

# Kapitel 9

## Anfangswertaufgaben: Einschrittverfahren

### 9.1 Grundlagen

Viele Probleme aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften führen auf Differentialgleichungen. Wir behandeln in den folgenden drei Kapiteln einige Verfahren zur numerischen Lösung von Anfangs- und Randwertproblemen bei gewöhnlichen Differentialgleichungen. Die Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen ist z.B. im Lehrbuch von W. Walter, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, detailliert dargestellt.

**Definition 9.1 (Anfangswertaufgabe)** Eine Anfangswertaufgabe (AWA) ist gegeben durch ein System von Gleichungen

$$y' = f(t, y), \quad y(c) = v; \quad (9.1)$$

hierbei ist  $f : G \rightarrow \mathbb{R}^n$  eine Funktion,  $G \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  ein Gebiet und  $(c, v) \in G$  mit  $c \in \mathbb{R}$  und  $v \in \mathbb{R}^n$ . Eine Lösung der AWA ist eine differenzierbare Funktion

$$y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n,$$

für die gilt:

- i)  $(x, y(x)) \in G$  für alle  $x \in [a, b]$ ,
- ii)  $c \in [a, b]$  und  $y(c) = v$ ,
- iii)  $y'(x) = f(x, y(x))$  für alle  $x \in [a, b]$ .

**Beispiel 9.2** (a) Hängt die Funktion  $f$  nicht von  $y$  ab, so folgt

$$y(x) = v + \int_c^x f(t) dt;$$

im Fall  $n > 1$  ist das Integral komponentenweise zu berechnen.

(b) Hängt die Funktion  $f$  nicht von  $x$  ab, so nennt man die Differentialgleichung *autonom*. Ein Beispiel ist die sog. "Modellgleichung"

$$y' = \lambda y, \quad y(a) = y_0 \quad (\lambda \in \mathbb{R}) \quad (9.2)$$

mit der Lösung

$$y(x) = y_0 e^{\lambda(x-a)}.$$

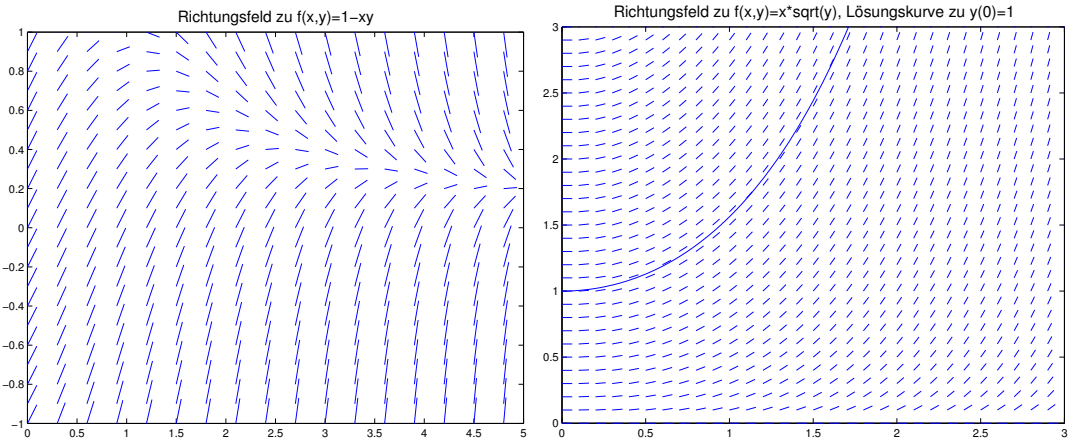
Die zugehörige inhomogene (nicht-autonome) lineare Gleichung

$$y' = \lambda y + g(x), \quad y(a) = 0 \quad (\lambda \in \mathbb{R})$$

besitzt die Lösung

$$y(x) = e^{\lambda(x-a)} \int_a^x g(t) e^{-\lambda(t-a)} dt.$$

- (c) Im Fall  $n = 1$  kann das “Richtungsfeld” der Differentialgleichung  $y' = f(x, y)$  Aufschluss über den qualitativen Verlauf der Lösung geben. Hierzu trägt man in passend gewählten Punkten  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  den Wert  $f(x, y)$  als Steigung ein. Die Lösung der AWA “folgt dem Richtungsfeld”.



- (d) Eine skalare AWA höherer *Ordnung*

$$\begin{aligned} y^{(n)} &= f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}), & y(a) &= y_0, \\ & & y'(a) &= y'_0, \\ & & & \vdots \\ & & y^{(n-1)}(a) &= y_0^{(n-1)}, \end{aligned}$$

wird durch die Festlegungen

$$Y = \begin{bmatrix} y \\ y' \\ \vdots \\ y^{(n-1)} \end{bmatrix}, \quad F(x, Y) = \begin{bmatrix} y' \\ y'' \\ \vdots \\ f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \end{bmatrix}, \quad Y_0 = \begin{bmatrix} y_0 \\ y'_0 \\ \vdots \\ y_0^{(n-1)} \end{bmatrix} \quad (9.3)$$

zu einem System von Differentialgleichungen erster Ordnung

$$Y' = F(x, Y), \quad Y(a) = Y_0,$$

dessen Lösung auch die Lösung von (9.3) liefert.

Die Frage der Lösbarkeit der AWA (9.1) wird durch zwei grundlegende Aussagen behandelt:

- **Satz von Peano:** Falls  $f$  stetig ist, existiert in einer Umgebung von  $x = c$  **mindestens** eine Lösung
- **Satz von Picard-Lindelöf:** Falls  $f$  *Lipschitz-stetig* bzgl.  $y$  ist, so existiert eine **eindeutige** Lösung, und die Lösung läuft von “Rand zu Rand” (genauer vgl. Satz 9.5).

Hierbei wurde die folgende Definition verwendet.

**Definition 9.3** Die Funktion  $f : G \rightarrow \mathbb{R}^n$ , mit  $G \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ , heißt Lipschitz-stetig bzgl.  $y$ , wenn es eine Konstante  $L > 0$  gibt mit

$$\|f(x, y) - f(x, \tilde{y})\| \leq L\|y - \tilde{y}\| \quad \text{für alle } (x, y), (x, \tilde{y}) \in G. \quad (9.4)$$

$L$  wird auch Lipschitz-Konstante genannt.

Meistens setzt man noch die Konvexität von  $G$  voraus, so dass eine einfache Abschätzung der Lipschitz-Konstanten mit dem Mittelwertsatz erfolgen kann.

**Lemma 9.4**  $f : G \rightarrow \mathbb{R}^n$  besitze auf dem Gebiet  $G \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  stetige partielle Ableitungen  $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$ . Dann ist  $f$  Lipschitz-stetig auf jeder konvexen kompakten Teilmenge  $K \subset G$ . Bzgl. der Normen  $\|\cdot\|_2$  und  $\|\cdot\|_\infty$  ist durch

$$L := \max_{(x,y) \in K} \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial f_i}{\partial y_j}(x, y) \right| \quad (9.5)$$

eine Lipschitz-Konstante von  $f$  auf der Teilmenge  $K$  gegeben.

**Satz 9.5 (Satz von Picard-Lindelöf)** Die Funktion  $f : G \rightarrow \mathbb{R}^n$  sei auf dem Gebiet  $G \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$  Lipschitz-stetig mit der Lipschitz-Konstanten  $L$ . Dann existiert zu jedem  $(c, v) \in G$  ein Intervall  $I_\delta = [c - \delta, c + \delta]$  derart, dass die AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(c) = v,$$

genau eine Lösung  $y \in C^1(I_\delta)$  besitzt. Man erhält  $y$  als Grenzwert der rekursiv definierten Funktionenfolge

$$\begin{aligned} y_0(x) &= v, & x \in I_\delta, \\ y_\nu(x) &= v + \int_c^x f(t, y_{\nu-1}(t)) dt, & x \in I_\delta, \quad \nu \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

**Bemerkung 9.6** (a) *Maximale Lösung:* Eine direkte Folgerung des Satzes von Picard-Lindelöf ist die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung der AWA in großen Intervallen. Zur Lösung  $y : I_\delta \rightarrow \mathbb{R}^n$  der AWA existiert eine (maximale) Lösung  $z$ , die auf  $I_\delta$  mit  $y$  übereinstimmt und deren Graf für fallendes und wachsendes  $x$  gegen den Rand von  $G$  strebt. D.h. die Lösungen der AWA gehen "von Rand zu Rand".

