Differentiell-algebraische Gleichungen vom Index 1

Beispiel: Das ungedämpfte mathematische Pendel (der Länge 1 und der Masse 1) wird unter Verwendung des Auslenkwinkels φ bekanntlich beschrieben durch die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\varphi'' = -g \sin \varphi.$$

Verwendet man Euklidische Koordinaten (y_1, y_2) der Endmasse, so liefert das Newtonsche Gesetz die Bewegungsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} y_1'' &= -zy_1 \\ y_2'' &= -zy_2 - g \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

mit einem Lagrangeschen Parameter $z(t)$. Zusätzlich muss die Nebenbedingung

$$y_1^2 + y_2^2 = 1 \tag{2}$$

erfüllt sein. $\square$

Bei der Simulation des dynamischen Verhaltens von Mehrkörpersystemen oder elektrischen Schaltkreisen treten häufig Systeme auf, die aus Differentialgleichungen und aus algebraischen Gleichungen bestehen. In diesem Fall spricht man von differentiell-algebraischen Systemen oder kurz DAE.

Man hat dann das Differentialgleichungssystem auf der Mannigfaltigkeit zu lösen, die durch die algebraischen Gleichungen gegeben it. Klar ist, dass dies nur möglich ist, wenn der Anfangspunkt auf der Mannigfaltigkeit liegt. Einen solchen Anfangsvektor nennt man konsistent.

Die Theorie der differentiell-algebraischen Gleichungen ist wesentlich schwieriger als die der gewöhnlichen Differentialgleichungen und ist Gegenstand aktiver Forschung. Einen Eindruck von der Theorie erhält man in den Büchern von *Ascher, Petzold* oder *Hairer, Wanner*, eine ausführliche Darstellung in *Griepentrog, März* oder *Hairer, Lubich, Roche*.

Die allgemeinste Form eines (autonomen) DAE Systems ist

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0}. \tag{3}$$

Dass wir ein von der unabhängigen Variable unabhängiges System betrachten, bedeutet wieder keine Einschränkung, denn wir können auch hier den allgemeinen Fall durch eine zusätzliche Gleichung $x' = 1$ auf den autonomen Fall zurückführen.

Ist

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{u}'} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}')$$

eine reguläre Matrix, so kann man nach dem Satz über implizite Funktionen die Gleichung $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0}$ nach $\boldsymbol{u}'$ auflösen, d.h. es gibt eine Funktion $\boldsymbol{f}$ mit

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0} \quad \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{u}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}),$$

und das DAE System ist tatsächlich ein gewöhnliches Differentialgleichungssytem in impliziter Form.

Ist

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{u}'}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}')$$

singulär, so ist die Auflösung nach $\boldsymbol{u}'$ nicht (notwendig) möglich. Häufig kann man aber durch weiteres Differenzieren des DAE Systems nach der unabhängigen Variable ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem für $\boldsymbol{u}$ aufstellen.

Definition

Das differentiell-algebraische System

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}',\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0}$$

besitzt den Index m, wenn $m \in \mathbb{N}$ die minimale Zahl von Differentiationen ist, so dass das System

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0},\ \frac{d}{dx}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0},\ldots,\frac{d^m}{dx^m}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}') = \boldsymbol{0}$$

aufgelöst werden kann in ein Differentialgleichungssystem

$$\boldsymbol{u}' = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{u}).$$

Beispiel

Ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})$$

hat als DAE den Index 0.

Beispiel

Für das semi-explizite System differentiell-algebraischer Gleichungen

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$$

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$$

setzen wir voraus, dass

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{z}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$$

regulär ist. Wir differenzieren die zweite Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \boldsymbol{y}' + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{z}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \boldsymbol{z}' = \boldsymbol{0},$$

und erhalten als Differentialgleichung für $\boldsymbol{z}$

$$\boldsymbol{z}' = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{z}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})^{-1} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}).$$

Das semi-explizite System hat also den Index 1.

Beispiel

Wir betrachten das semi-explizite System

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$$

$$\mathbf{0} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})$$

Die erste Differentiation liefert

$$\mathbf{0} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}) \boldsymbol{y}' = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}) \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}).$$

Die Lösung liegt also nicht nur auf der Mannigfaltigkeit, die durch $\mathbf{0} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})$ definiert ist, sondern (versteckt) auch auf der durch

$$\mathbf{0} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}) \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$$

definierten.

