

Vergleich der Integrationsmethoden und der Methoden des maschinellen Lernens für gewöhnliche Differentialgleichungen

Alexandro Jedaidi

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Problemstellung	2
2.1	Gewöhnliche Differentialgleichungen und Anfangswertprobleme	2
2.1.1	Lineare gewöhnliche Differentialgleichungen	3
2.2	Existenz und Eindeutigkeit	3
2.2.1	Existenz von Lösungen	4
2.2.2	Eindeutigkeit von Lösungen	5
2.3	Abhängigkeit der Lösungen von den Daten	7
3	Numerischer Lösungsansatz	10
3.1	Einschrittverfahren	10
3.1.1	Konsistenz	10
3.2	Runge-Kutta-Verfahren	12
3.2.1	Konsistenz	14
3.2.2	Schrittweitensteuerung	16
3.3	Mehrschrittverfahren	17
3.3.1	Konsistenz und Konvergenz	18
3.4	Verfahren für steife Differentialgleichungen	20
4	neuronale Netze	21
4.1	Struktur neuronaler Netze	21
4.1.1	Forwardpropagation	22
4.1.2	Backwardpropagation	22
4.1.3	Gradientenverfahren	23
4.1.4	Verschwindender und explodierender Gradient	24
4.1.5	Batch training	25
4.2	Prinzip der Lösungspakete	25
4.2.1	curriculum learning	27
4.3	Gewichtsinitialisierung	27
4.4	Fortsetzen einer Wahrscheinlichkeitsverteilung	28
5	Anwendungsbeispiele	29
	Abbildungsverzeichnis	30

Zusammenfassung

Bachelorarbeit WiSe 2021/2022

1 Einleitung

2 Problemstellung

In diesem Abschnitt wird die Theorie zu den gewöhnlichen Differentialgleichungen erläutert. Dieser orientiert sich hauptsächlich an den Arbeiten [1], [2] und [3]. Folgendes ist Grundlage für das Verständnis der Schlussfolgerungen und Ergebnisse dieser Arbeit.

2.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen und Anfangswertprobleme

Definition 2.1.1 Ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen m -ter Ordnung hat die Form

$$x^{(m)} = f(t, x, x', x'', \dots, x^{(m-1)}) \quad (2.1)$$

mit der gegebenen Funktion $f : D \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \dots \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, wobei $D \subseteq \mathbb{R}$ ein Zeitintervall ist. Eine dazugehörige Lösung (falls existent) $\hat{x} : D \rightarrow \mathbb{R}$ ist eine m -mal differenzierbare Funktion und erfüllt die Bedingung

$$\hat{x}^{(m)} = f(t, \hat{x}, \hat{x}', \hat{x}'', \dots, \hat{x}^{(m-1)}).$$

Definition 2.1.2 Ein Anfangswertproblem für eine Differentialgleichung (2.1) mit gegebenen Anfangswerten $x_{0,1}, \dots, x_{0,m} \in \mathbb{R}^n$ hat die Form

$$x^{(m)} = f(t, x, x', x'', \dots, x^{(m-1)}), \quad x(t_0) = x_{0,1}, \quad x'(t_0) = x_{0,2}, \dots, x^{(m-1)}(t_0) = x_{0,m}. \quad (2.2)$$

Eine Lösung des Problems $\hat{x} : D \rightarrow \mathbb{R}$ muss also zusätzlich zu (2.1) auch die Anfangswertbedingungen (vgl. (2.2)) erfüllen.

Es ist möglich jede gewöhnliche Differentialgleichung m -ter Ordnung zu einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung umzuwandeln. Dies erleichtert uns in späteren Abschnitten Aussagen über die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung(en) \hat{x} zu treffen. Betrachte hierzu eine gewöhnliche Differentialgleichung m -ter Ordnung (vgl. (2.1)). Diese ist mit Hilfe der Funktionen $x_j : D \rightarrow \mathbb{R}$ für $j \in \{1, \dots, m\}$ äquivalent zu einem System erster Ordnung mit m Gleichungen:

$$\begin{aligned} x_1' &= x_2 \\ x_2' &= x_3 \\ &\vdots \\ x_{m-1}' &= x_m \\ x_m' &= f(t, x_1, x_2, x_3, \dots, x_m). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Für ein AWP (2.2) gilt zusätzlich:

$$\begin{aligned} x_1(t_0) &= x_{0,1} \\ x_2(t_0) &= x_{0,2} \\ &\vdots \\ x_{m-1}(t_0) &= x_{0,m-1} \\ x_m(t_0) &= x_{0,m}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Definition 2.1.3 Ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen (2.1) heißt autonom, wenn die rechte Seite f nicht explizit von der unabhängigen Variable t abhängt. Das bedeutet, es gilt

$$x^m = f(x, x', x'', \dots, x^{(m-1)})$$

auf ganz D .

