

Technische Universität Ilmenau
Institut für Mathematik



Preprint No. M 99/28

**Zur effizienten Verfolgung
instabiler Orbits dynamischer
Systeme**

Beyer, Annett; Vogt, Werner

August 1999

Impressum:

Hrsg.: Leiter des Instituts für Mathematik
Weimarer Straße 25
98693 Ilmenau

Tel.: +49 3677 69 3621

Fax: +49 3677 69 3270

<http://www.tu-ilmenau.de/ifm/>

ISSN xxxx-xxxx

ilmedia

Zur effizienten Verfolgung instabiler Orbits dynamischer Systeme

Annett Beyer * Werner Vogt *

August 1999

*Technische Universität Ilmenau, Institut für Mathematik, PF 0565, D-98684 Ilmenau, email
vogt@mathematik.tu-ilmenau.de

Zusammenfassung. Für großdimensionale Fixpunktprobleme wird eine rekursive Projektionsmethode vorgestellt, die in Verbindung mit einer Parameterfortsetzung die effiziente Berechnung instabiler Fixpunkte gestattet. Mittels Fehlerschätzung und adaptiver Steuerung der Fortsetzungsschrittweite gelingt damit auch eine Lösungsverfolgung über Verzweigungspunkte hinweg, ohne daß auf Newton-ähnliche Verfahren im Gesamttraum zurückgegriffen werden muß.

1 Einleitung

Die numerische Approximation periodischer und quasi-periodischer Orbits dynamischer Systeme

$$x_t = \mathcal{F}(x, \lambda) \quad , \quad \lambda \in \mathbb{R} \quad (1.1)$$

mit der Phasenvariablen x und einem Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$ erfordert häufig die Lösung großdimensionaler nichtlinearer Gleichungssysteme. Beschreibt der Operator $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ein n -dimensionales Vektorfeld mit dem Fluß $\varphi_t(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, so ist zur Ermittlung T -periodischer Orbits die *Fixpunktaufgabe*

$$u = \varphi_T(u) \quad , \quad u \in \mathbb{R}^n \quad , \quad T > 0 \quad (1.2)$$

zu lösen. Auch asymptotisch stabile *Gleichgewichtslagen* u^* von (1.1) lassen sich mittels numerischer Integration gewinnen. Wendet man im einfachsten Falle das Euler-Cauchy-Verfahren mit Schrittweite h

$$u_{j+1} = u_j + h\mathcal{F}(u_j, \lambda) \quad , \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

an, um den Grenzwert $\lim_{j \rightarrow \infty} u_j = u^*$ zu erhalten, so ergibt sich mittels der Funktion

$$F(u, \lambda) := u + h\mathcal{F}(u, \lambda)$$

wiederum eine parameterabhängige Fixpunktaufgabe in \mathbb{R}^n der Form

$$u = F(u, \lambda) \quad \text{mit} \quad F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n \quad . \quad (1.3)$$

Entsprechend komplizierter aufgebaute Funktionen F lassen sich auch für Einschrittverfahren höherer Ordnung vom Runge-Kutta-Typ angeben.

Falls $\mathcal{F} : \mathcal{B}_1 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{B}_2$ ein partieller Differentialoperator in den Banachräumen \mathcal{B}_1 , \mathcal{B}_2 ist, so kann Problem (1.1) mittels Semidiskretisierung der Ortsvariablen $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ wiederum in ein großdimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Dimension $N \cdot n$

$$\frac{dx_i}{dt} = \mathcal{F}_i(x, \lambda) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1.4)$$

mit $x_i \in \mathbb{R}^n$, $\mathcal{F}_i : \mathbb{R}^{Nn} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{Nn}$ transformiert werden, wofür zeitperiodische Lösungen als *Fixpunkte* analog zu (1.2) bestimmt werden können. Schließlich sei auch auf die Approximationsaufgabe invarianter p -Tori verwiesen (vgl. [5],[2]), die in Winkel-Radius-Koordinaten $(\theta, x) \in \mathbb{T}^p \times \mathbb{R}^{n-p}$ ebenfalls in der Form (1.1) dargestellt werden kann und mittels Diskretisierung in ein hochdimensionales Fixpunktproblem (1.3) übergeht (vgl. [2],[3]).

Ausgangspunkt der nachfolgenden Betrachtungen soll deshalb das parameterabhängige Fixpunktproblem (1.3) mit im allgemeinen großer Dimension n und vollbesetzter Jacobimatrix sein. Für den Parameter λ werde ein endliches Intervall $\Lambda = [\lambda_a, \lambda_b]$ angenommen. Wegen des erheblichen

numerischen Aufwandes zur Ermittlung der Jacobimatrix $F_u(u, \lambda)$ werden die bekannten Fortsetzungsmethoden, die auf NEWTON-ähnlichen Verfahren, Quasi-NEWTON-Verfahren oder nichtlinearen konjugierten Gradienten-Verfahren basieren (vgl. [10],[1]), rasch ineffizient. Andererseits konvergiert die Fixpunktiteration (desweiteren als PICARD-Methode bezeichnet) im allgemeinen nur dann lokal, wenn sämtliche Eigenwerte μ_i der Jacobimatrix $F_u(u^*(\lambda), \lambda)$ am Fixpunkt $u^*(\lambda)$ betragsmäßig kleiner als 1 sind (Satz von OSTROWSKI, vgl. [8]). Verfolgt man jedoch stabile Orbits dynamischer Systeme über Verzweigungspunkte hinweg, so ist die Anzahl m der Eigenwerte μ_i mit $|\mu_i| > 1$ (d.h. die Dimension der instabilen invarianten Mannigfaltigkeit) anfangs sehr klein gegenüber der Dimension n .

JARAUSCH & MACKENS (vgl. [6],[7]) entwickelten für den Fall symmetrischer Jacobimatritzen deshalb eine “adaptive Dekompositionsmethode“, bei der das Fixpunktproblem (1.3) in ein niedrigdimensionales (instabiles) Teilsystem \mathcal{T}_p in \mathbb{R}^m und ein hochdimensionales (stabiles) Teilsystem \mathcal{T}_q in \mathbb{R}^{n-m} mit $m \ll n$ zerlegt wird. Während in \mathcal{T}_q die effiziente PICARD-Iteration durchgeführt wird, erfolgt lediglich im m -dimensionalen Teilsystem \mathcal{T}_p eine stabilisierende NEWTON-ähnliche Iteration. Diese Idee wurde von SHROFF & KELLER in [11] auch auf nichtsymmetrische Jacobimatritzen verallgemeinert, womit sämtliche eingangs genannten dynamischen Systeme erfaßt werden. Auch die zur effektiven Lösung großdimensionaler linearer Gleichungssysteme entwickelte Blockeliminationsmethode von TIMMERMANN [12] beruht auf der Idee einer Abspaltung des instabilen Anteils des Systems.

Nachfolgend wird eine Rekursive Projektionsmethode (RPM) aus [11] in Zusammenhang mit einer Parameterfortsetzung (Abschnitt 2) entwickelt und algorithmisch aufbereitet. Fragen der Fehlerschätzung und der automatischen Anpassung des Verfahrens bei Änderungen der Dimension m werden in Abschnitt 3 behandelt. Im Effizienzvergleich mit NEWTON-ähnlichen Verfahren werden schließlich einige Vor- und Nachteile der RPM erkennbar.

