkt durch eine Konstante c beschränken. \square

Da F in allen drei Verfahren als stetig differenzierbar nachgewiesen wird, ist eine Grundvoraussetzung für die Lösung dieses Nullstellenproblems mit Verfahren vom Newton-Typ gegeben. Über die Konvergenz dieser Methoden liegen jeweils Sätze vor, wie man sie z.B. in [9] findet. Teilweise garantieren diese Sätze dann unter verschärften Voraussetzungen an die Eigenschaften der Funktion F auch die Existenz und Eindeutigkeit einer Nullstelle.

Als Beispiel sei hier der Satz von Newton-Kantorovich angeführt, der die Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahrens beschreibt. Dabei ist $B(X, r)$ die offene Kugel um X mit Radius r und es wird die euklidische Norm verwendet.

Satz 8 (Newton-Kantorovich) Sei $F : G \rightarrow \mathbb{R}^n$, $G \subset \mathbb{R}^n$ auf einer konvexen Teilmenge $C \subset G$ stetig differenzierbar und erfülle für ein $X_0 \in C$, zu dem die Funktionalmatrix invertierbar ist, die Bedingungen

- $\left\| \frac{\partial F}{\partial X}(X) - \frac{\partial F}{\partial X}(Y) \right\| \leq \alpha \|X - Y\|$ für alle $X, Y \in C$
- $\left\| \frac{\partial F}{\partial X}(X_0)^{-1} \right\| \leq \beta$
- $\left\| \frac{\partial F}{\partial X}(X_0)^{-1} F(X_0) \right\| \leq \gamma$

Mit den Konstanten $h := \alpha\beta\gamma$ und $r_{1/2} := \frac{\gamma}{h}(1 \mp \sqrt{1 - 2h})$ gilt dann:

Falls $h \leq \frac{1}{2}$ und $\overline{B(X_0, r_1)} \subset C$ ist, so besitzt F genau eine Nullstelle \tilde{X} in $C \cap B(X_0, r_2)$ und die Folge $\{X_k\}$ aus dem Newton-Raphson-Verfahren gegeben durch

$$X_{k+1} = X_k - \frac{\partial F}{\partial X}(X_k)^{-1} F(X_k)$$

zu X_0 als Startwert existiert, ist in $B(X_0, r_1)$ enthalten und konvergiert gegen \tilde{X} .

Die dabei genannten Voraussetzungen an die Funktion F sind im allgemeinen nicht nachprüfbar, da diese meist nicht als expliziter Ausdruck vorliegt, sondern selbst nur näherungsweise zu einzelnen Argumenten bestimmt werden kann. Hier läßt sich z.B. nur bei der Finiten Differenzen Methode eine geschlossene Form von F mit Funktionen aus der MPDE angeben. Für die Hierarchische Randwertproblemlösung und das Charakteristikenverfahren jedoch ist F nur durch das Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen auswertbar.

Die Konvergenzsätze sind meist jedoch nur hinreichend und nicht notwendig, d.h. selbst wenn ihre Voraussetzungen nicht erfüllt sind, können die Verfahren dennoch zu einer Lösung führen.

Man muß daher an das Problem die Forderung stellen, daß die besagte Nullstelle existiert und eindeutig ist. Es wird also auch problemabhängig sein, ob Konvergenz eintritt oder nicht.

Besonders günstig erweist es sich, wenn die Funktionen q und f aus dem System der MPDE affin-linear sind. Dann besitzt nämlich die Funktion F aus den Verfahren die Gestalt $F(X) = AX + B$ mit einer konstanten Matrix A und einem konstanten Vektor B .

Dies ist für die Finite Differenzen Methode trivial. Bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung und dem Charakteristikenverfahren folgt es daraus, daß hier die bei der Semidiskretisierung entstehenden gewöhnlichen Differentialgleichungen bzw. das charakteristische System linear sind, welche jeweils die Funktion F bestimmen. Dadurch sind auch die bei der numerischen Lösung dieser impliziten Differentialgleichungen durch ein Integrationsverfahren auftretenden algebraischen Gleichungssysteme linear.

Das Newton-Raphson-Verfahren konvergiert damit in nur einem Schritt für beliebige Startwerte gegen die gesuchte Nullstelle von F . Zudem ist die dazu notwendige Bestimmung der Funktionalmatrix von F durch numerische Differentiation unproblematisch, da sich für beliebige Schrittweite die exakten Größen ergeben. Desweiteren gilt dies ebenfalls bei der Behandlung der inneren Randwertprobleme in der Hierarchischen Randwertproblemlösung, da in diesem Fall, wie bereits oben erwähnt, die zugehörige Differentialgleichung linear ist.

3.5 Vergleich der Verfahren

Die drei in diesem Kapitel erläuterten Verfahren zur numerischen Bestimmung der m -periodischen Lösung einer MPDE sollen jetzt von ihrer Theorie her verglichen werden. Dabei sei betont, daß die hier beschriebenen Varianten betrachtet sind. Mögliche Modifikationen könnten ein anderes Verhalten ergeben.

Die Finite Differenzen Methode (FDM) behandelt die MPDE als partielle Differentialgleichung direkt. Bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung (HRL) und dem Charakteristikenverfahren (CHV) wird das Problem auf die Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungssystemen zurückgeführt.

Alle drei Verfahren beruhen, wie im letzten Abschnitt dargestellt ist, auf der Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems. Daher sind die Eigenschaften dieses Gleichungssystems entscheidend für die Bestimmung der Näherungslösung und deren Güte.

Bei der FDM wird die Näherung auf einem Gitter durch Diskretisierung berechnet. Dadurch liegt naturgemäß ein sehr großes, dünn besetztes Gleichungssystem vor, woraus ein hoher Speicherplatzbedarf resultiert. In der HRL und dem CHV werden nur gewisse Anfangswerte näherungsweise bestimmt, aus denen dann gesuchte Lösungswerte vereinfacht, d.h. ohne das ursprüngliche Gleichungssystem wieder heranzuziehen, erhalten werden können. Damit ist die Zahl der Unbekannten gering, also der Speicherplatzbedarf niedrig.

Wie bereits gesagt, werden in der FDM alle m Differentialquotienten aus der MPDE diskretisiert. Bei der HRL diskretisiert man $m - 1$ dieser Differentialquo-

tienten, um letztlich eine gewöhnliche Differentialgleichung behandeln zu können. Das Charakteristikenverfahren jedoch benutzt direkt die Struktur des Informationstransports in der MPDE und gelangt daher ohne eine Diskretisierung bereits zu einem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem, mit welchem die Problemstellung gelöst werden kann.

Der Aufwand der Verfahren hängt mit davon ab, wie die Periodizitätsbedingungen aus den m Dimensionen jeweils eingehen. In der FDM werden mittels der Periodizitäten Unbekannte aus dem Gleichungssystem ausgeräumt und diese Vorgaben damit effizient eingesetzt. Bei der HRL muß man die Periodizität in der Hierarchie sukzessiv für jede Dimension einzeln erreichen, wodurch der Aufwand sehr groß ist. Im CHV braucht von der Theorie her nur die Periodizität in einer Dimension berücksichtigt zu werden, während man die Periodizitäten in den anderen $m - 1$ Dimensionen bereits miterhält, was gegenüber der HRL erheblich günstiger ist.

Bei der konkreten Behandlung des nichtlinearen Gleichungssystems muß die zugehörige Funktion, deren Nullstelle man bestimmen will, ausgewertet werden. Diese setzt sich in der FDM aus Funktionen von der MPDE zusammen. Die Verdichtung der Information auf die Anfangswerte führt bei der HRL und dem CHV dazu, daß jene Funktion aufwendiger zu berechnen ist, nämlich durch Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen, welche die jeweiligen Informationen aus den Anfangswerten propagieren. Dazu sind dann in der HRL Randwertprobleme solcher Gleichungen zu lösen, wodurch diese Auswertung sehr zeitaufwendig und das Verfahren anfälliger ist, weil sich hier zusätzliche Konvergenzprobleme ergeben können. Für das CHV braucht man dagegen nur Anfangswertprobleme zu behandeln, welche weniger aufwendig sind.

In allen drei Verfahren liegt eine stetig differenzierbare Funktion bei der Nullstellenbestimmung vor, wodurch Methoden vom Newton-Typ auf diese nichtlinearen Gleichungen angewendet werden können. Die dadurch auftretende Funktionalmatrix unterscheidet sich bei den drei Verfahren entsprechend dem zugrunde liegenden Gleichungssystem und der Art, wie sie bestimmt werden kann. Für die FDM ist sie extrem groß, dünn besetzt und kann im wesentlichen nur durch numerische Differentiation der in der MPDE vorliegenden Funktionen berechnet werden. In der HRL wird die Funktionalmatrix aus numerischer Differentiation der korrespondierenden Funktion erhalten, wodurch der Rechenaufwand sehr hoch ist, da viele Funktionsauswertungen dieser ohnehin schon aufwendig zu berechnenden Funktion nötig sind. Die Funktionalmatrix ist dadurch voll besetzt, aber kleiner als in der FDM, da die Unbekannten hier nur die Anfangswerte sind. Für das CHV allerdings kann die Funktionalmatrix leicht bei der Auswertung der zugehörigen Funktion miterhalten werden, indem man in den Integrationen der charakteristischen Systeme die korrespondierenden Matrixdifferentialgleichungen mitlöst, aus welchen sich die Sensitivitätsmatrizen, die in der Funktionalmatrix auftreten, ergeben. Zudem ist diese Funktionalmatrix von der Theorie her dünn besetzt und hat die gleichen Größenverhältnisse wie bei der HRL, da wieder-

um nur Anfangswerte betrachtet werden. Selbst wenn man eine günstigere Art der Bestimmung der Funktionalmatrix für die HRL finden würde, dürfte diese Berechnung immer noch aufwendiger sein als beim CHV, denn die korrespondierende Funktion ist dort schon deutlich kostspieliger auszuwerten als im CHV. Insgesamt zeigen sich also bei verschiedenen Kriterien unterschiedliche Eigenschaften der drei Verfahren. Letztendlich werden aber wohl die Konvergenzeigenschaften der Methoden bei Problemen in der Anwendung darüber entscheiden, welches Verfahren vorzuziehen ist.

Kapitel 4

Implementierung der Verfahren

Im folgenden wird nun beschrieben, auf welche Weise die drei Methoden aus Kapitel 3 implementiert sind und welche Parameter man zu ihrer Ausführung festzulegen hat.

Dabei sind alle drei Verfahren zur näherungsweise Bestimmung der biperiodischen Lösung einer MPDE mit zwei Zeitraten konstruiert, welche aus k einzelnen Gleichungen besteht. Die MPDE hat daher die Gestalt

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1} + \frac{\partial q(x)}{\partial t_2} = f(x) + b(t_1, t_2), \quad (4.1)$$

wobei wieder $q : G_q \rightarrow \mathbb{R}^k$ und $f : G_f \rightarrow \mathbb{R}^k$ stetig differenzierbare Funktionen auf den Gebieten $G_q, G_f \subset \mathbb{R}^k$ sind und $b : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^k$ stetig bzw. stetig differenzierbar, sowie $x : \mathbb{R}^2 \rightarrow G_q \cap G_f$ die gesuchte biperiodische Lösung. Die beiden Perioden T_1 und T_2 seien gegeben.

4.1 Implementierung der Finiten Differenzen Methode

Zur Berechnung von Näherungswerten der biperiodischen Lösung der MPDE auf einem zweidimensionalen Gitter ist das Finite Differenzen Verfahren als Funktion in MATLAB implementiert. Diese befindet sich in dem M-File `fdverf.m` und kann direkt unter MATLAB aufgerufen werden.

Es wird dabei genau die in Abschnitt 3.1 beschriebene Methode angewendet, nämlich die Diskretisierung der MPDE auf einem uniformen Gitter mittels des zentrierten Differenzenquotienten. Das Gitter besteht also aus den Punkten

$((j-1)(T_1/n), (i-1)(T_2/m))$ für $j = 1, \dots, n$ und $i = 1, \dots, m$

im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$, wobei die Anzahlen n und m wählbar sind. Daraus erhält man unter Verwendung der Biperiodizität dann ein System aus nmk algebraischen Gleichungen für die Näherungslösungen in den Gitterpunkten, wenn k die Anzahl der Gleichungen in der MPDE ist.

Diese nichtlinearen Gleichungen werden hier näherungsweise mit dem Newton-Raphson-Verfahren (siehe [9]) gelöst. Die Startwerte für die Iteration sind dabei vorzugeben. In einem Iterationsschritt wird zuerst die Funktion, deren Nullstelle zu bestimmen ist, an der jeweils vorliegenden Näherung ausgewertet. Dabei werden Auswertungen der Funktionen q und f zu den aktuellen Näherungswerten zwischengespeichert, weil diese auch bei der Berechnung der Funktionalmatrix auftreten. Die Gestalt der Funktion zur Nullstellenbestimmung ist in Abschnitt 3.1 erläutert. Die Einträge in den zu diesen Funktionswerten gehörenden Vektor erfolgen so, daß zunächst alle Auswertungen der Funktionen f und b eingeschrieben werden. Darauf folgen die Werte aus der Funktion q , wobei jede gespeicherte Auswertung einzeln aufgerufen und dann in alle entsprechenden Stellen mit den jeweiligen Vorfaktoren hinzugefügt wird. Aufgrund der besonderen Gestalt der Funktion zur Nullstellenbestimmung, die durch die Identifizierung der Gitterpunkte mit der Periodizität in beiden Dimensionen entsteht, ergibt sich hier eine bestimmte Schleifenstruktur bei diesem Vorgehen.

