9 Schießverfahren

9.1 Lineare Randwertaufgaben

Der konstruktive Beweis von Satz 8.2 zur Lösbarkeit der linearen RWA

$$\begin{aligned} u'(t) - A(t)u(t) &= f(t)\,, \quad t \in I = [a,b], \\ B_a u(a) + B_b u(b) &= g, \end{aligned} \tag{9.1.1}$$

legt auch ein Verfahren zu deren numerischen Approximation nahe, das sog. „Schießverfahren“. Die kontinuierliche Lösung ist gegeben in der Form

$$u(t;\hat{s}) = y_0(t) + Y(t)\hat{s}$$

mit den Lösungen $y_0 : I \to \mathbb{R}^d$ und $Y : I \to \mathbb{R}^{d\times d}$ der AWA

$$\begin{aligned} y_0'(t) - A(t)y_0(t) &= f(t)\,, \qquad t \in I\,, \qquad y_0(a) = 0\,, \\ Y'(t) - A(t)Y(t) &= 0\,, \qquad\quad t \in I\,, \qquad Y(a) = I\,. \end{aligned} \tag{9.1.2}$$

sowie der Lösung $\hat{s} \in \mathbb{R}^d$ des linearen Gleichungssystems

$$Qs := (B_a + B_b Y(b))s = g - B_b y_0(b),$$

vorausgesetzt $B_a + B_b Y(b)$ ist regulär. Dabei ist $u(t;\hat{s})$ die Lösung der AWA

$$u'(t;\hat{s}) - A(t)u(t;\hat{s}) = f(t), \quad t \in I, \quad u(a;\hat{s}) = \hat{s}\,, \tag{9.1.3}$$

für die gerade die Randbedingung $B_a u(a;\hat{s}) + B_b u(b;\hat{s}) = g$ erfüllt ist. Dies begründet die Bezeichnung *Schießverfahren* für das folgende Vorgehen:

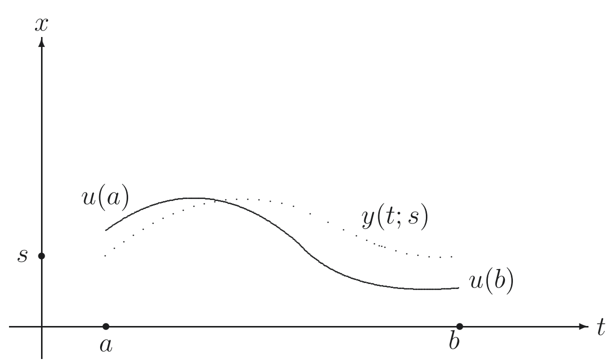

Abbildung 9.1: Konzept des (einfachen) Schießverfahrens.

Das Intervall I wird unterteilt,

$$a = t_0 < t_1 < \ldots < t_N = b\,,$$

in Teilintervalle der Länge $h_n = t_n - t_{n-1}$, wobei

$$h := \max_{1 \le n \le N} h_n \le \theta \min_{1 \le n \le N} h_n ,$$

mit einer Konstante $\theta \ge 1$. Auf diesem Punktgitter werden dann mit Hilfe eines konvergenten Differenzenverfahrens (Einschrittverfahren, Prädiktor-Korrektor-Verfahren, Extrapolationsverfahren, etc.) Näherungen $(y_{i,n}^h)_{n=1}^N$, $i = 0, \dots, d$, zu den Lösungen y_i, $i = 0, \dots, d$, der AWAn (9.1.2) berechnet; dazu sind $d+1$ Systeme zu lösen. Ist das verwendete Verfahren von der Ordnung m, und sind die Funktionen $A(t)$, $f(t)$ hinreichend glatt, so verhält sich nach den Resultaten der Kapitel 1.2, 1.4 und 1.5 der Diskretisierungsfehler wie

$$\|y_{i,N}^h - y_i(b)\| \le K e^{L(b-a)} h^m , \tag{9.1.4}$$

wobei die Konstante K im Wesentlichen nur von den gegebenen Daten $A(t)$, $f(t)$ abhängt, und $L = \max_{t \in I} \|A(t)\|$ die Lipschitz-Konstante des Systems repräsentiert. Mit der diskreten Fundamentalmatrix $Y_n^h = [y_{1,n}^h, \dots, y_{d,n}^h]$ wird dann die Matrix

$$Q^h := B_a + B_b Y_N^h$$

gebildet. Ist diese nun ebenfalls regulär, so besitzt das Gleichungssystem

$$Q^h s^h = g - B_b y_{0,N}^h \tag{9.1.5}$$

eine eindeutige Lösung $\hat{s}^h \in \mathbb{R}^d$, mit der durch

$$u_n^h := y_{0,n}^h + Y_n^h \hat{s}^h , \quad n = 0, \dots, N ,$$

eine Näherung zu $u(t)$ definiert ist.

