Bachelorarbeit zum Thema

Runge-Kutta Verfahren für parabolische partielle Differentialgleichungen am Beispiel der Wärmeleitungsgleichung

eingereicht von:

Marie Gaedke Matrikelnummer: 4964720 Studiengang: B.Sc. Mathematik

eingereicht am:
7. Oktober 2021

betreut durch: Univ.-Prof. Dr. Volker John

> **Zweitgutachter:** Dr. Alfonso Caiazzo

Selbstständigkeitserklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Die Zeichnungen oder Abbildungen sind von mir selbst erstellt worden. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Marie Gaedke

Inhaltsverzeichnis

	Ein	lleitung	1			
1	Ein	e Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen	3			
	1.1	Anfangs-Randwertproblem der Wärmeleitungsgleichung	3			
	1.2	Sobolev-Räume und schwache Lösungstheorie	5			
2	Fin	ite-Elemente-Methode für elliptische Randwertprobleme	9			
	2.1	Grundlagen	9			
	2.2	Numerische Berechnung für ein elliptisches Problem	13			
3	Rur	nge-Kutta Verfahren für Anfangswertprobleme	15			
4	4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentia					
	gleichungen					
	4.1	Die vertikale Linienmethode	18			
		4.1.1 Diskretisierung des Orts	19			
		4.1.2 Diskretisierung der Zeit	20			
	4.2	Die Rothe-Methode (horizontale Linienmethode)	24			
		4.2.1 Rothe-Verfahren mit expliziten Runge-Kutta Verfahren für die				
		Zeitdiskretisierung	25			
		4.2.2 Rothe-Verfahren mit DIRK Verfahren für die Zeitdiskretisierung .	28			
	4.3	Vergleich der vertikalen Linienmethode und der Rothe-Methode	32			
5	Numerische Berechnungen für ein parabolisches Problem					
6	Zusammenfassung und Ausblick					
	Anl	hang	39			

Einleitung

Mithilfe partieller Differentialgleichungen können unterschiedlichste Probleme aus Natur und Technik beschrieben werden. In dieser Arbeit betrachten wir parabolische Differentialgleichungen, die eine Klasse partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung bilden. Als einfaches Anwendungsbeispiel eines parabolischen Problems stelle man sich einen Stab aus Metall vor, der in der Mitte erhitzt wird. Wir stellen uns die Frage, wie die Temperaturverteilung innerhalb des Stabes nach einer bestimmten Zeit aussieht. Dieser Prozess kann mithilfe parabolischer Differentialgleichungen modelliert werden.

In der heutigen Zeit, in der immer größere Datenmengen und immer komplexere Probleme entstehen, können die Lösungen dieser Probleme sehr kompliziert werden. Für einige Probleme ist bis heute nicht bekannt, ob diese überhaupt eine Lösung besitzen. Die Entwicklung numerischer Verfahren, durch die wir zumindest eine näherungsweise Lösung eines Probleme erhalten, gewinnt deshalb zunehmend an Bedeutung.

In dieser Arbeit werden zwei grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen vorgestellt. Die verschiedenen Ansätze und Methoden werden dabei am Beispiel eines Anfangs-Randwertproblems der Wärmeleitungsgleichung verdeutlicht. Dabei wird insbesondere untersucht, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren und DIRK Verfahren (diagonal implizite Runge-Kutta Verfahren) als Teil numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen angewendet werden können.

Das erste Kapitel dieser Arbeit beginnt mit einer Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen und es wird das Anfangs-Randwertproblem der Wärmeleitungsgleichung eingeführt. Des Weiteren werden einführende Notationen zu passenden Lösungsräumen beschrieben und anschließend eine schwache Formulierung der Wärmeleitungsgleichung hergeleitet. Die im ersten Kapitel beschriebene schwache Formulierung bildet in dieser Arbeit die Grundlage für die Finite-Elemente-Methode. Diese kann zur Ortsdiskretisierung von parabolischen Anfangs-Randwertproblemen angewendet werden und wird im zweiten Kapitel anhand der Poisson-Gleichung erläutert.

Im dritten Kapitel gibt es eine Einführung zu Runge-Kutta Verfahren, die zur Zeitdiskretisierung innerhalb der numerischen Verfahren für parabolische Differentialgleichungen angewendet werden. Dabei wird die allgemeine Form *s*-stufiger Runge-Kutta Verfahren definiert und einige Vor- und Nachteile von expliziten und impliziten Verfahren in Bezug auf die Stabilität erläutert.

Das folgende Kapitel bilden den Kern der Arbeit. Es werden zwei grundlegende numerischen Verfahren für parabolische Probleme vorgestellt. Zum einen die *vertikale Linienmethode*, bei der, ausgehend von einer schwachen Formulierung des Problems, zunächst eine Diskretisierung des Orts vorgenommen wird. Dadurch erhalten wir ein

Einleitung

System gewöhnlicher Differentialgleichungen in der Zeit mit Anfangsbedingungen, welches anschließend mit Runge-Kutta Verfahren gelöst werden kann.

Das zweites Verfahren, welches vorgestellt wird, ist die *Rothe-Methode* (horizontale Linienmethode). Hier ist die Idee, ausgehend von der klassischen Wärmeleitungsgleichung, zunächst eine Diskretisierung der Zeit durchzuführen. Durch die Anwendung von Runge-Kutta Verfahren erhalten wir in jedem Zeitschritt stationäre Randwertprobleme. Diese können mit Verfahren für elliptische Differentialgleichungen gelöst werden. Anschließend folgt ein Vergleich der beiden Verfahren.

Die vertikale Linienmethode und das Rothe-Verfahren werden im fünften Kapitel für ein eindimensionales Beispiel der Wärmeleitungsgleichung implementiert und die Lösung veranschaulicht.

Im letzten Kapitel gibt es eine Zusammenfassung der Ergebnisse und einen Ausblick.

1 Eine Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen

Parabolische Differentialgleichung bilden neben den elliptischen und den hyperbolischen Differentialgleichungen eine Klasse partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Bei parabolischen Differentialgleichungen handelt es sich um instationäre Gleichungen, da sie neben räumlichen Komponenten auch eine Ableitung $\frac{\partial u}{\partial t}$ nach der Zeit besitzen. Sie beschreiben damit Prozesse, die sich ausgehend von einem Anfangszustand in der Zeit entwickeln.

Für die Definition parabolischer Differentialgleichungen betrachten wir die allgemeine Form partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung gegeben durch

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial^2 u}{\partial_i \partial_j} + b(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u + c(\boldsymbol{x})u = f, \qquad (1.1)$$

wobei u die gesuchte Funktion darstellt. Der ortsabhängige Term zweiter Ordnung $\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(\boldsymbol{x}) \frac{\partial^2 u}{\partial_i \partial_j}$ beschreibt die Diffusion von u, der ortsabhängigen Term erster Ordnung $b(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u$ die Konvektion und $c(\boldsymbol{x})u$ wird Reaktionsterm genannt.

Mit den Koeffizienten der Terme zweiter Ordnung a_{ij} , i, j = 1, ..., n, kann eine Matrix

$$A(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} a_{11}(\boldsymbol{x}) & \cdots & a_{1n}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}(\boldsymbol{x}) & \cdots & a_{nn}(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

aufgestellt werden.

Eine lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form (1.1) heißt parabolisch, wenn die Matrix A den Eigenwert Null genau einmal und zusätzlich entweder nur positive oder nur negative Eigenwerte besitzt. Darüber hinaus muss gelten, dass rang $(A(\mathbf{x}), b(\mathbf{x})) = n$ ist, vgl. [GR05, S. 14-15].

1.1 Anfangs-Randwertproblem der Wärmeleitungsgleichung

In dieser Arbeit wird die Wärmeleitungsgleichung exemplarisch für ein parabolisches Problem betrachtet.

1 Eine Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen

Die Gleichung modelliert die zeit- und ortsabhängige Temperaturverteilung in einem wärmeleitenden Körper.

Im folgenden sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d, d \leq 3$, ein offenes, beschränktes Lipschitz-Gebiet mit Rand $\partial \Omega$ und T > 0 eine reelle Zahl. Dabei wird ein Lipschitz-Gebiet wie folgt definiert:

Definition 1.1.1 (Lipschitz-Gebiet). [Ste03, S. 26]

Ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d, d \geq 2$ wird als Lipschitz-Gebiet bezeichnet, falls der Rand $\partial \Omega$ bezüglich einer beliebigen Zerlegung stückweise durch eine lipschitz-stetige Funktion dargestellt werden kann.

Für Lipschitz-Gebiete Ω existiert fast überall an $\partial \Omega$ eine eindeutige äußere Einheitsnormale n(x). Damit ist die erste Green'schen Formel

$$\int_{\Omega} \Delta(u(x,t))\varphi(x) = -\int_{\Omega} \nabla u(x,t) \cdot \nabla \varphi(x) \, dx + \int_{\partial \Omega} \frac{\partial u(t,x)}{\partial \boldsymbol{n}(x)}\varphi(x) \, ds, \qquad (1.2)$$

wobei φ einfach und *u* zweifach stetig differenzierbar sei, auf Ω anwendbar, vgl. [Bey13, S. 31], die wir in Kapitel 1.2 zur Herleitung einer schwachen Formulierung der Wärmeleitungsgleichung anwenden werden.

Wir wollen nun das Anfangs-Randwertproblem für die Wärmeleitungsgleichung mit homogenen Dirichlet'schen Randbedingungen betrachten. Dabei kann das Problem als ein Randwertproblem in Bezug auf den Ort und ein Anfangswertproblem in Bezug auf die Zeit gesehen werden, wodurch räumliche Randbedingungen und zeitliche Anfangswerte notwendig sind. Es kann beschrieben werden durch:

Finde $u \in (C^1((0,T)) \cap C^0([0,T])) \times (C^2(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega}))$, sodass

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}u(x,t) - \Delta u(x,t) &= f(x,t) & \text{ in } \Omega \times (0,T], \\ u(x,t) &= 0 & \text{ auf } \partial \Omega \times (0,T], \quad \text{(Randbedingung)} \\ u(x,0) &= u_0(x) & \text{ in } \Omega \times \{0\}. \quad \text{(Anfangsbedingung)} \end{aligned}$$
(1.3)

Die Funktion $u: \overline{\Omega} \times [0, T] \to \mathbb{R}$ beschreibt die Temperaturverteilung im Gebiet Ω abhängig von der Zeit t und wird klassische Lösung des Anfangs-Randwertproblems genannt, falls u die Wärmeleitungsgleichung mit zugehörigen Anfangs- und Randbedingungen erfüllt. Die Funktion $f: \overline{\Omega} \times [0, T] \to \mathbb{R}$ kann als äußere Wärmequelle verstanden werden und $u_0: \overline{\Omega} \times \{0\} \to \mathbb{R}$ als die Anfangstemperatur in Ω zum Zeitpunkt t = 0. Um ein gut gestelltes Problem zu erhalten, müssen zusätzlich Anforderungen an die Daten f, u_0 gestellt werden. Die Funktionen f und u_0 müssen hinreichend glatt sein und zusätzlich muss die Bedingung $u_0 \mid_{\partial\Omega} = 0$ gelten, die sich durch das Zusammenführen der Anfangs- und Randbedingungen für u ergibt.

1.2 Sobolev-Räume und schwache Lösungstheorie

Die Suche einer klassischen Lösung gelingt nicht immer. Man kann nicht erwarten, dass eine partielle Differentialgleichung eine klassische Lösung besitzt, denn im Allgemeinen sind nicht alle Voraussetzungen gegeben, die an u, f und u_0 gestellt werden. Dies führt zur Idee einer schwachen Formulierung des Anfangs-Randwertproblems (1.3), die in diesem Kapitel hergeleitet werden soll.

Um die schwache Formulierung eines Anfang-Randwertproblems einzuführen, brauchen wir einige grundlegende Definitionen zu passenden Funktionenräumen für die Lösung u und die Daten u_0, f . Dazu gehören die Lebesgue-Räume, Sobolev-Räume und den Begriff der schwachen Ableitung, die im Folgenden beschrieben werden.

Die Lebesgue-Räume bilden die Grundlage für die Sobolev-Räume. Für unsere Betrachtungen spielt der Lebesgue-Raum $L^2(\Omega)$ eine besondere Rolle.

Definition 1.2.1 (Lebesgue-Raum $L^2(\Omega)$). [For17, S. 133]

Der Lebesgue-Raum $L^2(\Omega)$ besteht aus allen messbaren Funktionen v für die

$$\int_{\Omega} |v|^2 \, dx < \infty$$

gilt. Eine Norm wird definiert durch

$$||v||_{L^2} := \left(\int_{\Omega} |v(x)|^2 dx\right)^{1/2}.$$

Der Raum ist außerdem ausgestattet mit dem L^2 -Skalarprodukt

$$(v,w)_{L^2} := \int_{\Omega} v(x)w(x) \, dx, \quad v,w \in L^2(\Omega).$$

Zusätzlich definieren wir den *Raum der Testfunktionen*, der die Menge aller unendlich oft differenzierbaren Funktionen auf Ω mit kompaktem Träger ist.

Definition 1.2.2 (Testfunktionenraum $C_0^{\infty}(\Omega)$). [Wer11, S. 209] Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen. Dann ist der Raum der Testfunktionen definiert durch

$$C_0^{\infty}(\Omega) := \Big\{ \varphi \in C^{\infty}(\Omega) \, \big| \, \mathrm{supp}(\varphi) \subset \Omega \, \mathrm{ist \, \, kompakt} \Big\},$$

wobei $\operatorname{supp}(\varphi) := \overline{\{x \mid \varphi(x) \neq 0\}} \operatorname{der} \operatorname{Träger} \operatorname{von} \varphi \operatorname{ist.}$

Außerdem führen wir die schwache Ableitung ein.

Definition 1.2.3 (schwache Ableitung). [Wer11, S. 210] Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen, $v \in L^2(\Omega)$ und $\alpha = (a_1, a_2, ..., a_d)$ mit $|\alpha| = \sum a_i$ ein Multiindex.