Nach der Funktionsauswertung wird die Maximumnorm des Ergebnisses, welches mit dem Residuum des Gleichungssystems identisch ist, berechnet. Wenn sich dieser Fehler kleiner als eine vorgegebene Genauigkeitsschranke *epsilon* erweist, so wird die aktuelle Näherung akzeptiert und die Iteration beendet. Ein Abbruch der Iteration mit Ausgabe der Näherung erfolgt an dieser Stelle auch, falls bereits eine vorgegebene Maximalzahl *itermax* an Newtonschritten durchgeführt ist.

Trifft beides nicht zu, so wird mit der Bestimmung der Funktionalmatrix fortgefahren. Diese besitzt die in Abschnitt 3.1 dargestellte Blockstruktur. Die einzelnen Blöcke sind bis auf Vorfaktoren Funktionalmatrizen der Funktionen q und f in den jeweiligen Näherungswerten. Man erhält diese Ableitungen durch numerische Differentiation, wobei hier der gewöhnliche Differenzenquotient mit der Schrittweite *delta* verwendet wird. Dazu können die gespeicherten Werte der Funktionen q und f bei der Bildung des Differenzenquotienten mitverwendet werden. Wiederum erfolgen zunächst alle Auswertungen und Eintragungen der Ableitungen bezüglich f . Dann wird jeweils eine Ableitung zu q berechnet und in alle Stellen, an denen sie auftritt, mit den entsprechenden Vorfaktoren eingeschrieben. Aus der Gestalt der gesamten Funktionalmatrix ergibt sich wieder die besagte Schleifenstruktur bei dieser Durchführung.

Nun kann die Newtonkorrektur vorgenommen werden. Dazu ist im wesentlichen ein großes, dünn besetztes lineares Gleichungssystem zu lösen. Daher wird die Funktionalmatrix als sparse matrix gespeichert. Die Lösung des zugehörigen Gleichungssystems erfolgt jedoch direkt mittels einer LR-Zerlegung.

Nach der Newtonkorrektur setzt das Programm den Iterationsschrittezähler hoch und fährt mit der Auswertung der Funktion an der neuen Näherung fort. Alles weitere wiederholt sich dann wie bereits beschrieben.

Die Struktur dieses Programms ist als Flußdiagramm in der Abbildung 4.1 dargestellt.

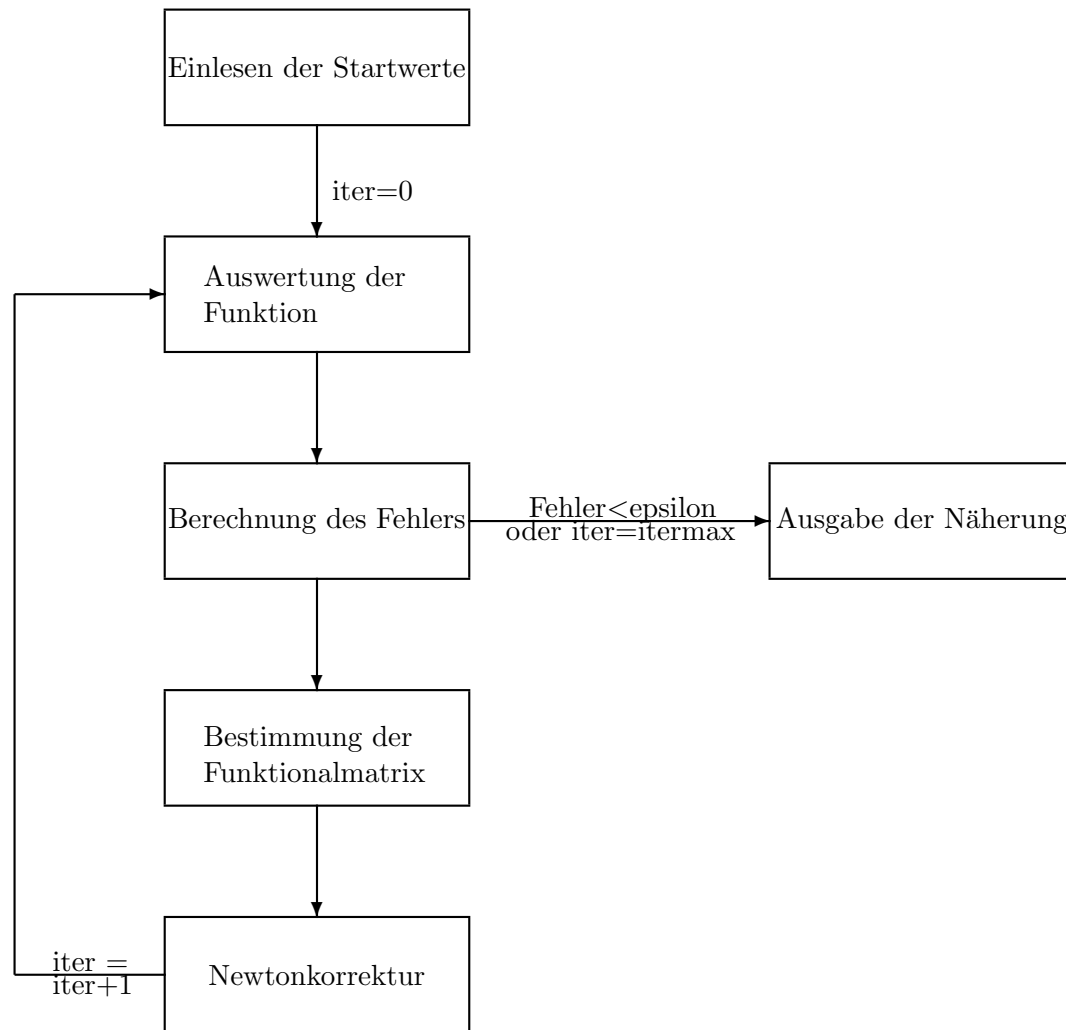


Abbildung 4.1: Flußdiagramm zu fdverf

Der Aufruf der Funktion fdverf unter MATLAB erfolgt in der Form :

$$v = fdverf(n, m, k, itermax, epsilon, delta, T_1, T_2, u)$$

Die Parameter sind dabei zum Teil die bereits erwähnten Größen und bedeuten im einzelnen :

n	Anzahl der Gitterschichten in der ersten Veränderlichen
m	Anzahl der Gitterschichten in der zweiten Veränderlichen
k	Anzahl der Gleichungen in der MPDE
$itermax$	Maximalzahl der Iterationsschritte
$epsilon$	Genauigkeitsvorgabe
$delta$	Schrittweite bei der numerischen Differentiation der Funktionen q und f aus der MPDE
T_1	Periode in der ersten Veränderlichen
T_2	Periode in der zweiten Veränderlichen
u	Spaltenvektor mit den Startwerten
v	Spaltenvektor mit den Näherungslösungen

Der Spaltenvektor u hat die Dimension nmk und muß in der Komponente $(i-1)nk + (j-1)k + l$ mit $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$, $1 \leq l \leq k$ einen Startwert für die l -te Komponente des Lösungswerts im Gitterpunkt mit den Koordinaten $((j-1)(T_1/n), (i-1)(T_2/m))$ enthalten. Der Spaltenvektor v ist auch von der Dimension nmk und besitzt in seinen Komponenten die Näherungslösungen zu den Gitterpunkten in der gleichen Reihenfolge wie in u . Dadurch kann v als Vektor für die Startwerte zu weiteren Iterationen benutzt werden. Die Funktionen q , f und b aus der MPDE müssen vom Anwender als weitere MATLAB-Funktionen mit den Bezeichnungen nlq , nlf und $beta$ bereitgestellt werden. Dabei sind nlq und nlf von der Form $y = nlq(x)$ bzw. $y = nlf(x)$, wobei x und y Spaltenvektoren der Dimension k sind, und $beta$ von der Gestalt $y = beta(t_1, t_2)$ mit einem Spaltenvektor y der Dimension k und reellen Argumenten $t_1 \in [0, T_1[$, $t_2 \in [0, T_2[$. Aus den Files $nlq.m$, $nlf.m$ und $beta.m$ kann näheres über die Form dieser Funktionen entnommen werden.

4.2 Implementierung der Hierarchischen Randwertproblemlösung

Um die Anfangswerte der biperiodischen Lösung zur MPDE (4.1) näherungsweise mittels der Hierarchischen Randwertproblemlösung zu bestimmen, ist das in Abschnitt 3.2 beschriebene Verfahren im Programm HRWP in der Programmiersprache FORTRAN 77 implementiert.

Das Hauptprogramm liest die benötigten Parameter aus einer Datei ein, deren Name bei der Ausführung über die Tastatur eingegeben wird. Danach wird die Subroutine HIERRWP aufgerufen, welche die Lösung des äußeren Randwertproblems, also die Berechnung der Anfangswerte, durchführt. Dies geschieht iterativ über die Behandlung des zugehörigen nichtlinearen Gleichungssystems (3.6) mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Die Anzahl der Anfangswerte ANZ ist dafür festzulegen, die dann zu den Punkten $((j-1)T_1/ANZ, 0)$ für $j = 1, \dots, ANZ$ gehören und aus jeweils DMS vielen Komponenten bestehen, wenn DMS die

Anzahl der Gleichungen in der MPDE ist. Für die Iteration sind die Startwerte in einer Datei vorzugeben. Die beim Newton-Raphson-Verfahren auftretende Funktionalmatrix wird durch numerische Differentiation mit dem gewöhnlichen Differenzenquotienten zur Schrittweite SIGMA bestimmt, d.h. es wird jede Komponente der Anfangswerte einzeln gestört und dazu die Funktion zur Nullstellenbestimmung ausgewertet, um den Differenzenquotienten bilden zu können. Die entstehenden linearen Gleichungssysteme werden direkt gelöst. Falls die Funktionalmatrix sich dabei als singular bezüglich der Rechengenauigkeit erweist, so erfolgt ein Abbruch des Programms mit einer entsprechenden Meldung. In jedem Iterationsschritt wird die Maximumnorm des Residuums beim nichtlinearen Gleichungssystem zu der aktuellen Näherung berechnet und falls dieser Fehler unter einer vorgegebenen Genauigkeitsschranke EPSA liegt, beendet das Programm die Iteration und gibt die Näherung in einer Datei aus. Die Iteration wird ebenfalls mit der Ausgabe der aktuellen Näherung gestoppt, wenn die maximale Schrittzahl IMAXA erreicht ist. Diese Ausgabe erfolgt durch die Subroutine AUSGABE. Die Abfolge hier entspricht im wesentlichen der des in Abbildung 4.1 dargestellten Flußdiagramms.

Um die Funktion der Nullstellenbestimmung auszuwerten, müssen schichtweise innere Randwertprobleme gelöst werden, wie es im Abschnitt 3.2 beschrieben ist. Dazu wird die Subroutine EVOLUT aufgerufen, welche die Integration der jeweiligen Anfangswerte nach diesem Verfahren bis zu den Endwerten hin koordiniert, also sozusagen die Evolution der Anfangswerte veranlaßt. Es ist dabei die Anzahl der äquidistanten Schichten SZHL für die Semidiskretisierung vorzugeben, wobei die Schicht mit den Anfangswerten nicht dazuzurechnen ist. Die Semidiskretisierung wird nach den BDF-Verfahren (siehe [10]) durchgeführt, d.h. der Differentialquotient nach t_2 wird durch diese Differenzenformeln ersetzt. Die erste Schicht enthält die bereits gegebenen Näherungen der Anfangswerte, auf die dann zur Berechnung der zweiten Schicht nach dem BDF-1-Verfahren, also dem impliziten Eulerverfahren, zurückgegriffen wird. Für die dritte Schicht findet das BDF-2-Verfahren Verwendung, welches die ersten beiden Schichten mitbenutzt und von zweiter Ordnung ist. Alle weiteren Schichten werden dann unter Benutzung der BDF-3-Formel bestimmt, die von dritter Ordnung approximiert. Dazu werden für die Berechnung einer aktuellen Schicht jeweils Lösungswerte der letzten drei Schichten, genauer deren Werte unter der Funktion q , auf die durch die Formel zurückgegriffen wird, zwischengespeichert. Für die Umrechnung der Näherungslösung mit q und deren Abspeicherung dient die Subroutine QLSGBE. Die Lösung des inneren Randwertproblems in einer Schicht erfolgt mit der Subroutine RWPLSG. Hier wird dieses periodische Randwertproblem mit dem einfachen Schießverfahren (siehe [10]) behandelt, d.h. aus dem zugehörigen nichtlinearen Gleichungssystem der Periodizitätsbedingung bestimmt man einen Anfangswert in der Schicht, aus dem dann die gesuchte Lösungsfunktion erhalten wird. Dies geschieht wieder iterativ mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Als Startwert für diese Newtoniteration wird der entsprechende Näherungswert aus

der vorhergehenden Schicht verwendet. In jedem Schritt berechnet sich der Fehler als Maximumnorm des Residuums von der aus der Periodizitätsbedingung folgenden Gleichung zu der aktuellen Näherung. Ist dieser Fehler dann kleiner als die Genauigkeitsschranke EPSI, so wird die Näherung akzeptiert. Erreicht man die Genauigkeit nicht innerhalb der vorgegebenen Iterationsschrittzahl IMAXI, so erfolgt ein Abbruch der Programmausführung mit entsprechender Meldung. Die linearen Gleichungssysteme werden ebenfalls direkt gelöst und bei singulärer Funktionalmatrix wird das Programm mit zugehöriger Fehlermeldung abgebrochen.