2 Stabilisierende Fixpunktiteration

2.1 Das theoretische Verfahren

Wir betrachten das Fixpunktproblem (1.3) vorerst für einen beliebigen *festen* Parameterwert $\lambda \in \Lambda$, zu dem ein Fixpunkt u^* existiere. Zu vorgegebener positiver Konstante $\delta < 1$ mögen genau $m > 0$ Eigenwerte $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$ der Jacobimatrix $F_u^* = F_u(u^*, \lambda)$ außerhalb des Kreises $K_\delta = \{|z| \leq \delta, 0 < \delta < 1\}$ liegen, d.h. es gelte

$$|\mu_1| \geq \dots \geq |\mu_m| > \delta \geq |\mu_{m+1}| \geq \dots \geq |\mu_n|. \quad (2.1)$$

Mit den zu $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$ gehörenden m Hauptvektoren v_1, \dots, v_m werden die Unterräume \mathbb{P} und \mathbb{Q} von \mathbb{R}^n durch $\mathbb{P} \equiv \text{span}(v_1, \dots, v_m)$ und das orthogonale Komplement $\mathbb{Q} \equiv \mathbb{R}^n - \mathbb{P}$ definiert. Offenbar ist \mathbb{P} invarianter Unterraum von $F_u^* = F_u(u^*, \lambda)$. Mit den orthogonalen Projektoren P bzw. $Q = I - P$ von \mathbb{R}^n auf \mathbb{P} bzw. \mathbb{Q} ist dann die direkte Zerlegung

$$\mathbb{R}^n = \mathbb{P} \oplus \mathbb{Q} = P\mathbb{R}^n \oplus Q\mathbb{R}^n. \quad (2.2)$$

möglich, d.h. für alle $u \in \mathbb{R}^n$ erhält man eine eindeutige Zerlegung

$$u = p + q, \quad p \equiv Pu \in \mathbb{P}, \quad q \equiv Qu \in \mathbb{Q}. \quad (2.3)$$

Das Stabilisationsverfahren benötigt die Projektoren P und Q auf die Unterräume \mathbb{P} und \mathbb{Q} . Diese erhält man, wenn eine Orthonormalbasis für den Unterraum \mathbb{P} gefunden wird. Angenommen, $\{z_i\}_{i=1}^m$

sei solch ein Orthonormalsystem für \mathbb{P} . Mit diesem System kann die Matrix $Z = (z_1, \dots, z_m) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ aufgebaut werden. Dann lassen sich die Projektoren leicht mittels der Darstellung

$$P = ZZ^T, \quad Q = I - ZZ^T \quad \text{mit} \quad Z^T Z = I_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

berechnen. Nachdem P und Q bestimmt sind, läßt sich die LYAPUNOV–SCHMIDT–Zerlegung durch Anwendung von (1.3) und (2.2) durchführen:

$$p = f(p, q, \lambda) \equiv PF(p + q, \lambda) \quad (2.4)$$

$$q = g(p, q, \lambda) \equiv QF(p + q, \lambda). \quad (2.5)$$

Die Kontraktivität von $g(p, q, \lambda)$ in q für (p, q) nahe (p^*, q^*) folgt aus

Lemma 1.

(i) $g_p^* = g_p(p^*, q^*, \lambda) = QF_u^* P = 0$

(ii) Alle Eigenwerte von $g_q^* = g_q(p^*, q^*, \lambda) = QF_u^* Q$ liegen im Kreis $K_\delta = \{|z| \leq \delta, 0 < \delta < 1\}$.

Beweis: Vgl. [11], S. 1102. ■

Aus diesem Lemma ist erkennbar, daß die Rekursion

$$q^{\nu+1} = g(p, q^\nu, \lambda)$$

auf \mathbb{Q} in einer Umgebung von (p^*, q^*) lokal konvergiert, auch wenn die ursprüngliche Fixpunktiteration (1.3) auf \mathbb{R}^n nicht konvergiert. Die Idee des Stabilisations–Verfahrens besteht in der simultanen Benutzung des NEWTON–Verfahrens für die Komponente $p = f(p, q, \lambda)$ und der Fixpunkt–Iteration für q (vgl. [11], S. 1102):

$$\begin{aligned} (I - f_p^\nu)(p^{\nu+1} - p^\nu) &= f(p^\nu, q^\nu, \lambda) - p^\nu, \\ q^{\nu+1} &= g(p^\nu, q^\nu, \lambda) \end{aligned} \quad (2.6)$$

mit $u^\nu = p^\nu + q^\nu$ und der Einschränkung

$$f_p^\nu \equiv f_p(p^\nu, q^\nu, \lambda) \equiv PF_u(u^\nu, \lambda)P.$$

der Matrix $F_u(u^\nu, \lambda)$ auf den Unterraum \mathbb{P} .

Falls der Wert 1 kein Eigenwert von f_p^ν ist, so besitzt $(I - f_p^\nu)$ eine Inverse. Dann kann das Stabilisationsverfahren wie folgt dargestellt werden (vgl. [11], S. 1103):

Theoretisches Stabilisationsverfahren

S1: $p^0 = Pu^0(\lambda), q^0 = Qu^0(\lambda);$

S2: Iteriere für $\nu = 0(1)N$ bis zur Konvergenz:

$$\begin{aligned} (a) \quad p^{\nu+1} &= p^\nu + (I - f_p^\nu)^{-1} (f(p^\nu, q^\nu, \lambda) - p^\nu), \\ (b) \quad q^{\nu+1} &= g(p^\nu, q^\nu, \lambda), \end{aligned} \quad (2.7)$$

S3: $u^*(\lambda) = p^N + q^N \equiv p^* + q^*.$

Das Grundverfahren in dieser einfachen Form wäre allerdings sehr aufwendig, da in jedem Schritt die Eigenwerte und Eigenvektoren in \mathbb{R}^n bestimmt werden müßten. Zur Konvergenzbetrachtung werde (2.7) in der Form

$$\begin{aligned} p^{\nu+1} &= h(p^\nu, q^\nu, \lambda), \\ q^{\nu+1} &= g(p^\nu, q^\nu, \lambda), \end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\text{mit } h(p, q, \lambda) = p + [I - f_p(p, q, \lambda)]^{-1} \cdot (f(p, q, \lambda) - p)$$

notiert. Die JACOBI-Matrix $\frac{\partial(h, g)}{\partial(p, q)}$ an der Lösung (p^*, q^*) läßt sich zu

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial(h, g)}{\partial(p, q)} \right|_{p^*, q^*} &= \begin{pmatrix} I + (I - f_p^*)^{-1} \cdot (f_p^* - I) & (I - f_p^*)^{-1} \cdot f_q^* \\ g_p^* & g_q^* \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & (I - f_p^*)^{-1} \cdot f_q^* \\ 0 & g_q^* \end{pmatrix} \end{aligned}$$

berechnen. Lemma 1 garantiert dann, daß das Spektrum von g_q^* in K_δ liegt:

$$\varrho \left(\left. \frac{\partial(h, g)}{\partial(p, q)} \right|_{p^*, q^*} \right) \leq \delta < 1. \tag{2.9}$$

Die lokale Konvergenz des Stabilisationsverfahrens (2.7) ergibt sich unter Benutzung dieser Resultate durch folgenden

Satz 1. $F(u, \lambda)$ genüge für ein $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\lambda) > 0$ auf der Kugel $K_{\varepsilon_1}(u^*) = \{u \mid \|u - u^*\| < \varepsilon_1\}$ folgenden Voraussetzungen:

- (a) $F(\cdot, \lambda) \in C^2$
- (b) $1 \notin \sigma(f_p^*) \equiv \sigma(PF_u(u^*(\lambda), \lambda)P)$.