Satz 9.1 (Konvergenz des Schießverfahrens): *Für hinreichend kleines $h > 0$ ist die Matrix Q^h regulär, und das Schießverfahren konvergiert mit der Ordnung m:*

$$\max_{t_n \in I} \|u_n^h - u(t_n)\| = \mathcal{O}(h^m) \quad (h \to 0) .$$

Beweis: Die Fehlerabschätzung (9.1.4) impliziert

$$\|Q - Q^h\| = \|B_b Y(b) - B_b Y_N^h\| \le c \|B_b\| \max_{i=1,\dots,d} \|y_i(b) - y_{i,N}^h\| = \mathcal{O}(h^m) , \tag{9.1.6}$$

mit einer dimensions-abhängigen Konstante c. Für hinreichend kleines h ist also

$$\|Q - Q^h\| < \frac{1}{\|Q^{-1}\|} \quad \text{bzw.} \quad \|Q^{-1}(Q^h - Q)\| < 1.$$

Im Hinblick auf die angenommene Regularität von Q impliziert dies auch die Regularität von $Q^h = Q(I + Q^{-1}(Q^h - Q))$ sowie die Abschätzung (Übungsaufgabe)

$$\|(Q^h)^{-1}\| \le \frac{\|Q^{-1}\|}{1 - \|Q^{-1}\| \|Q^h - Q\|} .$$

Über die Beziehung

$$Q^{-1} - (Q^h)^{-1} = Q^{-1}(Q^h - Q)(Q^h)^{-1},$$

folgt weiter die Abschätzung

$$\|Q^{-1} - (Q^h)^{-1}\| \leq \frac{\|Q^{-1}\|^2}{1 - \|Q^{-1}\|\,\|Q - Q^h\|}\,\|Q - Q^h\|\,.$$

Mit (9.1.6) folgt damit

$$\|Q^{-1} - (Q^h)^{-1}\| = \mathcal{O}(h^m)\,.$$

Damit erschließen wir weiter

$$\begin{aligned} \|s - s^h\| &= \|Q^{-1}[g - B_b y_0(b)] - (Q^h)^{-1}[g - B_b\, y^h_{0,N}]\,\| \\ &\leq \|Q^{-1} - (Q^h)^{-1}\|\,\|g\| + \|Q^{-1} - (Q^h)^{-1}\|\,\|B_b\|\,\|y_0(b)\| \\ &\quad + \|(Q^h)^{-1}\|\,\|B_b\|\,\|y_0(b) - y^h_{0,N}\| = \mathcal{O}(h^m)\,. \end{aligned}$$

und hiermit

$$\begin{aligned} \|u^h_n - u(t_n)\| &= \|y^h_{0,n} + Y^h_n s^h - y_0(t_n) - Y(t_n)s\| \\ &\leq \|y^h_{0,n} - y_0(t_n)\| + \|Y^h_n - Y(t_n)\|\,\|s^h\| + \\ &\quad + \|Y(t_n)\|\,\|s^h - s\| = \mathcal{O}(h^m), \end{aligned}$$

was zu zeigen war. Q.E.D.

Bei der praktischen Durchführung des Schießverfahrens hat man zunächst die $d+1$ AWA (9.1.2) zu lösen. Da zur Aufstellung des Gleichungssystems (9.1.5) aber nur die Endwerte $y^h_{i,N}$, $i = 0, \dots, d$, benötigt werden, ist die Anwendung eines Extrapolationsverfahrens mit Basisschrittweite $H = b - a$ zu empfehlen. Die diskrete Lösung u^h wird dann statt aus der Darstellung $u^h_n = y^h_{0,n} + Y^h_n \hat{s}^h$, wozu ja $y^h_{i,n}$ für alle $n = 0, \dots, N$ berechnet werden müssten, durch nochmalige Lösung der einzelnen AWA

$$u'(t) - A(t)u(t) = f(t)\,, \quad t \in I\,, \quad u(a) = \hat{s}^h\,,$$

bestimmt. Je nachdem, mit welcher Methode dies geschieht, erhält man natürlich möglicherweise eine leicht veränderte Approximation $\tilde{u}^h_n$.

Das Hauptproblem bei der Durchführung des oben beschriebenen sog. „einfachen“ Schießverfahrens ist das der Stabilität bei Integration über längere Intervalle I. Der Wert der Lösung $y(t; s)$ der AWA (9.1.3) am rechten Intervallpunkt b kann bei etwas instabileren Problemen sehr empfindlich gegenüber Störungen im Anfangswert s sein. Unter Umständen muss $\hat{s}$ zur Kompensation dieser Instabilität mit solcher Genauigkeit berechnet werden, dass der dazu erforderliche numerische Aufwand bei der Diskretisierung der AWA (9.1.2) nicht mehr realisierbar ist.

Beispiel 9.1:

$$y_1'(t) = y_2(t)\,, \quad y_2'(t) = 110 y_1(t) + y_2(t)\,.$$

Die allgemeine Lösung ist (mit beliebigen Zahlen c_1, c_2)

$$y(t) = \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{bmatrix} = c_1\, e^{-10t} \begin{bmatrix} 1 \\ -10 \end{bmatrix} + c_2\, e^{11t} \begin{bmatrix} 1 \\ 11 \end{bmatrix}.$$

Für die Anfangswerte $y(0) = (s_1, s_2)^T$ erhalten wir also

$$y(t; s) = \frac{11s_1 - s_2}{21}\, e^{-10t} \begin{bmatrix} 1 \\ -10 \end{bmatrix} + \frac{10s_1 + s_2}{21}\, e^{11t} \begin{bmatrix} 1 \\ 11 \end{bmatrix}.$$

Den Randbedingungen $y_1(0) = 1,\ y_1(10) = 1$ genügt die Lösung

$$y(t) = \frac{e^{110} - 1}{e^{110} - e^{-100}}\, e^{-10t} \begin{bmatrix} 1 \\ -10 \end{bmatrix} + \frac{1 - e^{-100}}{e^{110} - e^{-100}}\, e^{11t} \begin{bmatrix} 1 \\ 11 \end{bmatrix}.$$

Insbesondere ist

$$y_2(0) = -10 + \frac{21 - e^{-100}}{e^{110} - e^{-100}} \sim -10 + 3.5 \cdot 10^{-47}.$$

Eine Rechnung mit zehn Stellen Genauigkeit ergibt für den leicht gestörten Startwert

$$\tilde{s} = \begin{bmatrix} 1 \\ -10 + 10^{-9} \end{bmatrix}.$$

den zugehörigen Endwert $y_1(10; \tilde{s}) \sim 10^{37}$ anstelle des exakten Wertes $y_1(10; \bar{s}) = 1$. Bei diesem hochgradig instabilen Problem versagt die Schießverfahren also völlig.