Um die Funktion zur Nullstellenbestimmung in diesen inneren Randwertproblemen und ihre korrespondierende Funktionalmatrix auszuwerten, sind Anfangswertprobleme der ODE in einer Schicht und der zugehörigen Matrixdifferentialgleichung für die Sensitivitätsmatrix (siehe Lemma 4) zu lösen. Hierzu ist die Subroutine ODELSG bereitgestellt. Diese bestimmt näherungsweise die Lösungen der ODE in einer Schicht zu gegebenem Anfangswert und der Sensitivitätsmatrix zu diesem Anfangswert durch Diskretisierung der Differentialquotienten. Als Differenzenverfahren dient dazu die Trapezregel, die von zweiter Ordnung konvergent ist und auch einen geringen Fehlerkoeffizienten im Vergleich zu anderen Formeln besitzt. Zudem ist dieses Verfahren A-stabil (siehe [8] Kap. IV.3), d.h. es ist für steife Differentialgleichungen geeignet, welche häufig in der Schaltungssimulation auftreten. Außerdem hat dieses implizite Verfahren hier kaum mehr Aufwand als eine explizite Formel, da auch dort algebraische Gleichungssysteme zu lösen wären, weil die ODE im allgemeinen implizit ist. Die Differentialgleichungen werden hier äquidistant integriert, wobei die Schrittzahl stets der Anzahl der Anfangswerte ANZ entspricht, da dann nur auf bereits berechnete Lösungswerte in den vorhergehenden Schichten zurückgegriffen wird, wodurch keine Interpolation mehr nötig ist. Durch die Diskretisierung treten nichtlineare Gleichungssysteme auf, welche wieder iterativ gelöst werden. Dabei erfolgen genau IMAXO Newtonschritte und als Startwert dient der jeweils vorhergehende Lösungswert in der aktuellen Schicht. Die hier benötigten Funktionalmatrizen erhält man durch numerische Differentiation mit dem gewöhnlichen Differenzenquotienten zur Schrittweite DELTA, wobei die Funktionen q und f in der MPDE ausgewertet werden. Dabei resultierende lineare Gleichungssysteme werden direkt gelöst. Da die Matrixdifferentialgleichung linearen Charakter hat, erfordert sie in jedem Integrationsschritt nur die Lösung eines linearen Gleichungssystems. Bei einer äquidistanten Schrittweite sind die Matrizen für das lineare Gleichungssystem in einem Integrationsschritt der Matrixdifferentialgleichung und im ersten Newtonschritt des nächsten Integrationsschritts der ODE identisch, so daß man die entsprechende LR-Zerlegung dieser beiden Teile nur einmal zu berechnen braucht, wodurch sich besonders bei großen Systemen der Rechenaufwand erniedrigt. Diese Identität der Matrizen ist eine Konsequenz aus der impliziten Differenzenformel und wird in [2] erläutert. Speziell für die Trapezregel findet man dies in Anhang A hergeleitet.

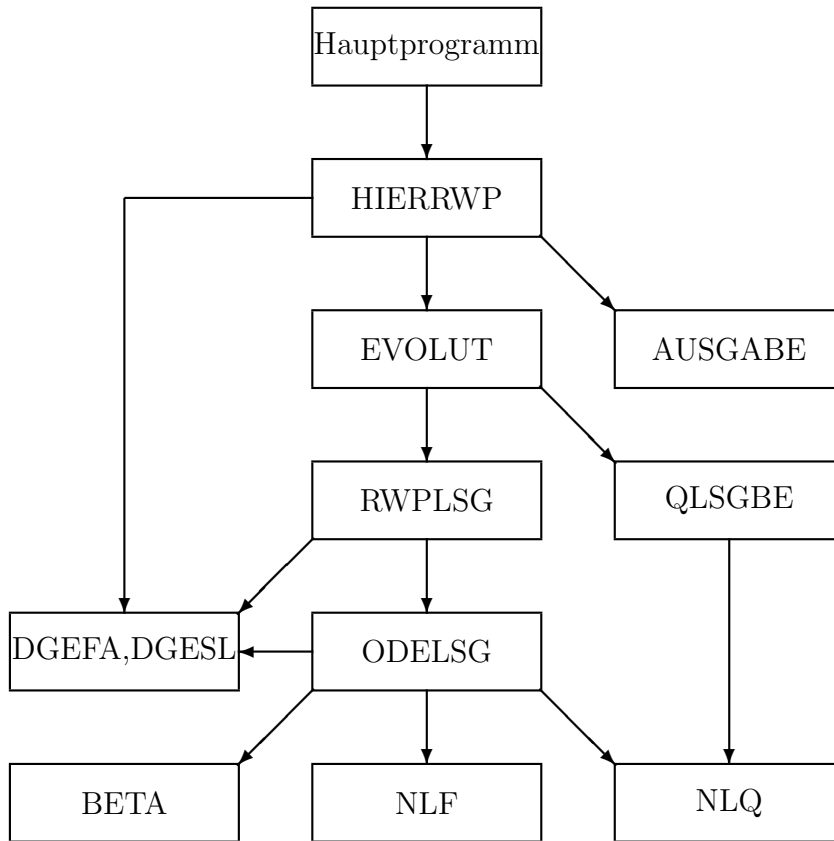


Abbildung 4.2: Programmhierarchie in HRWP

Die Subroutinen ODELSG und QLSGBE greifen auf Funktionen aus der MPDE zurück. Daher müssen die Abbildungen q , f und b als Subroutinen NLQ, NLF und BETA vom Benutzer bereitgestellt und eingebunden werden. Der Aufbau dieser Subroutinen kann den Beispielen im File `funktbsp.f` entnommen werden. Die Funktion b wird bei diesem Verfahren nur im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ ausgewertet, wodurch man BETA nur für diesen Bereich zu definieren braucht.

Lineare Gleichungssysteme, die bei diesem Verfahren auftreten, werden stets direkt mit den LINPACK-Routinen DGEFA und DGESL (siehe [19]) gelöst, die zusammen mit den BLAS-Routinen, auf welche von ihnen zurückgegriffen wird, ebenso einzubeziehen sind. Diese BLAS-Routinen lauten im einzelnen DAXPY, DDOT, DSCAL und IDAMAX. Im File `lgsls.f` sind die Quellcodes der hier benötigten LINPACK- und BLAS-Routinen enthalten und können so mitkompiliert werden.

Das Zusammenspiel der Subroutinen im Programm HRWP ist in Abbildung 4.2 skizziert. Dabei bedeutet ein Pfeil von einem Unterprogramm auf ein anderes, daß das zweite von dem ersten aufgerufen wird. Die BLAS-Routinen sind der Übersichtlichkeit halber nicht aufgeführt.

Die Eingabedatei mit den benötigten Parametern muß diese zeilenweise in der nun beschriebenen Abfolge enthalten.

- INTEGER-Werte :
 - ANZ Anzahl der Anfangswerte
 - DMS Anzahl der Gleichungen in der MPDE
 - SZHL Anzahl der Schichten für die Semidiskretisierung
 - IMAXA Maximalzahl der Iterationsschritte bei der Lösung des äußeren Randwertproblems
 - IMAXI Maximalzahl der Iterationsschritte bei der Lösung der inneren Randwertprobleme
 - IMAXO Anzahl der Iterationsschritte für die Lösung nichtlinearer Gleichungen bei der Integration der ODE

- DOUBLE PRECISION-Werte :
 - EPSA Genauigkeitsvorgabe im äußeren Randwertproblem
 - EPSI Genauigkeitsvorgabe im inneren Randwertproblem
 - SIGMA Schrittweite für die numerische Differentiation zur Berechnung der Funktionalmatrix bei der Lösung des äußeren Randwertproblems
 - DELTA Schrittweite für die numerische Differentiation der Funktionen q und f aus der MPDE
 - PERI1 Periode T_1 in der ersten Veränderlichen
 - PERI2 Periode T_2 in der zweiten Veränderlichen

- CHARACTER*20 :
 - IDATEI Name der Eingabedatei mit den Startwerten
 - ODATEI Name der Ausgabedatei mit den Näherungswerten

Die Eingabedatei mit den Startwerten hat diese zeilenweise so zu enthalten, daß sich in der Zeile der Nummer $(j-1)DMS+l$ mit $1 \leq j \leq ANZ$ und $1 \leq l \leq DMS$ der Startwert für die l -te Komponente des j -ten Anfangswerts befindet. Insgesamt sind dies also $ANZ \cdot DMS$ viele Zahlen, die in doppelter Genauigkeit eingelesen werden.

Die Ausgabedatei beinhaltet die Näherungen für die Anfangswerte zeilenweise in doppelter Genauigkeit mit der gleichen Abfolge. Dadurch kann die Ausgabedatei aus einer Programmdurchführung als Eingabedatei für weitere Durchläufe verwendet werden.

Um nun aus den so erhaltenen Anfangswerten eine Näherungslösung der MPDE auf einem uniformen Gitter im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ nach dieser Methode zu berechnen, ist das Programm HRWPLSG bereitgestellt. Dieses löst allgemein das zu der MPDE gehörige Rand-Anfangswertproblem, wie es in Satz 4 beschrieben ist, zu diskreten Anfangswerten.

Die Gitterpunkte sind dabei $((j - 1)(T_1/ANZ), (i - 1)(T_2/SZHL))$ für $1 \leq j \leq ANZ + 1$ und $1 \leq i \leq SZHL + 1$, wobei ANZ die Anzahl der gegebenen Anfangswerte und SZHL die wählbare Anzahl der äquidistanten Schichten in der Semidiskretisierung ist.

Das Hauptprogramm liest wieder die benötigten Parameter aus einer Datei ein, deren Name bei der Durchführung über die Tastatur eingegeben wird. Die Subroutine AWRWLSG leitet dann die Lösung des Rand-Anfangswertproblems ein, indem, wie bereits beschrieben, aus den Anfangswerten sukzessive periodische Näherungslösungen in den einzelnen Schichten berechnet werden. Diese Evolution der Anfangswerte und die Ausgabe der dabei erhaltenen Näherungswerte wird von der Subroutine EVOLAUSG durchgeführt. Dabei finden wieder Aufrufe der Subroutinen RWPLSG, ODELSG und QLSGBE statt, welche mit jenen aus dem Programm HRWP identisch sind.

Die Funktionen aus der MPDE hat man wieder durch die Subroutinen NLQ, NLF und BETA in das Programm einzubinden. Gleichfalls gilt dies für die LINPACK-Routinen DGEFA und DGESL und die von ihnen benötigten BLAS-Routinen. Die Bedeutungen der Eingabeparameter entsprechen denen im Programm HRWP. Die Eingabedatei mit den Parametern muß diese zeilenweise in der folgenden Anordnung enthalten.

- INTEGER-Werte :
 - ANZ Anzahl der Anfangswerte
 - DMS Anzahl der Gleichungen in der MPDE
 - SZHL Anzahl der Schichten für die Semidiskretisierung
 - IMAXI Maximalzahl der Iterationsschritte bei der Lösung der inneren Randwertprobleme
 - IMAXO Anzahl der Iterationsschritte für die Lösung nichtlinearer Gleichungen bei der Integration der ODE
- DOUBLE PRECISION-Werte :
 - EPSI Genauigkeitsvorgabe im inneren Randwertproblem
 - DELTA Schrittweite für die numerische Differentiation der Funktionen q und f aus der MPDE
 - PERI1 Periode T_1 in der ersten Veränderlichen
 - PERI2 Periode T_2 in der zweiten Veränderlichen
- CHARACTER*20 :
 - IDATEI Name der Eingabedatei mit den Anfangswerten
 - ODATEI Name der Ausgabedatei mit den Näherungslösungen

Die Eingabedatei mit den Anfangswerten hat deren Komponenten zeilenweise in der Reihenfolge zu enthalten, wie sie auch von HRWP ausgegeben wird.

Die Ausgabedatei mit den Näherungswerten besitzt schließlich in der Zeile $(i - 1)(ANZ + 1)DMS + (j - 1)DMS + l$ für $1 \leq i \leq SZHL + 1$, $1 \leq j \leq$

$ANZ + 1$, $1 \leq l \leq DMS$ die Näherung der l -ten Komponente des Lösungswerts im Punkt $((j-1)(T_1/ANZ), (i-1)(T_2/SZHL))$. Diese Zahlen werden in doppelter Genauigkeit eingelesen bzw. ausgegeben.

4.3 Implementierung des Charakteristikenverfahrens

Zur näherungsweise Bestimmung der Anfangswerte der biperiodischen Lösung zur MPDE (4.1) mit Hilfe des Charakteristikenverfahrens liegt das Programm CHARVERF in FORTRAN 77 vor. Dieses verfährt nach dem im Abschnitt 3.3 dargestellten Beispiel.