Erneutes Differenzieren liefert

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}^2}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}) + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}}\boldsymbol{f} + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{z}}\boldsymbol{z}' = \boldsymbol{0}.$$

Ist die Matrix $\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{z}}$ regulär, so erhält man hieraus

$$\boldsymbol{z}' = -\Big(\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{z}}\Big)^{-1}\Big(\frac{\partial^2 \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}^2}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}) + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{y}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{y}}\boldsymbol{f}\Big),$$

und das System besitzt den Index 2.

Beispiel

Das Pendelproblem in kartesischen Koordinaten besitz den Index 3, denn als System 1. Ordnung hat es die Gestalt

$$\left.\begin{array}{rcl} y_1' & = & y_2 \\ y_2' & = & -y_5 y_1 \\ y_3' & = & y_4; \\ y_4' & = & -y_5 y_3 - g \\ 0 & = & y_1^2 + y_3^2 - 1; \end{array}\right\} \tag{4}$$

Differenzieren der letzten Gleichung liefert

$$0 = 2y_1 y_1' + 2y_3 y_3',$$

d.h. unter Benutzung der 1. und 3. Gleichung des Systems (4)

$$0 = y_1 y_2 + y_3 y_4. \tag{5}$$

Durch erneutes Differenzieren erhält man

$$0 = y_1' y_2 + y_1 y_2' + y_3' y_4 + y_3 y_4' = y_2^2 - y_5 y_1^2 + y_4^2 - y_5 y_3^2 - g y_3,$$

und hieraus folgt mit der dritten Differentiation

$$0 = 2 y_2 y_2' - y_5' y_1^2 - 2 y_5 y_1 y_1' + 2 y_4 y_4' - y_5' y_3^2 - 2 y_5 y_3 y_3' - g y_3',$$

d.h. unter Benutzung von (4) und (5)

$$0 = -y_5'(y_1^2 + y_3^2) - 4 y_5 y_1 y_2 - 4 y_5 y_3 y_4 - 3 g y_4 = -y_5' - 3 g y_4.$$

Eine Einbettungsmethode

Wir betrachten der Einfachheit halber ein semi-explizites System von differentiell-algebraischen Gleichungen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}' &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) && (6) \\ \boldsymbol{0} &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}). && (7) \end{aligned}$$

Wir setzen voraus, dass die Jacobi Matrix

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{z}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \tag{8}$$

in einer Umgebung der Lösung von (6), (7) regulär sei, so dass das System den Index 1 besitzt.

Dann kann man nach dem Satz über implizite Funktionen Gleichung (7) lokal nach $\boldsymbol{z}$ auflösen, $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y})$, und die DAE (6), (7) geht über in die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y})). \tag{9}$$

(9) heißt die zu (6), (7) gehörige Zustandsraumgleichung.

Wenn die Funktion $\boldsymbol{G}$ bekannt ist, liegt es natürlich nahe, die Differentialgleichung (9) numerisch mit einem der diskutierten Verfahren zu behandeln.

I.a. ist aber nur die Existenz der Funktion $\boldsymbol{G}$ durch den Satz über implizite Funktionen gesichert, die explizite Auflösung von (7) aber nicht möglich.

Man benötigt daher Verfahren zur Lösung von DAEs.

Eine Möglichkeit ist, anstatt (6), (7) die singuläre Störung

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}' &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) & (10) \\ \varepsilon \boldsymbol{z}' &= \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}). & (11) \end{aligned}$$

für $\varepsilon > 0$ mit einem der bekannten Verfahren zu behandeln und in dem resultierenden Verfahren $\varepsilon = 0$ zu setzen.

Wir demonstrieren das Vorgehen für das (implizite) Runge–Kutta Verfahren.