Dann existiert ein $\varepsilon \in (0, \varepsilon_1)$, so daß das Stabilisationsverfahren (2.7) für alle Anfangswerte $u^0 \in K_\varepsilon(u^*)$ konvergiert.

Beweis: Vgl. [4], S. 31. ■

2.2 Parameterfortsetzung

Betrachtet man das Fixpunktproblem (1.3) nun für variablen Parameterwert λ , so lassen sich die Unterräume \mathbb{P} und \mathbb{Q} bei Veränderung des λ anpassen. Der Einfachheit halber sei am Anfangswert $\lambda = \lambda_0$ die Dimension $m = 0$, so daß die Lösung $u^*(\lambda_0)$ mittels PICARD-Iteration bestimmt werden kann (ggf. ist $u^*(\lambda_0)$ bereits bekannt).

Sekantenschritt

Es wird desweiteren angenommen, daß die Voraussetzungen des Satzes 1 für alle Parameterwerte λ erfüllt seien. Nach dem Theorem über die implizite Funktion existiert dann (lokal) die Lösung $\Gamma : u = u^*(\lambda)$ auf ganz $\Lambda = [\lambda_a, \lambda_b]$. Um diesen Lösungszweig Γ zu approximieren, wird ein Prädiktor-Korrektor-Fortsetzungsverfahren benutzt, das folgendermaßen aufgebaut ist: Es seien zwei Lösungspunkte $u_{-1}^* = u^*(\lambda_{-1})$, $u_0^* = u^*(\lambda_0)$, mit $\lambda_a \leq \lambda_{-1} < \lambda_0 \leq \lambda_b$ auf Γ gegeben. Ein neuer Lösungspunkt wird mit dem Sekantenprädiktor

$$\begin{aligned} \lambda &:= \lambda_0 + \delta \lambda, \\ u^0(\lambda) &:= u_0^* + \frac{\delta \lambda}{\lambda_0 - \lambda_{-1}} \cdot (u_0^* - u_{-1}^*). \end{aligned}$$

approximiert. Hierbei ist $\delta\lambda > 0$ die Fortsetzungsschrittweite. Das Korrekterverfahren wird durch das stabilisierte Verfahren

$$\begin{aligned} (a) \quad p^{\nu+1} &= p^\nu + (I - f_p^\nu)^{-1} (f(p^\nu, q^\nu, \lambda) - p^\nu), \\ (b) \quad q^{\nu+1} &= g(p^\nu, q^\nu, \lambda), \end{aligned} \tag{2.10}$$

beschrieben. Wie in Satz 1 gezeigt wurde, konvergiert die Iteration (2.7) nur, wenn die Anfangsiteration $u^0(\lambda)$ hinreichend nahe bei $u^*(\lambda)$ liegt und - dies ist das entscheidende Problem - der zu $u^0(\lambda)$ ermittelte Projektor P den zu $u^*(\lambda)$ gehörenden (exakten) Projektor hinreichend genau approximiert.

Bestimmung und Aufdatierung der Projektoren

Für λ seien die Dimension m und die Matrix $Z = (z_1, z_2, \dots, z_m)$ gegeben. Am neuen Parameterwert $\lambda := \lambda + \delta\lambda$ können sich nun einige Eigenwerte dem Rand des Kreises K_δ nähern oder diesen sogar verlassen, wenn sich λ bei der weiteren Berechnung ändert. Im generischen Fall ist dies entweder ein isolierter reeller Eigenwert μ_{m+1} oder ein komplex konjugiertes Paar (μ_{m+1}, μ_{m+2}) . Angenommen, für den aktuellen λ -Wert gilt

$$u^\nu = p^\nu + q^\nu \in K_\delta(u^*(\lambda)).$$

Wegen (2.7 b) läßt sich dann folgende Abschätzung gewinnen:

$$\begin{aligned} \Delta q^\nu &= q^{\nu+1} - q^\nu \\ &= g(p^\nu, q^\nu, \lambda) - g(p^{\nu-1}, q^{\nu-1}, \lambda) \\ &= g(p^{\nu-1} + \Delta p^{\nu-1}, q^{\nu-1} + \Delta q^{\nu-1}, \lambda) - g(p^{\nu-1}, q^{\nu-1}, \lambda) \\ &= g_p^* \Delta p^{\nu-1} + g_q^* \Delta q^{\nu-1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= g_q^* \Delta q^{\nu-1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \end{aligned}$$

woraus nach Vernachlässigung der Restterme zweiter Ordnung die Darstellung der ν -ten Differenz

$$\Delta q^\nu \approx (g_q^*)^\nu \Delta q^0 \tag{2.11}$$

folgt. Falls also das Verfahren nicht in ν_{max} Iterationen konvergiert, werden die Differenzvektoren $D = \{\Delta q^\nu, \Delta q^{\nu-1}\} = \{d_1, d_2\}$ benutzt, um den dominanten Eigenraum von g_q^* zu approximieren. Orthonormierung dieser Vektoren liefert $\tilde{D} = (\tilde{d}_1, \tilde{d}_2)$ mit

$$\begin{aligned} \tilde{d}_1 &:= \frac{d_1}{\|d_1\|} \\ d_2 &:= d_2 - (\tilde{d}_1, d_2) \cdot \tilde{d}_1 \\ \tilde{d}_2 &:= \frac{d_2}{\|d_2\|}. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Wenn $\|d_1\| > \kappa \cdot \|d_2\|$ mit einer hinreichend großen Konstanten κ ist (im allgemeinen $\kappa \approx 10^3$), so kann man folgern, daß der dominante Eigenraum von g_q^* eindimensional ist und den Vektor \tilde{d}_1 zu Z hinzufügen. Andernfalls nimmt man an, daß ein komplex konjugiertes Paar von Eigenwerten den Kreis K_δ verlassen hat und addiert zwei neue Vektoren, die beiden Spalten von \tilde{D} , zu Z .

Abnahme der Basisgröße

Ebenso ist es möglich, daß einige der vorher außerhalb von K_δ liegenden Eigenwerte nun innerhalb des Kreises zu finden sind. In diesem Fall muß die Matrix Z um die zu diesen Eigenwerten gehörigen

Eigenvektoren verringert werden. Hierfür wird die Größe von Z durch Einführung einer $m \times m$ Matrix

$$H = Z^T F_u^* Z = Z^T f_p^* Z \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

getestet. Wie man sich leicht überlegt, sind die Eigenwerte von H gleich den μ_i , eingeschränkt auf den „instabilen“ Unterraum \mathbb{P} . Nach jedem Fortsetzungsschritt werden die m Eigenwerte und Eigenvektoren von H berechnet. Falls nur $\hat{m} < m$ Eigenwerte von H außerhalb des Kreises K_δ liegen, berechnet man eine Basis $V \in \mathbb{R}^{m \times \hat{m}}$ der zugehörigen Eigenvektoren von H . Dann bildet der von ZV aufgespannte Unterraum eine gute Approximation für die gewünschte Eigenbasis, und man ersetzt Z durch

$$Z := \text{orth}(ZV) .$$

Auf diese Weise wird, falls erforderlich, die Größe der Basis der Eigenvektoren automatisch reduziert.

Fortsetzungsschritt

Nach jedem Fortsetzungsschritt ändert sich in der Regel der dominante Eigenraum von F_u^* , womit die Basis Z zunehmend ungeeignet wird. Um die Genauigkeit wiederherzustellen, werden die Spalten von Z jedesmal wie folgt neu berechnet:

$$Z := \text{orth}(F_u^* Z)$$

wobei $\text{orth}(F_u^* Z)$ die Berechnung einer orthonormalen Basis für die Spalten von $F_u^* Z$ durch Benutzung des SCHMIDTschen Orthonormierungsverfahrens beschreibt. Das im allgemeinen numerisch instabile SCHMIDTsche Verfahren ist hierfür gut geeignet, da meistens $m \ll n$ (in praxi $m \approx 5, \dots, 10$) ist.