Die benötigten Parameter werden wieder vom Hauptprogramm aus einer Datei eingelesen, deren Name bei der Ausführung über die Tastatur einzugeben ist. Daraufhin führt die Subroutine CHARKT die Berechnung der Anfangswerte durch, indem sie das Nullstellenproblem (3.8) heranzieht. Diese nichtlineare Gleichung für die Anfangswerte wird mit dem Newton-Raphson-Verfahren iterativ gelöst. Die Anzahl der Anfangswerte ANZ ist vorzugeben, welche dann zu den äquidistanten Punkten $((j-1)T_1/ANZ, 0)$ für $j = 1, \dots, ANZ$ gehören. Ein Anfangswert besitzt DMS viele Komponenten, wobei DMS die Anzahl der einzelnen Gleichungen in der MPDE ist. Man hat die Startwerte für die Komponenten der Anfangswerte bei der Newtoniteration in einer weiteren Datei vorzugeben. Lineare Gleichungssysteme, die bei der Newtonkorrektur auftreten, werden direkt gelöst. Ist die Matrix eines solchen Gleichungssystems singulär bezüglich der Rechengenauigkeit, so wird die Programmausführung mit einer entsprechenden Meldung abgebrochen. In jedem Iterationsschritt berechnet sich der Fehler als Maximumnorm des Residuums der nichtlinearen Gleichung bezüglich der aktuellen Näherung und falls dieser kleiner als eine vorgegebene Genauigkeit EPSLN ist, so wird die Iteration beendet und das Ergebnis in einer Datei ausgegeben. Dies geschieht auch, wenn die maximale Iterationsschrittzahl ITMAX erreicht ist. Zum Schreiben der Ausgabedatei dient die Subroutine AUSGABE. Damit entspricht dieses Programm der in Abbildung 4.1 aufgezeigten Vorgehensweise. Die Auswertung der Funktion zur Nullstellenbestimmung und ihrer Funktionalmatrix wird von der Subroutine INTERPOL durchgeführt. Dies erfolgt genau nach der in Abschnitt 3.3 beschriebenen Weise, d.h. es werden die charakteristischen Systeme entlang der charakteristischen Grundkurven, welche durch die den Anfangswerten zugehörigen Punkten verlaufen, gelöst, wobei die aktuellen Näherungen für die Anfangswerte auch als Anfangswerte bei der Integration dieser Systeme fungieren. Gleichzeitig werden die zugehörigen Matrixdifferentialgleichungen behandelt. Die gesuchten Lösungswerte erhält man dann durch Interpolation aus den mit der Integration der charakteristischen Systeme gewonnenen Endwerten. Dabei kann wahlweise lineare Interpolation aus jeweils den zwei benachbar-

ten Werten oder Übernahme des Werts, der zu einem Punkt mit nächsthöherer t_1 -Koordinate gehört, erfolgen. Letzteres ist bei den in Abschnitt 3.3 erwähnten Spezialfällen von Bedeutung. Die Variable IPMTH dient zur Wahl der Interpolationsmethode und führt bei der Zuweisung 0 zur Übernahme eines Werts und bei 1 zu linearer Interpolation. In der Interpolation muß die Verschiebung der zu den Endwerten aus der Integration gehörigen Punkten gegenüber den zu den gesuchten Lösungswerten korrespondierenden Punkten berücksichtigt werden, sowie die Periodizität in t_1 zur Identifizierung von Punkten benutzt werden. Damit dies vereinfacht geschehen kann, ist die Periode T_1 mindestens so groß zu wählen wie die Periode T_2 , was aber keine Einschränkung bedeutet. Die Subroutine INDBER berechnet daher den ersten Index der gesuchten Lösungswerte, der mit den ersten beiden Endwerten aus der Integration linear interpoliert werden kann. Hier werden auch die für die Interpolation benötigten Koeffizienten festgesetzt. Zur Kontrolle wird jener Index und der Abstand vom Punkt des ersten Endwerts aus der Integration zu dem des nächsten benötigten Lösungswerts in t_1 -Richtung, der hier als KAPPA bezeichnet wird, auf dem Bildschirm ausgegeben. Ist ein Endwert und die entsprechende Sensitivitätsmatrix aus einem der Anfangswerte berechnet, so werden diese mit den Interpolationskoeffizienten gewichtet und in die entsprechenden Stellen des Felds der Funktion bzw. ihrer Funktionalmatrix eingetragen.

Die Lösung eines Anfangswertproblems des charakteristischen Systems und seiner korrespondierenden Matrixdifferentialgleichung für die Sensitivitätsmatrix zum Anfangswert wird näherungsweise von der Subroutine INTEGR durchgeführt. Dabei integriert diese wie die Subroutine ODELSG in HRWP sowohl die ODE als auch die Matrixdifferentialgleichung mit der Trapezregel, aus den bereits in Abschnitt 4.2 erläuterten Gründen. Die resultierenden nichtlinearen Gleichungen für die Näherungswerte der ODE werden wieder über das Newton-Raphson-Verfahren mit genau IMAX Iterationsschritten approximativ gelöst, wobei der jeweils vorhergehende Lösungswert als Startwert verwendet wird. Aus der Diskretisierung der Matrixdifferentialgleichung entsteht in jedem Schritt nur ein lineares Gleichungssystem. Alle auftretende lineare Gleichungssysteme werden dann direkt gelöst. Die hierfür benötigten Funktionalmatrizen berechnen sich durch numerische Differentiation der Funktionen q und f der MPDE aus dem gewöhnlichen Differenzenquotienten mit der Schrittweite DELTA. Die Integration erfolgt hier äquidistant mit der Schrittzahl SZHL, wodurch wieder eine bestimmte LR-Zerlegung in zwei verschiedenen Schritten verwendet werden kann, wie dies in Abschnitt 4.2 dargestellt ist.

Bei der Integration des charakteristischen Systems müssen die in der MPDE auftretenden Funktionen q , f und b ausgewertet werden. Daher greift die Subroutine INTEGR auf die Subroutinen NLQ, NLF und BETA zurück, welche die jeweiligen Funktionswerte berechnen. Die Gestalt dieser Subroutinen ist an Beispielen im File funktbsp.f verdeutlicht. Für die Methode hier genügt es, die Funktion b in BETA auf dem Bereich $[0, T_1 + T_2] \times [0, T_2]$ zu definieren.

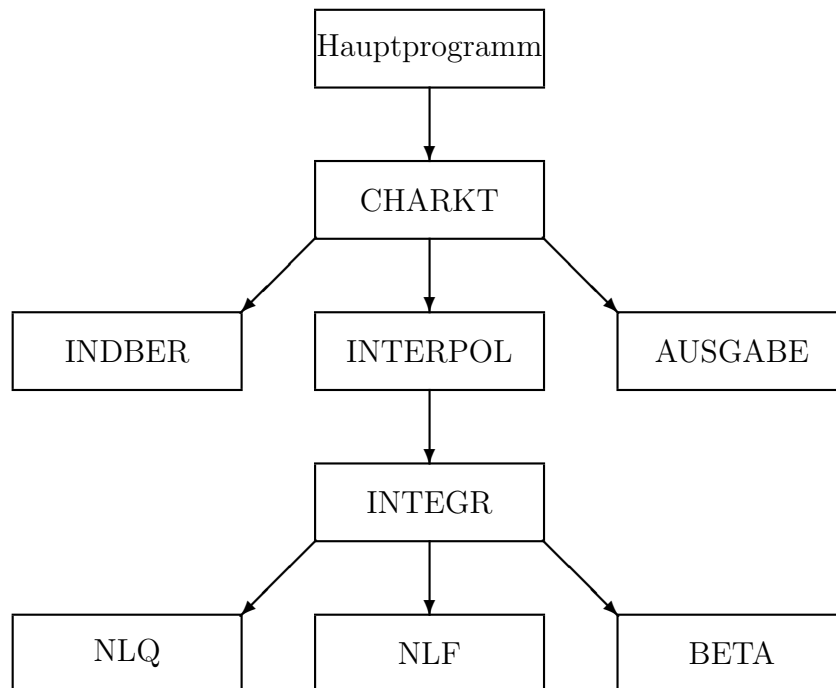


Abbildung 4.3: Programmhierarchie in CHARVERF

Bei der Lösung der linearen Gleichungssysteme wird auf die gleichen LINPACK- und damit BLAS-Routinen zurückgegriffen wie im Programm HRWP. Eine Zusammenstellung der Quellcodes dieser benötigten Subroutinen findet man im File lgsls.f, der so mit dem Hauptprogramm zusammen kompiliert werden kann.

Die Hierarchie der Subroutinen des Programms CHARVERF ist in Abbildung 4.3 verdeutlicht, wobei die LINPACK- und BLAS-Routinen aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht eingetragen sind.

Die Eingabedatei mit den Parametern muß diese zeilenweise in der nun beschriebenen Abfolge enthalten.

- INTEGER-Werte :
 - ANZ Anzahl der Anfangswerte
 - DMS Anzahl der Gleichungen in der MPDE
 - ITMAX Maximalzahl der Iterationsschritte
 - IPMTH Interpolationsmethode (0 oder 1)
 - SZHL Anzahl der Integrationsschritte bei der Lösung des charakteristischen Systems
 - IMAX Anzahl der Newtonschritte bei nichtlinearen Gleichungen in der Integration

- DOUBLE PRECISION-Werte :

EPSLN Genauigkeitsvorgabe
 DELTA Schrittweite bei der numerischen Differentiation der Funktionen q und f aus der MPDE
 PERI1 Periode T_1 in der ersten Veränderlichen
 PERI2 Periode T_2 in der zweiten Veränderlichen ($\leq T_1$)

- CHARACTER*20 :

IDATEI Name der Eingabedatei mit den Startwerten
 ODATEI Name der Ausgabedatei mit den Näherungswerten

Der Inhalt und die Gestalt der Eingabe- und Ausgabedatei sind mit denjenigen aus dem Programm HRWP identisch und wird in Abschnitt 4.2 erläutert.

Sind die Anfangswerte nun gegeben, so kann man nach diesem Verfahren auch eine Näherungslösung auf einem uniformen Gitter im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ bestimmen, wie es bereits in Abschnitt 3.3 erwähnt ist. Dazu dient das FORTRAN 77 Programm CHARLSG.

Das Gitter stimmt mit demjenigen aus HRWP in Abschnitt 4.2 überein, d.h. man hat eine durch die Anfangswerte mit ANZ vorgegebene Anzahl der Gitterschichten in t_1 -Richtung und eine mit SZHL wählbare Zahl der Gitterschichten in der t_2 -Koordinate.

Wiederum werden die hierfür benötigten Parameter vom Hauptprogramm aus einer Datei eingelesen, deren Name beim Programmmlauf über die Tastatur eingegeben wird. Daraufhin erfolgt der Aufruf der Subroutine CHLSG, welche dann die Berechnung der Näherungslösung auf dem Gitter koordiniert und die Ausgabedatei schreibt. Hierzu wird für alle Anfangswerte jeweils am zugehörigen charakteristischen System ein Integrationsschritt mit der Schrittweite $T_2/SZHL$ durchgeführt. Mit den daraus gewonnenen Näherungswerten werden dann die Lösungswerte in den Gitterpunkten der zugehörigen Schicht linear interpoliert, wobei die Periodizität in t_1 verwendet wird. Die Näherungswerte aus der Integration dienen als weitere Anfangswerte für den nächsten Integrationsschritt an den charakteristischen Systemen. Sukzessive erhält man auf diese Weise die gesuchten Größen in den Gitterpunkten durch erneute lineare Interpolationen.

Für die Interpolation wird der hier benötigte Index mit der modifizierten Subroutine INDBER2 bestimmt. Die Subroutine TRAPEZ ist ebenfalls eine Abwandlung von INTEGR, da man hier die Sensitivitätsmatrix zu den Anfangswerten nicht zu bestimmen braucht.

Die Subroutinen NLQ, NLF und BETA, sowie die üblichen LINPACK- und BLAS-Routinen, sind, wie oben beschrieben, einzubinden.

Die Eingabedatei mit den Parametern hat diese zeilenweise wie folgt zu enthalten.

- INTEGER-Werte :
 - ANZ Anzahl der Anfangswerte
 - DMS Anzahl der Gleichungen in der MPDE
 - SZHL Anzahl der Gitterschichten in t_2 -Richtung
 - IMAX Anzahl der Newtonschritte bei nichtlinearen Gleichungen in der Integration
- DOUBLE PRECISION-Werte :
 - DELTA Schrittweite bei der numerischen Differentiation der Funktionen q und f aus der MPDE
 - PERI1 Periode T_1 in der ersten Veränderlichen
 - PERI2 Periode T_2 in der zweiten Veränderlichen
- CHARACTER*20 :
 - IDATEI Name der Eingabedatei mit den Anfangswerten
 - ODATEI Name der Ausgabedatei mit den Näherungslösungen

Eingabe- und Ausgabedatei entsprechen ebenfalls von Inhalt und Gestalt her denjenigen aus dem Programm HRWPLSG, das in Abschnitt 4.2 beschrieben wird.

Kapitel 5

Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel sind zu Beispielgleichungen einer MPDE mit zwei Zeitraten nun Näherungslösungen, die man mit den Implementierungen der Verfahren erhält, bezüglich ihrer Fehler dargestellt und verglichen.

Die Systeme haben also die Gestalt

$$\frac{\partial q(x)}{\partial t_1} + \frac{\partial q(x)}{\partial t_2} = f(x) + b(t_1, t_2), \quad (5.1)$$

wobei eine biperiodische Lösung $x(t_1, t_2)$ zu vorgegebenen Perioden T_1 und T_2 gesucht ist.

Daher werden Näherungen der Lösung zu Gitterpunkten im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$ berechnet. Dabei ist das Gitter hier stets uniform und besteht aus den Punkten $((j-1)\frac{T_1}{N}, (i-1)\frac{T_2}{N})$ für $j, i = 1, \dots, N+1$. Benötigt man für diese Berechnung zunächst Anfangswerte, so werden diese zu den Punkten $((j-1)\frac{T_1}{N}, 0)$ mit $j = 1, \dots, N$ bestimmt. Als Anzahl der Gitterschichten wird hier nur $N = 20$ und $N = 40$ betrachtet.