Wendet man dieses auf (10), (11) an, so erhält man im n-ten Schritt bei bekannten Näherungen $\boldsymbol{y}^n \approx \boldsymbol{y}(x_n)$ und $\boldsymbol{z}^n \approx \boldsymbol{z}(x_n)$

$$\boldsymbol{Y}_i = \boldsymbol{y}^n + h \sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{Z}_j) \tag{12}$$

$$\varepsilon \boldsymbol{Z}_i = \varepsilon \boldsymbol{z}^n + h \sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{Z}_j) \tag{13}$$

$$\boldsymbol{y}^{n+1} = \boldsymbol{y}^n + h \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_i, \boldsymbol{Z}_i) \tag{14}$$

$$\varepsilon \boldsymbol{z}^{n+1} = \varepsilon \boldsymbol{z}^n + h \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_i, \boldsymbol{Z}_i). \tag{15}$$

Dies ist eine alternative Darstellung des impliziten Runge-Kutta Verfahrens, das für die autonome gewöhnliche Differentialgleichung lautet:

$$k_i = f(y_n + h\sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}k_j), \; i = 1, \ldots, s,$$

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s}\gamma_i k_i$$

Mit

$$Y_i = y_n + h\sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}k_j$$

ist dies äquivalent

$$Y_i = y_n + h\sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}f(Y_j), \; i = 1, \ldots, s,$$

$$y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{s}\gamma_i f(Y_i).$$

Ist die Matrix $\boldsymbol{B} := (\beta_{ij})$ der Gewichte im Runge-Kutta Verfahren regulär, so erhält man aus (13)

$$\varepsilon \boldsymbol{Z}_i = \varepsilon \boldsymbol{z}^n + h \sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{Z}_j)$$

$$h\boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_i, \boldsymbol{Z}_i) = \varepsilon \sum_{j=1}^{s} \omega_{ij} (\boldsymbol{Z}_j - \boldsymbol{z}^n), \tag{16}$$

wobei $\boldsymbol{B}^{-1} =: (\omega_{ij})$ bezeichnet.

Setzt man diesen Ausdruck in $\varepsilon \boldsymbol{z}^{n+1} = \varepsilon \boldsymbol{z}^n + h \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_i, \boldsymbol{Z}_i)$ ein, so kann man diese Gleichung durch ε kürzen.

Setzt man schließlich noch $\varepsilon = 0$ in (13), so erhält man das Verfahren

$$\boldsymbol{Y}_i = \boldsymbol{y}^n + h\sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{Z}_j) \tag{17}$$

$$\mathbf{0} = \sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{Z}_j) \tag{18}$$

$$\boldsymbol{y}^{n+1} = \boldsymbol{y}^n + h\sum_{i=1}^{s}\gamma_i\boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_i, \boldsymbol{Z}_i) \tag{19}$$

$$\boldsymbol{z}^{n+1} = \Big(1 - \sum_{i,j=1}^{s}\gamma_i\omega_{ij}\Big)\boldsymbol{z}^n + \sum_{i,j=1}^{s}\gamma_i\omega_{ij}\boldsymbol{Z}_j. \tag{20}$$

Die numerische Lösung $(\boldsymbol{y}^{n+1}, \boldsymbol{z}^{n+1})$ wird i.a. nicht auf der Mannigfaltigkeit liegen, die durch $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = \mathbf{0}$ definiert ist.

Dies kann man jedoch erreichen, wenn man in dem System (17), (18), (19), (20) die Gleichung (20) ersetzt durch

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}^{n+1}, \boldsymbol{z}^{n+1}) = \mathbf{0}. \tag{21}$$

In diesem Fall gilt wegen (18) $\boldsymbol{Z}_j = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{Y}_j)$ und wegen (21) auch $\boldsymbol{z}^{n+1} = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}^{n+1})$. Das Verfahren (17), (18), (19), (21) ist daher äquivalent dem zu Grunde liegenden Runge-Kutta Verfahren für die Zustandsraumgleichung (9). Es heißt daher Zustandsraumverfahren.

Vorteil der Zustandsraummethode ist es, dass keine Konvergenztheorie nötig ist. Die Ergebnisse für gewöhnliche Anfangswertaufgaben übertragen sich sofort auf DAEs. Man kann ferner das Verfahren sofort mit einem expliziten Runge-Kutta Verfahren als Basis verwenden. Andererseit geben theoretische Ergebnisse über die Einbettungsmethode Einsichten über singulär gestörte Probleme.