2.3 Der numerische Algorithmus

Für die Berechnung werden folgende Bezeichnungen eingeführt:

n	:	Dimension des Gleichungssystems
u_0	:	Startlösung
λ_0	:	Anfangswert für Fortsetzungsparameter
λ_{end}	:	Endwert für Fortsetzungsparameter
$delta = 1 - \delta$:	Schranke für stabilen Unterraum, $K_{1-\delta} = \{ z \leq 1 - \delta\}$
tol	:	Genauigkeitsschranke der Berechnungen
ν_{max}	:	maximale Iterationszahl
$\delta\lambda$:	Fortsetzungsschrittweite für λ
$Verf$:	Berechnung mit (1) PICARD-Verfahren, (2) NEWTON-Verfahren oder (3) RPM

Außerdem werde eine Koordinatenvariable z für die Repräsentation von $p \in \mathbb{P}$ in der Basis Z durch

$$z = Z^T p = Z^T u, \quad z \in \mathbb{R}^m, \quad \text{also} \quad p = Zz, \quad u = Zz + q$$

eingeführt. Damit lautet die Gleichung (2.6) im Unterraum \mathbb{P} nunmehr

$$(I - Z^T F_u Z)(z^{\nu+1} - z^\nu) = Z^T F - z^\nu . \tag{2.13}$$

Mit diesen Notationen läßt sich der RPM-Algorithmus wie folgt angeben:

RPM – Fortsetzungsalgorithmus**S1:** Eingabe $n, u_0, \lambda_0, \lambda_{end}, \delta, tol, \nu_{max}, \delta\lambda, Verf$ **S2:** Setze: $m := 0, \lambda_{-1} := \lambda_0 - \delta\lambda, u_{-1} := u_0, iZaehlF := 0$ **S3:** Solange $\lambda_0 < \lambda_{end}$ gehe zu **S4**, sonst zu **S20****S4:** Sekantenschritt

$$\lambda := \lambda_0 + \delta\lambda, \quad u(\lambda) := u_0 + \frac{\delta\lambda}{\lambda_0 - \lambda_{-1}} \cdot (u_0 - u_{-1})$$

S5: $u_{alt} := u, F := F(u_{alt}, \lambda),$

$$\nu := 0, q_1 := 0, q_2 := u, flag := 0$$

S6: Wenn $m > 0$ dann approximiere die Ableitung:

$$F_u Z_i := \frac{1}{\varepsilon} [F(u + \varepsilon Z_i, \lambda) - F(u, \lambda)], \quad i = 1, \dots, m$$

$$\text{und setze } H := Z^T [F_u Z]$$

S7: Solange $flag == 0$ gehe zu **S8**, sonst zu **S17****S8:** Wenn $m > 0$ gehe zu **S9**, sonst zu **S12**

$$\mathbf{S9:} \quad z := Z^T u, \quad \zeta := Z^T F, \quad q_0 := q_1, \quad q_1 := q_2$$

S10: Numerisches Stabilisationsverfahren

$$A := I - H, \quad a := \zeta - z$$

S11: Löse das lineare Gleichungssystem in \mathbb{R}^m

$$Ax = a \quad \implies x$$

$$z := z + x, \quad q_2 := F - Z\zeta, \quad u := Zz + q_2,$$

gehe zu **S13**.**S12:** Picard-Verfahren

$$q_0 := q_1, \quad q_1 := q_2, \quad q_2 := F, \quad u := F$$

S13: $F := F(u, \lambda), \quad inc(\nu)$ **S14:** Wenn $\|u - F\| < tol \cdot (\|F\| + 1)$ und $(Verf = 3)$

$$\text{dann } flag := 1 \quad \text{sonst } flag := 3$$

S15: Wenn $(\nu > \nu_{max} \text{ oder } \|q_2 - q_1\| > \kappa \|q_1 - q_0\|)$ und $(Verf = 3)$

$$\text{dann } flag := 2 \quad \text{sonst } flag := 3$$

S16: $flag == 1$: Abnahme der Basisgröße:Bestimme die Matrix V und setze

$$Z := orth(ZV)$$

 $flag == 2$: Erhöhung der Basisgröße $\implies Z$

$$u = u_{alt}, \quad F = F(u, \lambda), \quad \nu = 0$$

Berechnung der Ableitung $\implies H$

$$flag := 0$$

 $flag == 3$: break**S17:** Fortsetzungsschritt: $Z = orth(F_u^* Z)$ **S18:** Umspeicherung: $(u_1, \lambda_1, u_0, \lambda_0) := (u_0, \lambda_0, u, \lambda)$ **S19:** Ausgabe: $u_0, \lambda_0, \nu, iZaehlF$ **S20:** STOP

3 Fehlerschätzung und Effizienz

3.1 Praktische Fehlerschätzung

Um die Korrekturiteration der Rekursiven Projektions–Methode nach endlich vielen Schritten so zu beenden, daß die exakte Lösung $u^* = F(u^*, \lambda)$ mit vorgegebener Toleranz approximiert wird, ist eine a–posteriori–Schätzung für den Fehler $u^{\nu+1} - u^*$ durchzuführen. Bei festem Parameter $\lambda \in \Lambda := [\lambda_a, \lambda_b]$ werden deshalb folgende Voraussetzungen an das Problem gestellt:

Annahmen :

- (i) $F \in C^r(\mathbb{R}^n \times \Lambda, \mathbb{R}^n)$, $r \geq 2$
- (ii) Es existiert eine Lösung $u^* = u^*(\lambda)$ für alle $\lambda \in \Lambda$.
- (iii) u^* ist nicht entartet, d.h. $\mu_i \neq 1$, $i = 1..n$ mit $\sigma(F_u(u^*, \lambda)) = \{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}$.

Diese Annahmen garantieren die Regularität des gesuchten Lösungspfad $\mathcal{C} = \{(u^*(\lambda), \lambda) \mid \lambda \in \Lambda\}$. Wie im theoretischen Stabilisierungsverfahren angenommen, werde vorerst das NEWTON-Verfahren als Korrektor benutzt:

$$\begin{aligned} p^{\nu+1} &= h(p^\nu, q^\nu), & p^\nu &\in \mathbb{P} \\ q^{\nu+1} &= g(p^\nu, q^\nu), & q^\nu &\in \mathbb{Q} \end{aligned} \tag{3.1}$$

mit $h(p, q) = p + [I - f_p(p, q)]^{-1} (f(p, q) - p)$
 und $f(p, q) = PF(u)$, $f_p(p, q) = PF_u(u)P$.