In ähnlichem Stil der Ordnungsreduktion können wir auch eine nichtautonome Differentialgleichung zu einem autonomen System gewöhnlicher Differentialgleichungen umwandeln. Dazu führen wir eine neue Variable z ein, für die gilt

$$z' = 1, \quad z(t_0) = t_0.$$

Dann ist das Anfangswertproblem (2.2) äquivalent zu dem autonomen Anfangswertproblem $m+1$ -ter Ordnung

$$\begin{aligned} z' &= 1, & z(t_0) &= t_0 \\ x' &= f(z, x), & x(t_0) &= x_0. \end{aligned}$$

Die Lösung hat also die Form $\begin{bmatrix} t \\ x(t) \end{bmatrix}$.

2.1.1 Lineare gewöhnliche Differentialgleichungen

Wir definieren in diesem Abschnitt noch eine Sonderform einer gewöhnlichen Differentialgleichung.

Definition 2.1.4 Ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen m -ter Ordnung mit der Form

$$x^m(t) = \sum_{i=0}^{m-1} a_i(t)x^i(t) + g(t). \quad (2.5)$$

heißt lineares System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Dabei sind $a_k : D \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ und $g : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetige Funktionen.

Falls $g \equiv 0$, so nennt man (2.5) homogen, sonst inhomogen.

Die Lösung einer linearen Differentialgleichung erster Ordnung erfüllt also die Gleichung

$$x'(t) = A(t)x(t) + g(t), \quad (2.6)$$

wobei $A : D \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ und $g : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig sind. Wir definieren nun steife lineare Differentialgleichungen unter der Bedingung dass die Koeffizienten A konstant, also unabhängig von t sind.

Definition 2.1.5 Eine lineare Differentialgleichung (2.5) mit $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $b(t) \in \mathbb{R}^n$ heißt steif, wenn

$$1. \quad \operatorname{Re}(\lambda_j(A)) < 0, \quad \text{für alle Eigenwerte } \lambda_j(A) \text{ von } A, \quad (2.7)$$

$$2. \quad \min_{1 \leq j \leq n} \operatorname{Re}(\lambda_j(A)) \ll \max_{1 \leq j \leq n} \operatorname{Re}(\lambda_j(A)). \quad (2.8)$$

Wir werden später ein Verfahren betrachten, welches sich speziell dafür eignet, eine steife gewöhnliche Differentialgleichung zu lösen.

2.2 Existenz und Eindeutigkeit

In diesem Abschnitt betrachten wir ein Anfangswertproblem erster Ordnung

$$\begin{aligned} x' &= f(t, x) \\ x(t_0) &= x_0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

und zeigen, unter welchen Bedingungen der rechten Seite $f(t, x(t))$ eine Lösung existiert und ggf. eindeutig ist.

2.2.1 Existenz von Lösungen

Hier beweisen wir einen Satz, welcher zeigt, dass die Stetigkeit der rechten Seite f für die Existenz einer Lösung ausreicht. Dazu benötigen wir noch einen Satz aus der Funktionalanalysis.

Satz 2.2.1 (Fixpunktsatz von Schauder, 2. Version) *Sei M eine nichtleere, abgeschlossene und konvexe Teilmenge eines Banachraums X und $A : M \rightarrow M$ stetig. Dann besitzt A wenigstens einen Fixpunkt x , sofern die Bildmenge $A(M)$ relativ kompakt ist.*

Beweis. [4, S. 13, 14]

In dieser Arbeit wird mit $\|\cdot\|_2$ die euklidische Norm $\|x\|_2 = (\sum_{i=0}^n (x_i)^2)^{\frac{1}{2}}$ beschreiben. Der Beweis des folgenden Satzes beruht auf Überlegungen von H. Heuser in [5].

