

# Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

Oliver Ernst

Professur Numerische Mathematik

Wintersemester 2014/15



TECHNISCHE UNIVERSITÄT  
CHEMNITZ

- ① Einleitung
  - 1.1 Volterras Prinzip
  - 1.2 Begriffe und theoretische Resultate
  - 1.3 Lineare Differenzgleichungen
  - 1.4 Matrixfunktionen
  - 1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung
  - 1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren
  - 1.7 Weitere Beispiele
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
  - 2.1 Das Euler-Verfahren
  - 2.2 Eine Sammlung von Beispielverfahren
  - 2.3 Konvergenz, Konsistenz und Stabilität
  - 2.4 Der Hauptsatz
  - 2.5 Einschrittverfahren
  - 2.6 Numerische Experimente
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
  - 3.1 Begriffe
  - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere

- 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
- 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
- 3.5 Absolute Stabilität
- 3.6 BDF-Verfahren
  
- ④ Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
  
- ⑤ Steife Differentialgleichungen
  - 5.1 Was sind steife Differentialgleichungen?
  - 5.2 Stabilitätsbegriffe
  - 5.3 Ordnungssterne
  - 5.4 Lineare MSV für steife Probleme
  - 5.5 RKV für steife Probleme

## 5.6 Nichtlineare Stabilitätstheorie

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
- 5 Steife Differentialgleichungen

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen

Ausgangspunkt wie immer (Substitution:  $s = t + \tau h$ ,  $0 \leq \tau \leq 1$ )

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t+h) &= \mathbf{y}(t) + [\mathbf{y}(t+h) - \mathbf{y}(t)] = \mathbf{y}(t) + \int_t^{t+h} \mathbf{y}'(s) ds \\ &= \mathbf{y}(t) + h \int_0^1 \mathbf{y}'(t + \tau h) d\tau. \end{aligned}$$

Approximiere durch Quadraturformel

$$\int_0^1 g(\tau) d\tau \approx \sum_{j=1}^m \beta_j g(\gamma_j). \quad (*)$$

Damit zumindest  $g \equiv 1$  exakt integriert wird, fordern wir  $\sum_{j=1}^m \beta_j = 1$ .

Daraus folgt

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t+h) &\approx \mathbf{y}(t) + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{y}'(t + \gamma_j h) \\ &= \mathbf{y}(t) + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{f}(t + \gamma_j h, \mathbf{y}(t + \gamma_j h)).\end{aligned}\tag{RK-1}$$

Problem:  $\mathbf{y}(t + \gamma_j h) = \mathbf{y}(t) + h \int_0^{\gamma_j} \mathbf{y}'(t + \tau h) d\tau$  sind unbekannt. Näherungen wieder durch Quadraturformeln, aber mit den alten Knoten  $\gamma_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ) aus (\*) (sonst würden sich neue „Unbekannte“  $\mathbf{y}(t + \text{Knoten} \cdot h)$  ergeben).

$$\int_0^{\gamma_j} g(\tau) d\tau \approx \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} g(\gamma_\ell) \quad (j = 1, \dots, m).\tag{**}$$

Damit zumindest  $g \equiv 1$  exakt integriert wird, fordern wir

$$\sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} = \gamma_j \quad (j = 1, \dots, m).$$



Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\mathbf{y}(t + \gamma_j h) &\approx \mathbf{y}(t) + h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \mathbf{y}'(t + \gamma_\ell h) \\ &= \mathbf{y}(t) + h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \mathbf{f}(t + \gamma_\ell h, \mathbf{y}(t + \gamma_\ell h)).\end{aligned}\tag{RK-2}$$

Abkürzung:  $\tilde{\mathbf{k}}_j := \mathbf{f}(t + \gamma_j h, \mathbf{y}(t + \gamma_j h))$  ( $j = 1, \dots, m$ ).

(RK-2):  $\tilde{\mathbf{k}}_j \approx \mathbf{f}\left(t + \gamma_j h, \mathbf{y}(t) + h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \tilde{\mathbf{k}}_\ell\right)$  ( $j = 1, \dots, m$ ).

(RK-1):  $\mathbf{y}(t + h) \approx \mathbf{y}(t) + h \sum_{j=1}^m \beta_j \tilde{\mathbf{k}}_j$ .

