

Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

Oliver Ernst

Professur Numerische Mathematik

Wintersemester 2016/17



Mathematik!
TU Chemnitz

① Einleitung

- 1.1 Volterras Prinzip
- 1.2 Begriffe und theoretische Resultate
- 1.3 Lineare Differenzengleichungen
- 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 Konsistenzordnung linearer Mehrschrittverfahren

- 3.3 Die erste Dahlquist-Barriere
- 3.4 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
- 3.5 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
- 3.6 Absolute Stabilität
- 3.7 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

6 Ausblick

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

- 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
- ⑥ Ausblick

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 γ_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)

γ_1	$\alpha_{1,1}$	\cdots	$\alpha_{1,m}$
\vdots	\vdots		\vdots
γ_m	$\alpha_{m,1}$	\cdots	$\alpha_{m,m}$
	β_1	\cdots	β_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
	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 $\mathbf{k}_j = \mathbf{f}(t_n + \gamma_j h, \tilde{\mathbf{y}}_j)$.

- $\mathbf{k}_j \approx \mathbf{y}'(t_n + \gamma_j h)$
- $\tilde{\mathbf{y}}_j \approx \mathbf{y}(t_n + \gamma_j h)$.

- 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
- ⑥ Ausblick

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 AWPes 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

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

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

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

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.

Runge-Kutta-Verfahren

Konsistenzordnung

Weitere Beispiele sind

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-Theorie²³ 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.

²³J. 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 $\mathbf{e} := [1, 1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^m$.

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
- ⑥ Ausblick

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 6 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

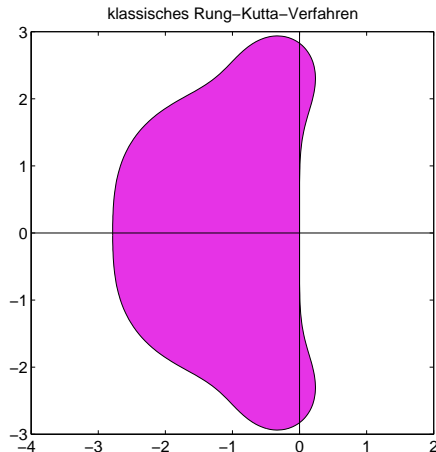
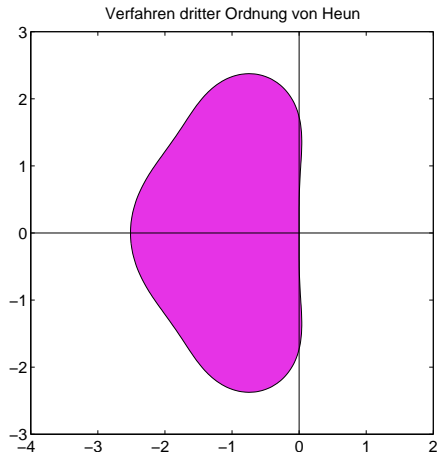
$$R(\hat{h}) = \sum_{j=0}^p \frac{1}{j!} \hat{h}^j + \sum_{j=p+1}^{\infty} \hat{h}^j \mathbf{b}^{\top} A^{j-1} \mathbf{e}.$$

- Ist das RKV explizit, so folgt

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

- 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
- ⑥ Ausblick

Runge-Kutta-Verfahren

Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren

- 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 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.

Runge-Kutta-Verfahren

Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren

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. (V₂) 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:

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

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

Für die zugehörigen Konsistenzfehler gelten (Lokalisierungsannahme):

$$\mathbf{K}_n = \frac{\mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}(t_{n-1})}{h} - \Phi_f(\mathbf{y}(t_{n-1}), t_{n-1}; h) = O(h^p),$$

$$\hat{\mathbf{K}}_n = \frac{\mathbf{y}(t_n) - \mathbf{y}(t_{n-1})}{h} - \hat{\Phi}_f(\mathbf{y}(t_{n-1}), t_{n-1}; h) = O(h^q).$$

Daraus folgt

$$\mathbf{K}_n - \hat{\mathbf{K}}_n = \hat{\Phi}_f(\mathbf{y}(t_{n-1}), t_{n-1}; h) - \Phi_f(\mathbf{y}(t_{n-1}), t_{n-1}; h) = \frac{1}{h}(\hat{\mathbf{y}}_n - \mathbf{y}_n) + O(h^p).$$

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 (α 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:

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

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 b unterscheiden (d.h. A und c sind für beide Verfahren gleich, so dass die Größen k_j nur einmal berechnet werden müssen).
- Man spricht von **eingebetteten RKV** und schreibt

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

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	0	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.

Runge-Kutta-Verfahren

Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren

Ein weiteres Beispiel ist das Verfahren von **Dormand-Prince 4(5)**:

0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	0	0	0	0	0	0
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$	0	0	0	0	0
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$	0	0	0	0
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$	0	0	0
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	0	0
1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0
	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0
	$\frac{5179}{57600}$	0	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{393}{640}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{187}{2100}$	$\frac{1}{40}$

Hier wird ein sechstufiges RKV der Ordnung 4 in ein siebenstufiges RKV der Ordnung 5 eingebettet.

- 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
- ⑥ Ausblick

Runge-Kutta-Verfahren

Implizite und halb-implizite Verfahren

- Ist die Matrix A eines m -stufigen RKVs **keine** echte untere Δ -Matrix (ist das RKV also **implizit**), so muss in jedem Zeitschritt ein nicht-lineares Gleichungssystem der Form

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{k}_1 & = & \mathbf{f}(t_n + \gamma_1 h, h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{1,\ell} \mathbf{k}_\ell) \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{k}_m & = & \mathbf{f}(t_n + \gamma_m h, h \sum_{\ell=1}^m \alpha_{m,\ell} \mathbf{k}_\ell) \end{array} \quad (\square)$$

gelöst werden.

- Dieses System hat also mn Unbekannte, wenn $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ aus n Gleichungen besteht.
- Mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes erkennt man, dass (\square) für genügend kleine h eindeutig lösbar ist.
- In der Praxis wird man dieses System aber nicht mit der Fixpunktiteration, sondern mit einem Newton- bzw. Quasi-Newton-Verfahren lösen.

Runge-Kutta-Verfahren

Implizite und halb-implizite Verfahren

- Ist A eine untere (aber keine echte untere) Δ -Matrix, so nennt man das zugehörige RKV **halb-implizit**. Das System (\square) 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 β_j und Knoten γ_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** $\frac{1/2}{1} \mid \frac{1/2}{1}$,
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

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

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
- ⑥ Ausblick

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 γ_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 $\mathbf{e} := [1, 1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^m$.