Beispiel: s. Vorlesung

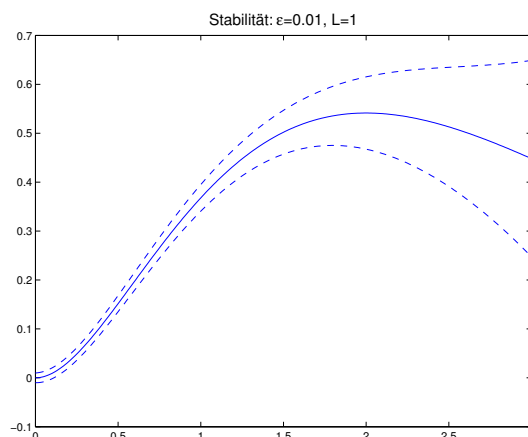
(b) **Stabilität:** Die Lösung  $y$  der AWA hängt Lipschitz-stetig vom Anfangswert  $v$  ab, d.h. gilt

$$\tilde{y}' = f(x, \tilde{y}), \quad \tilde{y}(c) = \tilde{v},$$

so folgt

$$\|y(x) - \tilde{y}(x)\| \leq e^{L|x-c|} \|v - \tilde{v}\|.$$

Diese Ungleichung bedeutet, dass für alle  $\|v - \tilde{v}\| < \epsilon$  der Graf von  $\tilde{y}$  in einem sich öffnenden "Kegel" um den Grafen von  $y$  liegt:



## 9.2 Einschrittverfahren: Definition und Beispiele

Wir betrachten zunächst den skalaren Fall ( $n = 1$ ), in dem die AWA die Form

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0,$$

annimmt. Die sogenannten Einschritt-Verfahren orientieren sich am Richtungsfeld der Differentialgleichung. Man legt eine ‘‘Schrittweite’’  $h > 0$  in  $x$ -Richtung fest, berechnet einen ‘‘Durchschnittswert’’  $\eta$  für die Steigung der Lösung in der Nähe des Punktes  $(x_0, y_0)$  und schreitet fort.

Mit der einfachsten Wahl  $\eta = f(x_0, y_0)$  ergibt sich das folgende Verfahren.

**Algorithmus 9.7 (Eulersches Polygonzug-Verfahren)** Zu gegebener AWA  $y' = f(x, y)$ ,  $y(x_0) = y_0$ , und gegebener Schrittweite  $h \in \mathbb{R}$  setzt man

$$x_{k+1} = x_k + h, \quad y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), \quad k = 0, 1, \dots, N.$$

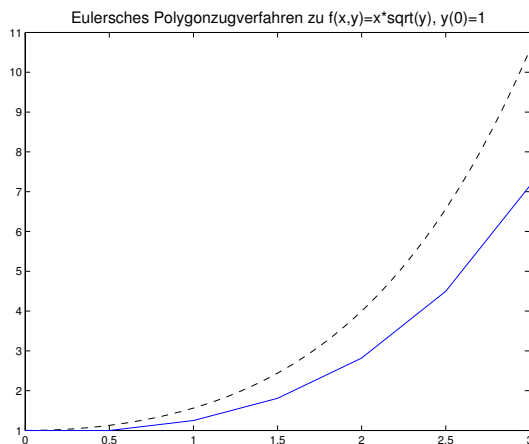
Hierbei ist  $N$  geeignet gewählt, so dass  $(x_k, y_k)$ ,  $1 \leq k \leq N$ , im Definitionsgebiet von  $f$  liegt.

Verbindet man die Punkte  $(x_k, y_k)$ ,  $0 \leq k \leq N$ , erhält man einen Polygonzug, der der Namensgebung des Verfahrens zu Grunde liegt.

**Beispiel 9.8** Das Richtungsfeld der AWA  $y' = x\sqrt{y}$ ,  $y(0) = 1$ , wurde in Beispiel 9.2(c) gezeigt, die Lösung lautet  $y(x) = (1 + x^2/4)^2$ . Führen wir 6 Schritte zur Schrittweite  $h = 0.5$  durch, ergibt sich

$k$	$x_k$	$y_k$	$y(x_k)$
0	0	1.0000	1.0000
1.0000	0.5000	1.0000	1.1289
2.0000	1.0000	1.2500	1.5625
3.0000	1.5000	1.8090	2.4414
4.0000	2.0000	2.8178	4.0000
5.0000	2.5000	4.4964	6.5664
6.0000	3.0000	7.1470	10.5625

Der Polygonzug stellt eine Näherung an den Grafen der Lösung dar, der für wachsendes  $x$  jedoch an Genauigkeit verliert.



Man beachte, dass der Schätzwert  $f(x_k, y_k)$  für  $k > 0$  nicht mehr der Steigung der Lösung  $y$  an der Stelle  $x_k$  entspricht, sondern der Steigung einer weiteren Lösung  $z$  der selben Differentialgleichung zum Anfangswert  $(x_k, y_k)$ . Dies wird bei der Betrachtung der Konvergenz von Einschrittverfahren eine wichtige Rolle spielen.

Weitere Verfahren gehen ganz ähnlich vor, bestimmen jedoch einen anderen Schätzwert für die Steigung der Lösung.

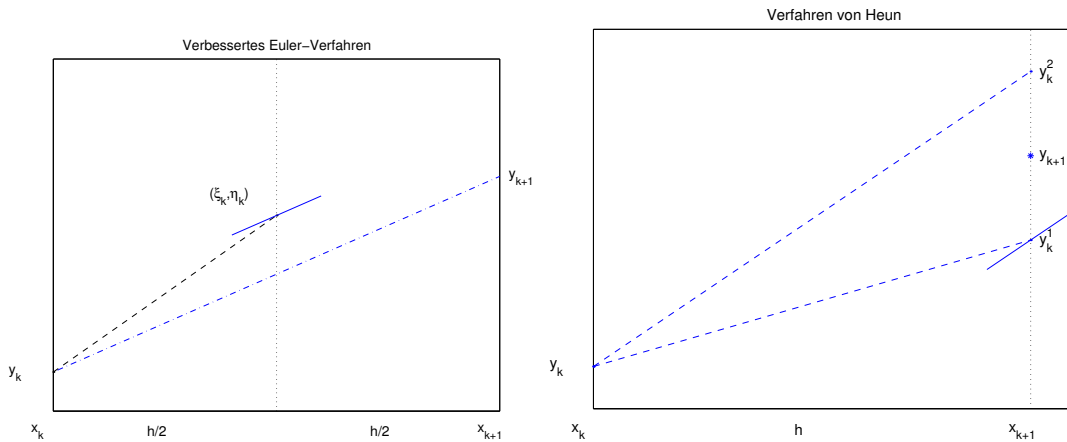
**Algorithmus 9.9** (a) **Verbessertes Euler-Verfahren:** Man setzt für  $k = 0, 1, \dots, N$

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + h, \\ \xi_k &= x_k + \frac{h}{2}, \quad \eta_k = y_k + \frac{h}{2} f(x_k, y_k), \\ y_{k+1} &= y_k + h f(\xi_k, \eta_k). \end{aligned}$$

(b) **Verfahren von Heun:** Man setzt für  $k = 0, 1, \dots, N$

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + h, \\ y_k^{(1)} &= y_k + h f(x_k, y_k), \\ y_k^{(2)} &= y_k + h f(x_k + h, y_k^{(1)}), \\ y_{k+1} &= \frac{1}{2}(y_k^{(1)} + y_k^{(2)}). \end{aligned}$$

Die Algorithmen lassen sich im Richtungsfeld der Differentialgleichung  $y' = f(x, y)$  veranschaulichen:



Wir betrachten im folgenden immer die AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(a) = v.$$

**Definition 9.10** Zu gegebener Anfangswertaufgabe und gegebener Schrittweite  $h \in \mathbb{R}$  heißt der Algorithmus

$$\begin{aligned} x_0 &:= a, & y_0 &:= v, \\ x_{k+1} &:= x_k + h, & y_{k+1} &:= y_k + h\Phi(f, x_k, y_k, h), \quad k = 0, 1, \dots, \end{aligned}$$

ein allgemeines Einschrittverfahren mit der Zuwachsfunktion  $\Phi = \Phi(f, x, y, h)$ .

Wir schreiben häufig kürzer  $\Phi(x, y, h)$ , wenn die gegebene Funktion  $f$  aus dem Zusammenhang hervorgeht.

**Beispiel 9.11** Die Zuwachsfunktionen lauten beim

Eulerschen Polygonzugverfahren:  $\Phi(x, y, h) = f(x, y)$ ,

verbesserten Euler-Verfahren:  $\Phi(x, y, h) = f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(x, y))$ ,

Verfahren von Heun:  $\Phi(x, y, h) = \frac{1}{2} [f(x, y) + f(x + h, y + h f(x, y))]$ .

Beachte: Falls die Funktion  $f(x, y)$  nicht von  $y$  abhängt, entspricht der Zuwachs  $h\Phi(x, y, h)$  der numerischen Quadratur des Integrals

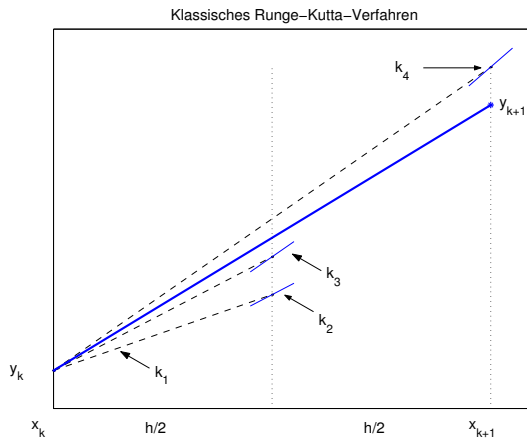
$$\int_{x_k}^{x_k+h} f(x) dx$$

durch die Rechteckregel (Eulersches Polygonzugverfahren), Mittelpunktsregel (verbessertes Euler-Verfahren) bzw. Trapezregel (Verfahren von Heun).

Als weiteres wichtiges Beispiel soll das ‐klassische Runge-Kutta-Verfahren‐ aus dem Jahr 1895 angegeben werden.