## $m$ -stufiges Runge-Kutta-Verfahren (RKV)

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{k}_j \quad \text{mit} \\ \mathbf{k}_j &= \mathbf{f}\left(t_n + \gamma_j h, \mathbf{y}_n + h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \mathbf{k}_\ell\right) \quad (j = 1, \dots, m).\end{aligned}\tag{RKV}$$

# Runge-Kutta-Verfahren

## Konstruktion

### Butcher-Tableau

(John Charles Butcher, \*1933)

$\gamma_1$	$\alpha_{1,1}$	$\cdots$	$\alpha_{1,m}$
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
$\gamma_m$	$\alpha_{m,1}$	$\cdots$	$\alpha_{m,m}$
	$\beta_1$	$\cdots$	$\beta_m$

## Beispiele.

0	0	0
1	1	0
	1/2	1/2

symbolisiert ein zweistufiges explizites RKV, nämlich das verbesserte Euler-Verfahren.

(Ein RKV ist **explizit**, wenn  $\alpha_{j,\ell} = 0 \forall j \leq \ell$  gilt.)

symbolisiert ein zweistufiges implizites RKV:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 1/4 & -1/4 \\ 2/3 & 1/4 & 5/12 \\ \hline & 1/4 & 3/4 \end{array}$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h\mathbf{k}_1 - \frac{1}{4}h\mathbf{k}_2 \right),$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f} \left( t_n + \frac{2}{3}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h\mathbf{k}_1 + \frac{5}{12}h\mathbf{k}_2 \right),$$

(„zwei“ i.A. nichtlineare Gleichungen für  $\mathbf{k}_1$  und  $\mathbf{k}_2$ )

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h(\mathbf{k}_1 + 3\mathbf{k}_2).$$

(Das Verfahren (2.2) aus Abschnitt 2 ist ein weiteres implizites zweistufiges RKV.)

# Runge-Kutta-Verfahren

## Konstruktion

0	0	0	0
1/2	1/2	0	0
1	-1	2	0
<hr/>			
	1/6	4/6	1/6

symbolisiert ein dreistufiges explizites RKV.

## Verfahren dritter Ordnung von Kutta

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n),$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(t_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1\right),$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{y}_n - h\mathbf{k}_1 + 2h\mathbf{k}_2),$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}h(\mathbf{k}_1 + 4\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3).$$

# Runge-Kutta-Verfahren

## Konstruktion

0	0	0	0
1/3	1/3	0	0
2/3	0	2/3	0
<hr/>			
	1/4	0	3/4

symbolisiert ein dreistufiges explizites RKV.

## Verfahren dritter Ordnung von Heun

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n),$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}\left(t_n + \frac{1}{3}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{3}h\mathbf{k}_1\right),$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}\left(t_n + \frac{2}{3}h, \mathbf{y}_n + \frac{2}{3}h\mathbf{k}_2\right),$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}h(\mathbf{k}_1 + 3\mathbf{k}_3).$$

(Vgl. (2.1) aus Abschnitt 2.)

# Runge-Kutta-Verfahren

## Konstruktion

0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
<hr/>				
	1/6	2/6	2/6	1/6

symbolisiert ein vierstufiges explizites RKV.

## Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n),$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1),$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(t_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_2),$$

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{y}_n + h\mathbf{k}_3),$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6}h(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4).$$

### Alternative Form von RKV

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{f}(t_n + \gamma_j h, \tilde{\mathbf{y}}_j) \quad (\text{RKV}^*)$$

$$\text{mit } \tilde{\mathbf{y}}_j = \mathbf{y}_n + h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \mathbf{f}(t_n + \gamma_\ell h, \tilde{\mathbf{y}}_\ell) \quad (j = 1, \dots, m).$$

Setze  $\mathbf{k}_j = \mathbf{f}(t_n + \gamma_j h, \tilde{\mathbf{y}}_j)$ .

Die  $\tilde{\mathbf{y}}_j$  können als Approximationen an die Lösung  $\mathbf{y}$  zur Zeit  $t_n + \gamma_j h$  interpretiert werden, die  $\mathbf{k}_j$  als Approximationen an  $\mathbf{y}'(t_n + \gamma_j h)$ .

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen



Jedes RKV hat die Form

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\Phi_f(\mathbf{y}_n, t_n; h) \quad \text{mit} \quad \Phi_f(\mathbf{y}_n, t_n; h) = \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{k}_j.$$

Es ist ein Einschrittverfahren ( $\rho(\zeta) = \zeta - 1$ ), also stabil und (vgl. Abschnitt 3) genau dann konsistent, wenn

$$\Phi_f(\mathbf{y}(t_n), t_n; 0) = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}(t_n))\rho'(1)$$

erfüllt ist, was hier zu  $\sum_{j=1}^m \beta_j = 1$  äquivalent ist.

Ein RKV ist deshalb genau dann konvergent, wenn

$$\sum_{j=1}^m \beta_j = 1$$

gilt.