Bei dem eben betrachteten Beispiel liegt offensichtlich ein exponentielles Wachstum in der Abhängigkeit der Lösung $y(x; s)$ vom Anfangswert s vor:

$$\|y(t; s_1) - y(t; s_2)\| = O(e^{11t})\, \|s_1 - s_2\|.$$

Diese Beobachtung ist in Übereinstimmung mit dem Resultat des Stabilitätssatzes aus Kapitel 1

$$\|y(t; s_1) - y(t; s_2)\| \le e^{L|t-a|}\, \|s_1 - s_2\|,$$

wobei L die Lipschitz-Konstante des Systems repräsentiert. Um dieses Instabilitätsproblem zu überwinden, wird das einfache Schießverfahren zum sog. „Mehrfachschießverfahren“ („multiple shooting method“ nach R. Bulirsch) erweitert. Dazu teilen wir das Intervall $[a, b]$ so in Teilintervalle auf,

$$a = t_1 < \cdots < t_k < \cdots < t_{R+1} = b,$$

dass die kritische Größe

$$e^{L(t_{k+1} - t_k)}$$

nicht zu groß wird. Dann wird die *Schießprozedur* auf jedes der Teilintervalle $[t_k, t_{k+1}]$ angewendet und die dabei gewonnenen Teilstücke der Lösung zu einer globalen Lösung zusammengesetzt.

Für gegebene Vektoren $s_k \in \mathbb{R}^d, k = 1, \dots, R$, seien $y(t; t_k, s_k)$ die Lösungen der AWA

$$y'(t) - A(t)y(t) = f(t)\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad y(t_k) = s_k\ : \tag{9.1.7}$$

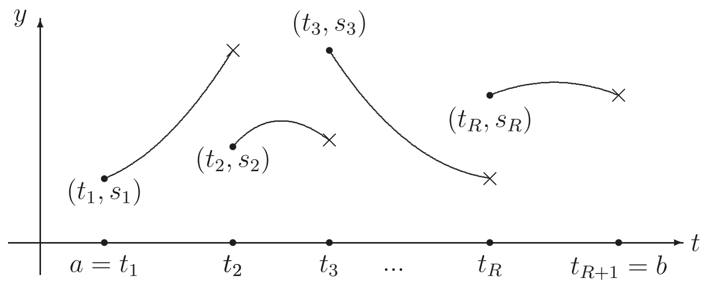

Abbildung 9.2: Konzept des Mehrfachschießverfahrens

Das Problem besteht dann darin, die R Vektoren s_k so zu bestimmen, dass die zusammengesetzte Funktion $y(t) : [a, b] \to R$,

$$y(t) := y(t; t_k, s_k)\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad k = 1, \dots, R\,,$$

stetig auf ganz $[a, b]$ wird und der Randbedingung

$$B_a y(a) + B_b y(b) = g$$

genügt. Für $t \in [t_k, t_{k+1})$ gilt dann

$$\begin{aligned} y(t) &= y(t) - y(t_k) + \sum_{l=1}^{k-1} \{y(t_{l+1}) - y(t_l)\} + y(a) \\ &= \int_{t_k}^{t} y'(\tau)\, d\tau + \sum_{l=1}^{k-1} \int_{t_l}^{t_{l+1}} y'(\tau)\, d\tau + y(a) \\ &= \int_a^t \{A(\tau)y(\tau) + f(\tau)\}\, d\tau + y(a)\,, \end{aligned}$$

d. h.: $y(t)$ ist auf I sogar stetig differenzierbar und somit Lösung der RWA (9.1.1). Die obigen Forderungen an $y(t)$ ergeben folgende Bestimmungsgleichungen für die Vektoren $s_k \in \mathbb{R}^d$:

$$y(t_{k+1}; t_k, s_k) = s_{k+1}\,, \quad k = 1, \dots, R-1\,, \tag{9.1.8}$$

$$B_a s_1 + B_b y(b; t_R, s_R) = g\,. \tag{9.1.9}$$

Seien wieder $y_k(t), Y_k(t)$, $(k=1, \dots, R)$ die eindeutig bestimmten Lösungen der AWA

$$y_k'(t) - A(t)y_k(t) = f(t)\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad y_k(t_k) = 0\,, \tag{9.1.10}$$

$$Y_k'(t) - A(t)Y_k(t) = 0\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad Y_k(t_k) = I\,. \tag{9.1.11}$$

Die Gleichungen (9.1.8) führen dann über die lokalen Lösungsdarstellungen

$$y(t;t_k,s_k) = y_k(t) + Y_k(t)\cdot s_k\,, \quad k=1,\dots,R\,,$$

auf

$$\begin{aligned} y_k(t_{k+1}) + Y_k(t_{k+1})s_k &= s_{k+1}\,, \quad k=1,\dots,R-1\,, \\ B_a s_1 + B_b\{y_R(b) + Y_R(b)s_R\} &= g\,. \end{aligned}$$