**Algorithmus 9.12 (Klassisches Runge-Kutta-Verfahren)** Für  $k = 1, 2, \dots, N$  setze

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + h, \\ K_1 &= f(x_k, y_k), \\ K_2 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}K_1\right), \\ K_3 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}K_2\right), \\ K_4 &= f(x_k + h, y_k + hK_3), \\ y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4). \end{aligned}$$



**Bemerkung 9.13** Die Verfahren dieses Abschnitts lassen sich in einfacher Weise auf Systeme von Differentialgleichungen ( $n > 1$ ) verallgemeinern. Dann ist die Zuwachsfunktion  $\Phi$  vektorwertig, genau so wie die Funktion  $f$  der rechten Seite der Differentialgleichung.

## 9.3 Konsistenz

Wir betrachten nun die AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(c) = v,$$

im Fall  $n = 1$ . Ein Einschrittverfahren mit der Zuwachsfunktion  $\Phi(x, y, h)$  kann nur dann sinnvoll sein, wenn für kleine  $|h|$  das Verhalten der Differentialgleichung angenähert wird. Mit der Lösung  $z = z(t)$  der AWA

$$z' = f(t, z), \quad z(x) = y,$$

muss  $\Phi(x, y, h)$  also eine Näherung der Steigung der Sekante  $\frac{z(x+h)-z(x)}{h} = \frac{z(x+h)-y}{h}$  darstellen. (Beachte:  $(x, y)$  ist nun der (variable) Anfangswert zur AWA.)

**Definition 9.14 (Lokaler Diskretisierungsfehler)** Sei  $(x, y) \in G$  beliebig und  $h \in \mathbb{R}$  die Schrittweite.

(a) Mit der Lösung  $z = z(t)$  der AWA

$$z' = f(t, z), \quad z(x) = y,$$

wird der exakte relative Zuwachs definiert als

$$\Delta(x, y, h) := \begin{cases} \frac{z(x+h)-y}{h}, & \text{für } h \neq 0, \\ f(x, y), & \text{für } h = 0. \end{cases}$$

(b) Die Funktion

$$r(x, y, h) := \Delta(x, y, h) - \Phi(x, y, h)$$

heißt lokaler Diskretisierungsfehler des Einschrittverfahrens mit Zuwachsfunktion  $\Phi$ .

**Beispiel 9.15** Wir betrachten die Modellgleichung  $y' = y$  auf  $G = \mathbb{R}^2$ . Lösung der AWA

$$z'(t) = z(t), \quad z(x) = y,$$

ist die Funktion  $z(t) = ye^{-x}e^t$ . Daher ist der exakte relative Zuwachs

$$\Delta(x, y, h) := \begin{cases} \frac{ye^{-x}e^{x+h}-y}{h}, & \text{für } h \neq 0, \\ y, & \text{für } h = 0, \end{cases} = \begin{cases} y \frac{e^h-1}{h}, & \text{für } h \neq 0, \\ y, & \text{für } h = 0. \end{cases}$$

Ist  $\Phi$  die Zuwachsfunktion des Eulerschen Polygonzugverfahrens, also  $\Phi(x, y, h) = f(x, y) = y$ , so ergibt sich der lokale Diskretisierungsfehler

$$r(x, y, h) = \begin{cases} y \left( \frac{e^h-1}{h} - 1 \right), & \text{für } h \neq 0, \\ 0, & \text{für } h = 0. \end{cases}$$

Wir stellen also fest, dass  $\lim_{h \rightarrow 0} r(x, y, h) = 0$  für alle  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  gilt.

Sinnvolle Einschrittverfahren müssen die folgende Bedingung erfüllen.

**Definition 9.16 (Konsistenz)** Das durch eine Zuwachsfunktion  $\Phi : G \times [0, h_0] \rightarrow \mathbb{R}$  definierte Einschrittverfahren heißt konsistent in  $G$ , wenn für alle  $(x, y) \in G$  und alle in  $G$  stetig partiell differenzierbaren Funktionen  $f$  stets gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} r(x, y, h) = 0,$$

oder anders ausgedrückt  $\lim_{h \rightarrow 0} \Phi(x, y, h) = f(x, y)$ .

**Beispiel 9.17** Wir betrachten das Eulersche Polygonzugverfahren für die Differentialgleichung  $y' = f(x, y)$ , wobei  $f$  stetige partielle Ableitungen  $f_x$  und  $f_y$  in  $G$  besitze. Der lokale Diskretisierungsfehler ist gegeben durch

$$r(x, y, h) = \begin{cases} \frac{z(x+h)-y}{h} - f(x, y), & \text{für } h \neq 0, \\ 0, & \text{für } h = 0. \end{cases}$$

Die Lösung  $z(t)$  zum Anfangswert  $z(x) = y$ ,  $(x, y) \in G$ , ist in einem Intervall  $[x - h_0, x + h_0]$  zweimal stetig differenzierbar, denn

$$\begin{aligned} z'(t) &= f(t, z(t)), \\ z''(t) &= f_x(t, z(t)) + z'(t)f_y(t, z(t)) = f_x(t, z(t)) + f(t, z(t))f_y(t, z(t)). \end{aligned} \quad (9.6)$$

Für alle  $|h| < h_0$  folgt dann

$$z(x+h) = z(x) + hz'(x) + \frac{h^2}{2}z''(\xi) = y + hf(x, y) + \frac{h^2}{2}z''(\xi) \quad (9.7)$$

mit einem  $\xi$  zwischen  $x$  und  $x+h$ . Daher schließen wir auf

$$r(x, y, h) = \frac{h}{2}z''(\xi) = \mathcal{O}(h), \quad h \rightarrow 0.$$

Insbesondere ist das Eulersche Polygonzugverfahren konsistent.

Man quantifiziert die lokale Güte des Einschrittverfahrens wie folgt.

**Definition 9.18 (Konsistenzordnung)** Ein Einschrittverfahren hat die Konsistenzordnung  $p \in \mathbb{N}$ , wenn für alle  $(x, y) \in G$  und alle in  $G$   $p$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen  $f$  stets gilt

$$r(x, y, h) = \mathcal{O}(|h|^p), \quad h \rightarrow 0.$$

**Beispiel 9.19** Die Euler-Verfahren haben die Konsistenzordnung

- 1 beim Eulerschen Polygonzugverfahren,
- 2 sowohl beim verbesserten Euler-Verfahren als auch beim Verfahren von Heun.

**Beweis:** (für das verbesserte Euler-Verfahren)

Wir setzen  $f$  als mindestens 2-mal stetig differenzierbar voraus. Wie in (9.6) erhalten wir, dass die Lösung  $z$  der AWA mit Anfangswert  $z(x) = y$  mindestens 3-mal stetig differenzierbar ist und

$$\begin{aligned} z(x+h) &= z(x) + hz'(x) + \frac{h^2}{2}z''(x) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= y + hf(x, y) + \frac{h^2}{2}(f_x(x, y) + f(x, y)f_y(x, y)) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \quad (9.8)$$

gilt. Ebenso folgt durch Taylorentwicklung (im  $\mathbb{R}^2$ ) der Verfahrensfunktion, dass

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, h) &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}f(x, y)\right) \\ &= f(x, y) + \frac{h}{2}f_x(x, y) + \frac{h}{2}f(x, y)f_y(x, y) + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Kombination beider Ausdrücke liefert

$$r(x, y, h) = \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0.$$

Damit ist gezeigt, dass das verbesserte Euler-Verfahren die Konsistenzordnung 2 besitzt.  $\square$

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren hat sogar die Konsistenzordnung 4, wie wir später sehen werden.

**Beispiel 9.20** Wir wollen nun die obige Methode anwenden auf die Klasse der sogenannten *zweistufigen Verfahren*, oder *zweistufigen Runge-Kutta-Verfahren*. Der Ansatz für die Zuwachsfunktion lautet

$$\Phi(x, y, h) = \alpha f(x, y) + \beta f(x + \gamma h, y + \delta h f(x, y)), \quad (9.9)$$

wobei  $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R}$  zu bestimmende Parameter sind, die die Konsistenz(ordnung) bestimmen. Beispiele hierzu sind das verbesserte Euler-Verfahren ( $\alpha = 0, \beta = 1, \gamma = \delta = 1/2$ ) und das Verfahren von Heun ( $\alpha = \beta = 1/2, \gamma = \delta = 1$ ). (Die Bezeichnung ‘‘zweistufig’’ rührt daher, dass  $f$  zuerst an der Stelle  $(x_k, y_k)$  ausgewertet wird (1. Stufe) und der Wert sodann bei der Berechnung von  $f(x + \gamma h, y + \delta h f(x, y))$  (2. Stufe) eingesetzt wird.)