# Runge-Kutta-Verfahren

## Konsistenzordnung

Um die Konsistenzordnung eines RKVs zu bestimmen (oder um  $m$ -stufige RKV mit möglichst hoher Konsistenzordnung zu konstruieren), sind wie im Fall der Taylor-Verfahren (siehe Abschnitt 5) komplizierte Rechnungen erforderlich. Wir untersuchen als Beispiel explizite dreistufige RKV,

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_2 & \gamma_2 & 0 & 0 \\ \gamma_3 & \gamma_3 - \alpha_{3,2} & \alpha_{3,2} & 0 \\ \hline & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \end{array},$$

und entwickeln

$$\frac{1}{h} \mathbf{R}_{n+1} = \frac{\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}(t_n)}{h} - \Phi_f(\mathbf{y}(t_n), t_n; h) = \frac{\mathbf{y}(t_{n+1}) - \mathbf{y}(t_n)}{h} - \sum_{j=1}^3 \beta_j \mathbf{k}_j$$

nach Potenzen von  $h$  (unter der Voraussetzung, dass  $\mathbf{y}$  bzw.  $f$  genügend oft differenzierbar sind).

Für skalare AWPe ergibt sich mit den Abkürzungen

$$F := f_t + f_y f \quad \text{und} \quad G := f_{tt} + 2f_{ty}f + f_{yy}f^2$$

(alle Ableitungen von  $f$  werden an der Stelle  $(t_n, y(t_n))$  ausgewertet) die Beziehung

$$\frac{y(t_{n+1}) - y(t_n)}{h} = f + \frac{1}{2}Fh + \frac{1}{6}(G + f_y F)h^2 + O(h^3).$$

Andererseits ist

$$k_1 = f(t_n, y(t_n)) = f,$$

$$k_2 = f(t_n + h\gamma_2, y(t_n) + h\gamma_2 k_1) = f + h\gamma_2 F + \frac{1}{2}h^2 \gamma_2^2 G + O(h^3),$$

$$\begin{aligned} k_3 &= f(t_n + h\gamma_3, y(t_n) + h(\gamma_3 - \alpha_{3,2})k_1 + h\alpha_{3,2}k_2) \\ &= f + h\gamma_3 F + h^2(\gamma_2 \alpha_{3,2} F f_y + \frac{1}{2} \gamma_3^2 G) + O(h^3). \end{aligned}$$

Das bedeutet:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \mathbf{R}_{n+1} &= \left[ 1 - \sum_{j=1}^3 \beta_j \right] f + \left[ \frac{1}{2} - \beta_2 \gamma_2 - \beta_3 \gamma_3 \right] Fh \\ &+ \left[ \left( \frac{1}{3} - \beta_2 \gamma_2^2 - \beta_3 \gamma_3^2 \right) \frac{1}{2} G + \left( \frac{1}{6} - \beta_3 \gamma_2 \alpha_{3,2} \right) F f_y \right] h^2 + O(h^3). \end{aligned}$$

**Folgerungen:**

1. Das Euler-Verfahren ist das einzige einstufige explizite RKV der Ordnung 1 ( $\beta_1 = 1$ ). Es gibt kein einstufiges explizites RKV höherer Ordnung.
2. Die zweistufigen expliziten RKV der Ordnung 2 sind durch

$$\beta_1 + \beta_2 = 1 \quad \text{und} \quad \beta_2 \gamma_2 = \frac{1}{2}$$

charakterisiert. Beispiele sind das modifizierte ( $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1, \gamma_2 = \frac{1}{2}$ ) und das verbesserte Euler-Verfahren ( $\beta_1 = \beta_2 = \frac{1}{2}, \gamma_2 = 1$ ). Kein explizites zweistufiges RKV besitzt die Ordnung 3.

3. Explizite dreistufige RKV der Ordnung 3 sind durch die vier Gleichungen

$$\begin{aligned}\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 &= 1, & \beta_2\gamma_2^2 + \beta_3\gamma_3^2 &= \frac{1}{3}, \\ \beta_2\gamma_2 + \beta_3\gamma_3 &= \frac{1}{2}, & \beta_3\gamma_2\alpha_{3,2} &= \frac{1}{6}\end{aligned}$$

charakterisiert. (Man kann zeigen, dass keine dieser Methoden die Ordnung 4 besitzt.) Beispiele sind das Verfahren von Heun ( $\beta_1 = \frac{1}{4}$ ,  $\beta_2 = 0$ ,  $\beta_3 = \frac{3}{4}$ ,  $\gamma_2 = \frac{1}{3}$ ,  $\gamma_3 = \alpha_{3,2} = \frac{2}{3}$ ) und das Verfahren von Kutta ( $\beta_1 = \frac{1}{6}$ ,  $\beta_2 = \frac{2}{3}$ ,  $\beta_3 = \frac{1}{6}$ ,  $\gamma_2 = \frac{1}{2}$ ,  $\gamma_3 = 1$ ,  $\alpha_{3,2} = 2$ ).