Für den Fehler der p-Komponente erhält man die Entwicklung

$$\begin{aligned} p^{\nu+1} - p^* &= h_p^* \cdot (p^\nu - p^*) + h_q^* \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}((v^\nu - v^*)^2) \\ &= h_q^* \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}((v^\nu - v^*)^2) \\ &= (I - f_p^*)^{-1} f_q^* \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}((v^\nu - v^*)^2) \\ &= B \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}(\varepsilon_\nu^2) \end{aligned} \tag{3.2}$$

mit $B := (I - f_p^*)^{-1} f_q^*$ und $\varepsilon_\nu := \max(\|p^\nu - p^*\|, \|q^\nu - q^*\|)$. Analog kann man den Fehler der q-Komponente darstellen:

$$\begin{aligned} q^{\nu+1} - q^* &= g_p^* \cdot (p^\nu - p^*) + g_q^* \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}((v^\nu - v^*)^2) \\ &= g_q^* \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}((v^\nu - v^*)^2) \\ &= C \cdot (q^\nu - q^*) + \mathcal{O}(\varepsilon_\nu^2), \end{aligned} \tag{3.3}$$

wobei abkürzend $C := g_q^*$ gesetzt wird. Eine a–posteriori–Schätzung für $p^{\nu+1} - p^*$ und $q^{\nu+1} - q^*$ mit (3.2) und (3.3) sowie der Darstellung $u^{\nu+1} - u^* = (p^{\nu+1} - p^*) + (q^{\nu+1} - q^*)$ liefert für die drei Fehler den folgenden

Satz 2.

Für alle $\nu \in \mathbb{N}$ gelten mit den Annahmen (i),(ii),(iii) die asymptotischen Fehlerschätzungen

$$p^\nu - p^* = -B(I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \tag{3.4}$$

$$q^\nu - q^* = -C(I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \tag{3.5}$$

$$u^\nu - u^* = -(B + C)(I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \tag{3.6}$$

Folgerung 1. Mit den Konstanten

$$\beta = \|(I - f_p^*)^{-1} f_q^*\| \text{ und } \gamma = \|g_q^*\|$$

erhält man bei Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung für $\nu = 1, 2, \dots$ die a-posteriori-Schätzungen

$$\|p^\nu - p^*\| \leq \frac{\beta}{1 - \gamma} \|q^\nu - q^{\nu-1}\| \quad (3.7)$$

$$\|q^\nu - q^*\| \leq \frac{\gamma}{1 - \gamma} \|q^\nu - q^{\nu-1}\| \quad (3.8)$$

$$\|u^\nu - u^*\| \leq \alpha \|q^\nu - q^{\nu-1}\|, \quad \alpha := \frac{\beta + \gamma}{1 - \gamma}. \quad (3.9)$$

In den Implementationen des Fortsetzungsalgorithmus wird aus Effizienzgründen häufig das *vereinfachte Newton-Verfahren* als Korrektor benutzt. Mit der konstanten Jacobimatrix $f_p^0 \equiv f_p(p^0, q^0, \lambda) \equiv PF_u(u^0, \lambda)P$ definieren wir dazu folgende Hilfsmatrizen:

$$\begin{aligned} A &:= I - f_p(p^0, q^0, \lambda) \\ B &:= A^{-1} f_q^* \\ C &:= g_q^* \\ D &:= A^{-1} (f_p^* - f_p(p^0, q^0, \lambda)) . \end{aligned}$$

Unter den obigen Annahmen (i),(ii),(iii) lassen sich auf analoge Weise die aufwendigeren asymptotischen Schätzungen

$$\begin{aligned} p^\nu - p^* &= -D(I - D)^{-1}(p^\nu - p^{\nu-1}) - \\ &\quad -(I - D)^{-1}B(I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$q^\nu - q^* = -C(I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} u^\nu - u^* &= -D(I - D)^{-1}(p^\nu - p^{\nu-1}) - \\ &\quad -[C + (I - D)^{-1}B](I - C)^{-1}(q^\nu - q^{\nu-1}) + \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon_{\nu-1}^2) \end{aligned} \quad (3.12)$$

herleiten.

Um die Abschätzungen des Satzes 2 praktisch nutzen zu können, ist eine Approximation der Konstanten β und γ erforderlich. Da die Differenzen $\Delta_{\nu+1} := \|q^{\nu+1} - q^\nu\|_\infty$ bereits für den Basistest benötigt werden und damit numerisch zur Verfügung stehen, bietet sich die Näherung

$$\gamma = \|g_q^*\|_\infty \approx \frac{\|q^{\nu+1} - q^\nu\|_\infty}{\|q^\nu - q^{\nu-1}\|_\infty} = \frac{\Delta_{\nu+1}}{\Delta_\nu} \quad (3.13)$$

dafür an. Die Beschaffung einer Approximation für β ist etwas aufwendiger. Anstelle des p wird im Algorithmus die Koordinatenvariable z der Darstellung von $p \in \mathbb{P}$ in der Basis Z benutzt, wobei $p = Zz$, $u = Zz + q$ gilt. Damit lautet das NEWTON-Verfahren für den Unterraum \mathbb{P}

$$(I - Z^T F_u Z)(z^{\nu+1} - z^\nu) = Z^T F - z^\nu . \quad (3.14)$$

Infolgedessen muß $p^\nu = Z_\nu z^\nu$ zusätzlich abgespeichert werden, so daß man für β die Darstellung

$$\beta = \|(I - f_p^*)^{-1} f_q^*\|_\infty \approx \frac{\|p^{\nu+1} - p^\nu\|_\infty}{\|q^\nu - q^{\nu-1}\|_\infty} = \frac{\|Z z^{\nu+1} - Z z^\nu\|_\infty}{\Delta_{\nu+1}} \quad (3.15)$$

erhält. Wegen $\alpha = \frac{\beta+\gamma}{1-\gamma}$ folgt schließlich die Darstellung des Fehlers von $u^{\nu+1}$

$$\|u^{\nu+1} - u^*\|_{\infty} \approx \alpha \|q^{\nu+1} - q^{\nu}\|_{\infty} = \alpha \cdot \Delta_{\nu+1}. \quad (3.16)$$

Beispiel 1 Das Gleichungssystem $u = F(u, \lambda)$ der Dimension $n = 10$ sei gegeben durch

$$\begin{aligned} F_i(u, \lambda) &= \left(2 + \frac{1}{2+i}\right) \cdot u_i \cdot (1.0 - u_i) + 0.1 \cdot (u_i - u_{i+1}), \\ & \quad i = 0(1)n - 2, \\ F_{n-1}(u, \lambda) &= \lambda \cdot u_{n-1} \cdot (1.0 - u_{n-1}) + 0.1 \cdot (u_{n-1} - u_0). \end{aligned}$$

Der Parameter liege im Intervall $\lambda \in [2.0, 3.0]$. Das Verfahren **RPM 2.1** lieferte bei vorgegebener Genauigkeit der Berechnungen $tol = 10^{-10}$ die in Tabelle 1 dargestellten Werte für die Fehlerkonstanten α, β und γ . Es erwies sich, daß im allgemeinen $\beta \ll \gamma$ war, also das Konvergenzverhalten der RPM durch die PICARD-Iteration dominiert wurde.