1 Eine Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen

 $w \in L^2(\Omega)$ heißt schwache α -te Ableitung von v, falls für alle Testfunktionen $\varphi \in C_0^{\infty}(\Omega)$ gilt:

$$\int_{\Omega} w(x)\varphi(x) \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v(x) \, D^{\alpha}\varphi(x) \, dx,$$
$$^{\alpha}\varphi = \frac{\partial^{|\alpha|}\varphi}{\partial x_{1}^{\alpha_{1}} \dots x_{n}^{\alpha_{d}}}.$$

Nach [Wer11, S. 210] ist ein solches w eindeutig bestimmt. Mithilfe der schwachen Ableitungen können nun Sobolev-Räume definiert werden. Diese bilden die Grundlage der schwachen Lösungstheorie für parabolischen Differentialgleichungen, denn es stellt sich heraus, dass sich die Sobolev-Räume als passende Ansatzräume für Lösung und Daten eignen. Wir definieren hier die speziellen Sobolev-Räume $H^k(\Omega)$, die aus Äquivalenzklassen von Funktionen aus $L^2(\Omega)$ bestehen, deren sämtliche partielle Ableitungen bis zur Ordnung k im Raum $L^2(\Omega)$ liegen. Dabei können die Äquivalenzklassen so verstanden werden, dass sich die Mitglieder nur auf einer Lebesgue-Nullmenge unterscheiden.

Definition 1.2.4 (Sobolev-Raum $H^k(\Omega)$). [Wer11, S. 210]

Sei $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ein offen, beschränktes Lipschitz-Gebiet und $k \in \mathbb{N}_0$. Wir definieren den speziellen Sobolev-Raum:

$$H^{k}(\Omega) := \left\{ v \in L^{2}(\Omega) \mid D^{(\alpha)}v \in L^{2}(\Omega) \quad \text{für alle } |\alpha| \le k \right\}$$

Der Raum $H^k(\Omega)$ ist ein Hilbertraum ausgestattet mit dem Skalarprodukt

$$(v,w)_{H^k} := \sum_{|\alpha| \le k} \int_{\Omega} D^{(\alpha)} v(x) D^{(\alpha)} w(x) \, dx$$

und der induzierten Norm

wobei D

$$\|v\|_{H^k} := (v, v)_{H^k}^{1/2}.$$

Möchte man diese Räume als Ansatzräume für Lösung und Daten verwenden, muss hier überlegt werden, wie die Randbedingungen des Anfangs-Randwertproblems (1.3) zu verstehen sind, da die Funktionen aus $H^k(\Omega)$ nur bis auf Lebesgue-Nullmengen eindeutig definiert sind. Um eine sinnvolle Definition der Randbedingungen zu erhalten, betrachten wir folgenden Satz:

Satz 1.2.5 (Spursatz). [AU18, S. 251]

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ eine offenes, beschränktes Lipschitz-Gebiet mit Rand $\partial \Omega$. Dann gibt es genau einen stetigen, linearen Operator (genannt Spur-Operator)

spur :
$$H^1(\Omega) \to L^2(\partial \Omega)$$
,

sodass für Funktionen $v \in H^1(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ gilt:

 $\operatorname{spur}(v) = v \mid_{\partial\Omega}$.

Ein Beweis zur Existenz und Eindeutigkeit des Spuroperators kann in [AU18, S.251-252] nachgelesen werden. Der Spursatz besagt, dass es eine Erweiterung der Randwerte, durch stetige Funktionen bis zum Rand, für die Funktionen in $H^1(\Omega)$ gibt. Das bedeutet, dass es in jeder Äquivalenzklasse von Funktionen aus $H^1(\Omega)$ eine stetige Funktion bis zum Rand gibt. Die Randwerte dieser Funktion sind die Spur und diese kann als Randwerte für die Funktionen der gleichen Äquivalenzklasse verstanden werden.

Wir betrachten nun wieder Problem (1.3), um eine schwache Formulierung herzuleiten. Es stellt sich heraus, dass die Wahl der Ansatzräume für die Lösung $u \in L^2(0,T; H_0^1(\Omega))$ und die Daten $u_0 \in H_0^1(\Omega)$ und $f \in L^2(0,T; L^2(\Omega))$ zu einem gut gestellten Problem führt.

Der Raum $L^2(0,T; H^1_0(\Omega))$ besteht aus allen Funktionen $v: (0,T) \to H^1_0(\Omega)$ für die gilt, dass

$$\|v\|_{L^2(0,T;H^1_0(\Omega))} := \left(\int_0^T \|v(t)\|_{H^1_0(\Omega)}^2 dt\right)^{1/2} < \infty$$

und wir definieren

$$H_0^1(\Omega) := \left\{ v \in H^1(\Omega) \, \big| \, \operatorname{spur}(u) = 0 \right\}$$

als den Raum der Funktionen aus $H^1(\Omega)$, die auf dem Rand von Ω im Sinne der Spur verschwinden, d.h. den Wert Null annehmen. Es gilt, dass $H_0^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ und mithilfe der Poincaré-Friedrichs-Ungleichung kann gezeigt werden, dass für alle $v \in H_0^1(\Omega)$ eine Norm definiert wird durch

$$\|v\|_{H^1_0(\Omega)} := \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} \,. \tag{1.4}$$

Der Raum $H_0^1(\Omega)$ kann auch als Abschluss des Testfunktionenraums $C_0^{\infty}(\Omega)$ bezüglich der Norm von $H^1(\Omega)$ definiert werden

$$H_0^1(\Omega) := \overline{C_0^{\infty}(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}}.$$

Für das Problem (1.3) stellt sich heraus, dass sich $H_0^1(\Omega)$ als Testfunktionenraum eignet. Dann wird durch

$$(\nabla v, \nabla w)_{L^2} = \int_{\Omega} \nabla v \nabla w \, dx, \quad u, v \in H^1_0(\Omega)$$

eine symmetrische Bilinearform auf $H_0^1(\Omega)$ definiert.

Um eine schwache Formulierung des Anfangs-Randwertproblems der Wärmeleitungsgleichung zu erhalten, gehen wir vor wie in [GR92, S. 294-296] beschrieben. Dafür multiplizieren wir die Wärmeleitungsgleichung (1.3) mit einer Testfunktion $\varphi(x) \in H_0^1(\Omega)$ und erhalten

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)\varphi(x) - \Delta(u(x,t))\varphi(x) = f(x,t)\varphi(x).$$
(1.5)

Anschließend integrieren wir über Ω und setzten die Green'sche Formel in (1.5) ein, wobei $\frac{\partial}{\partial n}u$ die Ableitung von u entlang der äußeren Einheitsnormale an $\partial\Omega$ darstellt. Wir

1 Eine Einführung zu parabolischen Differentialgleichungen

erhalten

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u(x,t)\varphi(x) \, dx + \int_{\Omega} \nabla u(x,t) \cdot \nabla \varphi(x) \, dx - \underbrace{\int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial n} u(x,t)\varphi(x) \, ds}_{=0} = \int_{\Omega} f(x,t)\varphi(x) \, dx.$$

wobei das Integral über $\partial \Omega$ verschwindet. Eine schwache Formulierung kann dann wie folgt definiert werden:

Gesucht ist $u \in L^2(0,T; H^1_0(\Omega))$ mit $u(0) = u_0 \in H^1_0(\Omega)$, sodass

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u(t)\varphi(x) \, dx + \int_{\Omega} \nabla u(t) \cdot \nabla \varphi(x) \, dx = \int_{\Omega} f(t)\varphi(x) \, dx \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega), \tag{1.6}$$

wobe
i $f\in L^2(0,T;L^2(\Omega))$ gegeben ist.

Nach [Eva10, S. 356-358] besitzt das Problem (1.6) eine eindeutige schwache Lösung u.

2 Finite-Elemente-Methode für elliptische Randwertprobleme

Die Finite-Elemente-Methode (kurz: FEM) hat bei der numerischen Berechnung der Lösung von elliptischen und parabolischen Differentialgleichungen eine große Bedeutung. Das Verfahren ist wegen seiner Flexibilität für eine Vielzahl von technischen und naturwissenschaftlichen Problemen einsetzbar, da es auf der schwachen Formulierung der Differentialgleichung beruht.

In diesem Kapitel wird die Finite-Elemente-Methode für elliptische partielle Differentialgleichungen erläutert. Für elliptische Probleme hat die am Anfang des Kapitel 1 beschriebene Koeffizientenmatrix $A(\mathbf{x})$ entweder nur positive oder nur negative Eigenwerte. Sie besitzt den Eigenwert Null nicht. Ein einfaches Beispiel ist die Poisson-Gleichung, die wir in diesem Kapitel als Beispiel für ein elliptisches Problem betrachten.

Da parabolische Anfangsrandwertprobleme für ein festes $t \in (0, T]$ in Ortsrichtung ein stationäres Randwertproblem darstellen, kann die Finite-Elemente-Methode zur Ortsdiskretisierung von parabolischen Differentialgleichungen verwendet werden. Dieses Kapitel bildet damit die Grundlage für die Verfahren für parabolische Differentialgleichungen, die im nächsten Kapitel vorgestellt werden.

2.1 Grundlagen

Das Verfahren der finiten Elemente beruht auf einer schwachen Formulierung des Problems. Dabei ist die Idee, das zu betrachtende Gebiet Ω in Teilgebiete zu zerlegen und die exakte Lösung durch stückweise polynomielle Funktionen aus einem endlich dimensionalen Ansatzraum bezüglich der Zerlegung zu approximieren. Durch das Einsetzen der Ansatzfunktionen in die schwache Formulierung entsteht ein lineares Gleichungssystem, welches gelöst werden muss. Dieser Finite-Elemente-Ansatz wird auch Ritz-Galerkin-Verfahren genannt.

Im Folgenden beschränken wir uns darauf, dass $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \leq 3$, ein beschränktes Lipschitz-Gebiet mit polygonalem Rand $\partial\Omega$ ist, d.h. $\partial\Omega$ aus endlich vielen Hyperebenen besteht. Die Anwendung der Green'schen Formel zur Erhaltung der schwachen Lösung ist hier wohldefiniert.

Das Poisson-Problem mit homogenen Dirichlet'schen Randbedingungen, das wir in diesem Kapitel als Beispiel für ein elliptisches Problem betrachten, kann wie folgt beschrieben

werden: Finde $u \in C^0(\overline{\Omega}) \cap C^2(\Omega)$, sodass gilt:

$$-\Delta u = f \qquad \text{in } \Omega,$$

$$u = 0 \qquad \text{auf } \partial\Omega,$$
(2.1)

wobei $f \in C(\Omega)$.

Eine schwache Formulierung des Poisson-Problems kann analog zum Kapitel 1.2 hergeleitet werden. Dafür multiplizieren wir die Gleichung mit Testfunktionen $\varphi \in H_0^1(\Omega)$, integrieren über Ω und wenden die Green'sche Formel an. Damit erhalten wir die schwache Formulierung von (2.1):

Finde $u \in H_0^1(\Omega)$, sodass

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega), \tag{2.2}$$

mit $f \in L^2(\Omega)$.

Die Randwerte sind im Sinne der Spur, nach Satz 1.2.5, zu verstehen. Alle Integrale sind wohldefiniert. In [Eva10, S. 301] wird unter Anwendung des *Satzes von Lax-Milgramm* bewiesen, dass das Randwertproblem (2.2) eine eindeutig bestimmte schwache Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ besitzt.

Wir wollen nun die Finite-Elemente-Methode auf das Problem (2.2) anwenden. Die Idee ist die schwache Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ durch eine Funktion aus einem endlich dimensionalen Ansatzraum zu approximieren. Dieser Raum beruht auf einer speziellen Triangulierung \mathcal{T}_{Ω}^h von $\overline{\Omega}$, die wir im folgenden definieren:

Definition 2.1.1 (zulässige Triangulierung \mathcal{T}_{Ω}^{h}). [Joh16, S. 709]

Eine Zerlegung $\mathcal{T}_{\Omega}^{h} = \{K_{1}, K_{2}, ..., K_{n'}\}$ von $\overline{\Omega}$ heißt zulässige Triangulierung, wenn folgende Eigenschaften erfüllt sind:

- i) $\overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^{n'} K_i.$
- ii) Jede Gitterzelle $K_i \in \mathcal{T}_{\Omega}^h$ ist abgeschlossen und das Innere $\overset{\circ}{K}$ ist nicht leer.
- iii) Für verschiedene Gitterzellen K_i und K_j gilt $\overset{\circ}{K_i} \cap \overset{\circ}{K_j} = \emptyset$.
- iv) Für jedes $K_i \in \mathcal{T}_{\Omega}^h$ ist der Rand ∂K_i lipschitz-stetig.
- v) Der Schnitt von zwei Gitterzellen ist entweder leer oder eine gemeinsame Untermannigfaltigkeit der Dimension m, wobei $m \in \{0, ..., d-1\}$ ist.

In einer Dimension, d.h $\overline{\Omega} = [a, b]$ ist ein Intervall, ist eine zulässige Triangulierung \mathcal{T}_{Ω}^{h} gegeben durch eine Zerlegung von $\overline{\Omega}$ in Teilintervalle $K_{i} = [x_{i-1}, x_{i}]$ mithilfe eines Gitters

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b,$$

siehe Abbildung 2.1.



Abb. 2.1: Zerlegung eines Gebiets $\Omega = [a, b]$ in Teilintervalle.

Ist $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein zweidimensionales Gebiet, kann eine Zerlegung von $\overline{\Omega}$ mithilfe eines Gitters aus Dreiecken oder Vierecken erfolgen, siehe Abbildung 2.2.



Abb. 2.2: Zerlegung eines Gebiets $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ in Dreiecke.

In drei Dimensionen kann eine Zerlegung in Tetraeder oder Parallelepipede durchgeführt werden.

Bezüglich der Triangulation \mathcal{T}_{Ω}^{h} können nun stetige Funktionen definiert werden, die auf jeder Gitterzelle ein Polynom vom Grad k sind. Diese Polynome bilden den sogenannten *Finite-Elemente-Raum* $P^{k}(\overline{\Omega})$ aus stückweise stetigen Polynomen auf $\overline{\Omega}$

$$P^{k}(\overline{\Omega}) := \left\{ v \in C(\overline{\Omega}) : v \mid_{K_{i}} \in P_{k} \text{ für alle } K_{i} \in \mathcal{T}_{\Omega}^{h} \right\}.$$

In dieser Arbeit beschränken wir uns auf stückweise lineare Funktionen $v \in P^1(\overline{\Omega})$ mit der zusätzlichen Eigenschaft, dass sie auf dem Rand von Ω verschwinden. Unser Ansatzraum $V_h(\overline{\Omega})$ (Finite-Elemente-Raum) wird dann definiert durch

$$V_h(\overline{\Omega}) := \Big\{ v \in P^{(1)}(\overline{\Omega}) : v \mid_{\partial \Omega} = 0 \Big\}.$$

Eine endliche Basis $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ von $V_h(\overline{\Omega})$ bilden die Hütchenfunktionen (Knotenbasis). Im eindimensionalen Fall, siehe Abbildung 2.3, sind diese definiert durch

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{für } x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_i} & \text{für } x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$
(2.3)

Für die Basisfunktionen gilt, dass

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j, \\ 0 & \text{für } i \neq j. \end{cases}$$

2 Finite-Elemente-Methode für elliptische Randwertprobleme

Das bedeutet, dass jede Basisfunktion genau an einem Gitterpunkt den Wert 1 annimmt und an den anderen den Wert 0.