Um die Konsistenzordnung zu bestimmen, verwenden wir für hinreichend oft differenzierbares  $f$  die Taylorentwicklung

$$f(x + \gamma h, y + \delta h f(x, y)) = f(x, y) + \gamma h f_x(x, y) + \delta h f(x, y) f_y(x, y) + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0.$$

Dies ergibt

$$\Phi(x, y, h) = (\alpha + \beta) f(x, y) + h\beta[\gamma f_x(x, y) + \delta f(x, y) f_y(x, y)] + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0.$$

Demgegenüber ist, wie in (9.8) gesehen,

$$\Delta(x, y, h) = f(x, y) + \frac{h}{2}(f_x(x, y) + f(x, y) f_y(x, y)) + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0.$$

Wir erhalten also

*Konsistenzordnung*  $p \geq 1$ , falls  $\alpha + \beta = 1$  gilt (Spezialfall: Eulersches Polygonzug-Verfahren),

*Konsistenzordnung*  $p \geq 2$ , falls

$$\alpha + \beta = 1 \quad \text{und} \quad \beta\gamma = \beta\delta = \frac{1}{2} \quad (9.10)$$

gilt. Das zweite (nichtlineare) Gleichungssystem wird gelöst von  $\gamma = \delta = \frac{1}{2\beta}$ . (Spezialfälle: siehe oben)

## 9.4 Allgemeine Runge-Kutta-Verfahren

Die Verfahren von Runge und Kutta sind mehrstufige Verfahren, die als Zuwachsfunktion  $\Phi(x, y, h)$  eine Linearkombination von Steigungswerten an mehreren Stellen des Richtungsfeldes in der Nähe von  $(x, y)$  verwenden.

**Definition 9.21** *Mit den Steigungen*

$$\begin{aligned} K_1(x, y, h) &:= f(x, y), \\ K_2(x, y, h) &:= f(x + ha_2, y + hb_{21}K_1(x, y, h)), \\ &\vdots \\ K_R(x, y, h) &:= f(x + ha_R, y + h \sum_{\nu=1}^{R-1} b_{R\nu} K_\nu(x, y, h)), \end{aligned}$$

die die (innere Konsistenz-)Bedingung

$$a_r = \sum_{\nu=1}^{r-1} b_{r,\nu}, \quad 2 \leq r \leq R, \quad (9.11)$$

erfüllen, definiert die Zuwachsfunktion

$$\Phi(x, y, h) := \sum_{r=1}^R c_r K_r(x, y, h)$$

ein  $R$ -stufiges Runge-Kutta Verfahren.

Die Parameter des  $R$ -stufigen Runge-Kutta Verfahrens werden in folgendem Schema zusammengefasst:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ a_2 & b_{21} & & \\ a_3 & b_{31} & b_{32} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ a_R & b_{R1} & b_{R2} & \cdots & b_{R,R-1} \\ \hline & c_1 & c_2 & \cdots & c_{R-1} & c_R \end{array}$$

Dabei stehen in der ersten Spalte die Zeilensummen der unteren Dreiecksmatrix  $[b_{r\nu}]$ . Die Konsistenz dieses Verfahrens ist einfach festzustellen.

**Lemma 9.22** *Das  $R$ -stufige Runge-Kutta Verfahren ist genau dann konsistent, wenn gilt*

$$\sum_{r=1}^R c_r = 1. \quad (9.12)$$

Die innere Konsistenz-Bedingung (9.23) hat folgende Auswirkung.

**Lemma 9.23**  *$f$  sei mindestens 2-mal stetig differenzierbar in  $G$ . Die Bedingung (9.23) ist äquivalent zu*

$$z'(x + a_r h) = K_r(x, y, h) + \mathcal{O}(h^2), \quad h \rightarrow 0,$$

wobei  $z$  die Lösung der AWA mit Anfangswert  $(x, y) \in G$  ist.

**Beispiel 9.24** Wir geben nun noch einige spezielle Schemata von Runge-Kutta-Verfahren an.

$R = 1$  Eulersches Polygonzugverfahren mit Konsistenzordnung 1:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array}$$

$R = 2$  Allgemeines zweistufiges Verfahren mit Konsistenzordnung 2:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2\beta} & & \frac{1}{2\beta} \\ \hline & 1 - \beta & \beta \end{array}$$

Spezialfälle:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

(Heun)

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

(verb. Eulerverfahren)

$R = 3$ : Allgemeines dreistufiges Verfahren:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ a_2 & a_2 & & \\ a_3 & a_3 - b_{32} & b_{32} & \\ \hline & c_1 & c_2 & c_3 \end{array}$$

Dieses Verfahren hat die Konsistenzordnung 3 genau dann, wenn folgende 4 nichtlineare Gleichungen für die 6 Parameter erfüllt sind:

$$\left. \begin{aligned} c_1 + c_2 + c_3 &= 1 && \text{(für Konsistenzordnung 1)} \\ c_2 a_2 + c_3 a_3 &= \frac{1}{2} && \text{(für Konsistenzordnung 2)} \\ c_2 a_2^2 + c_3 a_3^2 &= \frac{1}{3} \\ c_3 b_{32} a_2 &= \frac{1}{6} \end{aligned} \right\} \text{(für Konsistenzordnung 3)}$$

(Übungsaufgabe!)

Spezialfälle:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\ \hline & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4} \end{array}$$

(Heun 3. Ordnung)

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

(Kutta 3. Ordnung)

$R = 4$ : Spezialfall des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens 4. Ordnung:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Um ein allgemeines vierstufiges Runge-Kutta-Verfahren der Konsistenzordnung 4 zu bestimmen, sind 8 nichtlineare Gleichungen für die 10 Parameter aus dem allgemeinen Schema zu erfüllen (unter Einsetzen der inneren Konsistenzbedingungen).

Die Gleichungssysteme für die Parameter des  $R$ -stufigen Runge-Kutta-Verfahrens erhält man durch den sog. Taylorabgleich der Funktionen  $\Delta(x, y, h) = \frac{z(x+h)-y}{h}$  und  $\Phi(x, y, h)$ , mit dem man die Konsistenzordnung des Verfahrens bestimmt. J. C. Butcher (*The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*, s. Bibl. b352/Butc) hat gezeigt, dass nur für kleine  $R$  die Konsistenzordnung  $R$  erzielt werden kann. Für alle  $R \geq 10$  ist als obere Schranke für die maximal erreichbare Konsistenzordnung  $\rho(R) \leq R-2$  nachgewiesen. Folgende Tabelle gibt die maximal erzielbare Konsistenzordnung  $\rho(R)$  für kleine  $R$  an:

$R$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\rho(R)$	1	2	3	4	4	5	6	6	7

P. Albrecht (*The Runge-Kutta theory in a nutshell*, s. Bibl. b352/Albr) hat eine Rekursion zur Berechnung der Parameter des  $R$ -stufigen Runge-Kutta Verfahrens zur Erzielung der optimalen Konvergenzordnung angegeben. Dort wird ein Zusammenhang zu einem **linearen** Mehrschrittverfahren aufgestellt, der auf einfachere Bedingungen an die Parameter führt.

## 9.5 Konvergenz

Wir untersuchen in diesem Abschnitt, ob und wie die durch ein Einschrittverfahren mit Zuwachsfunktion  $\Phi$  berechneten Näherungen gegen die Lösung einer AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(c) = v,$$

konvergieren.

Um die Abhängigkeit der berechneten Näherungen  $y_k$  des Einschrittverfahrens von der Schrittweite  $h$  deutlich zu machen, verwenden wir in diesem Abschnitt die Schreibweise  $y_k^{(h)}$  statt  $y_k$ . Also lautet die Iteration des Einschrittverfahrens

$$\begin{aligned} x_0^{(h)} &:= c, & y_0^{(h)} &:= \tilde{v}, & & \text{(Startwert),} \\ x_{k+1}^{(h)} &:= x_k^{(h)} + c, & y_{k+1}^{(h)} &:= y_k^{(h)} + h\Phi(x_k^{(h)}, y_k^{(h)}, h), & & k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Hier beziehen wir sogar die Störung  $\tilde{v}$  des exakten Anfangswerts  $v$  mit ein.

Mit  $y = y(x)$  wird die exakte Lösung zum Anfangswert  $y(c) = v$  bezeichnet. Um den Näherungswert für  $y(x)$  an einer festen Stelle  $x \neq x_0$  zu bestimmen, kommen nur Schrittweiten

$$\frac{x - x_0}{k} =: h_{k,x} \quad \text{mit } k \in \mathbb{N}$$

in Betracht. In dieser Schreibweise ist also  $y_k^{(h_{k,x})}$  die berechnete Näherung an  $y(x)$  nach  $k$  Schritten des Einschrittverfahrens zur Schrittweite  $h_{k,x}$ . Die Anfangswerte  $y_0^{(h_{k,x})}$  können wieder Störungen des exakten Werts  $v$  enthalten.

**Definition 9.25 (Globaler Diskretisierungsfehler)** Zur AWA  $y' = f(x, y)$ ,  $y(c) = v$ , bezeichnet

$$e_k(x) := y(x) - y_k^{(h_{k,x})}, \quad x \neq c, \quad k \in \mathbb{N},$$

den globalen Diskretisierungsfehler.