λ	m	γ	β	α
2.0	0	0	0	0
2.1	0	0.187	0	0.230
2.2	0	0.198	0	0.247
2.3	0	0.225	0	0.290
2.4	0	0.330	0	0.493
2.5	0	0.435	0	0.770
2.6	0	0.539	0	1.169
	1	0.190	0.014	0.252
2.7	1	0.191	0.021	0.262
2.8	1	0.195	0.029	0.278
2.9	1	0.192	0.031	0.276
3.0	1	0.175	0.004	0.217

Tabelle 1: Berechnete Fehlerkonstanten

Während die Dimension m in Beispiel 1 lediglich von 0 auf 1 wechselte, durchläuft m im folgenden Beispiel, beginnend mit 0, die Werte 1, 2 und 3. Dicht aufeinander folgende Dimensionswechsel, z.B. hervorgerufen durch Periodenverdopplungen (Bifurkationskaskaden), stellen hohe Anforderungen an die Adaptivität der Fortsetzungsmethoden. Das richtige Erkennen der Dimension m des „instabilen“ Unterraumes während der Berechnungen erfordert in jedem Falle eine geeignete Steuerung der Fortsetzungsschrittweite $\delta\lambda$. Bewährt hat sich folgende heuristische Technik: Gegeben seien die maximale Zahl von Korrektoiterationen, z.B. $\nu_{\max} := 30$, und die Weite des vorangegangenen Fortsetzungsschrittes $\delta\lambda_{alt}$. Nach $\nu < \nu_{\max}$ Korrektoiterationen werde die geforderte Genauigkeit erreicht. Falls $\nu < 0.5\nu_{\max}$ ist, so setze man $\varrho := 1.5$. Ist dagegen $\nu > 0.75\nu_{\max}$, so verkleinere man die Schrittweite mittels $\varrho := 0.75$; andernfalls bleibt $\varrho := 1$. Die neue Schrittweite ist in jedem Falle $\delta\lambda_{neu} := \varrho \cdot \delta\lambda_{alt}$.

Beispiel 2

Zur Verfolgung instabiler numerischer Lösungen bei Periodenverdopplung wird folgende Gleichung mit komplexwertigem z betrachtet:

$$\dot{z} = z \cdot (\lambda - z\bar{z}), \quad z \in \mathbb{C}.$$

Dabei sei $\lambda = s + iw \in \mathbb{C}$ und $\dot{z} = \dot{x} + i\dot{y}$. Anwendung des EULER-CAUCHY-Verfahrens und Transformation auf Polarkoordinaten liefert das Fixpunktproblem in \mathbb{R}^n

$$u_i = u_i \cdot ((\lambda \cdot w)^2 + (1.0 + \lambda \cdot (s_i - u_i))^2), \quad i = 0(1)n - 1.$$

Die linke Tabelle 2 enthält die numerischen Parameterwerte; rechts sind folgende Werte aufgelistet:

- λ : aktueller Wert des Fortsetzungsparameters,
- m : Dimension des „instabilen“ Unterraumes,
- ν : Anzahl der durchgeführten Iterationen sowie
- ϕ : Anzahl der (skalaren) Funktionsberechnungen.

Parameter:
$w = 1.0$
$s_i = 5.0,$ $i = 0(1)n - 4$
$s_{n-3} = 4.0$
$s_{n-2} = 3.5$
$s_{n-1} = 3.0$
$\lambda \in [0.1, 0.3]$

λ	m	ν	ϕ
0.1	0	29	300
0.11	0	26	270
0.12	0	16	170
0.13	0	14	150
0.14	0	13	140
0.15	0	17	180
0.16	0	24	250
0.17	0 \rightarrow 1	30+19	530
0.185	1 \rightarrow 2	30+17	540
0.2075	2 \rightarrow 3	30+7	470
0.24125	3	3	100
0.291875	3	9	160
0.3	3	8	150

Tabelle 2: Veränderung der Dimension m

3.2 Effizienz im Vergleich

Um verschiedene Verfahrensvarianten hinsichtlich ihrer Effizienz vergleichen zu können, wurde die Anzahl ϕ der skalaren Funktionsaufrufe $F_i(u, \lambda)$ gezählt. Damit wird idealisierend unterstellt, daß die F_i hinreichend aufwendig zu bestimmen sind, also z.B. transzendente Funktionen enthalten, womit der übrige (algebraische) Aufwand nicht ins Gewicht fällt. Die Matrix $H := Z^T(F_u Z)$ des RPM-Schrittes 6 wird sinnvoll durch Differenzen approximiert, womit eine analytische Bereitstellung der Jacobi-Matrix vermieden wird. Mit der Matrix $Z = [Z_1, \dots, Z_m] \in \mathbb{R}^{n \times m}$ und $\varepsilon > 0$ werden die Vektoren

$$F_u Z_i := \frac{1}{\varepsilon} [F(u + \varepsilon Z_i, \lambda) - F(u, \lambda)], \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.17)$$

ermittelt (vgl. [11]). Die Variable ε wird dabei zu

$$\varepsilon = EPS \cdot (\|u\| + 1), \quad \text{mit } EPS = 10^{-6}$$

gewählt. (3.17) erfordert $m+1$ Berechnungen von F ; allerdings wird wegen der Orthogonalisierung in RPM-Schritt 17 gemäß $Z := orth(F_u^* Z)$ mit $u^* := u_{n\epsilon u}$ nochmals (3.17) erforderlich. Bei ν

Korrektoriterationen mit dem vereinfachten NEWTON-Verfahren kommen schließlich weitere ν Berechnungen von $F(u, \lambda)$ hinzu, womit sich die Gesamtzahl von skalaren Funktionswertberechnungen $F_i(u, \lambda)$ zu

$$\phi = (2m + 1 + \nu) \cdot n, \quad (3.18)$$

ergibt.

Beispiel 3

Mit dem Radiusparameter $\delta = 0.5$ sei das System $u = F(u, \lambda)$ der Dimension $n = 10$

$$\begin{aligned} F_i(u, \lambda) &= 2.1 \cdot u_i \cdot (1.0 - u_i) + 0.1 \cdot (u_i - u_{i+1}), \quad i = 0(1)n - 2, \\ F_{n-1}(u, \lambda) &= \lambda \cdot u_{n-1} \cdot (1.0 - u_{n-1}) + 0.1 \cdot (u_{n-1} - u_0) \end{aligned}$$

gegeben. Im gesamten Parameterbereich $\lambda \in [2, 3]$ ist die betrachtete Lösung stabil, so daß das PICARD-Verfahren stets konvergiert. Neben dem RPM-Verfahren wird das vereinfachte NEWTON-Verfahren angewandt, allerdings auf das Gesamtsystem der Dimension n . In Tabelle 3 wurde ϕ mit (3.18) berechnet, wobei folgende Verfahrensparameter benutzt wurden: Anfangsvektor $u_i^0 = 0.5$ für $i = 0(1)n - 1$; Schranke $delta = 1 - \delta = 0.5$; Genauigkeit der Berechnungen $tol = 10^{-10}$; Fortsetzungsschrittweite = 0.1; maximale Iterationsanzahl $\nu_{max} = 30$.

λ	Picard (1)			RPM (2)			Vereinf. Newton (3)		
	m	ν	ϕ	m	ν	ϕ	m	ν	ϕ
2.0	0	9	100	0	9	100	10	19	400
2.1	0	9	100	0	9	100	10	12	330
2.2	0	9	100	0	9	100	10	12	330
2.3	0	13	140	0	13	140	10	12	330
2.4	0	17	180	0	17	180	10	12	330
2.5	0	22	230	0	22	230	10	12	330
2.6	0	30	310	0 \rightarrow 1	30+8	420	10	12	330
2.7	0	42	430	0 \rightarrow 1	30+8	420	10	12	330
2.8	0	62	630	1	8	110	10	12	330
2.9	0	109	1100	1	8	110	10	12	330
3.0	0	327	3280	1	8	110	10	11	320

Tabelle 3: Skalare Funktionsaufrufe bei 3 Verfahren

Man erkennt, daß das PICARD-Verfahren für die ersten λ -Werte sehr schnell konvergiert, dann jedoch zunehmend mehr Iterationen benötigt. Die Rekursive Projektionsmethode verhält sich zunächst wie das PICARD-Verfahren. Bei $\lambda = 2.7$ schaltet sie auf $m = 1$ um und benötigt nur noch wenige Funktionswertberechnungen. Das vereinfachte NEWTON-Verfahren konvergiert über den gesamten λ -Bereich hinweg mit einer konstanten Anzahl von Iterationen. Dafür ist die Anzahl der Funktionswertberechnungen relativ hoch und vergrößert sich mit zunehmender Dimension erheblich.