Abb. 2.3: Hütchenfunktionen in \mathbb{R} .

Der nächste Schritt ist nun, die Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ aus (2.2) durch eine diskrete Lösung u_h aus unserem Ansatzraum $V_h(\overline{\Omega})$ zu ersetzen. Mit den FEM-Testfunktionen $\varphi_h \in V_h(\overline{\Omega})$ erhalten wie die allgemeine diskretisierte Problem:

Finde $u_h \in V_h(\overline{\Omega})$, sodass

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla \varphi_h \, dx = \int_{\Omega} f \, \varphi_h \, dx \quad \forall \varphi_h \in V_h, \tag{2.4}$$

wobei $f \in V_h(\overline{\Omega})$.

Da $\{\phi\}_{i=1}^N$ eine endliche Basis von $V_h(\overline{\Omega})$ darstellt, kann jedes $u_h \in V_h(\overline{\Omega})$ als Linearkombination von Basisfunktionen mit Koeffizienten $u_1, ..., u_N$ dargestellt werden

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(x).$$
 (2.5)

Zusätzlich können wir in der diskreten Gleichung (2.4) die Testfunktionen φ_h durch die N Basisfunktionen $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ ersetzten. Die Gleichung ist für jede Testfunktion $\varphi_h \in V_h(\overline{\Omega})$ genau dann erfüllt, wenn sie für jede Basisfunktion ϕ_i erfüllt ist, da man jede Testfunktion als Linearkombination von Basisfunktionen darstellen und die Linearität der Gleichung ausnutzen kann. Durch Einsetzen von (2.5) und der Basisfunktionen in (2.4) erhalten wir N Gleichungen

$$\int_{\Omega} \nabla \left[\sum_{j=1}^{N} u_j \phi_j \right] \cdot \nabla \phi_i \, dx = \int_{\Omega} f \, \phi_i \, dx, \quad i = 1, .., N.$$

Durch Herausziehen der Summe ergibt sich

$$\sum_{j=1}^{N} u_j \int_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, dx = \int_{\Omega} f \, \phi_i \, dx, \quad i = 1, .., N.$$

Diese Gleichungen sind äquivalent zum linearen Gleichungssystem,

$$K\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b} \tag{2.6}$$

mit

$$K = (k_{ij})_{1 \le i,j \le N}, \quad k_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, dx,$$
$$\mathbf{b} = (b_i)_{1 \le i \le N}, \quad b_i = \int_{\Omega} f \, \phi_i \, dx,$$
$$\mathbf{u} = (u_i)_{1 \le i \le N},$$

wobei u gesucht wird. Durch Lösen von (2.6) erhalten wir die Koeffizienten $u_1, ..., u_N$. Das Einsetzten in den Ansatz

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^N u_j \phi_j(x),$$

ergibt die numerische Approximation u_h der analytischen Lösung u. Durch die Wahl der Kontenbasis entsprechen die Koeffizienten $u_1, ..., u_N$ gerade den Werten von u_h an den Gitterpunkten $x_1, ..., x_N$. Ein weiterer Vorteil dieser Basis sind die kleinen Träger der Basisfunktionen, sodass wir für K eine dünn besetzte Matrix erhalten.

2.2 Numerische Berechnung für ein elliptisches Problem

Im folgenden wird eine numerische Berechnung zur Lösung eines konkreten elliptischen Problems mit der Finiten-Elemente-Methode veranschaulicht. Sei dazu Ω das sechseckige Gebiet, das in Abbildung 2.4 dargestellt ist.



Abb. 2.4: Gebiet Ω .

Wir betrachten folgende elliptische Differentialgleichung

$$-0.2\,\Delta u = 1 \quad \text{auf }\Omega,\tag{2.7}$$

2 Finite-Elemente-Methode für elliptische Randwertprobleme

mit Randbedingungen

$$\frac{\partial}{\partial n}u = 0 \quad \text{auf } \{(x, y) \in \partial\Omega : 0.5x - y = 1\},$$
$$u = 0 \quad \text{auf dem restlichen Rand.}$$

Zur Berechnung einer numerischen Lösung von u, wurde die im Programmcode PARMOON des Weierstraß-Instituts Berlin implementierte FEM-Routine verwendet. Die Zerlegung



Abb. 2.5: Gitternetze über Ω .

des Gebiet Ω in Teilgebiete erfolgte mithilfe eines Dreiecksgitters in 64 Gitterzellen. Eine anschließende Verfeinerung einer Gitterzellen in vier gleich große Tochterdreiecke heißt reguläre Verfeinerung. Diese wurde dreimal für jede Gitterzelle durchgeführt, siehe Abbildung 2.5.

Als Finite-Elemente-Raum wurden stückweise lineare Polynome auf dem gewählten Gitter verwendet. Das Lösen des entstandenen Gleichungssystem erfolgte mit einem direkten Löser (Programmbibliothek UMFPACK). Die Abbildung 2.6 veranschaulicht die numerisch berechnete Lösung der Gleichung (2.7) mit zugehörigen Randbedingungen.



Abb. 2.6: Approximierte Lösung u des Problems (2.7) in zwei und drei Dimensionen.

3 Runge-Kutta Verfahren für Anfangswertprobleme

Runge Kutta Verfahren, nach Carl David Tolmé Runge¹ und Martin Wilhelm Kutta², bilden eine Klasse von Einschrittverfahren zum numerischen Lösen von Anfangswertproblemen. Da die analytische Lösung von Anfangswertaufgaben im Allgemeinen nicht oder nur unter großem Aufwand angegeben werden kann, entwickelten 1895 Carl Runge und 1900 Karl Heun³, nach [Bie94, S. 48-49] zufolge, geeignete Formeln zur approximativen Lösung. In seiner Dissertation von 1900 erweiterte und verallgemeinerte Martin Wilhelm Kutta die Lösungsansätze seiner Vorgänger unter den Gesichtspunkten einfacher Anwendung und höherer Genauigkeit. John Butcher schuf in den 1960ern neue Ideen und entwickelte das Butcher-Tableau als neue Darstellungsform der Verfahren. Durch die Einfachheit und Genauigkeit der Verfahren haben diese bis heute eine große Bedeutung bei der numerischen Lösung von Anfangswertproblemen.

Dieses Kapitel bildet die Grundlage für Kapitel 4, in dem vorgestellt wird, wie Runge-Kutta Verfahren als Teil der vertikalen Linienmethode und Rothe-Methode für parabolische Differentialgleichungen angewendet werden können. Es wird sich herausstellen, dass sich diese zur Diskretisierung der Zeit für beide Verfahren eignen. Ziel dieses Kapitels ist deshalb, Runge-Kutta Verfahren für Anfangswertprobleme abhängig von der Zeit t der Form

$$u'(t) = F(t, u(t)),$$

mit Anfangswert

$$u(t_0) = u_0$$

einzuführen.

Für die Definition der Runge-Kutta Verfahren wird eine Zerlegung des Zeitintervalls I durch ein Gitter benötigt.

Definition 3.0.1 (Zerlegung des Zeitintervalls). Eine Zerlegung von $I = [t_0, t_\ell]$ wird definiert durch ein Gitter

$$I_{\tau} = \{t_0, t_1, ..., t_{\ell}\}$$

 $^{^1\}mathrm{Carl}$ David Tolmé Runge (1856 - 1927)

 $^{^{2}}$ Martin Wilhelm Kutta (1867 - 1944)

 $^{^{3}}$ Karl Heun (1859 - 1929)

3 Runge-Kutta Verfahren für Anfangswertprobleme

mit $t_0 < t_1 < ... < t_\ell$ und Schrittweiten $\tau_k = t_{k+1} - t_k$, wobei das Intervall I in Teilintervalle zerlegt wird. Wir beschränken uns dabei auf ein äquidistantes Gitter, d.h. für jeden Zeitschritt gilt $\tau_k = \tau$ für $k = 1, ..., \ell - 1$.

Die Runge-Kutta Verfahren können dann wie folgt definiert werden.

Definition 3.0.2 (*s*-stufiges Runge-Kutta Verfahren). [Joh20, S. 117f.] Ein *s*-stufiges Runge-Kutta Verfahren wird definiert durch

$$u_{k+1} = u_k + \tau \Phi(t, u, \tau), \quad k = 1, ..., \ell - 1,$$

$$u_0 = u(t_0),$$

mit Verfahrensfunktion

$$\Phi(t, u, \tau) = \sum_{i=1}^{s} b_i K_i(t, u, \tau)$$

und Inkrementen

$$K_i(t, u, \tau) = F\left(t_k + c_i\tau, u_k + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij}K_j(t, u, \tau)\right),$$

mit Verfahrenskoeffizienten $c_i, b_i, a_{ij} \in \mathbb{R}$ für i, j = 1, ..., s. Dabei nennen wir $s \in \mathbb{N}$ die Anzahl der Stufen des Verfahrens und die $b_i, i = 1, ..., s$ werden als Gewichte bezeichnet. Dann stellt u_k die approximierte Lösung von u im Punkte t_k dar.

Runge-Kutta Verfahren lassen sich zur Übersichtlichkeit in einem sogenannten *Butcher-Tableaus* darstellen, in welchem die Koeffizienten des Verfahrens dargestellt werden, siehe Abbildung 3.1.

c_1	a_{11}	a_{12}	•••	a_{1s}
c_2	a_{21}	a_{22}		a_{2s}
÷	:	÷	·	÷
c_s	a_{s1}	a_{s2}	•••	a_{ss}
	b_1	b_2		b_s

Abb. 3.1: Butcher-Tableau für allgemeine Runge-Kutta Verfahren.

Hierfür kann kurz geschrieben werden $-\frac{c}{b^T}$, wobei $c, b \in \mathbb{R}^s$ und $A \in \mathbb{R}^{s,s}$.

Bei Runge-Kutta Verfahren kann zwischen expliziten und impliziten Verfahren unterschieden werden. In Kapitel 4 erfolgt die Diskretisierung der Zeit für beide Verfahren zunächst mit allgemeinen expliziten Runge-Kutta Verfahren. Für explizite Verfahren hängt die Berechnung des nächsten Schrittes nur von zuvor berechneten Werten ab. Die Koeffizientenmatrix A ist eine strikte untere Dreiecksmatrix. Ein typischen Verhalten bei der numerischen Approximation von parabolischen Differentialgleichungen ist das Auftreten *steifer Anfangswertprobleme*, bzw. *steifer Systeme von Differentialgleichungen*. Dieses Verhalten ist auch bei den in Kapitel 4 vorgestellten Verfahren zu beobachten.

Ein System von linearen Differentialgleichungen

$$u' = Au + f, \quad A \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

wird steif genannt, wenn alle Eigenwerte $\lambda_1, ..., \lambda_d$ der Matrix A einen negativen Realteil besitzen und der Quotient

$$q := \frac{\max\{|Re(\lambda_i)|, i = 1, ..., d\}}{\min\{|Re(\lambda_i)|, i = 1, ..., d\}} \gg 1$$

ist, vgl. [Wal17].

Als Nachteil der expliziten Runge-Kutta Verfahren stellt sich heraus, dass diese für steife Probleme und große Schrittweiten τ instabil sind und dadurch starke Oszillationen bei der Berechnung der Lösung auftreten können, vgl. [JL13, S. 353].

Es erweist sich deshalb als geeignet, implizite Runge-Kutta Verfahren zu verwenden. Der Vorteil dieser Verfahren ist, dass sie sich gut zum Lösen steifer Probleme eignen, da sie auch für große Schrittweiten τ stabil bleiben.

Der zweiter Ansatz zur Zeitdiskretisierung in Kapitel 4 erfolgt mithilfe spezieller impliziter Runge-Kutta Verfahren, den sogenannten *DIRK Verfahren* (diagonal implizite Runge-Kutta Verfahren). Die Koeffizientenmatrix *A* dieser Verfahren ist in einer unteren Dreiecksform, siehe Abbildung 3.2.

Abb. 3.2: Butcher-Tableau für DIRK Verfahren.

DIRK Verfahren können für steife Probleme eingesetzt werden und haben den Vorteil, dass wir, durch die spezielle Form der Koeffizientenmatrix A, s unabhängige Gleichungen für die Inkremente $K_1, ..., K_s$ erhalten. Um das Inkrement K_j zu berechnen, werden nur $K_i, i = 1..j$ benötigt, wobei die K_i mit i < j bereits gegeben sind.

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

In diesem Kapitel werden die *vertikale Linienmethode* und die *Rothe-Methode* als zwei grundlegende numerische Verfahren zur Lösung parabolischer Anfangs-Randwertprobleme vorgestellt und Ideen entwickelt, wie darin Runge-Kutta Verfahren angewendet werden können. Als Beispiel für ein parabolisches Problem betrachten wir das Anfangs-Randwertproblems der Wärmeleitungsgleichung (1.3), welches in Kapitel 1.1 eingeführt wurde. Im Gegensatz zu elliptischen Problemen hängt die Wärmeleitungsgleichung von Ort und Zeit ab. Für die numerische Berechnung einer Lösung muss deshalb sowohl der Ort als auch die Zeit diskretisiert werden. Für beide Verfahren kann zur Ortsdiskretisierung die in Kapitel 2 vorgestellte Finite-Elemente-Methode verwendet werden. In Zeitrichtung betrachten wir ein Anfangswertproblem, auf welches üblicherweise Runge-Kutta Verfahren erster oder zweiter Ordnung, wie das explizite Euler Verfahren, das implizite Euler Verfahren oder das Crank-Nicolson Verfahren angewendet werden. In dieser Arbeit betrachten wir, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren und DIRK Verfahren zur Berechnung einer diskreten Lösung verwendet werden können.