**Beispiel 9.26** Zur AWA der Modellgleichung  $y' = \alpha y$ ,  $y(c) = v$ , lautet die Zuwachsfunktion der Eulerschen Polygonzugmethode  $\Phi(x, y, h) = \alpha y$ . Für die Iterierten zur Schrittweite  $h \neq 0$  und Startwert  $x_0 = c$ ,  $y_0^{(h)}$  erhalten wir

$$y_{k+1}^{(h)} = y_k^{(h)} + h\alpha y_k^{(h)} = (1 + h\alpha)y_k^{(h)} = (1 + h\alpha)^{k+1}y_0^{(h)}.$$

Wir halten nun  $x \neq c$  fest und variieren die Schrittzahl  $k$  und Schrittweite  $h = h_{k,x}$ . Unter der Voraussetzung

$$y_0^{(h_{k,x})} - v = \mathbf{o}(1), \quad k \rightarrow \infty,$$

ergibt sich der Fehler

$$\begin{aligned} e_k(x) &= y(x) - y_k^{(h_{k,x})} \\ &= ve^{\alpha(x-c)} - y_0^{(h_{k,x})}(1 + h_{k,x}\alpha)^k \\ &= ve^{\alpha(x-c)} - y_0^{(h_{k,x})} \left(1 + \frac{\alpha(x-c)}{k}\right)^k \\ &= e^{\alpha(x-c)}(v - y_0^{(h_{k,x})}) + y_0^{(h_{k,x})} \left[ e^{\alpha(x-c)} - \left(1 + \frac{\alpha(x-c)}{k}\right)^k \right] \\ &= \mathbf{o}(1), \quad k \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Der erste Term in diesem Beispiel entspricht in etwa dem Fehler aus Bemerkung 9.6 zur Stabilität der Lösung der AWA bzgl. des Anfangswerts. Der zweite Term beschreibt den zusätzlichen Verfahrensfehler der Polygonzugmethode.

**Definition 9.27 (Konvergenz)** Ein Einschrittverfahren heißt konvergent in einem Rechteck  $R = [x_0, b] \times [r, s]$ , wenn für alle Anfangswertaufgaben

$$y' = f(x, y), \quad y(c) = v,$$

mit in  $R$  stetig partiell differenzierbarer Funktion  $f$  und Lösung  $y$ , deren Graf  $\{(x, y(x)) : x \in [x_0, b]\}$  ganz in  $R$  verläuft, und für alle  $x \in [x_0, b]$  aus der Bedingung

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_0^{(h_{k,x})} = v \quad (9.13)$$

stets die Konvergenz des globalen Diskretisierungsfehlers

$$\lim_{k \rightarrow \infty} e_k(x) = 0 \quad (9.14)$$

folgt.

**Definition 9.28 (Konvergenzordnung)** Ein Einschrittverfahren hat im Rechteck  $R = [x_0, b] \times [r, s]$  die Konvergenzordnung  $p \in \mathbb{N}$ , wenn für alle Anfangswertaufgaben

$$y' = f(x, y), \quad y(c) = v,$$

mit in  $R$  stetig partiell differenzierbarer Funktion  $f$  und Lösung  $y$ , deren Graf  $\{(x, y(x)) : x \in [x_0, b]\}$  ganz in  $R$  verläuft, und für alle  $x \in [x_0, b]$  aus der Bedingung

$$v - y_0^{(h_{k,x})} = \mathcal{O}(h_{k,x}^p) \quad (9.15)$$

stets

$$e_k^{(h_{k,x})} = y(x) - y_k^{(h_{k,x})} = \mathcal{O}(h_{k,x}^p) \quad (9.16)$$

folgt.

Für die Konvergenzaussagen benötigen wir das folgende Lemma.

**Lemma 9.29** Es seien  $\xi_0, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}$  und  $A, B \geq 0$  gegeben mit

$$|\xi_\nu| \leq A|\xi_{\nu-1}| + B, \quad \nu = 1, \dots, n.$$

Dann folgt

$$|\xi_n| \leq A^n |\xi_0| + \begin{cases} \frac{A^n - 1}{A - 1} B, & \text{falls } A \neq 1, \\ nB, & \text{falls } A = 1. \end{cases} \quad (9.17)$$

Weiter folgt für  $A = 1 + \delta$  mit  $\delta > 0$

$$|\xi_n| \leq e^{n\delta} |\xi_0| + \frac{e^{n\delta} - 1}{\delta} B. \quad (9.18)$$

Die folgende Aussage liefert die Äquivalenz der Konsistenz eines Einschrittverfahrens und seiner Konvergenz; d.h. die Konvergenz des lokalen und des globalen Diskretisierungsfehlers gegen Null sind zueinander äquivalent. Wir werden im Anschluss sogar feststellen, dass die Konsistenzordnung und die Konvergenzordnung unter schwachen Voraussetzungen an die Zuwachsfunktion  $\Phi$  übereinstimmen.

**Satz 9.30** Gegeben sei das Rechteck  $R = [x_0, b] \times [r, s]$  und  $h_0 > 0$ . Die Zuwachsfunktion

$$\Phi : R \times [0, h_0] \rightarrow \mathbb{R}$$

sei für alle auf  $R$  stetig partiell differenzierbaren Funktionen  $f$  ebenfalls stetig partiell differenzierbar. Dann sind äquivalent:

- (a) Das Einschrittverfahren mit Zuwachsfunktion  $\Phi$  ist konsistent in  $R$ .  
 (b) Das Einschrittverfahren mit Zuwachsfunktion  $\Phi$  ist konvergent in  $R$ .

**Beweis:**

1. Neben der gestellten AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = v,$$

mit in  $R$  stetig partiell differenzierbarer Funktion  $f$  betrachten wir auch die AWA

$$z' = g(x, z), \quad z(x_0) = v, \quad (9.19)$$

mit der rechten Seite  $g(x, y) = \Phi(x, y, 0)$ . (Beachte: bei konsistenten Verfahren sind beide Aufgaben identisch.) Nach Vor. ist  $g$  stetig partiell differenzierbar, also existieren die Lipschitz-Konstanten  $L_1, L_2, L_3$  mit

$$\begin{aligned} |\Phi(x, y, h) - \Phi(\tilde{x}, y, h)| &\leq L_1|x - \tilde{x}|, \\ |\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \tilde{y}, h)| &\leq L_2|y - \tilde{y}|, \\ |\Phi(x, y, h) - \Phi(x, y, \tilde{h})| &\leq L_3|h - \tilde{h}|. \end{aligned}$$

Nach Satz 9.5 existiert  $z$  und ist eindeutig durch die AWA (9.19) bestimmt. Weiterhin ist  $z$  stetig differenzierbar und

$$L_4 := \max_{x \in [x_0, b]} |z'(x)| < \infty.$$

2. Sei  $0 < h < h_0$  gegeben. Mit  $y_\nu$  werden die Iterierten des Einschrittverfahrens zum Startwert  $y_0$  bezeichnet. Nach dem Mittelwertsatz existiert  $0 < \theta < 1$  mit

$$z(x_{\nu+1}) = z(x_\nu) + hz'(x_\nu + \theta h) = z(x_\nu) + h\Phi(x_\nu + \theta h, z(x_\nu + \theta h), 0).$$

Der Vergleich mit

$$y_{\nu+1} = y_\nu + h\Phi(x_\nu, y_\nu, h)$$

ergibt für den Fehler  $\epsilon_\nu := y_\nu - z(x_\nu)$

$$\begin{aligned} \epsilon_{\nu+1} &= \epsilon_\nu + h(\Phi(x_\nu, y_\nu, h) - \Phi(x_\nu, z(x_\nu), h)) \\ &\quad + h(\Phi(x_\nu, z(x_\nu), h) - \Phi(x_\nu, z(x_\nu), 0)) \\ &\quad + h(\Phi(x_\nu, z(x_\nu), 0) - \Phi(x_\nu + \theta h, z(x_\nu), 0)) \\ &\quad + h(\Phi(x_\nu + \theta h, z(x_\nu), 0) - \Phi(x_\nu + \theta h, z(x_\nu + \theta h), 0)). \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich die Abschätzung

$$\begin{aligned} |\epsilon_{\nu+1}| &\leq |\epsilon_\nu| + L_2h|\epsilon_\nu| + L_3h^2 + \theta L_1h^2 + \theta L_2L_4h^2 \\ &= (1 + L_2h)|\epsilon_\nu| + \underbrace{(L_3 + \theta L_1 + \theta L_2L_4)}_{L^*} h^2. \end{aligned}$$

Mit  $L := L_2$  erhalten wir aus Lemma 9.29

$$|\epsilon_n| \leq e^{nhL}|\epsilon_0| + \frac{e^{nhL} - 1}{hL} h^2 L^* = e^{nhL}|\epsilon_0| + \frac{e^{nhL} - 1}{L} hL^*.$$

3. Halten wir nun  $x \in (x_0, b]$  fest und setzen  $h = h_{n,x} = \frac{x-x_0}{n}$ , so ergibt Teil 2.

$$|\epsilon_n| \leq e^{L(x-x_0)}|\epsilon_0| + \frac{e^{L(x-x_0)} - 1}{L} hL^*. \quad (9.20)$$

4. Zur Beweisrichtung (a) $\implies$ (b): Ist das Verfahren konsistent, so gilt  $\Phi(x, y, 0) = f(x, y)$ . Nach den Festlegungen in Teil 1. ist dann  $z = y$  die Lösung der AWA und  $-\epsilon_n = e_n(x)$  der globale Diskretisierungsfehler. Konvergieren für  $h_{n,x} \rightarrow 0$  die Anfangswerte gegen  $v$  (also  $\epsilon_0 \rightarrow 0$ ), so folgt mit der Ungleichung (9.20)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} e_n(x) = 0.$$

Damit ist die Konvergenz des Verfahrens gezeigt.