Da die bei den Testbeispiele in diesem Kapitel erhaltenen Lösungswerte ausschließlich im Intervall $[-1, 1]$ liegen und zudem viele Größen nahe 0 sind, werden nur absolute Fehler angeführt und keine relativen Fehler. Grafiken visualisieren diese absoluten Fehler. Dazu werden jene für die Anfangswerte zweidimensional über der Nummerierung $j = 1, \dots, N$ ihrer korrespondierenden Punkte dargestellt. Die Fehler der Näherungen auf dem Gitter sind dementsprechend dreidimensional über den zugehörigen Gitterpunkten für $j, i = 1, \dots, N+1$ aufgetragen. Dazu wird vom berechneten Wert stets die bekannte Lösung oder eine Vergleichsgröße subtrahiert.

Die MATLAB-Funktion FDVERF berechnet die Näherungslösungen direkt auf dem Gitter mittels der Finiten Differenzen Methode. Die FORTRAN 77 Programme HRWP und CHARVERF bestimmen die besagten Anfangswerte nach der Hierarchischen Randwertproblemlösung bzw. dem Charakteristikenverfahren. Aus diesen Größen werden dann mit den FORTRAN 77 Programmen HRWPLSG und CHARLSG nach den analogen Verfahren die gesuchten Werte in den Gitter-

punkten erhalten. Näheres zur Implementierung der Methoden und der Bedeutung der festzusetzenden Parameter ist in Kapitel 4 ausgeführt.

Hier finden nur Untersuchungen von Ergebnissen bei der Behandlung der MPDE statt und nicht möglicherweise daraus gewonnene Näherungen einer korrespondierenden ODE. Testbeispiele dazu können in [1] gefunden werden.

5.1 Testbeispiel 1

In diesem Abschnitt soll eine skalare lineare MPDE der Gestalt (5.1) betrachtet werden, deren Lösung bekannt ist. Daher wird $q(x) = x$ und $f(x) = x$ gesetzt und die Funktion b wird gerade so gewählt, daß $x(t_1, t_2) = \sin(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2)$ mit $\omega_l = \frac{2\pi}{T_l}$ für $l = 1, 2$ eine Lösung der Gleichung ist. Dies wird künstlich erreicht durch die Festsetzung :

$$b(t_1, t_2) = -\sin(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2) + \omega_1 \cos(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2) + \omega_2 \sin(\omega_1 t_1) \cos(\omega_2 t_2)$$

In Abbildung 1.2 ist die Lösungsfunktion qualitativ dargestellt. Zunächst soll das Größenverhältnis der Perioden nicht stark unterschiedlich und ungerade sein, damit bei den Interpolationen im Programm CHARVERF keine trivialen Fälle auftreten. Deshalb werden als Perioden $T_1 = 11.5$ und $T_2 = 1$ vorgegeben.

Da die MPDE hier linear ist, sind auch die in den Verfahren auftretenden algebraischen Gleichungssysteme linear. Die Newton-Raphson-Verfahren liefern dadurch bereits in einem Iterationsschritt die angestrebte Lösung. Daher wird in den Programmen nur ein Newtonschritt zum Lösen dieser Gleichungen durchgeführt. Vorzugebende Startwerte für die Iterationen sind hier alle identisch 1. gesetzt.

Die weiteren Parameter für die Funktion FDVERF lauten im einzelnen

$$N=N, \quad M=N, \quad K=1, \quad \text{ITERMAX}=1, \quad \text{EPSILON}=10^{-3}, \quad \text{DELTA}=10^{-6}.$$

Für das Programm HRWP sind diese

$$\begin{aligned} \text{ANZ}=N, \quad \text{DMS}=1, \quad \text{SZHL}=N, \quad \text{IMAXA}=1, \quad \text{IMAXI}=1, \\ \text{IMAXO}=1, \quad \text{EPSA}=10^{-3}, \quad \text{EPSI}=10^{-6}, \quad \text{SIGMA}=10^{-3}, \quad \text{DELTA}=10^{-6} \end{aligned}$$

und bei CHARVERF dann

$$\begin{aligned} \text{ANZ}=N, \quad \text{DMS}=1, \quad \text{ITMAX}=1, \quad \text{IPMTH}=1, \\ \text{SZHL}=N, \quad \text{IMAX}=1, \quad \text{EPSLN}=10^{-3}, \quad \text{DELTA}=10^{-6}. \end{aligned}$$

Die folgende Tabelle zeigt die Ergebnisse aus den Programmdurchführungen mit $N = 20$ und $N = 40$. Dabei ist die Maximumnorm des Residuums bei dem algebraischen Gleichungssystem des jeweiligen Verfahrens, der betragsmäßig maximale absolute Fehler der berechneten Näherungswerte zu den bekannten Lösungswerten und die Nummer des Plots, der die absoluten Fehler zu allen bestimmten Größen zeigt, angegeben. Da die exakten Anfangswerte identisch 0. sind, stimmen die berechneten Anfangswerte hier mit dem absoluten Fehler überein. Dieser ist in den Grafiken für die aus HRWP erhaltenen Größen mit einem Kreuz und bei CHARVERF mit einem Kreis markiert.

Verfahren		Residuum	max. Fehler	Plot
FDVERF	$N = 20$	$5.993 \cdot 10^{-10}$	0.0162	1-3
FDVERF	$N = 40$	$6.057 \cdot 10^{-9}$	0.0041	1-4
HRWP	$N = 20$	$4.015 \cdot 10^{-7}$	0.0268	1-1
HRWP	$N = 40$	$8.699 \cdot 10^{-7}$	0.0036	1-2
CHARVERF	$N = 20$	$1.257 \cdot 10^{-9}$	0.0019	1-1
CHARVERF	$N = 40$	$1.537 \cdot 10^{-9}$	0.0005	1-2

Bei der Berechnung der Näherungslösungen in den Gitterpunkten aus den Anfangswerten werden die Programme HRWPLSG bzw. CHARLSG mit analogen Parametern verwendet. Dies sind bei HRWPLSG daher

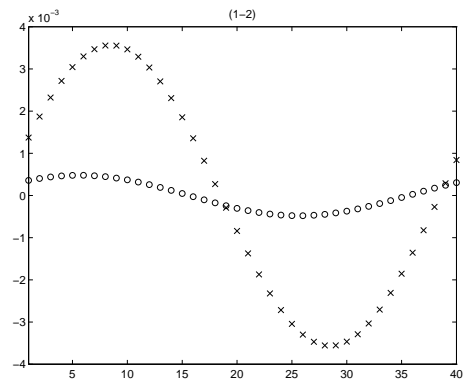
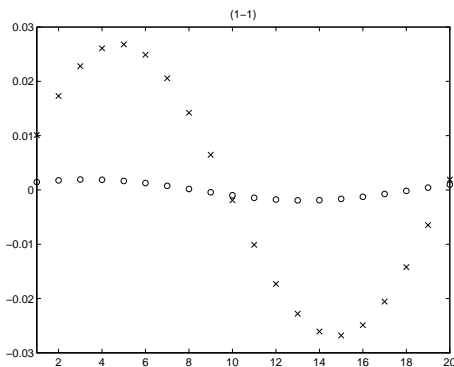
$$\text{ANZ}=N, \quad \text{DMS}=1, \quad \text{SZHL}=N, \quad \text{IMAXI}=1, \\ \text{IMAXO}=1, \quad \text{EPSI}=10^{-6}, \quad \text{DELTA}=10^{-6}$$

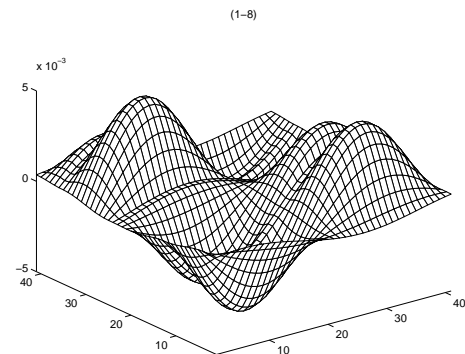
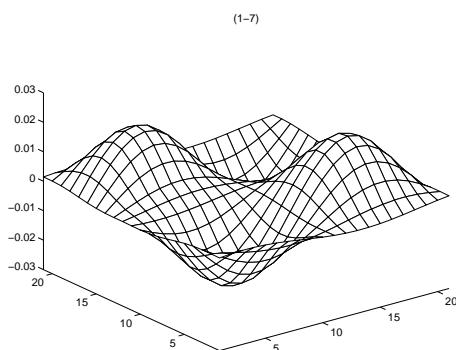
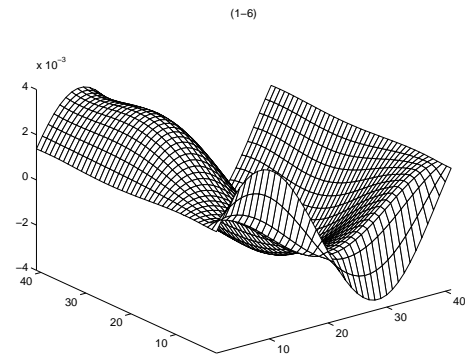
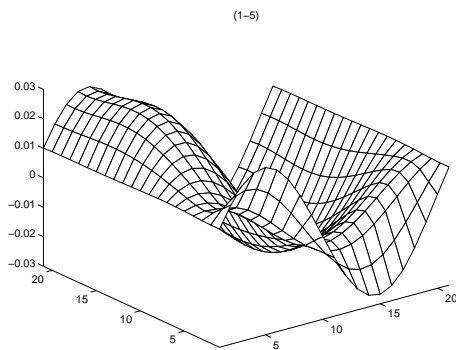
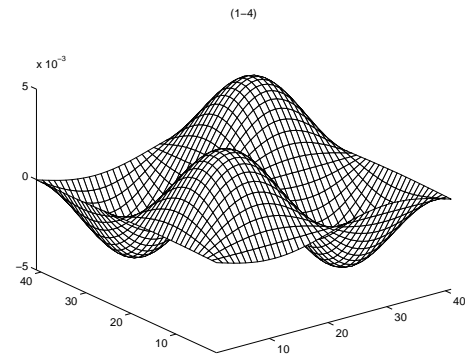
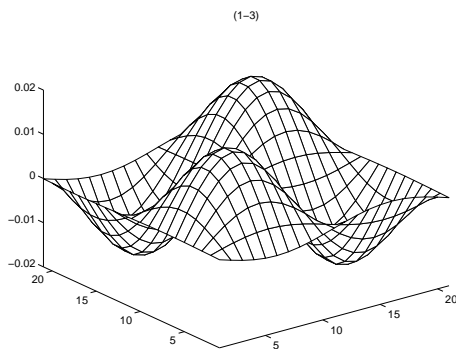
und für CHARLSG wiederum

$$\text{ANZ}=N, \quad \text{DMS}=1, \quad \text{SZHL}=N, \quad \text{IMAX}=1, \quad \text{DELTA}=10^{-6}.$$

Dabei ergeben sich die folgenden absoluten Fehler, die in den angegebenen Plots visualisiert sind und deren betragsmäßiges Maximum tabelliert ist.

Verfahren		max. Fehler	Plot
HRWPLSG	$N = 20$	0.0293	1-5
HRWPLSG	$N = 40$	0.0037	1-6
CHARLSG	$N = 20$	0.0201	1-7
CHARLSG	$N = 40$	0.0050	1-8



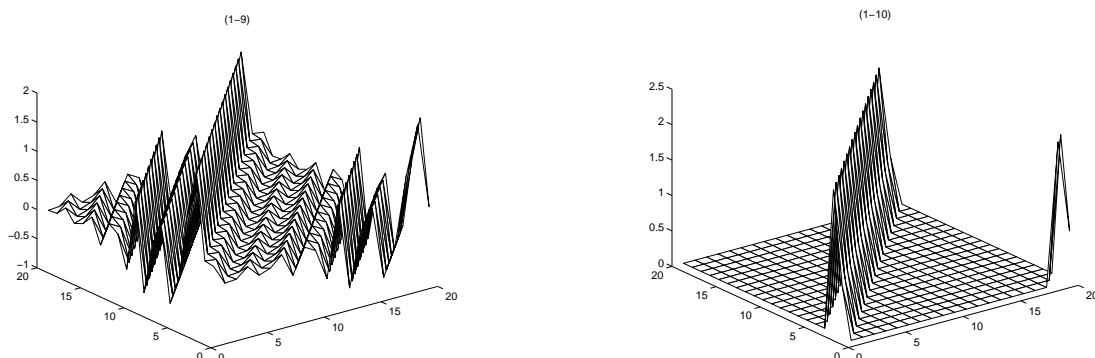


Bei den Ergebnissen fällt nun auf, daß die Form der Fehler, wie sie in den Grafiken dargestellt wird, für $N = 20$ und $N = 40$ bei jeweils einem Verfahren gleich ist, d.h. sich nur durch eine Skalierung unterscheidet. Dabei differieren die beiden Fehler hier oftmals um etwa den Faktor 4, was durch die Verwendung von Verfahren der Ordnung 2 bedingt ist. Bei dem Finite Differenzen Verfahren und dem Charakteristikenverfahren hat der Fehler die Gestalt der gesuchten Lösung. Die Hierarchische Randwertproblemlösung zeigt eine andere Form des Fehlers aufgrund der abweichenden Art der Berechnung der Näherung. Man erkennt nämlich, daß in den einzelnen Schichten der inneren Randwertproblemlösung jeweils eine Schwingung im Fehler vorliegt. Beim Charakteristikenverfahren hat man zu $N = 20$ ein regelmäßiges Verhalten des Fehlers in der besagten Form, für $N = 40$ jedoch sind Unterstrukturen erkennbar. Insgesamt sind aber die maximalen Feh-

ler bei allen drei Verfahren für identisches N in der gleichen Größenordnung. Bemerkenswert ist noch, daß die Fehler in den Anfangswerten für CHARVERF viel geringer sind als bei HRWP, jedoch die maximalen absoluten Fehler auf dem Gitter bei beiden zugehörigen Verfahren ungefähr gleich sind. Bei der Hierarchischen Randwertproblemlösung wird nämlich das Maximum des Fehlers bereits annähernd in den Anfangswerten angenommen und beim Charakteristikenverfahren erst in der Mitte des Gitters.