Die Parametervektoren $s_1,\dots,s_R$ sind also bestimmt durch ein lineares $Rd\times Rd$-Gleichungssystem

$$A_R s = \beta \tag{9.1.12}$$

mit $s=(s_1,\dots,s_R)^T$, $\beta = \big(g - B_b y_R(b), y_1(t_2),\dots,y_{R-1}(t_R)\big)^T$ und der Koeffizientenmatrix

$$A_R = \begin{bmatrix} B_a & & & & B_bY_R(b) \\ -Y_1(t_2) & I & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & -Y_{R-1}(t_R) & I \end{bmatrix}$$

Die mit dem eventuellen Lösungsvektor $\hat{s}$ gebildete Funktion $u\in C(I)$ ist dann konstruktionsgemäß die Lösung der RWA (9.1.1). Zur Untersuchung der Regularität der Matrix A nehmen wir folgende Dreieckszerlegung vor:

$$A_R = \underbrace{\begin{bmatrix} Q_1 & \dots & Q_R \\ & I & \\ & & \ddots \\ 0 & & I \end{bmatrix}}_{=:\,\mathcal{R}} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} I & & & 0 \\ -Y_1(t_2) & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & Y_{R-1}(t_R) & I \end{bmatrix}}_{=:\,\mathcal{L}}$$

mit den rekursiv bestimmten $d\times d$-Matrizen

$$\begin{aligned} Q_R &= B_b\,Y_R(b) \\ &\vdots \\ Q_k &= Q_{k+1}\,Y_k(t_{k+1})\,, \quad k=R-1,\dots,2, \\ &\vdots \\ Q_1 &= B_a + Q_2\,Y_1(t_2) \\ &= B_a + B_bY_R(b)Y_{R-1}(t_R)\dots Y_1(t_2)\,. \end{aligned}$$

Offensichtlich ist die Matrix A regulär, wenn es die Matrix $Q_1 = B_a + B_bY_R(t_{R-1})\dots Y_1(t_2)$ ist.

Hilfssatz 9.1 („Schießmatrix“): *Mit der Matrix* $Q = B_a + B_bY(b)$ *des einfachen Schießverfahrens gilt* $Q_1 = Q$ *.*

Beweis: Die Fundamentalmatrizen $Y(t)$ und $Y_k(t)$ sind definiert als Lösungen der AWAn:

$$Y'(t) - A(t)Y(t) = 0\,, \quad t \in I\,, \quad Y(a) = I\,,$$

$$Y_k'(t) - A(t)Y_k(t) = 0\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad Y_k(t_k) = I\,, \quad k = 1, \dots, R\,.$$

Die Lösung der AWA

$$y_k'(t) - A(t)y(t) = 0\,, \quad t \in I\,, \quad y(a) = \alpha = \sum_{i=1}^{d} \alpha_i e_i\,,$$

ist gerade $y(t) = Y(t)\alpha$ bzw. $y(t) = Y_1(t)\alpha$. Also ist

$$Y_1(t_2)\alpha = Y(t_2)\alpha \qquad \forall\, \alpha \in \mathbb{R}^d\,.$$

Analog gilt allgemein

$$Y_k(t_{k+1})[Y_{k-1}(t_k)\alpha] = Y_{k-1}(t_{k+1})\alpha\,,$$

und durch Rekursion folgt daraus

$$Y_R(t_{R+1})\dots Y_1(t_2)\alpha = Y(t_{R+1})\alpha \qquad \forall\, \alpha \in \mathbb{R}^d\,.$$

Q.E.D.

Das Mehrfachschießverfahren ist also durchführbar, wenn die gegebene RWA eine eindeutige Lösung besitzt, d. h. wenn $B_a + B_bY(b)$ regulär ist.

Die Dreieckszerlegung $A_R = \mathcal{RL}$ könnte natürlich direkt zur Berechnung des Parametervektors $\hat{s}$ verwendet werden. Durch Rückwärtseinsetzen wäre zunächst $\mathcal{R}\sigma = \beta$ nach σ aufzulösen, wozu es im Wesentlichen nur der Lösung des $d \times d$-Systems

$$Q_1\sigma_1 = \sum_{i=2}^{d} Q_i\beta_i \tag{9.1.13}$$

bedarf. Durch sukzessives Vorwärtseinsetzen erhält man dann $\hat{s}$ aus $\mathcal{L}\hat{s} = \sigma$. Die Matrix $Q_1 = Q$ wird aber meist sehr schlecht konditioniert sein, wie wir ja schon im Zusammenhang mit dem einfachen Schießverfahren festgestellt haben:

$$\|Q_1^{-1}\| \gg 1\,.$$

Statt der obigen $\mathcal{RL}$-Zerlegung von $\mathcal{A}$ verwendet man daher besser das Gaußsche Eliminationsverfahren mit partieller Pivotierung direkt am System $\mathcal{A}s = \beta$. Bei der praktischen Durchführung des Mehrfachschießverfahrens berechnet man analog zum einfachen Schießverfahren wieder mit Hilfe eines „AWA-Lösers“ diskrete Näherungen $y_{i,n}^h$ und $Y_{i,n}^h$ zu den Funktionen $y_i(t)$ und $Y_i(t)$ und erhält damit eine Approximation

$$\mathcal{A}^h\hat{s}^h = \beta^h$$

zum System (9.1.12). Die daraus bestimmten Parametervektoren $\hat{s}_1^h, \dots, \hat{s}_R^h$ ergeben dann durch