4.1 Die vertikale Linienmethode

Die Idee der vertikalen Linienmethode ist, zunächst eine Semidiskretisierung des Orts vorzunehmen. Als Ortsdiskretisierungsverfahren können beispielsweise die Finite-Differenzen-Methode, Finite-Volumen-Methode oder die Finite-Elemente-Methode verwendet werden. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf die im Kapitel 2 vorgestellte Methode der finiten Elemente. Durch die Diskretisierung im Ort erhalten wir "entlang von vertikalen Linien", siehe Abbildung 4.1, ein System gewöhnlicher Anfangswertprobleme mit zeitabhängigen Koeffizienten. Eine Diskretisierung bezüglich der Zeit kann anschließend



Abb. 4.1: Visualisierung der vertikalen Linienmethode.

mit Runge-Kutta Verfahren durchgeführt werden.

4.1.1 Diskretisierung des Orts

Sei im folgenden Ω ein beschränktes Lipschitz-Gebiet mit polygonalem Rand und \mathcal{T}_{Ω}^{h} eine zulässige Triangulierung von Ω . Sei außerdem $V_{h}(\overline{\Omega})$ unser in Kapitel 2 definierter Finite-Elemente-Raum aus stückweise linearen Polynomen, die auf dem Rand von Ω verschwinden und $\{\phi_i\}_{i=1}^{N}$ eine Basis von $V_{h}(\overline{\Omega})$.

Ausgehend von der schwachen Formulierung der Wärmeleitungsgleichung (1.6) formulieren wir das allgemeine im Orts diskretisierte Problem:

Finde $u_h(t) \in V_h(\overline{\Omega})$ mit $u_h(0) = u_{0h} \in V_h(\overline{\Omega})$, sodass

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u_h(t) \varphi_h(x) \, dx + \int_{\Omega} \nabla u_h(t) \cdot \nabla \varphi_h(x) \, dx = \int_{\Omega} f(t) \varphi_h(x) \, dx \quad \forall \varphi_h \in V_h, \ t \in (0, T],$$

$$(4.1)$$

wobei u_{0h} eine Approximation von u_0 in $V_h(\overline{\Omega})$ ist.

Dabei kann

$$u_h(t) = \sum_{j=1}^{N} u_j(t)\phi_j(x)$$
(4.2)

als Linearkombination der Basisvektoren $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ mit zeitabhängigen Koeffizienten $u_1(t), ..., u_N(t)$ dargestellt werden. Mithilfe der Darstellung (4.2) erhalten wir für die Gleichung (4.1)

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{j=1}^{N} u_j(t) \phi_j(x) \right) \varphi_h(x) \, dx + \int_{\Omega} \nabla \left(\sum_{j=1}^{N} u_j(t) \phi_j(x) \right) \cdot \nabla \varphi_h(x) \, dx$$
$$= \int_{\Omega} f(t) \varphi_h(x) \, dx \quad \forall \varphi_h \in V_h, t \in (0, T].$$

Anschließende Umformungen und das Ersetzen der Testfunktionen durch Basisfunktionen $\{\phi_i\}_{i=1}^N$, wie in Kapitel 2 beschrieben, ergeben

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial t} u_j(t) \int_{\Omega} \phi_j(x) \phi_i(x) dx + \sum_{j=1}^{N} u_j(t) \int_{\Omega} \nabla \phi_j(x) \cdot \nabla \phi_i(x) dx = \int_{\Omega} f(t) \phi_i(x) dx,$$

für i = 1, .., N.

Als Approximation der Anfangsbedingung $u_0(x)$ kann beispielsweise die Interpolierende $u_{0h} \in V_h(\overline{\Omega})$ bezüglich der Triangulierung \mathcal{T}^h_{Ω} gewählt werden, dargestellt durch

$$u_{0h} = \sum_{j=1}^{N} u_{0j} \phi_j(x), \qquad (4.3)$$

mit Koeffizienten $u_{0j}, j = 1, ..., N$.

Zusammen erhalten wir ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen in Matrixform

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

mit Anfangsbedingung

$$M\boldsymbol{u}'(t) + K\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{f}(t), \quad t \in (0,T],$$
$$\boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}^{0}, \tag{4.4}$$

wobei

$$M = (m_{ij})_{1 \le i,j \le N}, \quad m_{ij} = \int_{\Omega} \phi_j \phi_i \, dx,$$

$$K = (k_{ij})_{1 \le i,j \le N}, \quad k_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, dx,$$

$$f(t) = (f_i)_{1 \le i \le N}, \quad f_i = \int_{\Omega} f(t) \phi_i \, dx,$$

$$u(t) = (u_i(t))_{1 \le j \le N},$$

$$u^0 = (u_{0i})_{1 \le i \le N}.$$

Die Matrix M wird Massenmatrix und die Matrix K Steifigkeitsmatrix genannt. Um im folgenden die im Kapitel 3 eingeführten Runge-Kutta Verfahren auf das Differentialgleichungssystem anwenden zu können, möchten wir dieses in der Form

$$\boldsymbol{u}'(t) = F(t, \boldsymbol{u}(t)), \quad \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}^0$$

schreiben, wobei $F(t, \boldsymbol{u}(t)) = M^{-1}(-K\boldsymbol{u}(t) + \boldsymbol{f}(t))$ ist. Dafür muss gezeigt werden, dass die Matrix M eine Inverse M^{-1} besitzt, was insbesondere dann gegeben ist, wenn Msymmetrisch und positiv definit ist. Die Symmetrie folgt direkt aus der Definition von M, da sich das Integral über Ω unter Vertauschung der Basisfunktionen nicht ändert. Für $V_h \subset L^2(\Omega)$ mit Basisfunktionen $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ definiert $u^T M u$ gerade das in (1.2.1) gegebene L^2 -Skalarprodukt und damit gilt, dass

$$\boldsymbol{u}^{T} M \boldsymbol{u} = \sum_{i,j=1}^{N} u_{i} M_{ij} u_{j} = \left(\sum_{j=1}^{N} u_{j} \phi_{j}, \sum_{i=1}^{N} u_{i} \phi_{i} \right)_{L^{2}} = (u_{h}, u_{h})_{L^{2}}$$
$$= \|u_{h}\|_{L^{2}}^{2} > 0 \quad \text{für } u_{h} \in V_{h} \setminus \{0\}.$$

Es folgt die positive Definitheit von M und die Existenz einer Inversen M^{-1} . Außerdem ist zu erwähnen, dass K auch eine inverse Matrix besitzt, wobei die Symmetrie auch hier sofort aus der Definition von K gegeben ist und es gilt, dass $u^T K u = (\nabla u_h, \nabla u_h)_{L^2} \stackrel{(1.4)}{=} ||u_h||_{H_0^1}^2 > 0$ für alle $u_h \in V_h \setminus \{0\}$ ist.

4.1.2 Diskretisierung der Zeit

Wir betrachten unser Problem

$$u'(t) = M^{-1} (-Ku(t) + f(t)), \quad t \in (0, T],$$

$$u(0) = u^{0}.$$
 (4.5)

Dabei handelt es sich bei diesem Differentialgleichungssystem, um ein steifes Anfangswertproblem, was ein typisches Phänomen bei der Diskretisierung von parabolischen Differentialgleichungen darstellt. Dies hängt damit zusammen, dass die Eigenwerte der Matrix $-M^{-1}K$ einen negativen Realteil besitzen und sehr in der Größe variieren, wenn die Dimension von $-M^{-1}K$ groß ist. Das bedeutet, dass der in Kapitel 3 definierte Quotient $q \gg 1$ ist. Zur Berechnung des minimalen und maximalen Eigenwerts der Matrix $-M^{-1}K$ und des Steifigkeitsquotienten q in Abhängigkeit der Ortsgitterzellenanzahl $N = 2^2$ bis $N = 2^{10}$ wurde ein Matlab-Code implementiert. Dieser ist in Anhang A zu finden. Wir erhalten damit folgenden Zusammenhang:

Anz_Gitterzellen	min_Eigenwert	max_Eigenwert	Quotient q	
4	-157.97	-4.4876	35.202	
8	-714.25	-6.3687	112.15	
16	-3003	-7.818	384.12	
32	-12210	-8.7488	1395.6	
64	-49069	-9.2823	5286.3	
128	-1.9652e+05	-9.5687	20538	
256	-7.8634e+05	-9.7173	80922	
512	-3.1456e+06	-9.793	3.2121e+05	
1024	-1.2583e+07	-9.8312	1.2799e+06	

Abb. 4.2: Steifigkeitsquotiont der Matrix $-M^{-1}K$ in Abhängigkeit der Ortsgitterzellenanzahl N.

Es ist zu beobachten, dass mit jeder Verfeinerung des Ortsgitters $h \to \frac{h}{2}$ der Quotient qetwa um den Faktor 4 wächst und damit zunehmend steifere Systeme entstehen. Aufgrund der Steifheit des Systems (4.5) muss hier auf die Stabilität des angewendeten Runge-Kutta Verfahrens geachtet werden. Möchte man an dieser Stelle explizite Verfahren einsetzten, müssen für Ortsgitterweiten $h \to 0$ extrem kleine Zeitschrittweiten τ verwendet werden, um stabile Berechnungen durchführen zu können. In [Joh87, S. 156] wird beschrieben, dass beispielsweise für das explizite Euler Verfahren Zeitschrittweiten

 $\tau \in \mathcal{O}(h^2)$ gewählt werden müssen.

Dennoch wollen wir an dieser Stelle zunächst Ideen entwickeln, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren bezüglich der Zeit für Problem (4.5) aussehen können. Dafür zerlegen wir das Zeitintervall I = [0, T] mithilfe eines äquidistanten Gitters $I_{\tau} = \{t_0, t_1, ..., t_\ell\}$ nach Definition (3.0.1). Ausgehend von der vorgegebenen Anfangsiterierten u^0 entwickeln wir mit gegebenen Verfahrensparametern A, b, c eine Verfahrensvorschrift, um für jeden Zeitpunkt $t_1, ..., t_\ell$ eine diskrete Lösung u_k zu erhalten. Die Funktion u_k stellt dann eine Approximation von u zum Zeitpunkt t_k dar. Wir schreiben außerdem im folgenden $f_{k+c_i\tau}$ für f zum Zeitpunkt $t_{k+c_i\tau}$.

Explizite Runge-Kutta Verfahren

Um eine Verfahrensvorschrift für allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren zu entwi-

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

ckeln, berechnen wir zunächst die Inkremente $K_1(t, u, \tau), ..., K_s(t, u, \tau)$, nach Definition (3.0.2):

$$\begin{split} \boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k},\boldsymbol{u}_{k}\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\boldsymbol{u}_{k}+\boldsymbol{f}_{k}\right), \end{split}$$

$$\begin{split} \boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k}+c_{2}\tau,\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{21}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{21}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{2}\tau}\right), \end{split}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{K}_{3}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k}+c_{3}\tau,\boldsymbol{u}_{k}+\tau\left(a_{31}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+a_{32}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{31}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\tau a_{32}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{3}\tau}\right),\end{aligned}$$

:

$$\boldsymbol{K}_{s}(t,\boldsymbol{u},\tau) = F\left(t_{k} + c_{s}\tau, \boldsymbol{u}_{k} + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}\boldsymbol{K}_{j}(t,\boldsymbol{u},\tau)\right)$$

$$= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k} + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}\boldsymbol{K}_{j}(t,\boldsymbol{u},\tau)\right) + \boldsymbol{f}_{k+c_{s}\tau}\right).$$

Mit den Inkrementen $K_1, ..., K_s$ und den Gewichten $b_1, ..., b_s$ können wir nun das allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren aufstellen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}_{k+1} &= \boldsymbol{u}_k + \tau \sum_{i=1}^s b_i \boldsymbol{K}_i(t, \boldsymbol{u}, \tau) \\ &= \boldsymbol{u}_k + \tau \sum_{i=1}^s b_i M^{-1} \left(-K \left(\boldsymbol{u}_k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{K}_j(t, \boldsymbol{u}, \tau) \right) + \boldsymbol{f}_{k+c_i \tau} \right) \\ &= \boldsymbol{u}_k - M^{-1} \left[\tau \sum_{i=1}^s b_i \left(K \left(\boldsymbol{u}_k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{K}_j(t, \boldsymbol{u}, \tau) \right) + \boldsymbol{f}_{k+c_i \tau} \right) \right], k = 0, .., \ell - 1 \\ \boldsymbol{u}_0 &= \boldsymbol{u}^0. \end{aligned}$$

$$(4.6)$$

Für jeden Zeitschritt $t_1, ..., t_{\ell}$ erhalten wir damit ein System mit dünn besetzter Massenmatrix M. Die rechte Seite kann dabei explizit berechnet werden.

Zum Lösen des Gleichungssystems kann eine direkte oder iterative Methode gewählt werden. Als direktes Lösungsverfahren eignet sich eine LU-Faktorisierung der Matrix M = LR in zwei schwach besetzte Dreiecksmatrizen. Diese Zerlegung muss nur einmal am Anfang der Berechnung durchgeführt werden. In den einzelnen Zeitschritten müssen anschließend nur noch die schwach besetzte Dreiecksprobleme Ly = b und Ru = y gelöst werden, wobei b die rechte Seite und u die Lösung beschreibt. Als iterative Methode kann das Konjugierte Gradientenverfahren verwendet werden. Es lässt sich zeigen, dass die

Kondition der Systemmatrix M durch drei beschränkt ist. Eine schnelle Konvergenz des CG-Verfahrens ist damit gewährleistet. Durch das Einsetzten eines Vorkonditionierers wie beispielsweise das (gedämpfte) Jacobi-Verfahren oder SSOR kann die Konvergenz des Verfahrens nochmals beschleunigt werden.

DIRK Verfahren

Um sehr kleine Zeitschritte bei der Berechnung einer diskreten Lösung zu vermeiden, sollte für die Zeitdiskretisierung ein implizites Runge-Kutta Verfahren gewählt werden, da diese Verfahren bei relativ großer Schrittweite immer noch stabil sind.