4. Ähnliche (kompliziertere) Rechnungen zeigen, dass es eine zweiparametrische Familie expliziter vierstufiger RKV der Ordnung 4 gibt, von denen keines die Ordnung 5 besitzt. Ein Beispiel ist das klassische Runge-Kutta-Verfahren. Weitere Beispiele sind

# Runge-Kutta-Verfahren

Konsistenzordnung

0	0	0	0	0
1/3	1/3	0	0	0
2/3	-1/3	1	0	0
1	1	-1	1	0
<hr/>				
	1/8	3/8	3/8	1/8

(3/8-Regel)

0	0	0	0	0
2/5	2/5	0	0	0
3/5	-3/20	3/4	0	0
1	19/44	-15/44	40/44	0
<hr/>				
	55/360	125/360	125/360	55/360

(Formel von Kuntzmann).

- Die oben beschriebene Methode, die Ordnung eines RKVs zu bestimmen, wird für Verfahren höherer Ordnung schnell unübersichtlich: Die Koeffizienten eines expliziten Verfahrens der Ordnung 3 müssen 4 Gleichungen erfüllen (s.o.), während bei einem Verfahren der Ordnung 8 bereits 200 nicht-lineare Gleichungen überprüft werden müssen.
- Die sog. Butcher-Theorie<sup>22</sup> erleichtert mit Hilfe graphentheoretischer Bäume die Buchhaltung bei den partiellen Ableitungen von  $f$  und erlaubt eine elegante Berechnung der Ordnung eines gegebenen RKVs (sie liefert aber keine Methode, ein Verfahren mit gewünschter Ordnung zu konstruieren).
- Wir beschränken uns hier darauf, *notwendige Ordnungsbedingungen* abzuleiten, die sich aus den speziellen AWPen

$$y' = y + t^{\ell-1}, \quad y(0) = 0, \quad \ell \in \mathbb{N},$$

ergeben.

---

<sup>22</sup>J. C. Butcher, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations. Runge-Kutta and General Linear Methods*. John Wiley & Sons, Chichester 1987

### Satz 4.1 (Notwendige Ordnungsbedingungen für RKV)

Das durch das Butcher-Tableau

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}$$

definierte RKV besitze die Ordnung  $p$ . Dann gelten

$$\mathbf{b}^\top A^k C^{\ell-1} \mathbf{e} = \frac{(\ell-1)!}{(\ell+k)!} = \frac{1}{\ell(\ell+1)\dots(\ell+k)}$$

für  $\ell = 1, 2, \dots, p$  und  $k = 0, 1, \dots, p - \ell$ .

Dabei sind  $\mathbf{b} := [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m]^\top$ ,  $A := [\alpha_{j,\nu}]_{1 \leq j, \nu \leq m}$ ,  
 $C := \text{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m)$ , und  $\mathbf{e} := [1, 1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^m$ .



# Runge-Kutta-Verfahren

## Konsistenzordnung

Spezialfälle der notwendigen Bedingungen aus Satz 4.1 sind (für  $k = 0$ )

$$\mathbf{b}^\top C^{\ell-1} \mathbf{e} = \sum_{j=1}^m \beta_j \gamma_j^{\ell-1} = \frac{1}{\ell} \quad \text{für } \ell = 1, 2, \dots, p$$

sowie (für  $\ell = 1$  mit  $k \leftarrow k + 1$ )

$$\mathbf{b}^\top A^{k-1} \mathbf{e} = \frac{1}{k!} \quad \text{für } k = 1, 2, \dots, p.$$

**Bemerkung.** Ein explizites  $m$ -stufiges RKV besitzt höchstens die Konsistenzordnung  $m$ , denn hier ist  $A^m = O$  ( $A$  ist echte untere Dreiecksmatrix). Für die optimale Ordnung  $p(m)$  eines expliziten  $m$ -stufigen RKVs gilt sogar  $p(m) \leq m - 1$  falls  $m \geq 5$ , genauer:

$m$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$p(m)$	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	8	9

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen

Wir wenden ein  $m$ -stufiges RKV auf die Testgleichung  $y' = \lambda y$  an und erhalten

$$y_{n+1} = \left[ 1 + \hat{h} \mathbf{b}^\top (I_m - \hat{h}A)^{-1} \mathbf{e} \right] y_n =: R(\hat{h}) y_n, \quad (\hat{h} = \lambda h)$$

so dass (bei festem  $h$ )

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = 0 \text{ (für alle } y_0) \Leftrightarrow |R(\hat{h})| < 1.$$