$$y_n^h := y_{k,n}^h + Y_{k,n}^h \hat{s}_k^h\,, \quad t_n \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad k = 1, \dots, R,$$

eine Näherungslösung y_n^h für die RWA (9.1.1). Analog wie in Satz 9.1 zeigt man auch hier die Konvergenz

$$\max_{t_n \in I} \|u(t_n) - y_n^h\| = O(h^m) \quad (h \to 0)$$

mit der Ordnung m des AWA-Lösers. (Dabei sind natürlich die *Schießpunkte* t_k als Gitterpunkte angenommen!) Darüber hinaus lässt sich noch zeigen, dass i. Allg. die Matrix Q_1^h eine wesentlich bessere Approximation von Q_1 ist als Q^h von Q.

9.2 Nichtlineares Schießverfahren

Wir betrachten nun die allgemeine RWA

$$u'(t) = f(t, u(t))\,, \quad t \in I\,, \quad r(u(a), u(b)) = 0\,, \tag{9.2.14}$$

unter den Bedingungen von Abschnitt 8.1.1 und nehmen an, dass eine lokal eindeutige Lösung $u(t)$ existiert. Das einfache Schießverfahren zur Berechnung von $u(t)$ geht aus von der AWA

$$y'(t) = f(t, y(t))\,, \quad t \in I\,, \quad y(a) = s\,, \tag{9.2.15}$$

und versucht den Parameter $\hat{s} \in \mathbb{R}^d$ so zu bestimmen, dass die Lösung $y(t;\hat{s})$ der Randbedingung genügt:

$$r(y(a;\hat{s}), y(b;\hat{s})) = r(\hat{s}, y(b;\hat{s})) = 0\,.$$

Unter der Annahme, dass (9.2.15) wenigstens für ein gewisses Intervall $[s_1, s_2]$ eindeutige Lösungen $y(x;s)$ auf I besitzt, ist dieses Vorgehen äquivalent zur Suche nach einer Nullstelle $\hat{s} \in [s_1, s_2]$ der implizit definierten Funktion

$$F(s) := r(s, y(b;s))\,.$$

Zur Auswertung von $F(s)$ für ein $s \in [s_1, s_2]$ muss zunächst der Wert $y(b;s)$ der zugehörigen Lösung der AWA (9.2.15) berechnet werden. Zur Berechnung einer Nullstelle $\hat{s}$ von $F(s)$ bietet sich etwa eine Fixpunktiteration der Form

$$s^{(i)} = s^{(i-1)} - CF(s^{(i-1)}), \quad i \in \mathbb{N}, \tag{9.2.16}$$

an, mit einer geeigneten regulären Matrix $C \in \mathbb{R}^{d\times d}$. Wir wissen, dass die Lösung $y(b;s)$ der AWA (9.2.15) Lipschitz-stetig vom Anfangswert $y(a;s) = s$ abhängt; dies ist eine Konsequenz des allgemeinen Stabilitätssatzes 1.4. Damit wird auch die Funktion $F(s)$ Lipschitz-stetig, und die Fixpunktiteration (9.2.16) kann durch geschickte Wahl von C zur Konvergenz gebracht werden. Diese ist allerdings in der Regel zu langsam, so dass man besser das wesentlich schnellere Newton-Verfahren verwendet. Dazu benötigen wir aber die Ableitung (Jacobi-Matrix) der Funktion $F(s)$ bzw. die Ableitung des Wertes $y(b;s)$

nach dem Anfangswert s. Letztere ist eine Matrixfunktion $G(t;s) := \partial_s y(t;s)$ und nach Satz 1.6 als Lösung einer linearen Matrix-AWA gegeben, vorausgesetzt alle Daten des Problems sind hinreichend „glatt“:

$$G(t;s)'(t) = f_x(t, y(t;s))G(t;s)(t)\,, \quad t \in I\,, \quad G(a;s) = I\,. \tag{9.2.17}$$

Ist auch die Funktion $r(.,.)$ stetig differenzierbar (In der Praxis ist r meist sogar linear.), so wird die Funktion $F(s)$ stetig differenzierbar mit der Ableitung

$$F'(s) = r_x(s, y(b;s)) + r_y(s, y(b;s))G(b;s).$$

Damit lautet das Newton-Verfahren formal wie folgt:

$$s^{(i+1)} = s^{(i)} - F'(s^{(i)})^{-1}F(s^{(i)})\,, \quad i = 0, 1, 2, \dots\,, \tag{9.2.18}$$

wobei $s^{(0)}$ ein geeigneter Startwert ist. Um $s^{(i+1)}$ aus $s^{(i)}$ zu berechnen, sind dann folgende Schritte nötig:

i) Lösung der AWA
$$y'(t) = f(t, y(t))\,, \quad t \in I\,, \quad y(a) = s^{(i)},$$
und Auswertung der Funktion
$$F(s^{(i)}) = r(s^{(i)}, y(b; s^{(i)}));$$

ii) Lösung der linearen (Matrix)-AWA
$$G'(t; s^{(i)}) = f_x'(t, y(t; s^{(i)}))G(t; s^{(i)}), \quad t \in I\,, \quad G(a; s^{(i)}) = I,$$
und Auswertung der Matrixfunktion
$$F'(s^{(i)}) = r_x(s^{(i)}, y(b; s^{(i)})) + r_y(s^{(i)}, y(b; s^{(i)}))G(b; s^{(i)});$$

iii) Lösung des linearen Gleichungssystems (Newton-Schritt)
$$F'(s^{(i)})\delta s^{(i)} = -F(s^{(i)}), \quad s^{(i+1)} = s^{(i)} + \delta s^{(i)}.$$

Beispiel 9.2:

$$w''(t) = \tfrac{3}{2}w(t)^2\,, \quad t \in [0,1]\,, \quad w(0) = 4\,, \quad w(1) = 1\,,$$

bzw.