Dafür definieren wir nun DIRK Verfahren. Auch hier berechnen wir zunächst die Inkremente und nutzen dabei die Linearität der rechten Seite F aus:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k},\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{11}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\boldsymbol{u}_{k}-\tau a_{11}K\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\boldsymbol{f}_{k}\right) \\ &= \left(M+\tau a_{11}K\right)^{-1}\left(-K\boldsymbol{u}_{k}+\boldsymbol{f}_{k}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k}+c_{2}\tau,\boldsymbol{u}_{k}+\tau\left(a_{21}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+a_{22}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{21}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)-\tau a_{22}K\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{2}\tau}\right) \\ &= \left(M+\tau a_{22}K\right)^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{11}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{2}\tau}\right),\end{aligned}$$

$$\begin{split} \boldsymbol{K}_{3}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k}+c_{3}\tau,\boldsymbol{u}_{k}+\tau\left(a_{31}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+a_{32}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+a_{33}\boldsymbol{K}_{3}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{31}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\tau a_{32}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)-a_{33}K\boldsymbol{K}_{3}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{3}\tau}\right) \\ &= \left(M+\tau a_{33}K\right)^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau a_{11}\boldsymbol{K}_{1}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+\tau a_{32}\boldsymbol{K}_{2}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{3}\tau}\right), \\ &\vdots \end{split}$$

$$\begin{split} \boldsymbol{K}_{s}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right) &= F\left(t_{k}+c_{s}\tau,\boldsymbol{u}_{k}+\tau\sum_{j=1}^{s}a_{sj}\boldsymbol{K}_{j}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right) \\ &= M^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau\sum_{j=1}^{s-1}a_{sj}\boldsymbol{K}_{j}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)-\tau s_{ss}K\boldsymbol{K}_{s}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)+f_{k+c_{s}\tau}\right) \\ &= (M+\tau a_{ss}K)^{-1}\left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k}+\tau\sum_{j=1}^{s-1}a_{sj}\boldsymbol{K}_{j}\left(t,\boldsymbol{u},\tau\right)\right)+\boldsymbol{f}_{k+c_{s}\tau}\right). \end{split}$$

Für die allgemeinen DIRK Verfahren ergibt sich

$$u_{k+1} = u_k + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i K_i(t, u, \tau), \quad k = 0, .., \ell - 1,$$

$$u_0 = u^0,$$

(4.7)

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

wobei wir für jedes Inkrement $K_i(t, u, \tau), i = 1, ..., s$, das lineare Gleichungssystem

$$\boldsymbol{K}_{i}(t,\boldsymbol{u},\tau) = \left(M + \tau a_{ii}K\right)^{-1} \left(-K\left(\boldsymbol{u}_{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\boldsymbol{K}_{j}(t,\boldsymbol{u},\tau)\right) + \boldsymbol{f}_{k+c_{i}\tau}\right)$$

erhalten. Die Systemmatrizen $M + \tau a_{ii}K$ sind dünn besetzt. Im Fall, dass die Diagonalelemente a_{ii} , i = 1, ..., N, der Systemmatrix alle übereinstimmen, erhält man Gleichungssysteme mit ein und derselben Matrix, genauso wie im expliziten Fall. Sind die Diagonalelemente a_{ii} , i = 1, ..., N, nicht gleich, sind unter Anwendung einer *LU*-Zerlegung im ersten Zeitschritt einmalig *s* Faktorisierungen zu berechnen, die in den nächsten Schritten verwendet werden können. Bei der Durchführung vieler Zeitschritte τ , sind die Kosten allerdings unerheblich. Stark ansteigende Kosten für direkte Lösungsverfahren entstehen erst, wenn die Zeitschritte τ nicht mehr konstant sind, da die Systemmatrizen $M + \tau a_{ii}K$ sich dann in jedem Iterationsschritt unterscheiden können. In diesem Fall sollten iterative Verfahren zum Lösen der Gleichungssysteme bevorzugt werden. Für kleine Zeitschritte τ die Matrix $M + \tau a_{ii}K$ dicht an M, sodass wir für iterative Verfahren keinen großen Unterschied zum expliziten Fall erwarten.

4.2 Die Rothe-Methode (horizontale Linienmethode)

Das Rothe-Verfahren entwickelt und benannt nach Erich Rothe¹ ist das zweite grundlegende Verfahren zum Lösen parabolischer Probleme, das in dieser Arbeit vorgestellt wird. Bei diesem Verfahren wird, im Gegensatz zur vertikalen Linienmethode, zunächst in Zeitrichtung und anschließend in Ortsrichtung diskretisiert.

In verschiedener Literatur wird innerhalb der Rothe-Methode eine Näherung der Lösung durch die sogenannte *Rothe-Funktion* beschrieben. Dabei wird in [GR92, S. 331] das Rothe-Verfahren mit der Diskretisierung mittels des impliziten Euler-Verfahrens bezüglich des semidiskretisier-



ten Problems, erzeugt durch die Methode der finiten Elemente hinsichtlich der räumlichen Veränderlichen, verglichen.

In dieser Arbeit wollen wir uns von diesem Ansatz loslösen und stattdessen untersuchen, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren sowie DIRK Verfahren für die Diskretisierung der Zeit eingesetzt werden können. Durch die Zeitdiskretisierung erhalten wir *entlang* von horizontalen Linien, siehe Abbildung 4.3, für jeden Zeitschritt $t_1, ..., t_{\ell}$ ein elliptisches Randwertproblem, weshalb das Verfahren auch horizontale Linienmethode genannt wird. Die elliptischen Probleme können anschließend mit dem Finite-Elemente-Verfahren gelöst

¹Erich Rothe (1895 - 1988)

werden.

Im folgenden wird das Rothe-Verfahren zuerst mit expliziten Runge-Kutta Verfahren und anschließend mit DIRK Verfahren für die Zeitdiskretisierung am Beispiel der Wärmeleitungsgleichung (1.3) beschrieben.

4.2.1 Rothe-Verfahren mit expliziten Runge-Kutta Verfahren für die Zeitdiskretisierung

Wir betrachten die klassische Wärmeleitungsgleichung mit Anfangs- und Randbedingung (1.3), welche in Kapitel 1.1 eingeführt wurde. Unsere Ausgangsidee ist, das Problem zunächst als gewöhnliches Anfangswertproblem bezüglich der Zeit zu betrachten. Dafür formen wir die Wärmeleitungsgleichung zu

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \Delta u(x,t) + f(x,t) = F(t,u)$$
(4.8)

um und erhalten damit die in Kapitel 3 gegebene Ausgangsform u'(t) = F(t, u), auf die Runge-Kutta Verfahren angewendet werden können. Auch hier sollte auf die Stabilität des angewendeten Runge-Kutta Verfahrens geachtet werden, da es sich auch bei Gleichung (4.8) um eine steife Gleichung handelt. Dieses Verhalten hängt möglicherweise mit den Eigenschaften des Laplace-Operators zusammen. Darauf soll allerdings an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden.

Um im folgenden Schritt Runge-Kutta Verfahren aufzustellen, zerlegen wir das Intervall I = [0, T] nach Definition (3.0.1) und betrachte unser Problem an den endlich vielen Zeitpunkten $t_1, ..., t_l$. Wir definieren $u^k(x)$ als Approximation von u(x, t) zum Zeitpunkt t_k in $x \in \Omega$. Die Funktion $f^{k+c_i\tau}(x)$ beschreibt f(x, t) zum Zeitpunkt $t_{k+c_i\tau}$. Die Funktionen $u^k(x)$ und $f^{k+c_i\tau}(x)$ innerhalb der Runge-Kutta Verfahren für die Rothe-Methode sind immer noch stetige Funktionen im Ort. Die im Ort stetige Anfangsbedingung $u_0(x)$ aus Problem (1.3) definiert den Anfangswert $u^0(x)$ für das Verfahren.

Zur Beschreibung der expliziten Runge-Kutta Verfahren wird wieder eine Darstellung der Inkremente $K_1(t, u, \tau), ..., K_s(t, u, \tau)$ benötigt, die wir im folgenden aufstellen:

$$K_1(t, u, \tau) = F(t_k, u_k)$$
$$= \Delta u^k(x) + f^k(x),$$

$$K_{2}(t, u, \tau) = F(t_{k} + c_{2}\tau, u_{k}(x) + \tau a_{21}K_{1}(t, u, \tau))$$
$$= \Delta \left(u^{k}(x) + \tau a_{21}K_{1}(t, u, \tau) \right) + f^{k+c_{2}\tau}(x)$$

$$\begin{aligned} K_3\left(t, u, \tau\right) &= F\left(t_k + c_3 \tau, u_k(x) + \tau \left(a_{31} K_1\left(t, u, \tau\right) + a_{32} K_2\left(t, u, \tau\right)\right)\right) \\ &= \Delta \left(u^k(x) + \tau a_{31} K_1\left(t, u, \tau\right) + \tau a_{32} K_2\left(t, u, \tau\right)\right) + f^{k + c_3 \tau}(x), \\ &\vdots \end{aligned}$$

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

$$K_{s}(t, u, \tau) = F\left(t_{k} + c_{s}\tau, u_{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}K_{j}(t, u, \tau)\right)$$
$$= \Delta\left(u^{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}K_{j}(t, u, \tau)\right) + f^{k+c_{s}\tau}(x).$$

Mit diesem Ergebnis und den gegebenen Gewichten $b_1, ..., b_s$ können wir die allgemeinen expliziten Runge-Kutta Verfahren definieren:

$$u^{k+1}(x) = u_k(x) + \tau \sum_{i=1}^s b_i K_i(t, u, \tau)$$

= $u_k(x) + \tau \sum_{i=1}^s b_i \left(\Delta \left(u^k(x) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j(t, u, \tau) \right) + f^{k+c_i\tau}(x) \right),$ (4.9)
 $u^0(x) = u_0(x),$

wobei in jedem Zeitschritt die Randbedingung $u^{k+1} = 0$ gelten soll. In den einzelnen Zeitschritten erhalten wir somit stetige Randwertprobleme, die nun hinsichtlich des Orts, mit der üblichen Finite-Elemente-Methode gelöst werden. Dazu stellen wir zunächst die schwache Formulierung für die Verfahrensgleichung auf. Wir wählen $u^{k+1}(x), u^k(x), K_i(t, u, \tau)$ und $f^{k+c_i\tau}(x) \in H_0^1(\Omega)$, multiplizieren (4.9) mit Testfunktionen $\varphi(x) \in H_0^1(\Omega)$, integrieren über Ω und wenden die Green'sche Formel an. Damit erhalten wir

$$\begin{split} \int_{\Omega} u^{k+1}(x)\varphi \, dx &= \int_{\Omega} u^{k}(x)\varphi \, dx - \tau \sum_{i=1}^{s} b_{i} \Bigg[\int_{\Omega} \nabla \left(u^{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_{j}\left(t, u, \tau\right) \right) \cdot \nabla \varphi \, dx \\ &- \int_{\Omega} f^{k+c_{i}\tau}(x)\varphi \, dx \Bigg] \quad \forall \varphi \in H_{0}^{1}(\Omega). \end{split}$$

Die Null-Randbedingungen sind im Sinne der Spur, nach Satz 1.2.5, zu verstehen. Sei nun \mathcal{T}^{h}_{Ω} eine zulässige Triangulierung von Ω . Sei $V_{h}(\overline{\Omega})$ unser Finite-Elemente-Raum aus stückweise linearen Funktionen, die auf dem Rand von Ω verschwinden. Die allgemeine diskretisierte Verfahrensgleichung lautet dann

$$\begin{split} \int_{\Omega} u_h^{k+1} \varphi_h \, dx &= \int_{\Omega} u_h^k \varphi_h \, dx - \tau \sum_{i=1}^s b_i \Biggl[\int_{\Omega} \nabla \left(u_h^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_{jh} \left(t, u, \tau \right) \right) \cdot \nabla \varphi_h \, dx \\ &- \int_{\Omega} f_h^{k+c_i \tau} \varphi_h \, dx \Biggr] \quad \forall \varphi_h \in V_h. \end{split}$$

Ist $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ eine Basis von $V_h(\overline{\Omega})$ können wir die gesuchte Lösung u_h^{k+1} als Linearkombination der Basisfunktionen schreiben

$$u_h^{k+1} = \sum_{l=1}^N u_l^{k+1} \phi_l.$$

Auch die Lösung im alten Zeitschritt u_h^k und die Inkremente $K_{1h}(t, u, \tau), ..., K_{sh}(t, u, \tau)$ stellen wir mithilfe der Basisfunktionen dar. Zusätzlich ersetzten wir die Finite-Elemente-Testfunktionen aus $V_h(\overline{\Omega})$ durch die Basisfunktionen und erhalten

$$\begin{split} \int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} u_l^{k+1} \phi_l \right) \phi_m \, dx &= \int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} u_l^k \phi_l \right) \phi_m \, dx - \tau \sum_{i=1}^{s} b_i \Bigg[\int_{\Omega} \nabla \Bigg(\sum_{l=1}^{N} u_l^k \phi_l \\ &+ \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \left(\sum_{l=1}^{N} k_l^j \phi_l \right) \Bigg) \cdot \nabla \phi_m \, dx - \int_{\Omega} f_h^{k+c_i \tau} \phi_m \, dx \Bigg]. \end{split}$$

Umformungen ergeben

$$\sum_{l=1}^{N} u_l^{k+1} \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx = \sum_{l=1}^{N} u_l^k \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx - \tau \sum_{i=1}^{s} b_i \left[\left(\sum_{l=1}^{N} u_l^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \left(\sum_{l=1}^{N} k_l^j \right) \right) \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx - \int_{\Omega} f_h^{k+c_i \tau} \phi_m \, dx \right],$$

für m = 1, ..., N. Mit

$$M = (m_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad m_{ml} = \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx,$$

$$K = (k_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad k_{ml} = \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{f}^{k+c_i\tau} = (f_m)_{1 \le m \le N}, \quad f_m = \int_{\Omega} f_h^{k+c_i\tau} \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{k}^j = (k_l^j)_{1 \le l \le N},$$

$$\boldsymbol{u}^{k+1} = (u_l^{k+1})_{1 \le l \le N},$$

$$\boldsymbol{u}^k = (u_l^k)_{1 \le l \le N}.$$

erhalten wir die äquivalente Gleichung in Matrixform

$$M\boldsymbol{u}^{k+1} = M\boldsymbol{u}^k - \tau \sum_{i=1}^s b_i \left[K \left(\boldsymbol{u}^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^j \right) - \boldsymbol{f}^{k+c_i \tau} \right]$$
$$= M\boldsymbol{u}^k - M \left(\tau \sum_{i=1}^s b_i \left[M^{-1} \left(K \left(\boldsymbol{u}^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^j \right) - \boldsymbol{f}^{k+c_i \tau} \right) \right] \right).$$

Multiplizieren mit M^{-1} ergibt

$$\boldsymbol{u}^{k+1} = \boldsymbol{u}^k - \tau \sum_{i=1}^s b_i \left[M^{-1} \left(K \left(\boldsymbol{u}^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^j \right) - \boldsymbol{f}^{k+c_i \tau} \right) \right]$$

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

$$= \boldsymbol{u}^{k} - M^{-1} \left[\tau \sum_{i=1}^{s} b_{i} \left(K \left(\boldsymbol{u}^{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^{j} \right) - \boldsymbol{f}^{k+c_{i}\tau} \right) \right].$$

Insgesamt erhalten wir für Problem (1.3) das numerische Lösungsverfahren,

$$u^{k+1} = u^{k} - M^{-1} \left[\tau \sum_{i=1}^{s} b_{i} \left(K \left(u^{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k^{j} \right) - f^{k+c_{i}\tau} \right) \right], k = 0, ..., \ell - 1,$$

$$u^{0} = u_{0},$$

(4.10)

wobei für die Anfangsiterierte u_0 die Interpolierenden von $u_0(x)$ in $V_h(\overline{\Omega})$ gewählt werden kann.

