Seminar
Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen
Wintersemester 2010/2011

Peter Bastian
Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Im Neuenheimer Feld 368, D-69120 Heidelberg
mail: Peter.Bastian@iwr.uni-heidelberg.de

18. Oktober 2010

Anforderungen

- Ausarbeiten und Halten eines Vortrages
- Besprechen des Vorrages *spätestens* eine Woche vor Vortragstermin
- Erstellen einer Ausarbeitung von ca. 10 Seiten
- Anwesenheit bei den Terminen (einmal unentschuldigtes Fehlen)

Zeit und Ort

Vorzugsweise Dienstags, 14-16 Uhr, Ort wird noch bekannt gegeben

Themen

Verfahren für steife Anfangswertaufgaben

A-1 Stabilitätsbegriff für Einschrittverfahren [19]

A-2 Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren [3]

A-3 Rosenbrock Verfahren [22, 15]

A-4 Extrapolationsverfahren: Verfahrenskonstruktion und Konvergenz[9, 13]

A-5 Extrapolationsverfahren: Schrittweiten- und Ordnungskontrolle [8]

A-6 Galerkinverfahren: Verfahrenskonstruktion und Konvergenz [10, 20]

A-7 Galerkinverfahren: A-posteriori Fehlerschätzung [10, 20]

A-8 Explizite Verfahren für steife Probleme (Chebyshev-Methoden) [2, 1]

Verfahren für differentiell-algebraische Systeme

B-1 Einführung in DAEs; Index; Mehrschrittverfahren [12, 7, 14]

B-2 Einschrittverfahren für DAEs [4, 21]

Strukturerhaltende Verfahren

C-1 Hamiltonsysteme und Symplektizität [14, 24, 25, 16, 23]

C-2 Hermite-Verfahren; Höhere Ordnung [18, 11]

C-3 Splitting-Methoden [17, 14]

C-4 Parallele Lösung großer ODE-Systeme in der Moleküldynamik [5, 6]

Literatur

[1] A. Abdulle. Fourth order Chebyshev methods with recurrence relation. *SIAM J. Sci.Comput.*, 23(6):2041–2054, 2002.

[2] A. Abdulle and A. A. Medovikov. Second order Chebyshev methods based on orthogonal polynomials. *Numer. Math.*, 90:1–18, 2001.

[3] R. Alexander. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff O. D. E.'s. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(6):1006–1021, 1977.

[4] U. M. Ascher and L. R. Petzold. Projected implicit Runge-Kutta methods for differential-algebraic equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1991.

[5] Martin Bernreuther, Martin Buchholz, and Hans-Joachim Bungartz. Aspects of a parallel molecular dynamics software for nano-fluidics. In G.R. Joubert, C. Bischof, F. Peters, T. Lippert, M. Bücker, P. Gibbon, and B. Mohr, editors, *Parallel Computing: Architectures, Algorithms and Applications*, volume 38 of *NIC Series*, pages 53–60, Jülich, September 2007. International Conference ParCo 2007, NIC.

[6] Martin Bernreuther and Jadran Vrabec. Molecular simulation of fluids with short range potentials. In Michael Resch, Thomas Bönisch, Katharina Benkert, Wolfgang Bez, Toshiyuki Furui, and Yoshiki Seo, editors, *High Performance Computing on Vector Systems*, pages 187–195. Springer Berlin Heidelberg, 2006. `http://dx.doi.org/10.1007/3-540-35074-8_13`.

[7] K. E. Brenan, S. L. Campbell, and L. R. Petzold. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. SIAM Classics, 1996.

[8] P. Deuflhard. Order and stepsize control in extrapolation methods. *Numerische Mathematik*, 41:399–422, 1983.

[9] P. Deuflhard. Recent progress in extrapolation methods for ordinary differential equations. *SIAM Review*, 27(4):505–535, 1985.

[10] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson. *Computational Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.

[11] E. Forest and R. D. Ruth. Fourth-order symplectic integration. *Physica D*, 1990.

[12] C. W. Gear and L. R. Petzold. ODE methods for the solution of differential/algebraic systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(4):716–728, 1984.

[13] E. Hairer and C. Lubich. Extrapolation at stiff differential equations. *Numerische Mathematik*, 52:377–400, 1988.

[14] R. Hiptmair. Numerische Mathematik (Numerik der ODEs). `http://www.sam.math.ethz.ch/~hiptmair/tmp/NUMODE09.pdf`.

[15] P. Kaps and G. Wanner. A study of Rosenbrock-type methods of high order. *Numerische Mathematik*, 38:279–298, 1981.

[16] D. W. Markiewicz. Survey on symplectic integrators. `http://math.berkeley.edu/~alanw/242papers99/markiewicz.pdf`.

[17] R. I. McLachlan and G. Reinout W. Quispel. Splitting methods. *Acta Numerica*, pages 341–434, 2002.

[18] K. Nitadori and J. Makino. 6th and 8th order Hermite integrator for N-body simulations. `http://arxiv.org/abs/0708.0738`.

[19] A. Prothero and A. Robinson. On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations. *Mathematics of Computation*, 28(125):145–162, 1974.

[20] R. Rannacher. Numerische Mathematik I (Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen). `http://numerik.iwr.uni-heidelberg.de/~lehre/notes/num1/numerik1.pdf`.

[21] M. Roche. Rosenbrock methods for differential algebraic equations. *Numerische Mathematik*, 52:45–63, 1988.

[22] H. H. Rosenbrock. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Computer Journal*, 5:329–330, 1963.

[23] G. J. Sussman and J. Wisdom. Chaotic evolution of the solar system. *Science*, 257:56–62, 1992.

[24] L. Verlet. Computer "experiments" on classical fluids. I. thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical Review*, 1967.

[25] P. Young. The leapfrog method and other "symplectic" algorithms for integrating Newtons's laws of motion. `http://physics.ucsc.edu/~peter/242/leapfrog.pdf`.