Das RPM-Verfahren kann verbessert werden, indem der Radius $delta$ für $K_{delta} = \{|z| < delta\}$ verkleinert wird. Welche Auswirkungen eine Veränderung von $delta$ auf die Effizienz der Rekursive Projektionsmethode hat, zeigt Tabelle 4.

Die Dimension m erhöht sich beim Wert $delta = 0.25$ nach $\nu_{max} = 30$ Iterationen auf $m = 1$ und benötigt weitere 8 Iterationen bis zur Konvergenz. Danach bleibt sie bei $m = 1$. Bei $delta = 0.5$

λ	$delta = 0.25$			$delta = 0.5$			$delta = 0.75$		
	m	ν	ϕ	m	ν	ϕ	m	ν	ϕ
2.0	0	9	100	0	9	100	0	9	100
2.5	0	22	230	0	22	230	0	22	230
2.6	0, 1	8	420	0, 1	8	410	0, 1	8	410
2.7	1	8	110	0, 1	8	420	0, 1	8	410
2.8	1	8	110	1	8	110	0, 1	8	410
2.9	1	8	110	1	8	110	0, 2	7	130
3.0	1	8	110	1	8	110	0, 2	7	130

Tabelle 4: Vergleich der skalaren Funktionsaufrufe bei Änderung von $delta$

erhöht sich die Dimension m nach $\nu_{max} = 30$ Iterationen auf $m = 1$; sie verringert sich nach Erreichen der Toleranz tol allerdings wieder auf $m = 0$. Beim nächsten λ -Wert erhöht sich die Dimension wieder und bleibt schließlich bei $m = 1$. Am deutlichsten kann man diesen ständigen Wechsel bei $delta = 0.75$ erkennen. Die Erhöhung auf $m = 2$ erfolgt schon nach wenigen Iterationen, aber auch hier verringert sich die Dimension wieder auf $m = 0$. Dazu sind mehr Funktionsaufrufe nötig als bei kleinerem $delta$ -Wert. Zusammenfassend kann man feststellen, daß in diesem Beispiel das RPM-Verfahren bei kleinerem $delta$ schneller arbeitet.

3.3 Großdimensionale Probleme

Ein wesentliches Maß für den Gesamtaufwand stellt die Summe Φ_{ges} aller skalaren Funktionsaufrufe (3.18) für sämtliche Werte des Fortsetzungsparameters λ dar. Insbesondere Verfahren mit großen Fortsetzungsschrittweiten $\delta\lambda$ und relativ geringen Iterationszahlen ergeben hier die größte Effizienz. In Tabelle 5 werden diese Zahlen für die Beispiele 1-3 und nachfolgendes Beispiel 4 dargestellt.

Bsp. Nr.	λ	n	Funktionsaufrufe Φ_{ges}		
			Picard	Newton	RPM
1	[2, 3]	10	7 570	1 560	990
		100	75 700	105 900	9 900
		200	151 400	411 800	19 800
2	[2, 3]	10	k.Konv.	1 390	940
3	[2, 3]	10	6 890	2 030	1 180
4	[1.7, 2.3]	10	k.Konv.	2 240	620
		100	k.Konv.	148 400	6 200
		200	k.Konv.	576 800	12 400

Tabelle 5: Gesamtzahl Φ_{ges} skalarer Funktionsaufrufe

Die RPM erwies sich in allen Beispielen dem vereinfachten NEWTON-Korrektor überlegen. Dasselbe betraf die PICARD-Iteration, die in den Beispielen 2 und 4 erwartungsgemäß nicht konvergierte (k.Konv.).

Wie bereits die obigen Beispiele zeigen, sind zahlreiche Anwendungen durch einen relativ geringen arithmetischen Aufwand zur Berechnung der Funktionen $F_i(u, \lambda)$ gekennzeichnet. Bei großdimensionalen Systemen dominiert dann der *algebraische Aufwand*, insbesondere zur Lösung der linearen Gleichungssysteme, zur Matrixmultiplikation, zur Orthogonalisierung etc. Unterstellt man $n \gg 1$ und eine geringe, von n unabhängige Dimension m (vgl. vorgestellte Beispiele), so lassen sich mit den arithmetischen Grundoperationen folgende Zeitkomplexitäten für die drei betrachteten Verfahren gewinnen:

$$\text{Picard - Verfahren : } T_{pic}(n) = k_{pic} \cdot n = \mathcal{O}(n)$$

$$\text{Newton - Verfahren : } T_{newt}(n) = k_{newt} \cdot \frac{2}{3}n^3 = \mathcal{O}(n^3)$$

$$\text{RPM : } T_{rpm}(n) = k_{rpm} \cdot n(m+1) + \frac{2}{3}m^3 = \mathcal{O}(n).$$

Dabei bezeichne k_{pic} , k_{newt} , k_{rpm} jeweils die Anzahl der Korrekturiterationen der betreffenden drei Verfahren. Offenbar sind das PICARD-Verfahren und die Rekursive Projektionsmethode linear und das NEWTON-Verfahren kubisch von n abhängig. Dieses theoretische Ergebnis korrespondiert vollständig mit den für die Berechnungen gemessenen Zeiten. Folgendes Beispiel soll dies verdeutlichen:

Beispiel 4

Es wird das Gleichungssystem $u = F(u, \lambda)$ der Dimensionen $n = 100, 200, 300$ mit

$$\begin{aligned} F_i(u, \lambda) &= 1.0 \cdot u_i \cdot (\lambda - u_i), \quad i = 0(1)n - 2, \\ F_{n-1}(u, \lambda) &= 1.3 \cdot u_{n-1} \cdot (\lambda - u_{n-1}) \end{aligned}$$

betrachtet. Weiterhin seien der Anfangsvektor $u_i^0 = 0.8$, $i = 0(1)n - 1$, die Genauigkeit der Berechnungen $tol = 10^{-10}$, die Schranke $\delta = 0.25$ und die maximale Iterationsanzahl $\nu_{max} = 30$ gegeben. Die Rechnungen auf einer SUN-Workstation ergaben für $\lambda \in [1.7, 2.2]$ die Gesamtrechnenzeiten der Tabelle 6 :

Verfahren	Laufzeit			Komplexität
	$n = 100$	$n = 200$	$n = 300$	
PICARD	0.15 sec	0.35 sec	0.5 sec	$\mathcal{O}(n)$
NEWTON	18.0 sec	2 min 02 sec	6 min 59 sec	$\mathcal{O}(n^3)$
RPM	0.13 sec	0.25 sec	0.4 sec	$\mathcal{O}(n)$

Tabelle 6: Zeitvergleich der Verfahren für $\lambda \in [1.7, 2.2]$

Die Berechnungen im "kritischen" Intervall $\lambda \in [1.7, 2.3]$ ergaben die Laufzeiten der Tabelle 7:

Verfahren	Laufzeit			Komplexität
	$n = 100$	$n = 200$	$n = 300$	
PICARD	div.	div.	div.	-
NEWTON	20.5 sec	2 min 20 sec	7 min 59 sec	$\mathcal{O}(n^3)$
RPM	0.15 sec	0.3 sec	0.4 sec	$\mathcal{O}(n)$

Tabelle 7: Zeitvergleich der Verfahren für $\lambda \in [1.7, 2.3]$

Das PICARD-Verfahren divergierte erwartungsgemäß für $\lambda = 2.3$ und wurde nach $\nu = 500$ Iterationen abgebrochen.