Es fällt auf, dass das erhaltende Verfahren äquivalent zum mit der vertikalen Linienmethode erhaltenden expliziten Verfahren (4.6) ist. Die Lösung des Problems (4.10) erfolgt demnach analog zum expliziten Fall der vertikalen Linienmethode.

4.2.2 Rothe-Verfahren mit DIRK Verfahren für die Zeitdiskretisierung

Auch für die Variante des Rothe-Verfahrens mit DIRK Verfahren zur Zeitdiskretisierung ist Gleichung (4.8) unser Ausgangspunkt. Wir wählen eine Zerlegung des Zeitintervalls I = [0, T] und verwenden die Definitionen der Approximationen von u und f wie im expliziten Fall.

Für die Definition der Inkremente $K_1(t, u, \tau), ..., K_s(t, u, \tau)$ nutzen wir die Linearität des Laplace-Operators aus:

$$K_1(t, u, \tau) = F(t_k, u_k(x) + \tau a_{11}K_1(t, u, \tau))$$
$$= \Delta u^k(x) + \tau a_{11}\Delta K_1(t, u, \tau) + f^k(x)$$
$$\Leftrightarrow K_1(t, u, \tau) - \tau a_{11}\Delta K_1(t, u, \tau) = \Delta u^k(x) + f^k(x),$$

$$\begin{aligned} K_{2}\left(t, u, \tau\right) &= F\left(t_{k} + c_{2}\tau, u_{k}(x) + \tau a_{21}K_{1}\left(t, u, \tau\right)\right) + \tau a_{22}K_{2}\left(t, u, \tau\right) \\ &= \Delta\left(u^{k}(x) + \tau a_{21}K_{1}\left(t, u, \tau\right)\right) + \tau a_{22}\Delta K\left(t, u, \tau\right) \\ &+ f^{k+c_{2}\tau}(x) \\ \Leftrightarrow K_{2}\left(t, u, \tau\right) - \tau a_{22}\Delta K_{2}\left(t, u, \tau\right) &= \Delta\left(u^{k}(x) + \tau a_{21}K_{1}\left(t, u, \tau\right)\right) + f^{k+c_{2}\tau}(x), \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$K_{s}(t, u, \tau) = F\left(t_{k} + c_{s}\tau, u_{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{sj}K_{j}(t, u, \tau)\right)$$
$$= \Delta\left(u^{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj}K_{j}(t, u, \tau)\right) + \tau a_{ss}\Delta K_{s}(t, u, \tau)$$
$$+ f^{k+c_{s}\tau}(x)$$

$$\Leftrightarrow K_s(t, u, \tau) - \tau a_{ss} \Delta K_s(t, u, \tau) = \Delta u^k(x) + \tau \sum_{j=1}^{s-1} a_{sj} \Delta K_j(t, u, \tau) + f^{k+c_s\tau}(x).$$

Damit ergibt sich für die allgemeinen DIRK Verfahren

$$u^{k+1}(x) = u_k(x) + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i K_i(t, u, \tau), \quad k = 0, ..., \ell - 1,$$

$$u^0(x) = u_0(x),$$

(4.11)

wobei $u^{k+1} = 0$ auf $\partial\Omega$ gelten soll und die Anfangsiterierte $u^0(x)$ durch die im Ort stetige Anfangsbedingung $u_0(x)$ gegeben ist. Die Inkremente sind durch

$$K_{i}(t, u, \tau) - \tau a_{ii} \Delta K_{i}(t, u, \tau) = \Delta u^{k}(x) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \Delta K_{j}(t, u, \tau) + f^{k+c_{i}\tau}(x), \ i = 1, ..., s,$$
(4.12)

definiert, wobei auch für diese die Randbedingung $K_i(t, u, \tau) = 0$ auf $\partial \Omega$ gilt, um ein gut gestelltes Problem zu erhalten. Für den impliziten Fall erfordert damit jeder Zeitschritt das Lösen von *s* stationären elliptischen Differentialgleichung für die Inkremente mit der üblichen Finite-Elemente-Methode.

Wir stellen zunächst die schwache Formulierung für (4.12) auf, indem wir $u^k(x)$, $K_i(t, u, \tau)$ und $f^{k+c_i\tau}(x)$ aus $H_0^1(\Omega)$ wählen, mit Testfunktionen $\varphi(x) \in H_0^1(\Omega)$ multiplizieren, über Ω integrieren und die Green'sche Formel anwenden. Es ergibt sich damit

$$\begin{split} \int_{\Omega} K_i(t, u, \tau) \,\varphi \, dx + \tau a_{ii} \int_{\Omega} \nabla K_i(t, u, \tau) \cdot \nabla \varphi \, dx \\ &= -\int_{\Omega} \nabla \left(u_k(x) + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_j(t, u, \tau) \right) \cdot \nabla \varphi \, dx + \int_{\Omega} f^{k+c_i \tau}(x) \varphi \, dx, \end{split}$$

für alle $\varphi \in H_0^1(\Omega)$. Die Randbedingung $K_i(t, u, \tau) = 0$ für die Inkremente ist dabei im Sinne der Spur zu verstehen. Wir führen den Finite-Elemente-Raum $V_h(\overline{\Omega})$ analog zum expliziten Fall ein und überführen die schwache Form der Inkremente in die allgemeine im Ort diskretisierte Form

$$\int_{\Omega} K_{ih}(t, u, \tau) \varphi_h dx + \tau a_{ii} \int_{\Omega} \nabla K_{ih}(t, u, \tau) \cdot \nabla \varphi_h dx$$
$$= -\int_{\Omega} \nabla \left(u_h^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} K_{jh}(t, u, \tau) \right) \cdot \nabla \varphi_h dx + \int_{\Omega} f_h^{k+c_i\tau} \varphi_h dx,$$

für alle $\varphi_h \in V_h$. Auch hier stellen wir die Funktionen aus $V_h(\overline{\Omega})$ als Linearkombination der Basisfunktionen dar, ersetzten die Finite-Elemente-Testfunktionen durch die Basisfunktionen $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ und erhalten die N Gleichungen für das *i*-te Inkrement

4 Grundlegende numerische Verfahren für parabolische Differentialgleichungen

$$\begin{split} \int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} k_{l}^{i} \phi_{l} \right) \phi_{m} \, dx + \tau a_{ii} \int_{\Omega} \nabla \left(\sum_{l=1}^{N} k_{l}^{i} \phi_{l} \right) \cdot \nabla \phi_{m} \, dx \\ &= -\int_{\Omega} \nabla \left(\sum_{l=1}^{N} u_{l}^{k} \phi_{l} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \left(\sum_{l=1}^{N} k_{l}^{j} \phi_{l} \right) \right) \cdot \nabla \phi_{m} \, dx + \int_{\Omega} f_{h}^{k+c_{i}\tau} \phi_{m} \, dx, \end{split}$$

für m = 1, ..., N. Umformungen ergeben

$$\sum_{l=1}^{N} k_l^i \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx + \tau a_{ii} \sum_{l=1}^{N} k_l^i \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx$$
$$= -\left(\sum_{l=1}^{N} u_l^k + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \left(\sum_{l=1}^{N} k_l^j\right)\right) \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx + \int_{\Omega} f_h^{k+c_i\tau} \phi_m \, dx,$$

für m = 1, ..., N. Die Gleichungen sind äquivalent zum linearen Gleichungssystem

$$(M + \tau a_{ii}K) \mathbf{k}^{i} = -K \left(\mathbf{u}^{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mathbf{k}^{j} + \mathbf{f}^{k+c_{i}\tau} \right)$$

und damit zu

$$\boldsymbol{k}^{i} = (M + \tau a_{ii}K)^{-1} \left(-K \left(\boldsymbol{u}^{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^{j} + \boldsymbol{f}^{k+c_{i}\tau} \right) \right),$$

 mit

$$M = (m_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad m_{ml} = \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx,$$

$$K = (k_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad k_{ml} = \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{f}^{k+c_i\tau} = (f_m)_{1 \le m \le N}, \quad f_m = \int_{\Omega} f_h^{k+c_i\tau} \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{k}^j = (k_l^j)_{1 \le l \le N},$$

$$\boldsymbol{u}^k = (u_l^k)_{1 \le l \le N}.$$

Mit diesen Ergebnissen kann nun u_h^{k+1} berechnet werden. Dafür betrachten wir die Verfahrensgleichung (4.11). Auch hier können die schwache Formulierung und die allgemeine diskretisierte Form eingeführt werden. Innerhalb der Runge-Kutta Verfahren suchen wir dann für den k + 1-ten Zeitschritt eine diskrete Lösung $u_h^{k+1} \in V_h(\overline{\Omega})$, sodass

$$\int_{\Omega} u_h^{k+1} \varphi_h \, dx = \int_{\Omega} u_h^k \varphi_h \, dx + \tau \sum_{i=1}^s b_i \int_{\Omega} K_i \varphi_h \, dx \quad \forall \varphi_h \in V_h.$$

Mit dem Ansatz

$$u_{h}^{k+1} = \sum_{l=1}^{N} u_{l}^{k+1} \phi_{l}, \quad u_{h}^{k} = \sum_{l=1}^{N} u_{l}^{k} \phi_{l}, \quad K_{ih}\left(t, u, \tau\right) = \sum_{l=1}^{N} k_{l}^{i} \phi_{l}$$

und dem Ersetzen der FEM-Testfunktionen durch die N Basisfunktionen ergibt sich

$$\int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} u_l^{k+1} \phi_l \right) \phi_m \, dx = \int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} u_l^{k+1} \phi_l \right) \phi_m \, dx + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i \int_{\Omega} \left(\sum_{l=1}^{N} k_l^i \phi_l \right) \phi_m \, dx,$$

fürm=1,...,N, was äquivalent ist zu

$$\sum_{l=1}^{N} u_l^{k+1} \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx = \sum_{l=1}^{N} u_l^k \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i \left(\sum_{l=1}^{N} k_l^i \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx \right),$$

für m = 1, ..., N. Mit

$$M = (m_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad m_{ml} = \int_{\Omega} \phi_l \phi_m \, dx,$$

$$K = (k_{ml})_{1 \le m, l \le N}, \quad k_{ml} = \int_{\Omega} \nabla \phi_l \cdot \nabla \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{f}^{k+c_i\tau} = (f_m)_{1 \le m \le N}, \quad f_m = \int_{\Omega} f_h^{k+c_i\tau} \phi_m \, dx,$$

$$\boldsymbol{k}^j = (k_l^j)_{1 \le l \le N},$$

$$\boldsymbol{u}^{k+1} = (u_l^{k+1})_{1 \le l \le N},$$

$$\boldsymbol{u}^k = (u_l^k)_{1 \le l \le N}$$

erhalten wir

$$M \boldsymbol{u}^{k+1} = M \boldsymbol{u}^k + M \left(\tau \sum_{i=1}^s b_i \boldsymbol{k}^i \right).$$

Durch Multiplikation mit M^{-1} ergibt sich

$$\boldsymbol{u}^{k+1} = \boldsymbol{u}^k + \tau \sum_{i=1}^s b_i \boldsymbol{k}^i$$

zur Berechnung der Lösung u_h^{k+1} . Die Randbedingung $u_h^{k+1} = 0$ ist durch die Definition der Inkremente wohldefiniert. Auch für die Rothe-Methode mit DIRK Verfahren zur Zeitdiskretisierung ergibt sich das gleiche Verfahren wie bei der vertikalen Linienmethode

$$u^{k+1} = u^k + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i k^i, \quad k = 0, ..., \ell - 1,$$

$$u^0(x) = u_0,$$
(4.13)

wobei in einem Zeitschritt für jedes Inkremente das Gleichungssystem

$$\boldsymbol{k}^{i} = (M + \tau a_{ii}K)^{-1} \left(-K \left(\boldsymbol{u}^{k} + \tau \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}^{j} + \boldsymbol{f}^{k+c_{i}\tau} \right) \right)$$

gelöst werden muss. Die Berechnungen erfolgt auch hier analog zum impliziten Fall bei der vertikalen Linienmethode.

4.3 Vergleich der vertikalen Linienmethode und der Rothe-Methode

Die vertikale Linienmethode und das Rothe-Verfahren unterscheiden sich im Wesentlichen in der Reihenfolge der Diskretisierung von Ort und Zeit.

Innerhalb der vertikalen Linienmethode entsteht, ausgehend von der schwachen Formulierung des Problems durch die Diskretisierung des Orts mithilfe der üblichen Finiten-Elemente-Methode, ein System gewöhnlicher Anfangswertprobleme bezüglich der Zeit. Dabei erhalten wir durch die einmalige Ortsdiskretisierung zu Beginn des Verfahrens ein festes Ortsgitter für alle Zeitschritte des anschließend durchgeführten Runge-Kutta Verfahrens. Wir konnten beobachten, dass es sich bei dem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem um ein steifes Anfangswertproblem handelt, weshalb auf die Stabilität des angewendeten Runge-Kutta Verfahrens geachtet werden muss. Innerhalb der Runge-Kutta Verfahren treten vektorielle Funktionen auf. Für die Berechnung des nächsten Schritts muss im expliziten Fall ein System mit Massenmatrix gelöst werden. Im impliziten Fall müssen zunächst Gleichungssysteme für die Inkremente gelöst werden, wobei die Ergebnisse anschließend zur Berechnung des nächsten Zeitschritts verwendet werden. In unseren Betrachtungen haben wir für die Zeitdiskretisierung eine feste Schrittweite τ gewählt. Innerhalb der vertikalen Linienmethode ist allerdings eine Zeitschrittadaption möglich, wodurch der Rechenaufwand verringert werden kann. Dazu können beispielsweise eingebettete Verfahren verwendet werden.