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= y_2(t) \\ y_2'(t) &= \tfrac{3}{2}y_1(t)^2\,, \quad t \in [0,1], \quad y_1(0) = 4\,, \quad y_1(1) = 1. \end{aligned}$$

Die zugehörige AWA ist hier problemangepasst:

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= y_2(t) \\ y_2'(t) &= \tfrac{3}{2}y_1(t)^2, \quad t \in [0,1], \quad y_1(0) = 4\,, \quad y_2(0) = s. \end{aligned}$$

Die daraus resultierende Funktion $F(s)$ zeigt Abb. 9.3.

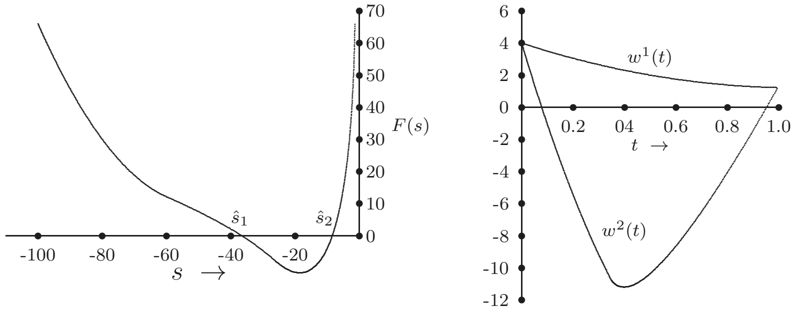

Abbildung 9.3: Verlauf der Funktion $F(s)$.

Offensichtlich hat die Funktion $F(s)$ zwei Nullstellen, welche zu zwei verschiedenen Lösungen w^i $(i = 1, 2)$ der RWA gehören. Obwohl diese dieselben Randwerte haben, besteht aber kein Widerspruch zum Eindeutigkeitssatz 8.1, da es sich hier um eine RWA 2-ter Ordnung handelt. Die oben beschriebene Newton-Iteration liefert die folgenden Näherungswerte für die Nullstellen:

$$\hat{s}_1 = -8\,, \quad \hat{s}_2 = -35.8585487278\,.$$

Ein Vergleich mit der bekannten exakten Lösung zeigt, dass die Schießmethode in diesem Fall eine auf mindestens 10 Stellen genaue Näherung liefert.

Die Berechnung der Ableitungsmatrix $F'(s^{(i)})$ in Schritt (ii) erfordert die Lösung eines $d \times d$-Systems von linearen gewöhnlichen Differentialgleichungen. Dies kann in der Praxis zu aufwendig sein. Stattdessen kann man die Ableitung F' durch einen Differenzenquotienten approximieren

$$\Delta F(s) = (\Delta_1 F(s), \dots, \Delta_d F(s))\,,$$

wobei

$$\Delta_j F(s) = \frac{F(s_1, \dots s_j + \Delta s_j, \dots, s_d) - F(s_1, \dots, s_d)}{\Delta s_j}\,.$$

Die Werte $F(s_1, \dots, s_j + \Delta s_j, \dots, s_d)$ und $F(s_1, \dots, , s_d)$ werden gemäß Schritt i) berechnet.

Zur Rechtfertigung des Schießverfahrens für die RWA (9.2.14) und insbesondere der Verwendung des Newton-Verfahrens zur Berechnung der Nullstelle $\hat{s}$ der impliziten Funktion $F(s)$ sei nun folgendes angenommen:

Auf einer ρ-Umgebung $(\rho > 0)$

$$U_\rho = \{\, (t, x) \in I \times \mathbb{R}^d |\ \|x - u(t)\| \le \rho,\ t \in I\}$$

der isolierten Lösung $u(t)$ der RWA (9.2.14) ist $f \in C^2(U_\rho)$ und besitzt bzgl. des Arguments x die Lipschitz-Konstante L. Auf einer ρ-Umgebung

$$Q_\rho = \{\, (x, y) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \,|\, \|x - u(a)\| \le \rho\,,\ \|y - u(b)\| \le \rho\,\}$$

der Randwerte ist $r \in C^2(Q_\rho)$. In Analogie zu Satz 1.1.7 des Kapitels 1.1.2 gilt dann:

Hilfssatz 9.2 (Nichtlineares Schießverfahren): *Für jeden Vektor*

$$s \in K = \{ \sigma \in \mathbb{R}^d \mid \|u(a) - \sigma\| < \rho\, e^{-L(b-a)} \}$$

besitzt die AWA

$$y'(t) = f(t, y(t)) , \quad t \in I , \quad y(a) = s ,$$

eine eindeutige Lösung $y(t;s)$ *, welche ganz in* U_ρ *verläuft. Weiter ist* $u(b;s) \in C^2(K)$ *, und die Ableitungsmatrix* $\partial_s y(t;s) = G(t;s)$ *erfüllt*

$$G'(t;s) = f_x(t, y(t;s))G(t;s) , \quad t \in I , \quad G(a;s) = I .$$

Beweis: Siehe: E.A. Coddington und N. Levinson: Theory of Ordinary Differential Equations, McGraw-Hill, 1955. Q.E.D.