In Analogie zu Abschnitt 5 definieren wir den **Stabilitätsbereich** eines RKVs durch

$$\mathcal{R}_A := \{ \hat{h} \in \mathbb{C} : |R(\hat{h})| < 1 \}.$$

Für ein beliebiges  $m$ -stufiges RKV gilt

$$R(\hat{h}) = 1 + \hat{h} \mathbf{b}^\top (I_m - \hat{h}A)^{-1} \mathbf{e} = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \hat{h}^j \mathbf{b}^\top A^{j-1} \mathbf{e}.$$

- Besitzt das Verfahren die Ordnung  $p$ , so folgt

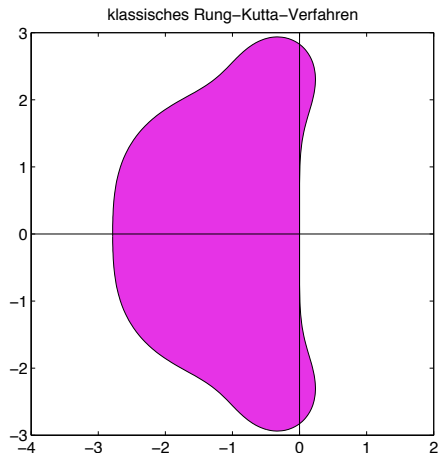
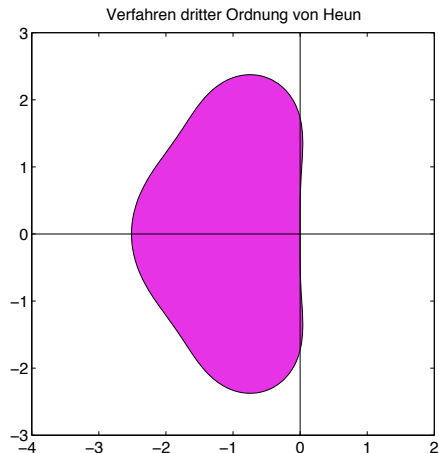
$$R(\hat{h}) = \sum_{j=0}^p \frac{1}{j!} \hat{h}^j + \sum_{j=p+1}^{\infty} \hat{h}^j \mathbf{b}^T A^{j-1} \mathbf{e}.$$

- Ist das RKV explizit, so folgt

$$R(\hat{h}) = 1 + \sum_{j=1}^m \hat{h}^j \mathbf{b}^T A^{j-1} \mathbf{e}.$$

- Insbesondere hängt der Stabilitätsbereich eines  $m$ -stufigen expliziten RKVs der Ordnung  $m$  ( $1 \leq m \leq 4$ ) wegen  $R(\hat{h}) = \sum_{j=0}^m \frac{1}{j!} \hat{h}^j$  nicht von den Koeffizienten des Verfahrens ab.
- Außerdem besitzt kein explizites RKV einen unbeschränkten Stabilitätsbereich (denn  $R$  ist in diesem Fall ein Polynom).

### Beispiele für Stabilitätsgebiete zweier RKV:



- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen

- Kein Verfahren zur Lösung von AWPen arbeitet in der Praxis mit einer *konstanten* Schrittweite.
- Man wird vielmehr versuchen, die Schrittweite an das Verhalten der Lösung  $y$  anzupassen (ändert sich  $y$  in einem Bereich schnell, so ist dort eine kleine Schrittweite angebracht; in Bereichen, in denen  $y$  kaum variiert, ist eine größere Schrittweite ausreichend).
- Wir werden hier eine **Schrittweitensteuerung** vorstellen, die zum Ziel hat, den Konsistenzfehler  $K_{n+1} := \frac{1}{h} R_{n+1}$  (wird in der Literatur oft lokaler Diskretisierungsfehler genannt, vgl. Abschnitt 3) zu kontrollieren:

$$\|K_n\| \sim \text{tol}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

mit einer vorgebenen Toleranz  $\text{tol}$ .

- Bei Systemen von DGen (insbesondere dann, wenn die Lösungskomponenten von unterschiedlicher Größenordnung sind) wird man für jede Komponente eine eigene absolute Fehlertoleranz und global eine relative Fehlertoleranz festsetzen.

Das folgende Lemma besagt, dass mit dem Konsistenzfehler auch der (eigentlich interessierende) globale Diskretisierungsfehler kontrolliert wird.

### Lemma 4.2

Für den globalen Diskretisierungsfehler  $e_n = \mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}_n$  eines Einschrittverfahrens gilt

$$\|e_n\| \leq (t_n - t_0) \kappa_n \exp(M(t_n - t_0)).$$

Dabei ist  $\kappa_n := \max\{\|\mathbf{K}_j\| : j = 0, 1, \dots, n\}$  und  $M$  die Lipschitzkonstante der Verfahrensfunktion (vgl. (V<sub>2</sub>) aus Abschnitt 2).