Der Theorie aus Kapitel 3 entnimmt man, daß die algebraischen Gleichungen beim äußeren Randwertproblem in der Hierarchischen Randwertproblemlösung und der Periodizitätsbedingung im Charakteristikenverfahren identisch sind. Jedoch werden in den beiden Methoden die Funktion, zu der die Nullstelle bestimmt werden soll, unterschiedlich berechnet. Die Ergebnisse hier zeigen, daß beide Verfahren brauchbare Näherungen ergeben, d.h. die erhaltenen Funktionswerte in den Verfahren sind nahezu gleich. Dann müßten auch die Funktionalmatrizen, welche die differenzierbare Abhängigkeit der Endwerte von den Anfangswerten beschreiben, bei beiden Methoden übereinstimmen. Es handelt sich dabei um die Ausdrücke $\frac{\partial X}{\partial S}$ aus den Gleichungen (3.7) bzw. (3.9). Bedingt durch die Vorgehensweise der Verfahren ist jedoch diese Funktionalmatrix in der Hierarchischen Randwertproblemlösung voll besetzt und im Charakteristikenverfahren eine Blockmatrix.

Um dies näher zu untersuchen, sind jene Matrizen bei dem hier vorliegenden Testbeispiel nach der Verfahrensweise in den Programmen HRWP und CHARVERF zu $N = 20$ ermittelt, wobei als Startwerte die exakten Anfangswerte 0 dienen. Die übrigen Parameter lauten wie oben. Die Funktionalmatrizen sind durch die folgenden Abbildungen visualisiert, indem die Werte aus den Komponenten über ihren Indizes aufgetragen werden. Dabei enthält der Plot (1-9) die aus HRWP gewonnene Matrix und der Plot (1-10) jene aus CHARVERF.



Die Ergebnisse zeigen, daß in der Funktionalmatrix aus HRWP die maximalen Einträge gerade im Bereich der Bänder aus der Matrix von CHARVERF vorliegen. Somit spiegelt sich die Gestalt der Charakteristiken auch in der Hierarchischen Randwertproblemlösung wider, die vom Verfahren her überhaupt keine Kenntnis von dieser Struktur hat.

5.2 Testbeispiel 2

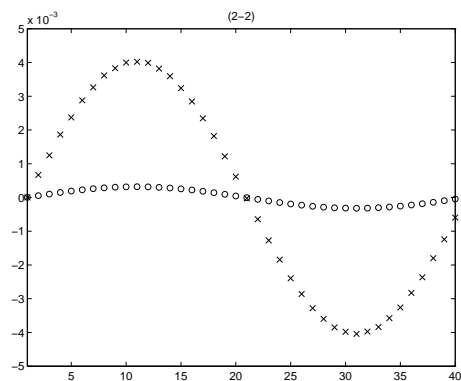
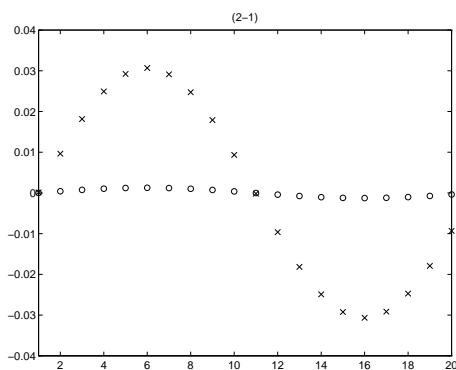
Nun soll eine skalare lineare MPDE der Gestalt (5.1) mit zwei weit separierten Zeitraten gelöst werden. Hierzu wird die Gleichung aus Testbeispiel 1 mit den Perioden $T_1 = 1000.$ und $T_2 = 1.$ übernommen. Damit ist die biperiodische Lösung wieder bekannt.

Die Programme werden daher für $N = 20$ und $N = 40$ mit den gleichen Parametern wie in Testbeispiel 1 ausgeführt. Einzige Ausnahme ist, daß jetzt die Anfangswerte mit dem Programm CHARVERF auch nach der bereits in Abschnitt 3.3 zu den Spezialfällen erläuterten Methode berechnet werden können, bei der sich die Interpolation unterscheidet. Dies wird durch die Festsetzung des Parameters IPMTH=0 für die Übernahme von Werten erreicht, während IPMTH=1 die lineare Interpolation veranlaßt.

Die Ergebnisse sind wieder in einer Tabelle aufgeführt.

Verfahren		Residuum	max. Fehler
FDVERF	$N = 20$	$5.993 \cdot 10^{-10}$	0.0162
FDVERF	$N = 40$	$6.057 \cdot 10^{-10}$	0.0041
HRWP	$N = 20$	$3.808 \cdot 10^{-5}$	0.0307
HRWP	$N = 40$	$1.769 \cdot 10^{-5}$	0.0040
CHARVERF	$N = 20$ IPMTH=0	$1.279 \cdot 10^{-9}$	$1.269 \cdot 10^{-3}$
CHARVERF	$N = 20$ IPMTH=1	$1.279 \cdot 10^{-9}$	$1.269 \cdot 10^{-3}$
CHARVERF	$N = 40$ IPMTH=0	$1.527 \cdot 10^{-9}$	$3.187 \cdot 10^{-4}$
CHARVERF	$N = 40$ IPMTH=1	$1.576 \cdot 10^{-9}$	$3.188 \cdot 10^{-4}$

Dabei zeigt sich detaillierter, daß die aus CHARVERF berechneten Anfangswerte für IPMTH=0 von denen für IPMTH=1 bei $N = 20$ um weniger als $4.7 \cdot 10^{-6}$ und bei $N = 40$ um weniger als $1.2 \cdot 10^{-6}$ abweichen. Daher sind in den Grafiken hier nur die Anfangswerte aus HRWP und aus CHARVERF mit IPMTH=1 dargestellt. Jene sind für $N = 20$ in (2-1) und für $N = 40$ in (2-2) aufgetragen. Wieder tragen die Größen aus HRWP ein Kreuz und die aus CHARVERF einen Kreis.



Diese Ergebnisse entsprechen bis auf kaum bedeutsame Abweichungen denen aus Testbeispiel 1.

Aufgrund des geringen Unterschieds in den Anfangswerten sind auch die von CHARLSG auf dem Gitter gelieferten Näherungen für IPMTH=0 und IPMTH=1 nahezu gleich und werden nur für letzteres aufgeführt. In der folgenden Tabelle befinden sich wieder die betragsmäßig maximalen absoluten Fehler für die in allen Gitterpunkten erhaltenen Werte.

Verfahren	max. Fehler
HRWPLSG $N = 20$	0.0332
HRWPLSG $N = 40$	0.0043
CHARLSG $N = 20$	0.0088
CHARLSG $N = 40$	0.0024

Die Form der absoluten Fehler über dem Gitter ist hier die gleiche wie bei Testbeispiel 1. Nur für CHARLSG mit $N = 40$ zeigt sich eine ebenso regelmäßige Fehlerform wie bei $N = 20$, während in Testbeispiel 1 dort Unterstrukturen auftreten. Deshalb sind hierzu keine weiteren Abbildungen angeführt.

Erstaunlich ist aber, daß CHARLSG nun eine genauere Näherung verschafft im Gegensatz zu FDVERF und HRWPLSG, welche die gleichen Fehlergrößenordnungen wie in Testbeispiel 1 besitzen.

5.3 Testbeispiel 3

Jetzt wird eine skalare nichtlineare MPDE der Form (5.1) betrachtet, wobei die Zeitraten sehr unterschiedlich sein sollen. Dazu werden die nichtlinearen Funktionen $q(x) = \sqrt{1 - 0.5x}$ und $f(x) = x^3$ gewählt, welche in der Schaltungssimulation durchaus auftreten. Als Erreger dient das typische Signal $b(t_1, t_2) = \sin(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2)$. Durch $T_1 = 1000.$ und $T_2 = 1.$ seien die Perioden festgesetzt. Die Lösung dieser MPDE ist unbekannt. Deshalb werden die auf dem Gitter mit dem Finiten Differenzen Verfahren erhaltenen Näherungen und die in ihnen enthaltenen Anfangswerte in den Grafiken (3-1) bzw. (3-2) gesondert dargestellt. Als Fehler der anderen Verfahren wird jeweils die Differenz aus deren Näherungswerten und den Auswertungen von FDVERF betrachtet, um die Ergebnisse vergleichen zu können. Diese Abweichungen haben aber keine Aussagekraft über die Qualität der Näherungslösungen, da willkürlich die Finite Differenzen Methode als Referenz verwendet wird.

Für die Newtoniterationen vorzugebenden Startwerte sind hier stets identisch 0. gewählt. Die Maximumnorm des Residuums soll nur kleiner als 10^{-3} sein, denn die bisherigen Beispiele haben gezeigt, daß der Fehler zu den richtigen Lösungen bei den hier verwendeten Schrittweiten auch für kleineres Residuum größer als diese Zahl ist. Die Parameter für die Funktion FDVERF sind daher

$$N=N, \quad M=N, \quad K=1, \quad \text{ITERMAX}=10, \quad \text{EPSILON}=10^{-3}, \quad \text{DELTA}=10^{-6}.$$

Bei HRWP lauten sie dann

ANZ= N , DMS=1, SZHL= N , IMAXA=10, IMAXI=5,
 IMAXO=2, EPSA= 10^{-3} , EPSI= 10^{-6} , SIGMA= 10^{-3} , DELTA= 10^{-6}

und für CHARVERF schließlich

ANZ= N , DMS=1, ITMAX=10, IPMTH=1,
 SZHL= N , IMAX=2, EPSLN= 10^{-3} , DELTA= 10^{-6} .

Die folgende Tabelle zeigt die von den Programmen ausgeführte Anzahl an Iterationsschritten und das dabei entstehende Residuum in der Maximumnorm. Zudem ist der betragsmäßig maximale absolute Fehler in Bezug auf die Ergebnisse aus FDVERF und die Nummer des Plots, der diese Fehler detailliert zeigt, angegeben. Die Anfangswerte sind mit den gewohnten Symbolen markiert.

Verfahren		Schrittzahl	Residuum	max. Fehler	Plot
FDVERF	$N = 20$	3	$2.898 \cdot 10^{-5}$	—	—
FDVERF	$N = 40$	3	$2.225 \cdot 10^{-5}$	—	—
HRWP	$N = 20$	4	$8.400 \cdot 10^{-4}$	0.0888	3-3
HRWP	$N = 40$	3	$2.077 \cdot 10^{-5}$	0.0266	3-4
CHARVERF	$N = 20$	3	$2.443 \cdot 10^{-4}$	0.0273	3-3
CHARVERF	$N = 40$	3	$5.074 \cdot 10^{-5}$	0.0059	3-4

Die Berechnung der Näherungen auf dem Gitter erfolgt mit HRWPLSG und CHARLSG zu analogen Parametern, nämlich

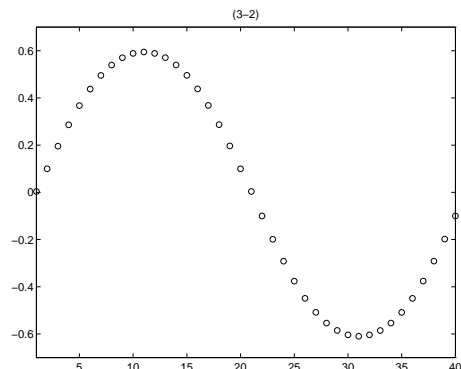
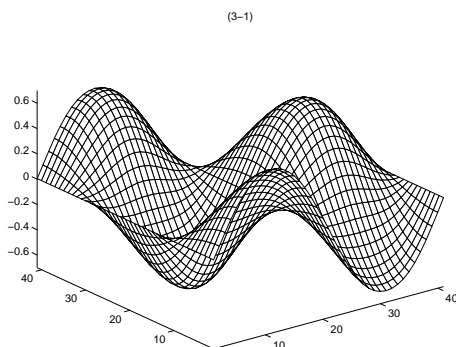
ANZ= N , DMS=1, SZHL= N , IMAXI=5,
 IMAXO=2, EPSI= 10^{-6} , DELTA= 10^{-6}