Satz 2.2.2 (Existenzsatz von Peano, quantitative und qualitative Version) *Quantitative Version: Seien*

$$\mathcal{G} = \{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n : |t - t_0| \leq \alpha, \quad \|x - x_0\|_2 \leq \beta, \quad \alpha, \beta > 0\}$$

und $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig. Dann besitzt das Anfangswertproblem (2.9) mindestens eine Lösung \hat{x} auf dem Intervall $D = \{t_0 - a, t_0 + a\}$, wobei

$$a = \min\{\alpha, \frac{\beta}{M}\}, \quad M = \max_{(t,y) \in \mathcal{G}} \|f(t, x)\|_2.$$

Qualitative Version: Seien $\mathcal{G} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ offen und $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig. Dann besitzt das Anfangswertproblem (2.9) für jedes Paar $(t_0, x_0) \in \mathcal{G}$ mindestens eine lokale Lösung, d.h., es existiert ein $a = a(t_0, x_0) > 0$, sodass das Anfangswertproblem (2.9) auf dem Intervall $[t_0 - a, t_0 + a]$ mindestens eine Lösung \hat{x} hat.

Beweis. (Quantitative Lösung) Sei $J \subset D$ abgeschlossen mit $t_0 \in J$ und $\hat{x}(t)$ eine Lösung von (2.9). Da die rechte Seite f auf J stetig ist, gilt nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung:

$$\hat{x}(t) = \hat{x}_0 + \int_{t_0}^t f(s, \hat{x}(s)) ds \quad \text{für alle } t \in J.$$

Außerdem gilt für jede auf J stetige Funktion $\hat{x}(t)$, die obige Gleichung erfüllt, dass sie auf J differenzierbar ist. Dies bedeutet, dass eine auf J stetige Funktion $\hat{x}(t)$ löst genau dann das Anfangswertproblem (2.9), wenn es die obige Integralgleichung erfüllt. für eine auf J stetige Funktion $\hat{x}(t)$ gilt also:

$$\hat{x}(t) \text{ löst das AWP (2.9)} \Leftrightarrow \hat{x}(t) \text{ erfüllt obige Gleichung.}$$

Betrachte nun die Menge $K := \{x \in C(D) : \|x(t) - x_0\|_2 \leq \beta \text{ für alle } t \in D\}$, wobei $C(D) = \{f : f(t) \text{ ist stetig für alle } t \in D\}$. K ist offensichtlich nicht leer (Betrachte bspw. die konstante Funktion $x \equiv x_0$). Jedem $x \in K$ wird nun eine Funktion $Ax \in C(D)$ zugewiesen mit der Definition

$$(Ax)(t) := x_0 + \int_{t_0}^t f(s, x(s)) ds \quad \text{für alle } t \in D.$$

Also löst Ax nach obiger Äquivalenz das Anfangswertproblem auf D . Außerdem gilt:

$$\begin{aligned} \|(Ax)(t) - x_0\|_2 &= \left\| \int_{t_0}^t f(s, x(s)) ds \right\|_2 \\ &\leq \int_{t_0}^t \|f(s, x(s))\|_2 ds \\ &\leq |t - t_0| \max_{(t,y) \in \mathcal{G}} \|f(t, x)\|_2 \\ &\leq |t_0 + a - t_0| M \\ &\leq \frac{\beta}{M} M = \beta \quad \text{für alle } t \in D \end{aligned}$$

Für A wird hier jedoch die Operatornorm $\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|$ benutzt. Das bedeutet, dass $Ax \in K$, bzw. $AK = K$. Nun können wir die hergeleitete Äquivalenz umformulieren: Für eine Funktion $\hat{x} \in K$ gilt

\hat{x} löst auf D das Anfangswertproblem (2.9) $\Leftrightarrow \hat{x}$ ist ein Fixpunkt der Abbildung $A : K \rightarrow K$.

Dazu nutzen wir den Fixpunktsatz von Schauder. Betrachte den Banachraum $C(D)$ mit der Maximumsnorm

$$\|x\|_\infty := \max_{t \in D} \|x(t)\|_2.$$

Sei $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset K$ eine konvergente Folge mit Grenzwert $x \in C(D)$. Dann ist

$$\|x - x_0\|_2 = \left\| \lim_{n \rightarrow \infty} (x_n) - x_0 \right\|_2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(x_n) - x_0\|_2 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \beta = \beta.$$