Um den Konsistenzfehler zu schätzen, verwendet man **zwei Methoden unterschiedlicher Konsistenzordnungen** (sagen wir  $p$  und  $q$  mit  $p < q$ ), um  $\mathbf{y}_n$  aus  $\mathbf{y}_{n-1}$  zu berechnen:

$$\mathbf{y}_n = \mathbf{y}_{n-1} + h\Phi_f(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h) \text{ bzw. } \hat{\mathbf{y}}_n = \mathbf{y}_{n-1} + h\hat{\Phi}_f(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h).$$



Für die zugehörigen Konsistenzfehler gelten:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_n &= \frac{\mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}(t_{n-1})}{h} - \Phi(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h) = O(h^p), \\ \hat{\mathbf{K}}_n &= \frac{\mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}(t_{n-1})}{h} - \hat{\Phi}(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h) = O(h^q). \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\mathbf{K}_n - \hat{\mathbf{K}}_n = \hat{\Phi}(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h) - \Phi(\mathbf{y}_{n-1}, t_{n-1}; h) = \frac{1}{h}(\hat{\mathbf{y}}_n - \mathbf{y}_n).$$

Wegen  $\mathbf{K}_n - \hat{\mathbf{K}}_n = \mathbf{K}_n(1 + O(h^{q-p})) \sim \mathbf{K}_n$  erhalten wir aus

$$\frac{1}{h} \|\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{y}}_n\| \sim \|\mathbf{K}_n\|$$

eine (grobe) Schätzung für  $\|\mathbf{K}_n\|$ .

Ist  $\frac{1}{h} \|\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{y}}_n\| > \text{tol}$ , so wird die Schrittweite  $h$  verworfen und mit

$$\left(\frac{\tilde{h}}{h}\right)^p = \alpha \frac{h \text{ tol}}{\|\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{y}}_n\|} \quad (*)$$

eine neue Schrittweite  $\tilde{h}$  bestimmt ( $\alpha$  ist hier ein Sicherheitsfaktor, etwa  $\alpha = 0.9$ ). Ausgehend von  $\mathbf{y}_{n-1}$  werden jetzt neue Näherungen  $\mathbf{y}_n$  und  $\hat{\mathbf{y}}_n$  (an der Stelle  $t_{n-1} + \tilde{h}$ ) berechnet. Diesen Prozess wiederholt man so lange, bis  $\frac{1}{\tilde{h}} \|\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{y}}_n\| \leq \text{tol}$  erfüllt ist. Dann wird (\*) verwendet, um eine neue (größere) Schrittweite für den nächsten Schritt ( $n \rightarrow n + 1$ ) vorzuschlagen.

Die Wahl von  $\tilde{h}$  nach (\*) motiviert sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \text{benutzte Schrittweite } h: & \quad \frac{1}{h} \|\mathbf{y}_n - \hat{\mathbf{y}}_n\| \sim \|\mathbf{K}_n\| = ch^p + O(h^{p+1}) \sim ch^p, \\ \text{erwünschte Schrittweite } \tilde{h}: & \quad \text{tol} = \|\mathbf{K}_n\| = c\tilde{h}^p + O(\tilde{h}^{p+1}) \sim c\tilde{h}^p. \end{aligned}$$

# Runge-Kutta-Verfahren

## Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren

Um den Aufwand in Grenzen zu halten, verwendet man zur Berechnung von  $y_n$  und  $\hat{y}_n$  zwei RKV (verschiedener Ordnungen), deren Butcher-Tableaus sich nur im Vektor  $\mathbf{b}$  unterscheiden (d.h.  $A$  und  $\mathbf{c}$  sind für beide Verfahren gleich, so dass die Größen  $k_j$  nur einmal berechnet werden müssen). Man spricht von **eingebetteten RKV** und schreibt

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^\top \\ \hline & \hat{\mathbf{b}}^\top \end{array}, \quad \text{z.B.} \quad \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 1 & 0 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array}.$$

Im Beispiel wird ein RKV der Ordnung 1 (das Euler-Verfahren) in ein RKV der Ordnung 2 (das verbesserte Euler-Verfahren) eingebettet.

# Runge-Kutta-Verfahren

## Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren

Ein populäres Beispiel ist die **Fehlberg 4(5)-Formel**:

0	0	0	0	0	0	0
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	0	0	0	0
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$	0	0	0	0
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$	0	1	0
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$	0	0
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	0
	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$	0
	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

Hier werden zwei sechsstufige RKV der Ordnungen 4 bzw. 5 kombiniert.