Probleme mit Massenmatrizen

Viele differentiell-algebraische Probleme haben die Gestalt

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}' = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}) \tag{22}$$

mit einer konstanten Matrix $\boldsymbol{M}$.

Das semi-explizite Problem (6), (7) ist ein Spezialfall hiervon mit

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix}.$$

Ist $\boldsymbol{M}$ regulär, so können wir jedes Verfahren der vorhergehenden Abschnitte auf das System

$$\boldsymbol{u}' = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})$$

anwenden und die entstehenden Formeln mit $\boldsymbol{M}$ multiplizieren, um zu einem Verfahren für die DAE (22) zu gelangen. Für ein implizites Runge-Kutta Verfahren erhält man auf diese Weise

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{U}_i - \boldsymbol{u}^n) = h\sum_{j=1}^{s}\beta_{ij}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_j) \tag{23}$$

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{u}^{n+1} - \boldsymbol{u}^n) = h\sum_{i=1}^{s}\gamma_i\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_i). \tag{24}$$

Aus (23) erhält man wie im letzten Abschnitt mit der Matrix $\boldsymbol{B}^{-1} = (\omega_{ij})$

$$h\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_i) = \sum_{j=1}^{s} \omega_{ij} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{U}^j - \boldsymbol{u}^n),$$

und das Runge-Kutta Verfahren erhält die Gestalt

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{U}_i - \boldsymbol{u}^n) = h \sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_j) \tag{25}$$

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = \Big(1 - \sum_{i,j=1}^{s} \gamma_i \omega_{ij}\Big) \boldsymbol{u}^n + \sum_{i,j=1}^{s} \gamma_i \omega_{ij} \boldsymbol{U}_j. \tag{26}$$

Dieses Verfahren ergibt auch einen Sinn, wenn die Matrix $\boldsymbol{M}$ singulär ist. In diesem Fall ist das System (22) äquivalent einem semi-expliziten System (6), (7), und das Verfahren (25), (26) enspricht der Einbettungsmethode (17) – (20).

Dies sieht man so ein: Mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren mit totaler Pivotsuche kann man reguäre Matrizen $\boldsymbol{S}$ und $\boldsymbol{T}$ bestimmen mit

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} \boldsymbol{T}, \tag{27}$$

wobei r den Rang von $\boldsymbol{M}$ bezeichnet.

Setzt man $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} \boldsymbol{T}$ in $\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}' = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})$ ein, multipliziert man mit $\boldsymbol{S}^{-1}$ und verwendet man die transformierten Variablen

$$\boldsymbol{T}\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix},$$

so erhält man

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{y}' \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{T}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix}\right) =: \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \\ \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \end{pmatrix}, \qquad (28)$$

ein semi-explizites Problem (6), (7). Ein Anfangswert $\boldsymbol{u}^0$ ist konsistent, wenn $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}^0)$ im Wertebereich der Matrix $\boldsymbol{M}$ liegt.

Setzt man (27) in (25), (26) ein und verwendet man die transformierten Variablen

$$\boldsymbol{T}\boldsymbol{U}_j =: \begin{pmatrix} \boldsymbol{Y}_j \\ \boldsymbol{Z}_j \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{T}\boldsymbol{u}^n =: \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}^n \\ \boldsymbol{z}^n \end{pmatrix},$$

so geht das Verfahren (25), (26) über in die Formeln (17) – (20). Damit gelten alle Resultate für das semi-explizite Problem (6), (7) und die Einbettungsmethode auch für Probelme des Typs (22).

Mehrschrittverfahren

Auch Mehrschrittverfahren lassen sich leicht auf semi-explizite DAEs übertragen. Wendet man ein Mehrschrittverfahren auf die Einbettung (10), (11) einer semi-expliziten DAE an, so liefert dies

$$\sum_{i=0}^{k} a_i \boldsymbol{y}^{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} b_i \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}^{n+i}, \boldsymbol{z}^{n+i}) \tag{29}$$

$$\varepsilon \sum_{i=0}^{k} a_i \boldsymbol{z}^{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} b_i \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}^{n+i}, \boldsymbol{z}^{n+i}). \tag{30}$$