5. Zur Beweisrichtung (b) $\implies$ (a): Wir nehmen an,  $f : R \rightarrow \mathbb{R}$  sei eine Funktion, die die Voraussetzungen des Satzes erfüllt und so gewählt ist, dass das Verfahren in  $R$  konvergent, aber nicht konsistent ist. Dann existiert ein Punkt  $(\xi, \eta) \in R$  mit

$$f(\xi, \eta) \neq \Phi(\xi, \eta, 0). \quad (9.21)$$

Wir betrachten die beiden Lösungen wie in Teil 1., jetzt aber zum Anfangswert  $(\xi, \eta)$ . Sei also  $y$  die eindeutige Lösung der AWA

$$y' = f(x, y), \quad y(\xi) = \eta,$$

und  $z$  die eindeutige Lösung der AWA

$$z' = \Phi(x, z, 0), \quad z(\xi) = \eta.$$

Mit  $y_k$  bezeichnen wir wieder die Iterierten des Einschrittverfahrens zum exakten Startwert  $y_0 = \eta (= y(\xi) = z(\xi))$ . Die Voraussetzung der Konvergenz des Verfahrens (mit der Zuwachsfunktion  $\Phi(x, y, h) = \Phi(f, x, y, h)$ ) besagt, dass für alle  $x \in [x_0, b]$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n^{(h_{n,x})} = y(x)$$

gilt. Hier ist  $h_{n,x} = \frac{x-\xi}{n}$  gesetzt. Die der Ungleichung (9.20) entsprechende Abschätzung lautet nun

$$|\epsilon_n| = |y_n^{(h_{n,x})} - z(x)| \leq \frac{e^{L(x-\xi)} - 1}{L} h_{n,x} L^*.$$

(Beachte  $\epsilon_0 = 0$ .) Also gilt ebenso

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n^{(h_{n,x})} = z(x).$$

Damit muss sogar  $y \equiv z$  und  $y' \equiv z'$  gelten. Dies widerspricht aber der Annahme (9.21), wie durch Einsetzen von  $\xi$  in die Gleichungen  $y' = f(x, y)$  und  $z' = \Phi(x, z, 0)$  bestätigt wird.  $\square$

**Satz 9.31** Die Zuwachsfunktion  $\Phi$  sei stetig auf  $R \times [0, h_0]$  und genüge dort einer Lipschitz-Bedingung bzgl.  $y$

$$|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \tilde{y}, h)| \leq L|y - \tilde{y}|, \quad (x, y, h), (x, \tilde{y}, h) \in R \times [0, h_0].$$

Dann gilt für alle Schrittweiten  $0 < h \leq h_0$  und die zugehörigen Iterierten  $y_n^{(h)}$  des Einschrittverfahrens zum Startwert  $y_0^{(h)}$

$$|y(x_n^{(h)}) - y_n^{(h)}| \leq e^{L(x_n^{(h)} - x_0)} |y(x_0) - y_0^{(h)}| + \frac{e^{L(x_n^{(h)} - x_0)} - 1}{L} R_h,$$

wobei  $R_h := \sup_{(x,y) \in R} r(x, y, h)$  eine obere Schranke für den lokalen Diskretisierungsfehler ist. Insbesondere hat das Verfahren die Konvergenzordnung  $p$ , wenn es die Konsistenzordnung  $p$  besitzt.

**Beweis:** Die Schrittweite  $h$  sei fest. Unter Verzicht auf den oberen Index ( $h$ ) setzen wir  $\epsilon_\nu = y(x_\nu) - y_\nu$  und erhalten

$$\begin{aligned}\epsilon_{\nu+1} &= y(x_{\nu+1}) - y(x_\nu) + y(x_\nu) - y_{\nu+1} \\ &= y(x_{\nu+1}) - y(x_\nu) + y(x_\nu) - y_\nu - h\Phi(x_\nu, y_\nu, h) \\ &= \epsilon_\nu + \underbrace{y(x_{\nu+1}) - y(x_\nu)}_{=h\Delta(x_\nu, y(x_\nu), h)} - h\Phi(x_\nu, y_\nu, h)\end{aligned}$$

(Hier betrachtet man den exakten relativen Zuwachs  $\Delta$  zur Schrittweite  $h$  im Punkt  $(x_\nu, y(x_\nu))$ .)  
Hieraus folgt mit dem lokalen Diskretisierungsfehler  $r = \Delta - \Phi$

$$\epsilon_{\nu+1} = \epsilon_\nu + h(r(x_\nu, y(x_\nu), h) + \Phi(x_\nu, y(x_\nu), h) - \Phi(x_\nu, y_\nu, h)).$$

Mit der Lipschitz-Bedingung an  $\Phi$  ergibt sich

$$|\epsilon_{\nu+1}| \leq |\epsilon_\nu| + h|r(x_\nu, y(x_\nu), h)| + hL\epsilon_\nu \leq (1 + hL)|\epsilon_\nu| + hR_h.$$

Wieder mit Lemma 9.29 folgt hieraus

$$|\epsilon_n| \leq e^{nhL}|\epsilon_0| + \frac{e^{nhL} - 1}{hL} hR_h.$$

Einsetzen von  $nh = x_n - x_0$  ergibt die Behauptung.  $\square$

**Bemerkung 9.32** (a) Die Umkehrung

$$\text{Konvergenzordnung } p \implies \text{Konsistenzordnung } p$$

gilt ebenfalls. Der (längere) Beweis ist z.B. in Stoer-Bulirsch, *Einführung in die Numerische Mathematik II*, zu finden.

(b) Die Lipschitzkonstante  $L_\Phi$  der Zuwachsfunktion hängt in der Regel von der Lipschitzkonstanten  $L_f$  der Funktion  $f$  ab. Dies soll anhand des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens verdeutlicht werden. Wir setzen  $K_i := K_i(x, y, h)$ ,  $\tilde{K}_i = K_i(x, \tilde{y}, h)$  und erhalten aus der Definition der Steigungen

$$\begin{aligned}|K_1 - \tilde{K}_1| &\leq L_f|y - \tilde{y}|, \\ |K_2 - \tilde{K}_2| &\leq L_f|y - \tilde{y} + \frac{h}{2}(K_1 - \tilde{K}_1)| \leq L_f(1 + \frac{h}{2}L_f)|y - \tilde{y}|, \\ |K_3 - \tilde{K}_3| &\leq L_f|y - \tilde{y} + \frac{h}{2}(K_2 - \tilde{K}_2)| \leq L_f(1 + \frac{h}{2}L_f(1 + \frac{h}{2}L_f))|y - \tilde{y}|, \\ |K_4 - \tilde{K}_4| &\leq L_f|y - \tilde{y} + h(K_3 - \tilde{K}_3)| \leq L_f(1 + hL_f(1 + \frac{h}{2}L_f(1 + \frac{h}{2}L_f)))|y - \tilde{y}|,\end{aligned}$$

also

$$|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \tilde{y}, h)| \leq \bar{L}_f|y - \tilde{y}|$$

mit einer entsprechenden Konstanten  $\bar{L}_f$ . In der Regel wird man eine Schrittweite  $h$  verwenden mit  $hL_f \ll 1$ , also ergibt sich  $L_\Phi \approx L_f$ . Diese Annahme an die Schrittweite ist nach den obigen Betrachtungen sinnvoll, da der Faktor  $e^{khL}$  in den Fehlerabschätzungen sonst sehr groß wird.

## 9.6 Implizite Runge-Kutta-Verfahren

Aus der Beziehung

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx$$

erhält man durch Anwendung der Trapezregel auf das Integral

$$y(x_{k+1}) \approx y_{k+1} = y_k + \frac{x_{k+1} - x_k}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})].$$

Dies stellt eine implizite Gleichung für  $y_{k+1}$  dar, die bereits in Fixpunktform formuliert ist. Unter geeigneten Voraussetzungen an die Funktion  $f$  und die Schrittweite  $h$  kann die Konvergenz des allgemeinen Iterationsverfahrens (Fixpunktiteration) gesichert werden. Man wird dann in jedem Schritt des Einschrittverfahrens zuerst eine Näherung  $y_{k+1}^{(0)}$  an  $y(x_{k+1})$  mit einem einfachen expliziten Verfahren bestimmen ("Prädiktor" genannt) und sodann mit diesem Wert als Startwert wenige Schritte der Fixpunktiteration durchführen, um den neuen Wert  $y_{k+1}$  des Verfahrens zu erhalten. Die gesamte Methode wird als *Prädiktor-Korrektor-Methode* bezeichnet.

**Algorithmus 9.33 (Implizite Trapez-Methode mit fester Schrittzahl)** Zur AWA  $y' = f(x, y)$ ,  $y(x_0) = v$ , Schrittweite  $h \neq 0$  und Schrittzahl  $N \geq 1$  für die Fixpunktiteration setze  $y_0 := v$ , und für  $k = 0, 1, \dots$

$$\begin{aligned} x_{k+1} &:= x_k + h, \\ \text{Startwert} & \quad y_{k+1}^{(0)}, \quad \text{z.B. } y_{k+1}^{(0)} := y_k + hf(x_k, y_k), \\ \text{für } t = 1, 2, \dots, N & \quad y_{k+1}^{(t)} := y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1}^{(t)})], \\ y_{k+1} &:= y_{k+1}^{(t)}. \end{aligned}$$

Der obige Algorithmus mit der Schrittzahl  $N = 1$  ist gerade die (explizite) Methode von Heun der Konvergenzordnung 2. Deshalb ist es sinnvoll, als Prädiktor ein Verfahren der niedrigeren Konvergenzordnung 1 zu verwenden.