Bei der Rothe-Methode betrachten wir die klassische Wärmeleitungsgleichung als gewöhnliches Anfangswertproblem bezüglich der Zeit. Für die Runge-Kutta Verfahren haben wir in der Arbeit ein Zeitgitter mit fester Schrittweite τ gewählt. Das Wählen eines ungleichmäßigen Gitters und das Steuern der Zeitschrittweite ist auch hier möglich. Innerhalb der Runge-Kutta Verfahren treten im Ort stetige Funktionen auf. Für den expliziten Fall werden innerhalb der Runge-Kutta Verfahren zunächst nur stetige Funktionen addiert. Durch die anschließende Ortsdiskretisierung erhalten wir dasselbe Problem, wie bei der vertikalen Linienmethode, wobei ein System mit Massenmatrix gelöst werden muss. Im impliziten Fall entstehen innerhalb der Runge-Kutta Verfahren für die Inkremente stetige elliptische Randwertprobleme. Diese können dann mit dem Finite-Elemente-Verfahren hinsichtlich der räumlichen Variablen gelöst werden. Wir erhalten damit auch hier dasselbe Problem wie beim impliziten Fall ertstehen innerhalb der vertikalen Linienmethode. In unserem Betrachtungen haben wir innerhalb des Rothe-Verfahrens in jedem Zeitschritt dasselbe Ortsgitter gewählt. Es gibt Herangehensweisen, um in jedem Zeitschritt das Ortsgitter neu anzupassen, wodurch eine gewisse Flexibilität in Ortsrichtung entsteht. Für die in der Arbeit betrachtete Wärmeleitungsgleichung erhalten wir durch die Wahl eines festen Orts-Zeit-Gitter für die vertikale Linienmethode und die Rothe-Methode schlussendlich dasselbe Problem.

5 Numerische Berechnungen für ein parabolisches Problem

Wir betrachten in diesem Kapitel als Beispiel für ein parabolisches Problem die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) - \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,t) = 1 \quad \text{auf } \Omega = (0,1) \times I = (0,1]$$

mit Randbedingung

$$u(0,t) = u(1,t) = 0$$

und Anfangsbedingung

$$u(x,0) = \sin(\pi x).$$

Es ist zu bemerken, dass das Problem ein Spezialfall der in der Arbeit betrachteten Wärmeleitungsgleichung (1.3) ist. Die Berechnung der Lösung u kann demnach für die vertikale Linienmethode und die Rothe-Methode auf die gleiche Weise erfolgen, wie wir in Kapitel 4.3 festgestellt haben.

Zur numerischen Berechnung der Lösung u wurde ein MATLAB-Code implementiert. Dieser ist im Anhang B zu finden. Die Zerlegung von Ω erfolgte durch äquidistante Gitter mit verschiedenen Ortsgitterweiten h. Als Finite-Elemente-Ansatzraum wurden stückweise lineare Polynome gewählt. Die Berechnung der Einträge der Massenmatrix, Steifigkeitsmatrix und der rechten Seite kann im Anhang C nachvollzogen werden. Innerhalb des Programms wurden die dünn besetzten Matrizen M und K im sparse-Format gespeichert. Im Code wurden als Beispiele für explizite Verfahren das vierstufige klassische Runge-Kutta Verfahren und als Beispiel für ein DIRK Verfahren das dreistufige DIRK Verfahren nach Crouzeix, vgl. [Ale77, S. 1008], zur Zeitdiskretisierung mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten τ , abhängig von der Ortsgitterweite h, gewählt. Das Lösen der linearen Gleichungssysteme erfolgte mittels LR-Zerlegung. Die durch das Programm erzeugten Lösungen mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren zur Zeitdiskretisierung unter Angabe der Orts- und Zeitgitterweite, sind im folgenden in Abbildung 5.1 zu erkennen. Die numerisch berechneten Lösungen mithilfe des DIRK Verfahrens zur Zeitdiskretisierung werden in Abbildung 5.2 dargestellt.



Abb. 5.1: Numerisch berechnete Lösungen mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren.



Abb. 5.2: Numerisch berechnete Lösungen mit einem DIRK Verfahren nach Crouzeix.

In Abbildung 5.1a ist die numerisch berechnete Lösung mit Ortsschrittweiten $h = \frac{1}{2^2}$ und Zeitschrittweite $\tau = 0.1h^2$ zu erkennen. Durch das noch sehr grobe Ortsgitter sind starke Kanten in Ortsrichtung sichtbar. Auch in Zeitrichtung sind etwas feinere Kanten zu erkennen.

In Abbildung 5.1b erhalten wir mit $h = \frac{1}{2^4}$ und $\tau = 0.1h^2$ eine deutlich verbesserte Approximation. In Zeitrichtung erscheint die numerisch berechnete Lösung glatt.

Für Ortsgitterweite $h = \frac{1}{2^6}$ und $\tau = 0.1h^2$ erhalten wir eine gute Approximation der Lösung u, die in Abbildung 5.1c dargestellt ist. Die Lösung erscheint überwiegend glatt. Die Anfangsbedingung $u_0 = \sin(\pi x)$ und die Nullrandbedingung sind gut zu erkennen. Durch die positive rechte Seite f = 1 entsteht eine Wölbung nach oben. Es ist zu bemerken, dass sich die Lösung u über die Zeit immer weniger verändert und sich letztlich an den stationären Zustand annähert. Die Lösung des stationären Problems ist gegeben durch $u_{stat}(x) = \frac{x(1-x)}{2}$. Für t = 1 ist unsere numerisch berechnete Lösung eine gute Approximation von u_{stat} .

In Abbildung 5.1c rechts und Abbildung 5.1d ist besonders gut das typische Verhalten

der Lösung eines steifen Problems zu erkennen. Die Lösung hat am Anfang der Zeit in einem kleinen Zeitabschnitt $t \in [0, 0.2]$ eine starke Änderung der Werte und verläuft sonst sehr flach. Es ist zu bemerken, dass sich das klassisches Runge-Kutta Verfahren für Problem (5) mit $\tau = 0.1h^2 \in \mathcal{O}(h^2)$ stabil verhält.

In Abbildung 5.1
e sind starke Oszillationen der berechneten Lösung in Größenordnung
 10^{303} sichtbar. Aufgrund der Steifheit unseres Problems ist das klassische Runge-Kutta Verfahren für $\tau = 0.2h^2$ und insbesondere für
 $\tau = h$ nicht stabil.

Interessant ist das Verhalten des DIRK Verfahrens für Zeitschrittweite $\tau = h$, siehe Abbildung 5.2. Aufgrund der Stabilität bezüglich steifer Probleme sind die Berechnungen mit implizite Verfahren auch für große Schrittweiten $\tau \in \mathcal{O}(h)$ stabil.

In Abbildung 5.2a, Abbildung 5.2b und Abbildung 5.2c ist, durch die zur Ortsschrittweite asymptotisch äquivalenten Zeitschrittweite, noch gut das Zeitgitter zu erkennen. Für immer kleiner werdende Orts-Zeit-Gitter erscheint die Lösung glatt, siehe Abbildung 5.2d. Durch die Vermeidung extrem kleiner Zeitschrittweiten, kann es sogar zu einer Verringerung des Rechenaufwands kommen.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde anhand der Wärmeleitungsgleichung erste Ideen entwickelt, wie allgemeine Runge-Kutta Verfahren innerhalb der vertikalen Linienmethode und des Rothe-Verfahrens, zweier grundlegender Verfahren für parabolische Differentialgleichungen, angewendet werden können. Innerhalb der Verfahren wurde zur Ortsdiskretisierung die Finite-Elemente-Methode verwendet. Statt zur Zeitdiskretisierung die üblichen Runge-Kutta Verfahren erster und zweiter Ordnung einzusetzen, wurden in dieser Arbeit überlegt, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren und DIRK Verfahren angewendet werden können. In beiden Verfahren ist die Anwendung Runge-Kutta Verfahren höherer Ordnung möglich. Dabei sollte auf die Stabilität des angewendeten Runge-Kutta Verfahrens geachtet werden. Da innerhalb der Diskretisierung parabolischer Differentialgleichungen oft steife Probleme entstehen, sollten implizite Verfahren bevorzugt werden. Innerhalb unserer Betrachtungen hat sich für die Wärmeleitungsgleichung unter Anwendung desselben Raum-Zeit-Gitters für die vertikale Linienmethode als auch für die Rothe-Methode herausgestellt, dass beide Verfahren zusammenfallen und wir am Ende jeweils für den expliziten als auch impliziten Fall das gleiche Problem erhalten. An dieser Stelle ist zu bemerken, dass es sich bei der in der Arbeit betrachteten Wärmeleitungsgleichung um eines der einfachsten parabolischen Probleme zweiter Ordnung handelt. Die im Zusammenhang damit gewonnenen Erkenntnisse lassen sich damit möglicherweise nur bedingt auf komplexere Probleme übertragen. So stellt sich weiterführend die Frage, wie allgemeine explizite Runge-Kutta Verfahren, DIRK Verfahren oder auch allgemeine implizite Verfahren und damit die resultierende vertikale Linienmethode und Rothe-Methode für komplexere Differentialgleichungen aussehen könnten. Zudem könnte es von Interesse sein, die in der Arbeit beschriebenen Verfahren für komplizierte Ortsgitter zu betrachten oder auch Ortsgitteranpassungen einzubinden, da im Allgemeinen beispielsweise innerhalb der Rothe-Methode für jeden Zeitschritt ein anderes Ortsgitter gewählt werden kann. Da in unseren Betrachtungen nun auch Runge-Kutta Verfahren höherer Ordnung zum Einsatz kommen, könnte außerdem die Entwicklung eingebetteter Verfahren zur Zeitschrittweitenadaption innerhalb der Verfahren für parabolische Probleme von Interesse sein.

Anhang A

Code 1: Programmcode zu Kapitel 4 Abbildung 4.2

```
2
  %
  %
      Berechnung der maximalen und minimalen Eigenwerte der Matrix – M^{(-1)K}
3
  %
      mit Ortsgittterzellenanzahl, bzw. Matrixdimension N = 2^2 bis 2^{10}
4
  %
      und des zugehörigen Steifigkeitsquotienten
5
  %
6
  7
8
  function eigenvalues()
9
10
  for i=2:10
11
12
      %Anzahl der Gitterzellen
13
       N = 2^{i};
14
15
      %Ortsgitterweite
16
       h = 1/N;
17
18
      %Massenmatrix
19
       M = (h/6) * (diag(4 * ones(1, N+1)) + diag(ones(1, N), 1) + diag(ones(1, N), 1))
20
     N),-1));
21
      %Steifigkeitsmatrix
22
       K = (1/h) * (diag(2 * ones(1, N+1)) + diag(-1 * ones(1, N), 1) + diag(-1))
23
      * ones(1,N),-1));
24
      %Matrix
25
       MinvK = - M \setminus K;
26
27
      %Eigenwerte
28
       v = eig(MinvK);
29
       eig_min = min(v);
30
       eig_max = max(v);
31
32
```

```
%Quotient
33
        quo = max(abs(eig_max),abs(eig_min))/min(abs(eig_max),abs(eig_min));
34
35
       %Ergebnis speichern
36
        erg(i-1,:) = [N; eig_min; eig_max; quo];
37
38
39
  end
40
41 %Ergebnis-Tabelle
    T = array2table(erg, 'VariableNames', {'Anz_Gitterzellen', 'min_Eigenwert'
42
       ,'max_Eigenwert','Quotient q'});
    disp(T);
43
44
45 end
```

Angang B

Code 2: Programmcode zu Kapitel 5.

```
2
  %
     Numerische Berechnung der Lösung von Problem:
3
  %
4
  %
     du/dt - d^2u/dx^2 = 1, 0 < x < 1, 0 < t < = 1,
  %
5
  %
     u(0,t) = u(1,t) = 0, u(x,0) = sin(pi*x)
6
  %
7
  ""
8
9
  function parabExample()
10
11
     %Anzahl der Ortsgitterzellen
12
      N = 2^{4};
13
14
     %Ortsgitterweite
15
      h = 1/N;
16
17
     %Ortsgitterpunkte
18
      x = 0:h:1;
19
20
     %Massenmatrix
21
      M = speye(N+1);
22
23
     %Steifigkeitsmatrix
24
      K = speye(N+1);
25
26
     for i=2:N
27
         M(i,i) = (2*h)/3;
28
         K(i,i) = 2/h;
29
     end
30
31
32
      for i=2:N-1
         M(i+1,i) = h/6;
33
         M(i,i+1) = h/6;
34
```

```
K(i+1,i) = -1/h;
35
           K(i, i+1) = -1/h;
36
       end
37
38
       %rechte Seite
39
        f = @(t) [0; h*ones(N-1,1);0];
40
41
      %Zeitschritt
42
       tau = h;
43
44
       %Zeitgitter
45
       t = 0:tau:1;
46
47
       %Anzahl der Zeitschritte
48
       l = 1/tau;
49
50
      %diskretisierte Anfangsbedingung
51
       u_0 = sin(pi * x)';
52
53
      %die Matrix U speichert die Werte der Lösung u für das Orts-Zeit-
54
      Gitter [0,1]x[0,1]
       U = zeros(N+1,N+1);
55
       U(1,:) = u_0;
56
57
      %Anfangsiterierte
58
       u_k = u_0;
59
60
  %-----
61
  %explizites -RungeKutta Verfahren:
62
63
       %Verfahrens-Parameter des
64
      %klassischen Runge-Kutta Verfahrens
65
       s = 4;
66
       A = [0, 0, 0, 0; 0.5, 0, 0, 0; 0, 0.5, 0, 0; 0, 0, 1, 0];
67
       c = [0, 0.5, 0.5, 1];
68
       b = [1/6, 1/3, 1/3, 1/6];
69
70
71
       %einmalige Zerlegung der Matrix M
72
       [L,R] = lu(M);
73
74
       for k=2:(1+1) %Schleife über die Zeitschritte
75
76
```

```
sum_ki = zeros(N+1,1);
77
          inner_sum = zeros(N+1,1);
78
         k_i = zeros(N+1,1);
79
80
          for i = 1:s %Schleifen über die Stufen
81
82
            for j = 1:i-1 %innere Summe
83
                inner_sum = inner_sum + A(i,j) * k_i;
84
            end
85
86
         %äußere Summe
87
           sum_ki = sum_ki + b(i)* (K * (u_k + tau * inner_sum) - f(c(i)));
88
89
         end
90
91
         %Gleichungssystem mit M
92
           y = L \setminus sum_ki;
93
           z = R \setminus y;
94
95
         %Schritt für die Lösung
96
           u_k = u_k - tau * z;
97
           U(k,:) = u_k;
98
        end
99
100
   %_____
101
                              _____
                                             _____
   %DIRK-Verfahren:
102
103
       %Verfahrens-Parameter des
104
       %dreistufigen DIRK Verfahrens von Crouzeix
105
        a = 2*cos(pi/18)/sqrt(3);
106
        s = 3;
107
        A = [(1+a)/2, 0, 0; -a/2, (1+a)/2, 0; 1+a, -(1+2*a), (1+a)/2];
108
        c = [(1+a)/2, 1/2, (1-a)/2];
109
        b = [1/(6*a^2), 1-1/(3*a^2), 1/(6*a^2)];
110
111
        for k=2:(l+1)% Schleife über die Zeitstufen
112
113
         sum_ki = zeros(N+1,1);
114
          inner_sum = zeros(N+1,1);
115
         k_i = zeros(N+1,1);
116
117
         %erster Schritt, dabei wird einmalig die LR-Zerlegung
118
         %aller Matrizen (M + tau*a_ii*K), i=1,...,s
119
```

```
if(k == 2)
120
121
              %Matrix S speichert die LR-Zerlegungen
122
               S = sparse([]);
123
124
               for i = 1:s
125
126
                 [L,R] = lu(M + tau*A(i,i)*K);
127
                  S = [S; L, R];
128
129
               end
130
           end
131
132
            for i = 1:s %Schleifen über die Stufen
133
134
              for j = 1:i-1 %innere Summe
135
                 inner_sum = inner_sum + A(i,j) * k_i;
136
              end
137
138
             %Gleichungssystem mit (M + tau*a_ii*K) = L*R
139
              y = S((i-1)*(N+1)+1:i*(N+1),1:N+1)\setminus(-K * (u_k + tau * inner_sum))
140
        + f(c(i)));
              k_i = S((i-1)*(N+1)+1:i*(N+1),N+2:2*(N+1)) \setminus y;
141
142
             %Summe der K_i zusammen mit den Gewichten
143
              sum_ki = sum_ki + b(i)*k_i;
144
           end
145
146
           %Schritt für die Lösung
147
             u_k = u_k + tau * sum_ki;
148
             U(k,:) = u_k;
149
        end
150
151
152
   %-----
        %Plot
153
        [X,Y] = meshgrid(x,t);
154
        surf(X,Y,U,'LineStyle','none');
155
        xlabel('x')
156
        ylabel('t')
157
        zlabel('u')
158
159
160 end
```