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen



- Ist  $A$  eine untere (aber keine echte untere)  $\Delta$ -Matrix, so nennt man das zugehörige RKV **halb-implizit**. Das System (□) zerfällt dann in  $m$  Systeme mit jeweils  $n$  Unbekannten.
- Implizite RKV werden oft mit Hilfe von **Gauß-Quadraturformeln** konstruiert. Dies sind Formeln der Bauart

$$\int_a^b g(\tau) d\tau = \sum_{j=1}^m \beta_j g(\gamma_j) + R_m(g).$$

Hier werden die Gewichte  $\beta_j$  und Knoten  $\gamma_j$  so gewählt, dass  $R_m(p) = 0$  für Polynome  $p$  möglichst hohen Grades  $d$  erfüllt ist. Man kann zeigen (vgl. Numerik I), dass eine optimale Wahl auf  $d = 2m - 1$  führt (man sagt die Quadraturformel hat **Exaktheitsgrad**  $2m - 1$ ).

- Die zugehörigen RKV (auch sie werden **Gauß-Formeln** genannt) haben die Ordnung  $2m$ . Beachte, dass kein  $m$ -stufiges RKV eine höhere Ordnung besitzen kann. Warum?

# Runge-Kutta-Verfahren

## Implizite und halb-implizite Verfahren

Für  $m = 1$  ergibt sich die **implizite Mittelpunktsregel**  $\frac{1/2 \mid 1/2}{1}$ ,  
welche die Ordnung 2 besitzt.

Für  $m = 2$  und  $m = 3$  ergeben sich die Gauß-Formeln

$$\begin{array}{c|cc} \frac{3-\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} \\ \frac{3+\sqrt{3}}{6} & \frac{3+2\sqrt{3}}{12} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad \text{bzw.} \quad \begin{array}{c|ccc} \frac{5-\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{10-3\sqrt{15}}{45} & \frac{25-6\sqrt{15}}{180} \\ \frac{1}{2} & \frac{10+3\sqrt{15}}{72} & \frac{2}{9} & \frac{10-3\sqrt{15}}{72} \\ \frac{5+\sqrt{15}}{10} & \frac{25+6\sqrt{15}}{180} & \frac{10+3\sqrt{15}}{45} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array}$$

mit den Konsistenzordnungen 4 bzw. 6.

Bei **Gauß-Radau-Integrationsformeln** wählt man einen Knoten als (entweder linken oder rechten) Endpunkt des Integrationsintervalls.



# Runge-Kutta-Verfahren

## Implizite und halb-implizite Verfahren

- Die übrigen Knoten und alle Gewichte werden so bestimmt, dass sich ein möglichst hoher Exaktheitsgrad ergibt.
- Man kann zeigen, dass eine Gauß-Radau-Formel mit  $m$  Knoten den Exaktheitsgrad  $2m - 2$  besitzt. Daher haben die zugehörigen impliziten RKV die Konsistenzordnung  $2m - 1$ .
- Zu dieser Klasse gehören die Verfahren

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array} \quad \text{und} \quad \begin{array}{c|cc} \frac{1}{3} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ \hline 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array}$$

- Schließlich kann man noch beide Enden des Integrationsintervalls als Knoten wählen und die übrigen Daten so bestimmen, dass die zugehörige Integrationsformel den Exaktheitsgrad  $2m - 3$  (bzw. das zugehörige implizite RKV die Konsistenzordnung  $2m - 2$ ) besitzt. Man spricht von **Gauß-Lobatto-Formeln**. Ein Beispiel ist die Trapezregel (für  $m = 2$ ).

# Runge-Kutta-Verfahren

## Implizite und halb-implizite Verfahren

- Ein Vorteil von impliziten gegenüber expliziten RKV ist ihr wesentlich größerer Stabilitätsbereich (wird ausführlicher im nächsten Kapitel diskutiert).
- Wir betrachten die Trapezregel

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \\ 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \quad \text{d.h.} \quad \begin{array}{l} \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n), \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_n + h(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)/2), \\ \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)/2, \end{array}$$

oder kürzer:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h(\mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}))/2.$$

Die zugehörige Stabilitätsfunktion ist  $R(\hat{h}) = (1 + \hat{h}/2)/(1 - \hat{h}/2)$  und es gilt:

$$|R(\hat{h})| < 1 \Leftrightarrow |1 + \hat{h}/2| < |1 - \hat{h}/2| \Leftrightarrow \operatorname{Re} \hat{h} < 0.$$

Die Trapezregel ist daher **A-stabil**.

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.1 Konstruktion
  - 4.2 Konsistenzordnung
  - 4.3 Absolute Stabilität
  - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
  - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
  - 4.6 Kollokationsmethoden
- 5 Steife Differentialgleichungen

**Kollokationsmethoden** sind spezielle implizite RKV, die – auf Grund ihrer Konstruktion – sehr viel leichter zu analysieren sind als allgemeine RKV.