Setzt man hier wieder $\varepsilon = 0$, so erhält man das eingebettete Verfahren

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{k} a_i \boldsymbol{y}^{n+i} &= h \sum_{i=0}^{k} b_i \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}^{n+i}, \boldsymbol{z}^{n+i}) && (31) \\ 0 &= h \sum_{i=0}^{k} b_i \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}^{n+i}, \boldsymbol{z}^{n+i}). && (32) \end{aligned}$$

Dieser Zugang wurde erstmals von Gear für BDF Methoden für differentiell-algebraische Systeme vorgeschlagen und in einem ersten (sehr erfolgreichen) Code für DAEs umgesetzt.

Wie vorher kann man $0 = h\sum_{i=0}^{k} b_i\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}^{n+i}, \boldsymbol{z}^{n+i})$ ersetzen durch

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}^{n+k}, \boldsymbol{z}^{n+k}) = \mathbf{0}$$

und erhält die zugehörige Zustandsraummethode.

Ferner kann man das Verfahren sofort auf das Problem (22) übertragen und erhält

$$\boldsymbol{M}\sum_{i=0}^{k} a_i\boldsymbol{u}^{n+i} = h\sum_{i=0}^{k} b_i\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}^{n+i}). \tag{33}$$

Für Mehrschrittverfahren gilt das folgende Konvergenzresultat:

Satz 5.2

Das semi-explizite Problem (6), (7) erfülle die Voraussetzung (8) ($\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{z}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})$ regulär in einer Umgebung der Lösung).

Das Mehrschrittverfahren ($\sum_{i=0}^{k} a_i y_{n+i} = h\sum_{i=0}^{k} b_i f_{n+i}$), das (31), (32) zu Grunde liegt, besitze die Ordnung p, und es mögen die Punkte 0 und ∞ im Stabilitätsgebiet liegen. Ferner habe der Fehler des Anfangsfeldes $\boldsymbol{y}^j$, $\boldsymbol{z}^j$, $j = 0,\ldots,k-1$, die Größe $O(h^p)$. Dann erfüllt der globale Fehler

$$\boldsymbol{y}^n - \boldsymbol{y}(x_n) = O(h^p),\ \boldsymbol{z}^n - \boldsymbol{z}(x_n) = O(h^p),$$

für $x_n - x_0 = nh \leq$ const.

Beweis: s. *Hairer und Wanner*, p. 383

Beispiel:
Wir betrachten erneut das Beispiel von Robertson:

$$\begin{aligned} y_1' &= -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3, & y_1(0) &= 1 \\ y_2' &= 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2, & y_2(0) &= 0 \\ y_3' &= 3 \cdot 10^7 y_2^2, & y_3(0) &= 0. \end{aligned}$$

Summiert man die drei Gleichungen, so folgt

$$y_1' + y_2' + y_3' = 0, \text{ d.h. } y_1 + y_2 + y_3 = \text{const},$$

und aus den Anfangsbedingungen folgt $y_1 + y_2 + y_3 = 1$.

Damit ist die Anfangswertaufgabe äquivalent dem differentiell-algebraischen Problem

$$\begin{array}{rcl} y_1' & = & -0.04y_1 + 10^4 y_2 z_1 \\ y_2' & = & 0.01y_1 + 10^4 y_2 z_1 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \ , \\ 0 & = & y_1 + y_2 + z_1 - 1 \end{array} \qquad \boldsymbol{y}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{34}$$

Natürlich kann man hier die letzte Gleichung nach z_1 auflösen und erhält die Zustandsraumgleichung

$$\begin{array}{rcl} y_1' & = & -0.04y_1 + 10^4 y_2(1 - y_1 - y_2) \\ y_2' & = & 0.04y_1 + 10^4 y_2(1 - y_1 - y_2) - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{array}, \qquad \boldsymbol{y}(0) = \binom{1}{0}. \tag{35}$$

Mit `ode15s` der ODE-Suite von MATLAB erhält man in allen drei Fällen die bereits bekannte Lösung. Dabei werden (mit `AbsTol=`10^{-12}) für das Originalproblem 83345 flops, für (34) 89355 und für die Zustandsraumgleichung (35) 59250 flops benötigt. $\square$