Anhang C

Hier erfolgt die Berechnung der Einträge der Massenmatrix M, der Steifigkeitsmatrix K und der rechten Seite f zum Beispiel (5).

Für die i-te Zeile der Massenmatrix ergibt sich:

$$\begin{split} \int_{0}^{1} \phi_{i} \phi_{i} dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} \frac{(x - x_{i-1})^{2}}{h^{2}} dx + \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} \frac{(x_{i+1} - x)^{2}}{h^{2}} dx \\ & \text{(substituiere: } u = x - x_{i-1} \Rightarrow \frac{du}{dx} = 1, \quad z = x_{i+1} - x \Rightarrow \frac{dz}{dx} = -1) \\ &= \frac{1}{h^{2}} \int_{0}^{h} u^{2} \, du - \frac{1}{h^{2}} \int_{h}^{0} z^{2} \, dz \\ &= \frac{1}{h^{2}} \int_{0}^{h} u^{2} \, du + \frac{1}{h^{2}} \int_{0}^{h} z^{2} \, dz \\ &= \frac{1}{h^{2}} \left[\frac{u^{3}}{3} \right]_{0}^{h} + \frac{1}{h^{2}} \left[\frac{z^{3}}{3} \right]_{0}^{h} \\ &= \frac{1}{3h^{2}} (h^{3} + h^{3}) \\ &= \frac{2h}{3}, \end{split}$$

$$\int_{0}^{1} \phi_{i-1} \phi_{i} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} \frac{(x_{i} - x)(x - x_{i-1})}{h^{2}} dx$$

$$= \frac{1}{h^{2}} \left[-\frac{1}{3}x^{3} + \frac{1}{2} (x_{i} + x_{i-1}) x^{2} - x_{i} x_{i-1} x \right]_{x_{i-1}}^{x_{i}}$$

$$= \frac{1}{h^{2}} \left(\frac{1}{6}x_{i}^{3} - \frac{1}{2}x_{i}^{2}x_{i-1} + \frac{1}{2}x_{i} x_{i-1}^{2} - \frac{1}{6}x_{i-1}^{3} \right)$$

$$= \frac{1}{6h^{2}} (x_{i} - x_{i-1})^{3}$$

$$= \frac{h}{6},$$

$$\int_0^1 \phi_{i+1} \phi_i dx = \frac{h}{6},$$
$$\int_0^1 \phi_i \phi_j dx = 0 \quad \text{für } |i-j| \ge 2.$$

Für die i-te Zeile der Steifigkeitsmatrix ergibt sich:

$$\int_{0}^{1} \phi_{i}' \phi_{i}' dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} \frac{1}{h^{2}} dx + \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} \left(-\frac{1}{h}\right) \left(-\frac{1}{h}\right) dx$$
$$= \left[\frac{1}{h^{2}} x\right]_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}$$
$$= \frac{1}{h^{2}} (x_{i+1} - x_{i-1})$$
$$= \frac{2}{h},$$

$$\int_{0}^{1} \phi_{i-1}' \phi_{i}' dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} -\frac{1}{h^{2}} dx$$
$$= -\frac{1}{h^{2}} \left[x \right]_{x_{i-1}}^{x_{i}}$$
$$= -\frac{1}{h^{2}} (x_{i} - x_{i-1})$$
$$= -\frac{1}{h},$$

$$\int_0^1 \phi'_{i+1} \phi'_i dx = -\frac{1}{h},$$
$$\int_0^1 \phi'_i \phi'_j dx = 0 \quad \text{für } |i-j| \ge 2.$$

Für den i-ten Eintrag der rechten Seite ergibt sich:

$$\int_{0}^{1} \phi_{i} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} \frac{x - x_{i-1}}{h^{2}} dx + \int_{x_{i}}^{x_{i+1}} \frac{x_{i+1} - x}{h^{2}} dx$$

$$= \frac{1}{2h} \left[x^{2} - 2x_{i-1}x \right]_{x_{i-1}}^{x_{i}} + \frac{1}{2h} \left[2x_{i+1}x - x^{2} \right]_{x_{i}}^{x_{i+1}}$$

$$= \frac{1}{2h} \left((x_{i} - x_{i-1})^{2} + (x_{i+1} - x_{i})^{2} \right)$$

$$= \frac{h}{2} + \frac{h}{2}$$

$$= h.$$

Literaturverzeichnis

- [Ale77] Roger Alexander. "Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff O.D.E.'s". English. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 14 (1977), S. 1006–1021. ISSN: 0036-1429.
- [AU18] Wolfgang Arendt und Karsten Urban. Partielle Differenzialgleichungen. Eine Einführung in analytische und numerische Methoden. German. 2nd edition. Berlin: Springer Spektrum, 2018. ISBN: 978-3-662-58321-0/pbk; 978-3-662-58322-7/ebook.
- [Bär07] Günter Bärwolff. Numerik für Ingenieure, Physiker und Informatiker. Für Bachelor und Diplom. German. Heidelberg: Elsevier/Spektrum Akademischer Verlag, 2007. ISBN: 978-3-8274-1689-6/pbk.
- [Bey13] Jürgen Bey. Finite-Volumen- und Mehrgitter-Verfahren für elliptische Randwertprobleme. Advances in Numerical Mathematics. Vieweg+Teubner Verlag, 2013. ISBN: 9783663100713.
- [Bie94] K. Biener. "Zum 50. Todestag von Wilhelm Kutta". In: RZ-Mitteilungen, Geschichte der Rechentechnik Nr. 8 (1994), S. 48–49.
- [Bra13] Dietrich Braess. Finite Elemente. Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie. German. 5th revised ed. Berlin: Springer Spektrum, 2013. ISBN: 978-3-642-34796-2/pbk; 978-3-642-34797-9/ebook.
- [Bur+11] Klemens Burg u. a. Partielle Differentialgleichungen und funktionalanalytische Grundlagen: Höhere Mathematik für Ingenieure, Naturwissenschaftler und Mathematiker. Vieweg Studium. Vieweg+Teubner Verlag, 2011. ISBN: 978-3-834-89589-9.
- [Dob10] Manfred Dobrowolski. Angewandte Funktionalanalysis. Funktionalanalysis, Sobolev-Räume und elliptische Differentialgleichungen. German. 2nd revised and extended ed. Berlin: Springer, 2010. ISBN: 978-3-642-15268-9/pbk; 978-3-642-15269-6/ebook.
- [Eva10] Lawrence C. Evans. Partial differential equations. 2nd ed. English. 2nd ed.
 Bd. 19. Providence, RI: American Mathematical Society (AMS), 2010. ISBN: 978-0-8218-4974-3/hbk.
- [For17] Otto Forster. Analysis 3. Ma β und Integrationstheorie, Integralsätze im \mathbb{R}^n und Anwendungen. German. 8th revised edition. Wiesbaden: Springer Spektrum, 2017. ISBN: 978-3-658-16745-5/pbk; 978-3-658-16746-2/ebook.

- [GR05] Christian Großmann und Hans-Görg Roos. Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen. German. Wiesbaden: Teubner, 2005, S. 571. ISBN: 3-519-22089-X.
- [GR92] Christian Großmann und Hans-Görg Roos. Numerik partieller Differentialgleichungen. German. Stuttgart: B. G. Teubner, 1992. ISBN: 3-519-02089-0/pbk.
- [GT01] David Gilbarg und Neil S. Trudinger. Elliptic partial differential equations of second order. Reprint of the 1998 ed. English. Reprint of the 1998 ed. Berlin: Springer, 2001. ISBN: 3-540-41160-7/pbk.
- [Hac17] Wolfgang Hackbusch. Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen. German. 4th revised edition. Heidelberg: Springer Spektrum, 2017. ISBN: 978-3-658-15357-1/pbk; 978-3-658-15358-8/ebook.
- [Han09] Martin Hanke-Bourgeois. Grundlagen der numerischen Mathematik und des wissenschaftlichen Rechnens. German. 3rd revised ed. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2009. ISBN: 978-3-8348-0708-3/pbk.
- [JL13] Michael Jung und Ulrich Langer. Methode der finiten Elemente für Ingenieure. Eine Einführung in die numerischen Grundlagen und Computersimulation.
 German. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2013, S. xvi + 639. ISBN: 978-3-658-01100-0; 978-3-658-01101-7. DOI: 10.1007/978-3-658-01101-7.
- [Joh16] Volker John. Finite element methods for incompressible flow problems. English.
 Bd. 51. Cham: Springer, 2016. ISBN: 978-3-319-45749-9/hbk; 978-3-319-45750-5/ebook.
- [Joh20] Volker John. Numerik I (SoSe 2020); Kapitel 6. Vorlesungsskript. https: //www.wias-berlin.de/people/john/LEHRE/lehrealt.html. Eingesehen am 20.08.2021. 2020.
- [Joh82] Fritz John. Partial differential equations. 4th ed. English. Bd. 1. Springer, Cham, 1982.
- [Joh87] Claes Johnson. Numerical solution of partial differential equations by the finite element method. English. Cambridge: Cambridge University Press, 1987.
 ISBN: 0-521-34758-0/pbk; 0-521-34514-6/hbk.
- [LT05] Stig Larsson und Vidar Thomée. Partielle Differentialgleichungen und numerische Methoden. German. Berlin: Springer, 2005. ISBN: 3-540-20823-2/pbk.
- [NV12] Ira Neitzel und Boris Vexler. "A priori error estimates for space-time finite element discretization of semilinear parabolic optimal control problems".
 English. In: Numer. Math. 120.2 (2012). ISSN: 0029-599X; 0945-3245/e.
- [Sch18] Ben Schweizer. Partielle Differentialgleichungen. Eine anwendungsorientierte Einführung. German. 2nd revised and corrected edition. Heidelberg: Springer Spektrum, 2018. ISBN: 978-3-662-56667-1/pbk; 978-3-662-56668-8/ebook.
- [Ste03] Olaf Steinbach. Numerische N\u00e4herungsverfahren f\u00fcr elliptische Randwertprobleme. Finite Elemente und Randelemente. German. Stuttgart: Teubner, 2003. ISBN: 3-519-00436-4.

- [SWP12] K. Strehmel, R. Weiner und H. Podhaisky. Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen: Nichtsteife, steife und differential-algebraische Gleichungen. Vieweg+Teubner Verlag, 2012. ISBN: 978-3-834-81847-8.
- [Tho06] Vidar Thomée. Galerkin finite element methods for parabolic problems. English. Berlin: Springer, 2006, S. xii + 370. ISBN: 3-540-33121-2. DOI: 10.1007/3-540-33122-0.
- [Wal17] Prof. Dr. Guido Walz. LEXIKON DER MATHEMATIK steifes Differentialgleichungssystem. https://www.spektrum.de/lexikon/mathematik/steifesdifferentialgleichungssystem/11295. Eingesehen am 26.09.2021. 2017.
- [Wer11] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. German. 7th revised and expanded ed. Berlin: Springer, 2011. ISBN: 978-3-642-21016-7/pbk; 978-3-642-21017-4/ebook.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Zerlegung eines Gebiets $\Omega = [a, b]$ in Teilintervalle	11
2.2	Zerlegung eines Gebiets $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ in Dreiecke	11
2.3	Hütchenfunktionen in \mathbb{R}	12
2.4	Gebiet Ω	13
2.5	Gitternetze über Ω	14
2.6	Approximierte Lösung u des Problems $\left(2.7\right)$ in zwei und drei Dimensionen.	14
3.1	Butcher-Tableau für allgemeine Runge-Kutta Verfahren.	16
3.2	Butcher-Tableau für DIRK Verfahren.	17
4.1	Visualisierung der vertikalen Linienmethode.	18
4.2	Steifigkeitsquotiont der Matrix $-M^{-1}K$ in Abhängigkeit der Ortsgitter-	
	zellenanzahl $N.$	21
4.3	Visualisierung der Rothe-Methode	24
5.1	Numerisch berechnete Lösungen mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren.	35
5.2	Numerisch berechnete Lösungen mit einem DIRK Verfahren nach Crouzeix.	36