Mit Hilfe dieses Resultates erhalten wir nun leicht folgenden Satz.

Satz 9.2 (Newton-Bedingungen): *Unter den obigen Bedingungen gilt* $F(s) \in C^2(K)$ *,* $F(u(a)) = 0$ *, und* $F'(u(a))$ *ist regulär.*

Beweis: i) ist eine unmittelbare Folge der Glattheitsvoraussetzungen an $f(t,x)$ und $r(x,y)$ und Hilfsatz 9.2. ii) ist offensichtlich. Zur Verifikation von iii) schreiben wir

$$F'(s) = r_x(s, y(b;s)) + r_y(s, y(b;s))G(b;s) .$$

Offenbar ist $G(t;s) = Y(t)$ gerade die Fundamentalmatrix der linearen Gleichung (für festes s)

$$Y'(t) - f_x(t, y(t;s)Y(t) = 0 , \quad t \geq a , \quad Y(a) = I.$$

Also ist

$$F'(u(a)) = r_x(u(a), y(b;u(a))) + r_y(u(a), y(b;u(a)))Y(b) .$$

Diese Matrix ist aber gemäß Satz 8.2 notwendig regulär, wenn $u(t)$ isolierte Lösung ist, da dann das linearisierte System (8.1.2) aus Satz 8.1 nur die triviale Lösung haben kann. Q.E.D.

Satz 9.2 enthält gerade die wesentlichen Bedingungen, unter denen das Newton-Verfahren lokal quadratisch konvergiert:

$$\|s^{(k)} - \hat{s}\| \leq c\|s^{(k-1)} - \hat{s}\|^2 , \quad k = 1, 2, \ldots ;$$

auf die wichtige Frage der Bestimmung eines geeigneten Startvektors $s^{(0)} \in K$ kann hier nicht eingegangen werden (siehe dazu z. B. [Stoer/Bulirsch] im Literaturverzeichnis).

Wir skizzieren nun noch die kontinuierliche Version des Mehrfachschießverfahrens zur Lösung der RWA (9.2.14).

Für gegebene Vektoren $s_k\ (k = 1, \dots, R)$ seien $y(t; t_k, s_k)$ die Lösungen der AWA

$$y'(t) = f(t, y(t))\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}]\,, \quad y(t_k) = s_k\,. \tag{9.2.19}$$

Das Problem besteht nun darin, die Vektoren s_k so zu bestimmen, dass die zusammengesetzte Funktion

$$\begin{aligned} y(t) &:= y(t; t_k, s_k)\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}], \quad k = 1, \dots, R-1, \\ y(b) &= s_{R+1}, \end{aligned} \tag{9.2.20}$$

stetig (und damit natürlich notwendig auch stetig differenzierbar) auf dem ganzen Intervall $[a, b]$ wird und der Randbedingung genügt:

$$r(y(a), y(b)) = r(s_1, s_{R+1}) = 0\,.$$

Dann ist $y(t)$ die gesuchte Lösung der RWA (8.1.11).

Dies sind $d \cdot R$ Bestimmungsgleichungen für s_k:

$$\begin{aligned} y(t_{k+1}; t_k, s_k) &= s_{k+1}\,, \quad k = 1, \dots, R-1, \\ r(s_1, s_{R+1}) &= 0, \end{aligned} \tag{9.2.21}$$

die auch in der Form geschrieben werden können:

$$F(s) := \begin{bmatrix} F_1(s_1, s_2) \\ \vdots \\ F_{R-1}(s_{R-1}, s_R) \\ F_R(s_1, s_{R+1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y(t_2; t_1, s_1) - s_2 \\ \vdots \\ y(t_R; t_{R-1}, s_{R-1}) - s_R \\ r(s_1, s_{R+1}) \end{bmatrix} = 0\,.$$

Eine Nullstelle $\bar{s} \in \mathbb{R}^{d\times R}$ der Funktion $F(s)$ kann wieder mit Hilfe des Newton-Verfahrens bestimmt werden. Ausgehend von einem geeigneten Startwert $s^{(0)}$ lautet die Iteration dann

$$s^{(i+1)} = s^{(i)} - F'(s^{(i)})^{-1} F(s^{(i)})\,, \quad i = 0, 1, 2, \dots\,. \tag{9.2.22}$$

Jeder Iterationsschritt erfordert nun die Lösung der R AWAn

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(t, y(t))\,, \quad t \in [t_k, t_{k+1}] \\ y(t_k) &= s_k^{(i)} \to y(t_{k+1}; t_k, s_k^{(i)}), \end{aligned}$$

für $k = 1, \dots, R$, und die Berechnung der Jacobi-Matrix

$$F'(s^{(i)}) = \left(\frac{\partial}{\partial s_j} F_k(s^{(i)}) \right)_{i,j=1,\dots,R} = \begin{bmatrix} G_1 & -I & 0 & \dots & 0 \\ 0 & G_2 & -I & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & G_{R-1} & -I \\ A & 0 & \dots & 0 & B \end{bmatrix},$$

wobei die folgenden Abkürzungen verwendet wurden:

$$\begin{aligned} G_k &= \frac{\partial}{\partial s_k} y(t_{k+1}; t_k, s_k)\,, \quad k = 1, \dots, R\,, \\ B &= \frac{\partial}{\partial s_R} r(s_1, s_{R+1})\,, \quad A = \frac{\partial}{\partial s_1} r(s_1, s_{R+1})\,. \end{aligned}$$