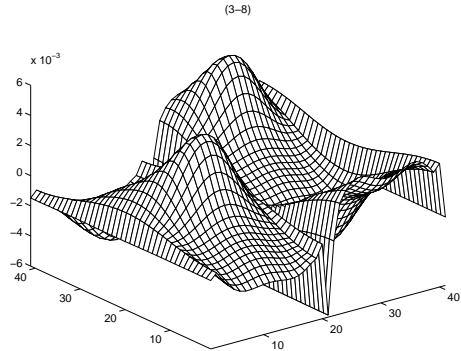
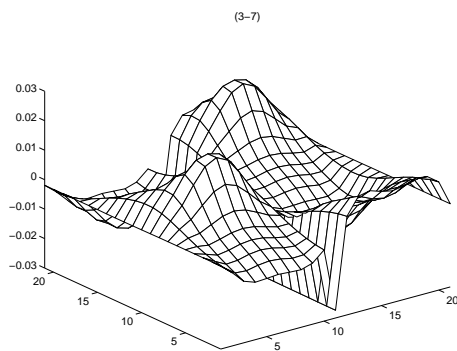
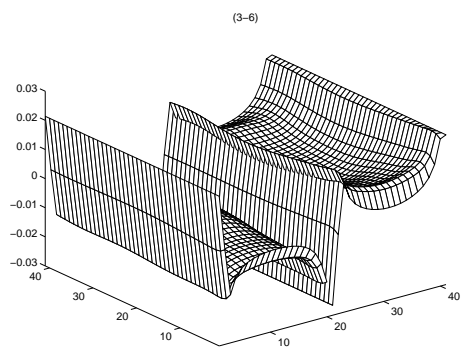
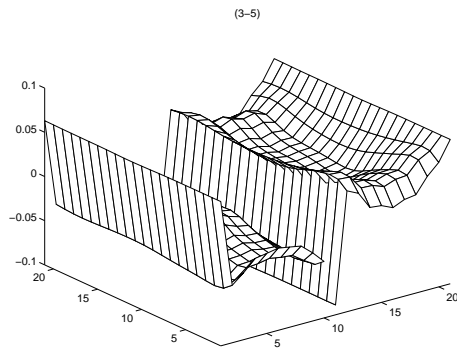
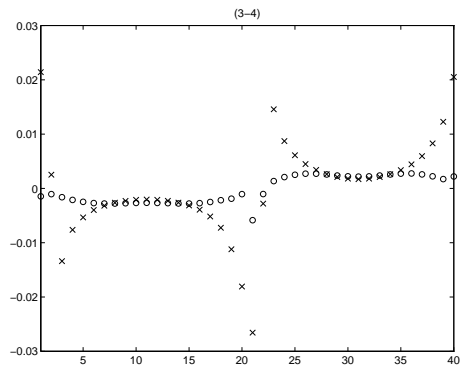
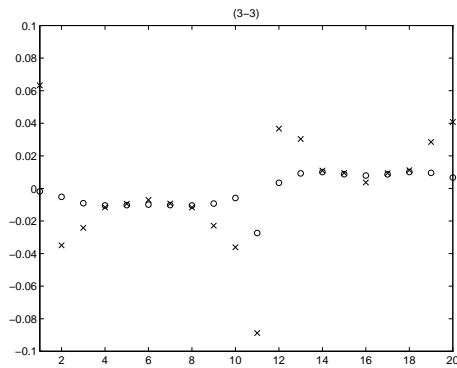
bzw.

ANZ= N , DMS=1, SZHL= N , IMAX=2, DELTA= 10^{-6} .

Dabei ergeben sich die nun folgenden Fehler.

Verfahren		max. Fehler	Plot
HRWPLSG	$N = 20$	0.0896	3-5
HRWPLSG	$N = 40$	0.0266	3-6
CHARLSG	$N = 20$	0.0273	3-7
CHARLSG	$N = 40$	0.0059	3-8





Besonders bei diesen Fehlerformen sind die Abweichungen in den Anfangswerten nahe den Stellen $t_1 = 0$, $t_1 = \frac{T_1}{2}$ und $t_1 = T_1$ des zugehörigen Intervalls $[0, T_1]$. Diese zeigen sich dann auch in t_2 -Richtung bei den Näherungen auf dem Gitter im Rechteck $[0, T_1] \times [0, T_2]$. Desweiteren sind die Abweichungen bei CHVERF nicht so groß wie für HRWP.

Bemerkenswert ist, daß diese Anomalien nahe den Geraden $t_1 = 0$, $t_1 = \frac{T_1}{2}$ und wegen der Periodizität bei $t_1 = T_1$ auftreten, wo die Lösung verschwindet, nicht aber längs jener Geraden parallel zur t_1 -Achse, wo die Lösung ebenfalls bei 0 ist. Darin findet sich die Struktur der Charakteristiken wieder, denn die charakteristischen Grundkurven verlaufen hier sehr steil in t_2 -Richtung nahe den besagten Geraden, bei denen die Abweichungen vorkommen. Instabilitäten treten somit dort auf, wo die charakteristischen Grundkurven in einem Bereich liegen, in dem

die Lösung nahezu verschwindet. Darauf deutet auch hin, daß das Programm CHARVERF für die Wahl IPMTH=0 hier nicht die Anfangswerte bestimmen kann, da die dann zum Gleichungssystem gehörende Funktionalmatrix singular wird.

Andere skalare Testbeispiele mit der Funktion q , bei denen die Lösung bekannt ist, zeigen für moderates Größenverhältnis der Perioden bei den Programmen hier normale Ergebnisse, während für die Wahl $T_1 = 1000T_2$ bei allen drei Verfahren wieder die erwähnten Abweichungen auftreten. Die nichtlineare Funktion q verhält sich also in dieser Hinsicht problematisch.

5.4 Testbeispiel 4

Als letztes wird nun ein nichtlineares System der Gestalt (5.1) aus zwei Gleichungen untersucht. Die Perioden werden dabei mit $T_1 = 11.5$ und $T_2 = 1$ vorgegeben. Es seien x_1, x_2 die Komponenten der gesuchten biperiodischen Lösung.

Die Funktion q wird dabei mit $c = 0.1$ gewählt als :

$$q(x) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - cx_2} \\ \sqrt{1 - cx_1} \end{pmatrix}$$

Dadurch ist insbesondere die Funktionalmatrix von q für Werte $x_1, x_2 \in (-\infty, 10)$ stets regulär. Desweiteren werden f und b so bestimmt, daß

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2) \\ \sin(\omega_1 t_1) \cos(\omega_2 t_2) \end{pmatrix}$$

mit $\omega_l = \frac{2\pi}{T_l}$ für $l = 1, 2$ eine Lösung des Systems ist.

Dies erreicht man durch Differentiation dieser Funktion und es ergibt sich :

$$f = \frac{c \omega_2}{2} \begin{pmatrix} \frac{x_1}{\sqrt{1 - cx_2}} \\ \frac{-x_2}{\sqrt{1 - cx_1}} \end{pmatrix} \quad b = -\frac{c \omega_1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\cos(\omega_1 t_1) \cos(\omega_2 t_2)}{\sqrt{1 - c \sin(\omega_1 t_1) \cos(\omega_2 t_2)}} \\ \frac{\cos(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2)}{\sqrt{1 - c \sin(\omega_1 t_1) \sin(\omega_2 t_2)}} \end{pmatrix}$$

Die erste Komponente der Lösung findet man qualitativ in Abbildung 1.2 dargestellt. Die zweite Komponente ist gerade die um $-\frac{\pi}{2}$ in t_2 -Richtung verschobene erste Komponente.

Die gesuchten Anfangswerte sind daher für erstere identisch 0 und für die zweite eine Sinusschwingung.

Es werden wieder Näherungslösungen zu $N = 20$ und $N = 40$ als Anzahl der Gitterschichten berechnet. Die vorzugebenden Startwerte für die Newton-Raphson-Verfahren in den Programmen sind stets auf 1. gesetzt.

Die übrigen Parameter für die Funktion FDVERF heißen dann

$$N=N, \quad M=N, \quad K=2, \quad \text{ITERMAX}=10, \quad \text{EPSILON}=10^{-3}, \quad \text{DELTA}=10^{-6}.$$

Beim Programm HRWP lauten sie

ANZ= N , DMS=2, SZHL= N , IMAXA=10, IMAXI=5,
 IMAXO=2, EPSA= 10^{-3} , EPSI= 10^{-6} , SIGMA= 10^{-3} , DELTA= 10^{-6}

und für CHARVERF hier

ANZ= N , DMS=2, ITMAX=10, IPMTH=1,
 SZHL= N , IMAX=2, EPSLN= 10^{-3} , DELTA= 10^{-6} .

In der folgenden Tabelle sind die Ergebnisse in der gewohnten Weise aufgeführt, wobei jetzt die absoluten Fehler in den einzelnen Komponenten betrachtet werden.

Verfahren	Schritte	Residuum	Komp.	max. Fehler	Plot
FDVERF $N = 20$	2	$1.677 \cdot 10^{-4}$	1	0.2027	4-3
			2	0.2027	4-4
FDVERF $N = 40$	2	$1.557 \cdot 10^{-4}$	1	0.0485	—
			2	0.0485	—
HRWP $N = 20$	2	$7.624 \cdot 10^{-5}$	1	0.0868	4-1
			2	0.0871	4-1
HRWP $N = 40$	2	$4.874 \cdot 10^{-4}$	1	0.0397	4-2
			2	0.0332	4-2
CHARVERF $N = 20$	2	$6.733 \cdot 10^{-8}$	1	0.0933	4-1
			2	0.0273	4-1
CHARVERF $N = 40$	2	$7.255 \cdot 10^{-8}$	1	0.0239	4-2
			2	0.0090	4-2

In den Plots werden die Fehler in den Anfangswerten aus HRWP für die erste Komponente der Lösung mit 'x' und für die zweite mit '*' dargestellt, während diese beim Charakteristikenverfahren durch 'o' bzw. '+' gegeben sind.

In der Berechnung der Näherungslösungen auf dem gesamten Gitter aus den Anfangswerten ergeben sich jetzt andere maximale Fehler.

Die verwendeten Parameter für HRWPLSG sind dabei

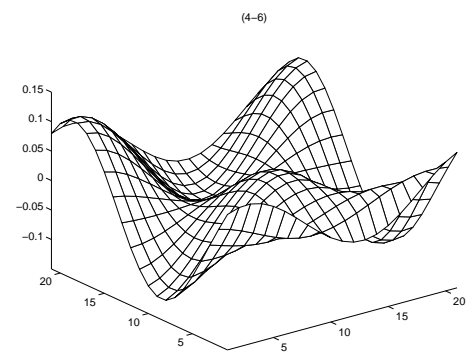
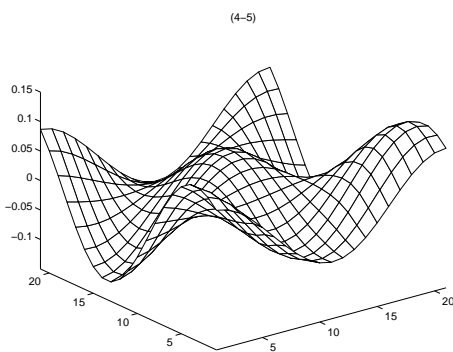
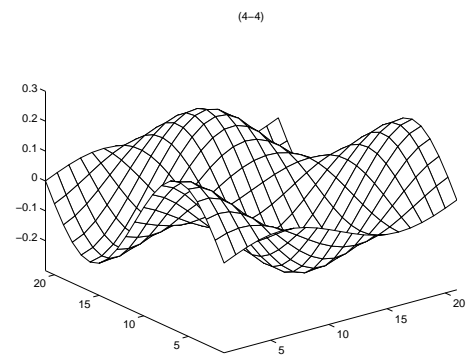
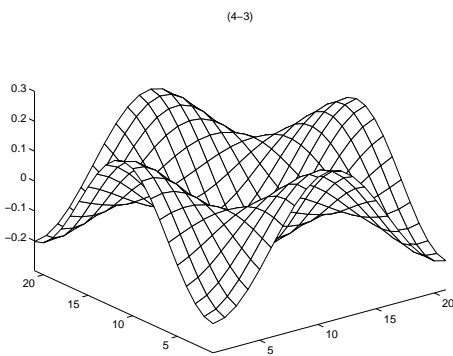
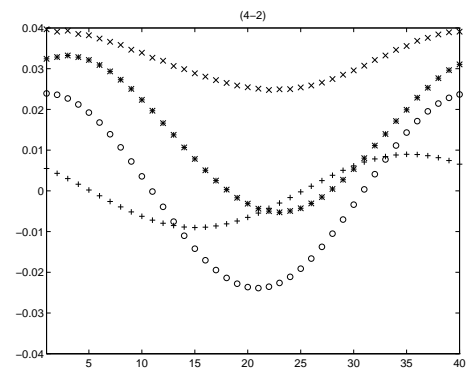
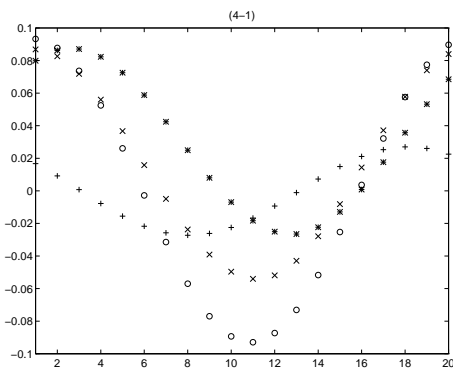
ANZ= N , DMS=2, SZHL= N , IMAXI=5,
 IMAXO=2, EPSI= 10^{-6} , DELTA= 10^{-6}

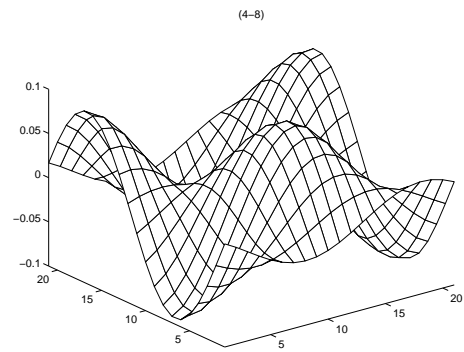
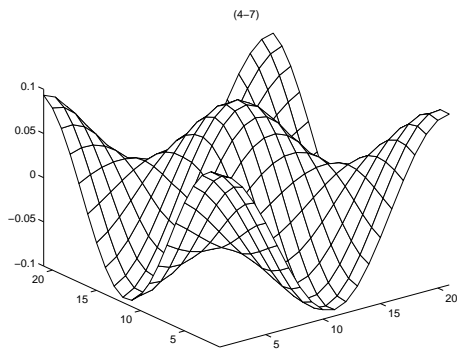
und in CHARLSG dann

ANZ= N , DMS=2, SZHL= N , IMAX=2, DELTA= 10^{-6} .