**Bemerkung 9.34** (a) Durch die Wahl der Schrittweite  $h$  kann die Kontraktionseigenschaft der Fixpunktiteration sichergestellt werden: Ist  $L$  eine Lipschitz-Konstante von  $f$ , so ist für hinreichend kleine Schrittweiten  $q := \frac{hL}{2} < 1$  die Kontraktionszahl der Fixpunktiteration.

(b) Der lokale Diskretisierungsfehler der Methode wird definiert als

$$r(x, y, h) := \frac{z(x+h) - y}{h} - \frac{1}{2} [f(x, y) + f(x+h, z(x+h))],$$

wobei  $z$  wieder die exakte Lösung der AWA zum Anfangswert  $z(x) = y$  ist. Für die implizite Trapezmethode mit stetig differenzierbarem  $f$  gilt  $r(x, y, h) = \mathcal{O}(h^2)$ , also besitzt sie die Konsistenzordnung 2. Ganz analog zum Konvergenzsatz 9.31 zeigt man, dass die globalen Diskretisierungsfehler die Differenzenungleichung

$$|y(x_{k+1}^{(h)}) - y_{k+1}^{(h)}| \leq \underbrace{\frac{1+hL}{1-hL}}_{=: 1+hK} |y(x_k^{(h)}) - y_k^{(h)}| + \frac{|r(x_k, y_k, h)|}{1-hL}$$

erfüllen. Falls also  $\boxed{hL < 1}$  gilt, ist  $hK > 0$  und Lemma 9.29 ergibt die Abschätzung

$$|y(x_n^{(h)}) - y_n^{(h)}| \leq e^{K(x_n^{(h)} - x_0)} |y(x_0) - y_0^{(h)}| + \frac{e^{K(x_n^{(h)} - x_0)} - 1}{K(1-hL)} R_h,$$

wobei  $R_h$  eine obere Schranke von  $|r(x, y, h)|$  auf dem Rechteck ist.

- (c) Die implizite Trapezmethode besitzt sehr vorteilhafte Stabilitätseigenschaften (“absolute Stabilität”, s. Kapitel 11) und ist daher für die Untersuchung des *Langzeitverhaltens* von Lösungen (im Intervall  $[x_0, \infty)$ ) von Bedeutung.

Die Klasse der  $R$ -stufigen impliziten Runge-Kutta-Verfahren ist wie folgt definiert.

**Definition 9.35** *Mit den Steigungen*

$$K_r(x, y, h) := f(x + ha_r, y + h \sum_{\nu=1}^R b_{r\nu} K_\nu(x, y, h)) \quad 1 \leq r \leq R, \quad (9.22)$$

die die (innere Konsistenz-)Bedingung

$$a_r = \sum_{\nu=1}^R b_{r\nu}, \quad 1 \leq r \leq R, \quad (9.23)$$

erfüllen, definiert die Zuwachsfunktion

$$\Phi(x, y, h) := \sum_{r=1}^R c_r K_r(x, y, h)$$

ein implizites  $R$ -stufiges Runge-Kutta Verfahren.

Die Anordnung der Parameter erfolgt wieder nach dem Schema

$$\begin{array}{c|cccc} a_1 & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1,R} \\ \vdots & & \vdots & & \\ a_R & b_{R1} & b_{R2} & \cdots & b_{R,R} \\ \hline & c_1 & c_2 & \cdots & c_R. \end{array}$$

In der ersten Spalte stehen aufgrund der inneren Konsistenzbedingungen die Zeilensummen der Matrix  $[b_{r\nu}]$ . Die Konsistenzaussage in Lemma 9.22 bleibt wörtlich erhalten. Ebenso bestimmt die Konsistenzordnung auch die Konvergenzordnung des Verfahrens.

**Bemerkung 9.36** (a) Die  $R(R+1)$  freien Parameter  $b_{r\nu}, c_r$  lassen sich so festlegen, dass die Konsistenzordnung und Konvergenzordnung  $2R$  erzielt wird (Butcher, 1963).

- (b) Die Lösung des (i.a. nichtlinearen) impliziten Gleichungssystems für die Steigungen  $K_1, \dots, K_R$  kann mit der Fixpunktiteration erfolgen. Hierzu ist die Schrittweite  $h$  so zu wählen, dass die Kontraktionszahl

$$q \leq hL \max_{1 \leq i \leq R} \sum_{j=1}^R |b_{ij}| < 1$$

erfüllt. Der Startwert (Prädiktor) für die Fixpunktiteration wird mit einem expliziten Verfahren kleinerer Konsistenzordnung berechnet. Da die Fixpunktiteration häufiges Auswerten der Funktion  $f$  erfordert, zahlt sich die Ersparnis durch die Verwendung einer größeren Schrittweite  $h$  aufgrund der höheren Konvergenzordnung des impliziten Verfahrens meistens nicht aus. Wie bei der Trapezmethode haben einige implizite Runge-Kutta-Verfahren aber Vorteile hinsichtlich der Stabilität.

**Beispiel 9.37** (a) Wir wollen ein einstufiges implizites Runge-Kutta Verfahren der Konsistenzordnung 2 bestimmen. Mit den Parametern  $a := a_1, c_1$  wird  $b_{11} = a_1$  gesetzt.

Wir erhalten (unter Weglassen der Argumente  $(x, y)$ ) und bei 2-mal stetig partiell differenzierbarem  $f$

$$\begin{aligned} K_1 &= f(x + ah, y + ahK_1) \\ &= f + ah(f_x + K_1 f_y) + \frac{a^2 h^2}{2} (f_{xx} + 2K_1 f_{xy} + K_1^2 f_{yy}) + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Andererseits liefert Taylorentwicklung von  $K_1$

$$K_1 = \alpha_0 + \alpha_1 h + \alpha_2 h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Vergleich der Koeffizienten ergibt

$$\alpha_0 = f, \quad \alpha_1 = a \underbrace{(f_x + f_y f)}_{=: F}, \quad \alpha_2 = a^2 (F f_y + \frac{1}{2} \underbrace{(f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2)}_{=: G}).$$

Die Zuwachsfunktion  $\Phi = c_1 K_1$  liefert den lokalen Diskretisierungsfehler

$$r(x, y, h) = (1 - c_1)f + \left(\frac{1}{2} - ac_1\right)hF + \left\{ \left(\frac{1}{6} - a^2 c_1\right)F f_y + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2} a^2 c_1\right)G \right\} h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Die Forderung der Konsistenzordnung 2 ergibt die Lösung  $c_1 = 1$ ,  $a = \frac{1}{2}$ , also das einstufige implizite Verfahren

$$\begin{aligned} K_1 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2} K_1\right), \\ y_{k+1} &= y_k + h K_1. \end{aligned}$$

(b) Ein 2-stufiges implizites Verfahren der Konsistenzordnung 4 ist gegeben durch

$$\begin{aligned} K_1 &= f\left(x + \frac{3 - \sqrt{3}}{6}h, y + \frac{1}{4}hK_1 + \frac{3 - 2\sqrt{3}}{12}hK_2\right), \\ K_2 &= f\left(x + \frac{3 + \sqrt{3}}{6}h, y + \frac{3 + 2\sqrt{3}}{12}hK_1 + \frac{1}{4}hK_2\right), \\ \Phi &= \frac{1}{2}(K_1 + K_2). \end{aligned}$$

Hängt  $f$  nicht von  $y$  ab, so entspricht dieses Verfahren der 2-punktigen Gauss-Formel.

## 9.7 Schrittweitenkontrolle

Große Schrittweiten  $h$  haben den Vorteil, dass man mit wenigen Schritten Näherungen der Lösung  $y(x)$  an Stellen bekommt, die weit vom Anfangspunkt  $x_0$  entfernt sind. Dadurch spart man einerseits Rechenzeit, reduziert aber auch den Einfluss der Rundungsfehler bei Rechnung mit endlicher Stellenzahl (Maschinengenauigkeit  $\epsilon_{\text{ps}}$ ). Andererseits führt zu großes  $h$  auf einen zu großen globalen Fehler  $y(x_n) - y_n$ .

**Beispiel 9.38** Die AWA

$$y' = -200xy^2, \quad y(0) = 1,$$

hat die exakte Lösung  $y(x) = \frac{1}{1+100x^2}$ . Um Näherungen von  $y(2) = 1/401$  zu erhalten, verwenden wir das klassische Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung 4 und das Verfahren von Heun (Ordnung 2) zu verschiedenen Schrittweiten und berechnen den Fehler an der Stelle  $x = 2$ .

$h$	Runge-Kutta 4. Ordnung		Heun 2. Ordnung	
	Auswertungen von $f$	Fehler	Auswertungen von $f$	Fehler
$10^{-1}$	80	$0.21 \cdot 10^{-5}$	40	$0.25 \cdot 10^{-2}$
$10^{-2}$	800	$-0.20 \cdot 10^{-9}$	400	$-0.65 \cdot 10^{-6}$
$10^{-3}$	8000	$-0.19 \cdot 10^{-13}$	4000	$-0.62 \cdot 10^{-8}$
$10^{-4}$	80000	$-0.12 \cdot 10^{-16}$	40000	$-0.62 \cdot 10^{-10}$
$10^{-5}$	800000	$-0.12 \cdot 10^{-16}$	400000	$-0.62 \cdot 10^{-12}$

Bei den expliziten Einschrittverfahren steigt die Rechenzeit linear mit der Anzahl der Auswertungen von  $f$ , also reziprok zur Schrittweite. Man erkennt die Konvergenzordnungen anhand der globalen Fehler bei  $x = 2$ , da die Verkleinerung der Schrittweite um den Faktor  $1/10$  jeweils eine Verkleinerung des Fehlers um  $10^{-4}$  (Runge-Kutta) bzw.  $10^{-2}$  (Heun) bewirkt. Typisch tritt dieser Effekt nur bei "mittleren" Schrittweiten auf und wird bei zu großem oder zu kleinem  $h$  von anderen Fehlern überdeckt (z.B. Rundungsfehler, Terme höherer Ordnung in  $h$ ).