Mit gegebenen

$$0 \leq \gamma_1 < \gamma_2 < \dots < \gamma_m \leq 1 \text{ setzen wir } t^{(j)} := t_n + \gamma_j h \quad (j = 1, 2, \dots, m)$$

und suchen ein „Polynom“  $\mathbf{p}$  vom Grad  $\leq m$  (bei Systemen von  $k$  DGen ist das ein „Vektor“  $\mathbf{p} = [p_1, p_2, \dots, p_k]^\top$  aus  $k$  Polynomen vom Grad höchstens  $m$ ), das die Interpolationsbedingungen

$$\mathbf{p}(t_n) = \mathbf{y}_n, \quad \mathbf{p}'(t^{(j)}) = \mathbf{f}(t^{(j)}, \mathbf{p}(t^{(j)})) \quad (j = 1, 2, \dots, m)$$

erfüllt. Die Näherung  $\mathbf{y}_{n+1}$  an der Stelle  $t_{n+1}$  wird dann definiert durch

$$\mathbf{y}_{n+1} := \mathbf{p}(t_{n+1}).$$

$\mathbf{p}'$  ist ein Polynom vom Grad  $m - 1$ , das durch die letzten  $m$  dieser Interpolationsbedingungen eindeutig bestimmt ist. In Lagrange-Form besitzt es die Darstellung

$$\mathbf{p}'(t_n + \tau h) = \sum_{j=1}^m \ell_j(t_n + \tau h) \mathbf{k}_j$$

$$\text{mit } \ell_j(t_n + \tau h) = \prod_{j \neq i=1}^m \frac{\tau - \gamma_i}{\gamma_j - \gamma_i} \quad \text{und} \quad \mathbf{k}_j := \mathbf{p}'(t^{(j)}).$$

Jetzt folgt für jedes  $i \in \{1, 2, \dots, m\}$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(t^{(i)}) - \mathbf{p}(t_n) &= \int_{t_n}^{t^{(i)}} \mathbf{p}'(t_n + sh) \, ds = \int_{t_n}^{t^{(i)}} \sum_{j=1}^m \ell_j(t_n + sh) \mathbf{k}_j \, ds \\ &= h \sum_{j=1}^m \left( \int_0^{\gamma_i} \ell_j(r) \, dr \right) \mathbf{k}_j =: h \sum_{j=1}^m \alpha_{i,j} \mathbf{k}_j. \end{aligned}$$

Analog:

$$\mathbf{p}(t_{n+1}) - \mathbf{p}(t_n) = h \sum_{j=1}^m \left( \int_0^1 \ell_j(r) \, dr \right) \mathbf{k}_j =: h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{k}_j.$$

Daraus folgt

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{p}(t_{n+1}) = \mathbf{p}(t_n) + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{k}_j = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^m \beta_j \mathbf{k}_j$$

mit  $\mathbf{k}_j = \mathbf{p}'(t^{(j)}) = \mathbf{f}(t^{(j)}, \mathbf{p}(t^{(j)})) = \mathbf{f}(t_n + \gamma_j h, \mathbf{y}_n + \sum_{\ell=1}^m \alpha_{j,\ell} \mathbf{k}_\ell)$ .

Mit anderen Worten: Jedes Kollokationsverfahren ist ein (implizites) RKV. Implementiert wird es in der Form (RKV) bzw. (RKV\*), d.h. zu gegebenen  $\gamma_j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) bestimmt man zunächst

$$\alpha_{i,j} = \int_0^{\gamma_i} \ell_j(r) dr \quad \text{und} \quad \beta_j = \int_0^1 \ell_j(r) dr \quad (i, j = 1, 2, \dots, m).$$

Nicht jedes implizite RKV ist ein Kollokationsverfahren.

**Beispiel.**

0	1/4	-1/4
2/3	1/4	-5/12
	1/4	3/4

 repräsentiert kein Kollokationsverfahren.

### Satz 4.3 (Konsistenzordnung bei Kollokationsverfahren)

Für ein  $m$ -stufiges Kollokationsverfahren mit dem Butcher-Tableau

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & A \\ \hline & \mathbf{b}^\top \end{array}$$

sind die folgenden drei Aussagen äquivalent:

(a) Das Verfahren besitzt die Konsistenzordnung  $m + p$ .

(b)  $\int_0^1 \tau^j \prod_{j=1}^m (\tau - \gamma_j) d\tau = 0$  für  $j = 0, 1, \dots, p - 1$ .

(c)  $\mathbf{b}^\top C^{\ell-1} \mathbf{e} = 1/\ell$  für  $\ell = 1, 2, \dots, m + p$ .

Dabei sind  $C := \text{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_m)$  und  $\mathbf{e} := [1, 1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^m$ .