Verfahren	Komp.	max. Fehler	Plot
HRWPLSG $N = 20$	1	0.1170	4-5
	2	0.1180	4-6
HRWPLSG $N = 40$	1	0.0517	—
	2	0.0514	—
CHARLSG $N = 20$	1	0.0942	4-7
	2	0.0939	4-8
CHARLSG $N = 40$	1	0.0246	—
	2	0.0246	—

Die Fehler sind bei diesem System merklich größer als für die bisher betrachteten skalaren Gleichungen. Es ist aber wieder deutlich eine Konvergenz zu erkennen, denn man hat hier bei Halbierung der Schrittweiten die für Verfahren der Ordnung 2 erwartete Viertelung des Fehlers. Lediglich die Hierarchische Randwertproblemlösung zeigt dabei ein schlechteres Konvergenzverhalten. Die Form der Fehler über dem Gitter unterscheidet sich bei einem der drei Verfahren für $N = 20$ und $N = 40$ damit nicht, da nur eine andere Skalierung vorliegt. Deshalb sind auch nur Abbildungen für den Fall $N = 20$ aufgeführt.





Aus diesen Grafiken ersieht man, daß die Fehler für jeweils eine Komponente der Lösung bei allen drei Verfahren von der gleichen Gestalt sind. Es handelt sich dabei in den Anfangswerten stets um Sinusbögen. Die Formen über den Gitterpunkten entsprechen Phasenverschiebungen und Skalierungen der gesuchten Lösungskomponenten.

Schlußbemerkungen und Ausblick

Das MPDE-Modell stellt einen interessanten Ansatz dar, um Probleme gewöhnlicher Differentialgleichungen in der Schaltungssimulation zu behandeln. Dabei sind die Beziehungen zwischen MPDE und korrespondierender ODE in leicht überschaubarer Weise gegeben.

Die theoretischen Resultate in dieser Arbeit haben gezeigt, daß man die ODE, wenn man die MVF-Darstellung ihrer Funktionen einbezieht, dann als ein charakteristisches Differentialgleichungssystem ihrer zugehörigen MPDE interpretieren kann.

Für den Fall, daß das zur MPDE korrespondierende gewöhnliche Differentialgleichungssystem keine differential-algebraische Gleichung darstellt, gelten auch die üblichen Sätze bezüglich dieses charakteristischen Systems, deren Beweise hier durchgeführt sind. In diesen stellt sich jetzt heraus, daß die Zusammenhänge zwischen ODE und korrespondierender MPDE sowie zwischen MPDE und deren charakteristischem Differentialgleichungssystem gerade diesselben sind. Durch den Informationstransport bedingt enthalten nämlich Lösungen der MPDE entlang gewisser Geraden sowohl Lösungswerte der ODE als auch des charakteristischen Systems.

Damit besteht ein Teil dieser Theorie auch bei den in der Schaltungssimulation überwiegend auftretenden differential-algebraischen Gleichungen, den sog. Differential-Algebraic Equations oder DAEs, denn die Sätze über die MPDE-ODE-Relation gelten bereits für diesen Fall. Jedoch liegt im DAE-Fall keine differenzierbare Abhängigkeit von Anfangswerten im üblichen Sinn vor. Daher ist besonders für das Cauchysche Anfangswertproblem noch zu prüfen, in welcher Form es hierfür verallgemeinert werden kann.

Das gleiche gilt für die hier betrachteten numerischen Verfahren, die zur Lösung der MPDE dienen. Diese sind dort zu modifizieren, wo Ableitungen nach Anfangswerten eingehen. Bei der Finite Differenzen Methode sind diesbezüglich keine Veränderungen notwendig, da hier das Randwertproblem nicht auf Anfangswertprobleme zurückgeführt wird.

Die Ergebnisse zu den Testbeispielen in dieser Arbeit deuten darauf hin, daß eine MPDE, die eine gleichmäßig verlaufenden Lösungsfunktion besitzt, ohne prin-

zipielle Schwierigkeiten numerisch gelöst werden kann. Die Erprobung der drei numerischen Verfahren hat hier gezeigt, daß alle ungefähr gleich gute Konvergenzeigenschaften bei den gewählten Testbeispielen besitzen. Desweiteren hat man daher festzustellen, ob sich bei in den Anwendungen auftretenden großen Systemen dann ein Verfahren durch besonders gute Eigenschaften gegenüber den anderen auszeichnet.

Die hier implementierten Methoden können für die Benutzung in der Praxis noch effizienter gemacht werden. Dabei sollte man die Hierarchische Randwertproblemlösung nicht weiter verfolgen, da diese vergleichsweise zu aufwendig ist.

Das Charakteristikenverfahren besitzt genau wie dieses den Vorteil einer reduzierten Anzahl von Unbekannten und dadurch einer Speicherplatzersparnis, hat jedoch einen deutlich geringeren Rechenaufwand. Um dieses effizienter zu gestalten, ist eine geeignete Schrittweitensteuerung bei der Integration der impliziten gewöhnlichen Differentialgleichungssysteme zu entwickeln und zu implementieren. Da zugleich mehrere solcher Systeme unabhängig voneinander zu lösen sind, sollte man hierbei eine Parallelisierung auf entsprechenden Rechnern erwägen.

Die Finite Differenzen Methode könnte von der Rechengeschwindigkeit her verbessert werden, indem die sich durch das Newton-Verfahren ergebenden linearen Gleichungssysteme iterativ gelöst werden. Hierfür ist ein auf die spezielle Gestalt der Funktionalmatrix zugeschnittenes Verfahren zu finden. Auch sollte man spezielle Methoden für große dünnbesetzte nichtlineare Gleichungssysteme auf ihre Anwendbarkeit dort prüfen.

Desweiteren sind Verfahren, welche auf dem Prinzip der Harmonischen Balance beruhen, bei der Lösung der MPDE in Betracht zu ziehen. Methoden dieser Art sind in [1] angeführt. Ansätze der Harmonischen Balance für die ODE bzw. DAE direkt können in [3] und [4] gefunden werden.

Insgesamt besteht also Grund, das MPDE-Modell in der Schaltungssimulation weiterzuverfolgen.

Anhang A

Trapezregel bei ODE und Matrix-ODE

ODE :
$$\frac{\partial q(x(t))}{\partial t} = f(t, x(t))$$

Matrix-ODE :
$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial q}{\partial x}(x(t)) \frac{\partial x}{\partial s}(t) \right) = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t)) \frac{\partial x}{\partial s}(t)$$

Vorgegeben sei das Anfangswertproblem $x(t_0) = s$.

Hier wird nun äquidistant mit Schrittweite h integriert, wodurch die Punkte $t_i = t_0 + ih$ mit $i = 0, 1, 2, \dots$ ausgezeichnet sind.

Es seien X_i und Z_i die Näherungen zu x bzw. $\frac{\partial x}{\partial s}$ an der Stelle t_i .

Bei Integration mit der Trapezregel ergibt sich für die ODE :

$$q(X_{i+1}) = q(X_i) + \frac{h}{2} [f(t_i, X_i) + f(t_{i+1}, X_{i+1})]$$

Das Newton-Raphson-Verfahren angewendet auf diese algebraische Gleichung führt auf die folgende Formel für die $(\nu + 1)$ -te Näherung :

$$X_{i+1}^{(\nu+1)} = X_{i+1}^{(\nu)} - \left(\frac{\partial q}{\partial x}(X_{i+1}^{(\nu)}) - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial x}(X_{i+1}^{(\nu)}) \right)^{-1} \left(q(X_{i+1}^{(\nu)}) - q(X_i) - \frac{h}{2} [f(t_i, X_i) + f(t_{i+1}, X_{i+1}^{(\nu)})] \right)$$

Für die Matrix-ODE erhält man mit der Trapezregel :

$$\frac{\partial q}{\partial x}(X_{i+1}) Z_{i+1} = \frac{\partial q}{\partial x}(X_i) Z_i + \frac{h}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial x}(X_i) Z_i + \frac{\partial f}{\partial x}(X_{i+1}) Z_{i+1} \right]$$

Daraus resultiert durch Invertierung :

$$Z_{i+1} = \left(\frac{\partial q}{\partial x}(X_{i+1}) - \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial x}(X_{i+1}) \right)^{-1} \left(\frac{\partial q}{\partial x}(X_i) + \frac{h}{2} \frac{\partial f}{\partial x}(X_i) \right) Z_i$$

Wird nun als Startwert der Newtoniteration der jeweils vorhergehende Näherungswert verwendet, d.h. $X_{i+1}^{(0)} = X_i$, so stimmt die Matrix aus dem linearen Gleichungssystem im i -ten Integrationsschritt der Matrix-ODE mit der des linearen Gleichungssystems im ersten Newtonschritt des $(i+1)$ -ten Integrationsschritts bei der ODE überein.

Anhang B

Inhalt der beiliegenden Diskette

Auf der Diskette sind die Quellcodes der beschriebenen MATLAB Funktionen bzw. der FORTRAN 77 Programme enthalten.

Die zugehörigen Files werden im folgenden aufgelistet.

-fdverf.m	Funktion FDVERF in MATLAB
-nlq.m	Funktionen NLQ zu den Testbeispielen in MATLAB
-nlf.m	Funktionen NLF zu den Testbeispielen in MATLAB
-beta.m	Funktionen BETA zu den Testbeispielen in MATLAB
-hrwp1.f	Programm HRWP in FORTRAN 77 mit dynamischen Speicheranforderungen
-hrwp2.f	Programm HRWPLSG in FORTRAN 77 mit dynamischen Speicheranforderungen
-char1.f	Programm CHARVERF in FORTRAN 77 mit dynamischen Speicheranforderungen
-char2.f	Programm CHARLSG in FORTRAN 77 mit dynamischen Speicheranforderungen
-char3.f	Programm CHARVERF in FORTRAN 77 Standard
-char4.f	Programm CHARLSG in FORTRAN 77 Standard
-lgsls.f	LINPACK Routinen DGEFA, DGESL und BLAS Routinen DAXPY, DDOT, DSCAL, IDAMAX
-funktbsp.f	Beispiele für NLQ, NLF und BETA in FORTRAN 77
-funkt.f	NLQ, NLF und BETA aus den Testbeispielen

Literaturverzeichnis

- [1] J. Roychowdhury: *Analysing Circuits with Widely-Separated Time Scales using Numerical PDE Methods* eingereicht zur Veröffentlichung bei IEEE Transactions on Circuits and Systems
- [2] W. Kampowsky, P. Rentrop, W. Schmitt: *Classification and numerical simulation of electric circuits* Surveys on Mathematics for Industry, Vol. 2 No. 1, Springer, 1992, pp. 23-65
- [3] H.G. Brachtendorf, G. Welsch, R. Laur, A. Bunse-Gerstner: *Numerical steady state analysis of electronic circuits driven by multi-tone signals* Electrical Engineering 79, Springer, 1996, pp. 103-112
- [4] H.G. Brachtendorf: *Simulation des eingeschwungenen Verhaltens elektronischer Schaltungen* Dissertation D46 Universität Bremen (Elektrotechnik), Verlag Shaker, Aachen, 1994
- [5] M. Günther: *Multirate Rosenbrock-Wanner Verfahren zur Integration von elektrischen Schaltkreisen* Diplomarbeit, München, 1991
- [6] R.J. LeVeque, H.C. Yee: *A Study of Numerical Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Source Terms* Journal of Computational Physics 86, Academic Press, 1990, pp. 187-210
- [7] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations I* 2. Aufl., Springer, Berlin, 1993
- [8] E. Hairer, G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations II* 2. Aufl., Springer, Berlin, 1996
- [9] J. Stoer: *Numerische Mathematik 1* 7. Aufl., Springer, Berlin, 1994
- [10] J. Stoer, R. Bulirsch: *Numerische Mathematik 2* 3. Aufl., Springer, Berlin, 1990
- [11] F. Erwe: *Gewöhnliche Differentialgleichungen* 2.Aufl., BI Hochschultaschenbücher, Mannheim, 1964

- [12] F. Erwe, E. Peschl: *Partielle Differentialgleichungen erster Ordnung* BI Hochschultaschenbücher, Mannheim, 1973
- [13] O. Forster: *Analysis II* 5. Aufl., Vieweg, Braunschweig, 1984
- [14] T. Bröcker: *Analysis II* BI Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1992
- [15] Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen: *FORTRAN 77 Sprachumfang* 9. Aufl., Universität Hannover, 1987
- [16] I. Kießling, M. Lowes: *Programmierung in FORTRAN 77* 4. Aufl., Teubner, Stuttgart, 1987
- [17] *MATLAB User's Guide* The MATH WORKS, Inc., 1992
- [18] *MATLAB Reference Guide* The MATH WORKS, Inc., 1992
- [19] J.J. Dongarra, C.B. Moler, J.R. Bunch, G.W. Stewart: *LINPACK User's Guide* SIAM, Philadelphia, 1979