In der Praxis wird man durch Anpassen der Schrittweite  $h$  in jedem Iterationsschritt versuchen, die Anzahl der Schritte zu kontrollieren. Dann hat das Einschrittverfahren zur Zuwachsfunktion  $\Phi$  die Form

$$x_0 := c, \quad y_0 := v,$$

Für  $k = 0, 1, \dots$

bestimme die Schrittweite  $h_k$  und setze

$$x_{k+1} := x_k + h_k, \quad y_{k+1} := y_k + h_k \Phi(x_k, y_k, h_k).$$

Für die Wahl von  $h_k$  gibt es unterschiedliche Überlegungen, die z.T. heuristische Argumente benutzen. Die Abschätzung im Beweis der Konvergenzordnung expliziter Verfahren zeigt, dass  $\epsilon_k := y(x_k) - y_k$  die Gleichung

$$\epsilon_{k+1} = \epsilon_k + h_k (r(x_k, y(x_k), h_k) + \Phi(x_k, y(x_k), h_k) - \Phi(x_k, y_k, h_k))$$

erfüllt. Wesentlich für die Anwendung des Lemmas 9.29 sind daher

- die lokale Lipschitzkonstante von  $\Phi$  in der Umgebung des Punktes  $(x_k, y_k)$
- die Größe des lokalen Diskretisierungsfehlers in der Umgebung desselben Punktes (bei Annahme  $y_k \approx y(x_k)$ ).
- Eigentlich sind auch die Vorzeichen der einzelnen Terme wichtig, da evtl. wesentlich bessere Abschätzungen als durch die Dreiecksungleichung erzielt werden können (mehr dazu später).

Gelingt es, den lokalen Diskretisierungsfehler durch die Wahl der Schrittweite  $h_k$  unterhalb einer Toleranz  $TOL$  zu halten, also

$$|r(x_k, y_k, h_k)| \leq TOL, \quad (9.24)$$

so tritt die Konstante  $TOL$  an die Stelle des Parameters  $R_h$  in Satz 9.31. Man wird  $TOL$  deutlich größer als die Maschinengenauigkeit  $\mathbf{eps}$  setzen, etwa  $TOL = 10^{-6}$  bei doppelt genauer Gleitpunktarithmetik.

Ein guter Schätzwert für den lokalen Diskretisierungsfehler kann mit wenig Rechenaufwand durch den Vergleich von zwei Näherungen für  $y(x_{k+1})$  erzielt werden. Die Zahl der zusätzlich benötigten Auswertungen von  $f$  soll möglichst gering sein. Exemplarisch sollen zwei Ansätze erläutert werden. Dabei wird ein Einschrittverfahren der Konsistenzordnung  $p \geq 1$  vorausgesetzt.

**Beispiel 9.39** *Methode der Schrittweithalbierung:* Wir setzen ein Einschrittverfahren voraus, dessen lokaler Diskretisierungsfehler die Form

$$r(x_k, y_k, h_k) = \underbrace{\tau(x_k, y_k)}_{\text{Hauptteil}} h_k^p + \mathcal{O}(h_k^{p+1})$$

besitzt. Dann werden mit einer Schätzschriftweite  $H$  (etwa  $H = 2h_{k-1}$ ) vorläufige Werte

$$\left. \begin{aligned} y_{k+1}^H &= y_k + H\Phi(x_k, y_k, H), & (1 \text{ Schritt mit Schrittweite } H) \\ y_{k+1/2}^{H/2} &= y_k + \frac{H}{2}\Phi(x_k, y_k, \frac{H}{2}) \\ y_{k+1}^{H/2} &= y_{k+1/2}^{H/2} + \frac{H}{2}\Phi(x_k + \frac{H}{2}, y_{k+1/2}^{H/2}, \frac{H}{2}) \end{aligned} \right\} (2 \text{ Schritte mit Schrittweite } \frac{H}{2})$$

zum vorläufigen  $x$ -Wert  $x_{k+1} := x_k + H$  berechnet. Unter Ausnutzung der Beziehung

$$\tau(x_k + \frac{H}{2}, y(x_k + \frac{H}{2})) = \tau(x_k, y_k) + \mathcal{O}(H)$$

wird durch

$$\tilde{\tau} := \frac{y_{k+1}^{H/2} - y_{k+1}^H}{H^{p+1}(1 - 2^{-p})}$$

eine brauchbare Näherung an den Hauptteil  $\tau(x_k, y_k)$  erzielt.

Nun ist also

$$r(x_k, y(x_k), h) = \tilde{\tau}h^p + \mathcal{O}(h^{p+1})$$

für  $0 < h \leq H$  anzunehmen. Um die Beziehung  $r(x_k, y(x_k), h) \approx TOL$  zu erzielen, setzt man daher zunächst

$$\tilde{h}_k := \left( \frac{TOL}{|\tilde{\tau}|} \right)^{1/p}.$$

Dann verfährt man wie folgt:

1. Falls  $\tilde{h}_k \ll H/2 = h_{k-1}$  gilt (z.B.  $\tilde{h}_k \leq H/4$ ), ist die Schätzung für  $r(x_k, y(x_k), h)$  zu grob. Wiederhole die Berechnung von  $\tilde{\tau}$  mit der neuen Schätzschriftweite  $H = 2\tilde{h}_k$ . (Beende die Rechnung, falls  $H < h_{\min}$ !. In diesem Fall vermutet man, dass die Lösung eine Singularität aufweist.)
2. Andernfalls setze  $h_k := H$ ,  $x_{k+1} := x_k + h_k$  und  $y_{k+1} := y_{k+1}^{H/2}$  und fahre mit dem nächsten Schritt genau so fort.

**Beispiel 9.40** *Methode der eingebetteten Einschrittverfahren:* Wir verwenden zwei Einschrittverfahren mit Zuwachsfunktionen  $\Phi_A$  und  $\Phi_B$  und Konsistenzordnungen  $1 \leq p_A < p_B$ . Die Verfahren werden so ausgewählt, dass die Berechnungen von  $\Phi_B$  nur noch wenige zusätzliche Auswertungen von  $f$  erfordern. Beispiele von passenden Verfahren sind

- (a)  $\Phi_A$  = verbesserte Polygonzugmethode,  $\Phi_B$  = dreistufige Methode von Kutta der Ordnung 3.  $\Phi_B$  verwendet eine zusätzliche Auswertung von  $f$  zur Berechnung der Steigung  $K_3$ .
- (b)  $\Phi_A$  = Methode von Heun zweiter Ordnung,  $\Phi_B$  = dreistufiges Runge-Kutta Verfahren mit  $K_1 = f(x, y)$ ,  $K_2 = f(x + h, y + hK_1)$ , wie bei der Methode von Heun, und

$$\begin{aligned} K_3 &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{4}(K_1 + K_2)\right), \\ y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}(K_1 + K_2 + 4K_3). \end{aligned}$$

- (c) Weitere eingebettete Verfahren 4. Ordnung in Verfahren 5. Ordnung wurden von England (1969) und Fehlberg (1964–1970) vorgeschlagen. Siehe H. R. Schwarz, *Numerische Mathematik* (Bibl. Sign. b350/Schw).

Bezeichne wieder  $H$  die vorgesehene Schätzschrittweite (etwa  $H = h_{k-1}$ ). Dann werden die Zuwächse

$$\Phi_A(x_k, y_k, H), \quad \Phi_B(x_k, y_k, H),$$

berechnet und der lokale Diskretisierungsfehler der Methode  $\Phi_A$  geschätzt durch

$$r_A(x_k, y_k, H) \approx \rho := \Phi_B(x_k, y_k, H) - \Phi_A(x_k, y_k, H).$$

Dann verfährt man wie folgt:

1. Falls  $\rho > TOL$  gilt, halbiere  $H$  und berechne damit den neuen Schätzwert für den Diskretisierungsfehler. (Beende die Rechnung, falls  $H < h_{\min}$ !, siehe oben.)
2. Falls in  $\nu$  (etwa  $\nu = 3$ ) aufeinanderfolgenden Schritten des Einschrittverfahrens  $\rho < TOL/4$  gilt, verdopple  $H$  und berechne damit den neuen Schätzwert für den Diskretisierungsfehler. (Zufällige Übereinstimmung von  $\Phi_A$  und  $\Phi_B$  soll durch  $\nu > 1$  unberücksichtigt bleiben.)
3. Im Bereich  $TOL/4 \leq \rho \leq TOL$  wird  $x_{k+1} := x_k + H$ ,  $y_{k+1} := y_k + H\Phi_A(x_k, y_k, H)$  akzeptiert.