Die Rekursive Projektionsmethode läßt sich auch zur numerisch aufwendigen Approximation invarianter Tori (vgl. [2], [3]) mit Vorteil anwenden. Ausgehend von einem dynamischen System in \mathbb{R}^n , beschrieben durch (1.1), erhält man nach Transformation in (θ, u) -Koordinaten ein (quasilineares) System partieller Differentialgleichungen. Nach Diskretisierung, z.B. durch geeignete Upwind-Verfahren, läßt sich das Problem als parameterabhängige Fixpunktaufgabe $u = F(u, \lambda)$ hoher Dimension notieren. Während asymptotisch stabile Tori (vgl. [9]) mittels PICARD-Iteration gut approximiert werden können, muß bei Annäherung eines einzigen charakteristischen Multiplikators an den Einheitskreis (Stabilitätsverlust des Torus) in der Regel auf das extrem aufwendige NEWTON-Verfahren umgeschaltet werden. Hier bietet sich die RPM-Iteration an. Zur Verdeutlichung des Problems werde folgendes einfache Beispiel betrachtet.

Beispiel 5

Betrachtet wird das gekoppelte System mit festem $s > 0$ und $\omega > 0$

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\lambda \cdot (sx - \omega y - x \cdot (x^2 + y^2)) \\ \dot{y} &= -\lambda \cdot (\omega x + sy - y \cdot (x^2 + y^2)) \end{aligned}$$

Für $\lambda < 0$ ist die periodische Lösung mit $x^2 + y^2 = s$ asymptotisch stabil; dagegen läuft für $\lambda > 0$ das System in negativer Zeitrichtung und ist somit instabil. Bei $\lambda = 0$ findet der Richtungswechsel statt. Nach Transformation in (θ, u) -Polarkoordinaten kann das "Torus-System" (hier nur eindimensional) aufgestellt werden:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda \cdot \omega \frac{\partial u}{\partial \theta} = \lambda \cdot u \cdot (u^2 - s).$$

Durch Diskretisierung dieser Gleichung mit dem CIR-Upwind-Verfahren auf einem Gitter mit $N \times J$ Gitterpunkten (t_i, θ_j) , $i = 0(1)N-1$, $j = 0(1)J-1$, (vgl. [2]) erhält man folgendes Gleichungssystem in Fixpunktform für die Näherungswerte $u_j^i \approx u(t_i, \theta_j)$

$$\begin{aligned} u_j^{i+1} &= u_j^i + |\lambda \cdot \omega| \cdot \frac{\tau}{2 \cdot h} \cdot (u_{j+1}^i - 2.0 \cdot u_j^i + u_{j-1}^i) - \\ &\quad - (\lambda \cdot \omega) \cdot \frac{\tau}{2h} \cdot (u_{j+1}^i - u_j^i) + \tau \cdot \lambda \cdot u_j^i \cdot ((u_j^i)^2 - s), \\ &\quad i = 0(1)N - 1, j = 0(1)J - 1. \end{aligned}$$

Die Diskretisierungsschrittweiten sind darin $\tau = \frac{2\pi}{N}$, $h = \frac{2\pi}{J}$. Mit den Parameterwerten $s = 0.04$, $\omega = 1.23456$ und den Anfangswerten $u_i = 0.15$, $i = 0(1)n - 1$ ergab sich im Parameterintervall $\lambda \in [-1.0, 1.0]$ folgende Gesamtzahl Φ_{ges} skalarer Funktionsaufrufe der RPM

Bsp.	λ	$J \times N$	Φ_{ges}
5	[-1, 1]	20 x 60	176 400
		30 x 90	396 900
		40 x 120	705 600

Tabelle 8: Gesamtzahl Φ_{ges} skalarer Funktionsaufrufe

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß die Rekursive Projektionsmethode ein numerisches Stabilisierungsverfahren ist, das den Konvergenzbereich der Fixpunktiteration der Form (1.3) vergrößern kann. Der angegebene numerische Algorithmus ist dann besonders effizient, wenn die Dimension m des „instabilen“ Unterraumes im Vergleich zur Dimension n des Gleichungssystems sehr klein ist. Dies ist aber bei der Verfolgung stabiler periodischer Lösungen dynamischer Systeme über Bifurkationspunkte hinweg in vielen Anwendungen der Fall.

Einschränkend sei bemerkt, daß das numerische RPM–Verfahren relativ viel Heuristik enthält, insbesondere bei der adaptiven Bestimmung der Dimension m des „instabilen“ Unterraumes, der Aufdatierung der Projektoren P und Q und der geeigneten Steuerung der Fortsetzungsschrittweite $\delta\lambda$. Hierzu sind weitere Untersuchungen erforderlich.

Die Beispielrechnungen zeigten allerdings, daß bei Vorliegen stabiler Lösungen das nichtlineare Gleichungssystem mit Hilfe der PICARD–Iteration sehr schnell und effektiv gelöst werden kann. Wird die Lösung dagegen „instabil“, (d.h. Eigenwerte der Jacobimatrix werden betragsmäßig größer als 0.5), so sollte auf die Rekursive Projektionsmethode umgeschaltet werden, da sie für großdimensionale Gleichungssysteme bedeutend schneller arbeitet als das NEWTON–Verfahren.

Literatur

- [1] ALLGOWER, E.L.; GEORG, K. : Numerical Continuation Methods. Springer-Verlag Berlin 1990.
- [2] BERNET, K.; VOGT, W.: Anwendung finiter Differenzenverfahren zur direkten Bestimmung invarianter Tori. ZAMM 74 (1994), No.6 ,T 577 – T 579.
- [3] BERNET, K.; VOGT, W.: A Shooting Method for Invariant Tori. Preprint No. M 3/95, Technical University of Ilmenau, 1995.
- [4] BEYER, A.: Effiziente numerische Lösung parameterabhängiger Fixpunktprobleme mit der Rekursiven Projektions–Methode und deren Anwendung bei nichtlinearen dynamischen Systemen. Diplomarbeit, TU Ilmenau 1997.
- [5] L. DIECI, J. LORENZ, AND R. D. RUSSELL: Numerical Calculation of Invariant Tori. SIAM J. Sci. Statist. Comput., 12 (1991), pp. 607–647.
- [6] JARAUSCH, H.; MACKENS, W.: Numerical Treatment of Bifurcation Branches by Adaptive Condensation. Küpper, T.; Mittelman, H.D.; Weber, H.; eds.: Numerical Methods for Bifurcation–Problems. Birkhäuser Basel 1984.
- [7] JARAUSCH, H.; MACKENS, W.: Solving large nonlinear systems of equations by an adaptive condensation process. Numerische Mathematik, Vol. 50 No. 6 pp. 633–653 (1987).
- [8] ORTEGA, J.M.; RHEINBOLDT, W.C.: Iterative solution of nonlinear equations in several variables. Academic Press New York 1970.
- [9] SAMOILENKO, A.M.: Elements of the Mathematical Theory of Multi-Frequency Oscillations. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht u.a., 1991.
- [10] SCHWETLICK, H.: Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen. Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1979.
- [11] SHROFF, G.M.; KELLER, H.B.: Stabilisation of unstable procedures: The Recursive Projection Method. SIAM J. Numer. Anal. Vol. 30 No. 4 pp. 1099–1120 (1993).
- [12] TIMMERMANN, G.: Lösung von nichtlinearen, fast positiv definiten Randwertaufgaben mittels rekursiver Projektionsmethode. Diplomarbeit, TU Dresden 1995.