Normalerweise ist die direkte Berechnung von $F'(s^{(i)})$ aus seiner Darstellung als Lösung einer linearen AWA viel zu aufwendig. Da die Koeffizienten dieses Systems von der Lösung $y(t)$ abhängen, müßte man diese dazu mit großer Genauigkeit auf dem „ganzen" Intervall I berechnen, obwohl sie eigentlich nur in den Gitterpunkten t_k benötigt wird! Man ersetzt daher die Ableitung $F'(s^{(i)})$ wieder durch einen Differenzenquotienten

$$\Delta F(s^{(i)}) = (\,\Delta_{jk} F(s^{(i)})\,)_{j,k=1,\dots,R}\,,$$

wobei

$$\Delta_{jk} F(s^{(i)}) = \frac{F(\dots, s_{jk}^{(i)} + \Delta s_{jk}, \dots) - F(\dots, s_{jk}^{(i)}, \dots)}{\Delta s_{jk}}\,.$$

Zur Berechnung der Iterierten $s^{(i+1)}$ aus $s^{(i)}$ schreiben wir das lineare Gleichungssystem (9.2.22) in der Form

$$\begin{aligned} G_1 \Delta s_1 - \Delta s_2 &= -F_1 \\ &\vdots \\ G_{R-1} \Delta s_{R-1} - \Delta s_R &= -F_{R-1} \\ A \Delta s_1 + B \Delta s_r &= -F_R \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen $\Delta s_k := s_k^{(i+1)} - s_k^{(i)}$ und $F_k := F_k(s_k, s_{k+1})$. Durch Kombination dieser Gleichung erhält man dann:

$$\begin{aligned} \Delta s_2 &= G_1 \Delta s_1 + F_1 \\ &\vdots \\ \Delta s_R &= G_{R-1} \dots G_1 \Delta s_1 + \textstyle\sum_{j=1}^{R-1} (\Pi_{l=j+1}^{R-1} G_l) F_j\,, \end{aligned} \tag{9.2.23}$$

und aus der letzten Gleichung:

$$[A + B G_{R-1} \dots G_1] \Delta s_1 = w \tag{9.2.24}$$

mit $\quad w = -[F_R + B F_{R-1} + B G_{R-1} F_{R-2} + \dots + B G_{R-1} \dots G_2 F_1]\,.$

Das lineare Gleichungssystem (9.2.24) für Δs_1 kann nun etwa mit Hilfe der Gauß-Elimination gelöst werden. Die anderen Unbekannten Δs_k, $k = 2, \dots, R$ erhält man dann aus den Rekursionsgleichungen (9.2.23).

9.3 Übungsaufgaben

Aufgabe 9.1: Es sei $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ eine reguläre Matrix. Man zeige, dass für jede Matrix $B \in \mathbb{R}^{d\times d}$ mit der Eigenschaft $\|B\| < \|A^{-1}\|^{-1}$ bzgl. irgend einer natürlichen Matrizennorm $\|\cdot\|$ auch die Matrix $A+B$ regulär ist und dass dann gilt:

$$\|(A+B)^{-1}\| \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}\|\|B\|}\,.$$

Aufgabe 9.2: Für eine d-dimensionale lineare RWA mit „separierten“ Randbedingungen

$$u'(t) = Au(t) + f(t), \quad t \in [a,b],$$
$$u_i(a) = \alpha_i,\ i = 1,\dots,r, \quad u_i(b) = \beta_i,\ i = r+1,\dots,d,$$

kann die Dimension der im Zuge des Mehrfachschießverfahrens zu lösenden Gleichungssysteme reduziert werden. Für den Fall $d = 2$ (und somit $r = 1$), sowie $a = x_1 < x_2 < x_3 = b$ stelle man das Gleichungssystem für die Parametervektoren s_1 und s_2 auf. Dabei soll entsprechend der Separation der Randbedingungen von $a = x_1$ nach x_2 und rückwärts von $b = x_3$ nach x_2 integriert werden (sog. „Gegenschießen“).

Aufgabe 9.3: Die Randwertaufgabe

$$u''(t) = 100u(t), \quad 0 \le t \le 3, \quad u(0) = 1,\ \ u(3) = e^{-30},$$

soll mit dem einfachen Schießverfahren gelöst werden. Dazu berechnet man die Lösung $u(t;s)$ der Anfangswertaufgabe

$$u''(t) = 100u(t), \quad t \ge 0, \quad u(0) = 1,\ \ u'(0) = s,$$

und bestime $s = s^*$ so, dass $u(3;s^*) = e^{-30}$ wird. Wie groß ist der relative Fehler in $u(3;s^*)$, wenn s^* mit einem relativen Fehler ε behaftet ist? (Hinweis: man forme die RWA in ein System erster Ordnung um und bestimme dessen allgemeine Lösung durch Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der 2×2 Koeffizientenmatrix.)

Aufgabe 9.4 (Praktische Aufgabe): Man löse die skalare Randwertaufgabe

$$-u''(t) - 4u'(t) + \sin(t)u(t) = \cos(t), \quad 0 \le t \le \pi,$$
$$u(0) = u(\pi),\ \ u'(0) = u'(\pi),$$

mit Hilfe des Einfachschießverfahrens. Als Integrator für die AWA verwende man alternativ das Heunsche Verfahren 2-ter Ordnung und das klassische Runge-Kutta-Verfahren 4-ter Ordnung.