Also ist $x \in K$ und somit ist K abgeschlossen. Sei $x, y \in K$ bel. und betrachte $v := \lambda x + (1 - \lambda)y$ mit $0 \leq \lambda \leq 1$. Dann ist $v \in K$, da

$$\begin{aligned} \|v(t) - v_0\|_2 &= \|\lambda x(t) + (1 - \lambda)y(t) - \lambda x(t_0) - (1 - \lambda)y(t_0)\|_2 \\ &= \lambda \|x(t) - x_0\|_2 + (1 - \lambda) \|y(t) - y_0\|_2 \\ &\leq \beta(\lambda + 1 - \lambda) = \beta. \end{aligned}$$

Das heißt, K ist außerdem konvex. Die Stetigkeit der Abbildung $A : K \rightarrow K$ lässt sich wie folgt zeigen. Wegen der gleichmäßigen Stetigkeit von f auf \mathcal{G} können wir ein $\delta > 0$ so bestimmen, sodass gilt:

$$\|f(t, x) - f(t, y)\|_2 < \frac{\epsilon}{a} \quad \text{für } \|x - y\|_2 < \delta.$$

Betrachte nun $x, y \in K$ mit $\|x - y\|_\infty$ also auch $\|x(t) - y(t)\|_2$ für alle $t \in D$, so ist für $t \in D$ immer $\|f(t, x(t)) - f(t, y(t))\|_2 < \frac{\epsilon}{a}$ und es folgt

$$\|(Ax)(t) - (Ay)(t)\|_2 \leq |t - t_0| \frac{\epsilon}{a} = \epsilon \quad \text{für jedes } t \in D,$$

also auch $\|Ax - Ay\|_\infty \leq \epsilon$. Es bleibt jetzt nur noch zu zeigen, dass die Bildmenge $A(K)$ relativ kompakt ist. Sei hierfür $x \in K$ beliebig, dann ist

$$\|(Ax)(t)\|_2 \leq \|x_0\|_2 + aM \quad \text{für jedes } t \in D$$

und

$$\|(Ax)(t_1) - (Ax)(t_2)\|_2 \leq |t_1 - t_2|M \quad \text{für alle } t_1, t_2 \in D.$$

Somit ist $A(K)$ punktweise beschränkt und gleichgradig stetig auf dem kompakten Intervall D . Nach dem Satz von Arzela-Ascoli [6, S. 49] hat also jede Folge $(Ax)_n \subset A(K)$ eine gleichmäßig konvergente Teilfolge. Dies gilt offensichtlich auch für die Maximumsnorm wodurch $A(K)$ relativ kompakt ist. \square

2.2.2 Eindeutigkeit von Lösungen

Ähnlich wie im vorherigen Kapitel existiert ein Satz, welcher zeigt, dass eine Lipschitz-stetige rechte Seite f ausreicht, damit eine eindeutige Lösung für eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung existiert. Dazu definieren wir zuerst eine Lipschitz-stetige Funktion.

Definition 2.2.3 Sei $M \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ und $f : M \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine Funktion. Dann heißt genau dann f Lipschitz-stetig auf M bezüglich der x -Variable, wenn ein $L > 0$ existiert, sodass gilt:

$$\|f(t, x) - f(t, y)\|_2 \leq L \|x - y\|_2$$

für alle $(t, x), (t, y) \in M$.

Außerdem benötigen wir für den Beweis noch den Fixpunktsatz von Weissinger. Sowohl Satz als auch Beweis lassen sich in [5] wiederfinden.

Satz 2.2.4 (Fixpunktsatz von Weissinger) Sei $(B, \|\cdot\|_2)$ ein Banachraum und $U \subset B$ abgeschlossen und nichtleer. Ferner ist $\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j$ eine konvergente Reihe positiver Zahlen, also $\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j < \infty$, $\alpha_j \geq 0$, sowie $A : U \rightarrow U$ eine Selbstabbildung, für die

$$\|A^j u - A^j v\|_2 \leq \alpha_j \|u - v\|_2 \quad \text{für alle } u, v \in U \quad \text{und } j \in \mathbb{N}$$

gilt. Dann besitzt A genau einen Fixpunkt in U , nämlich

$$u = \lim_{n \rightarrow \infty} A^n u_0$$

mit beliebigem $u_0 \in U$. u ist also der Grenzwert der rekursiven Folge $u_j := Au_{j-1}$ für $j \geq 1$ mit $u_0 \in U$ beliebig. Außerdem gilt die Fehlerabschätzung

$$\|u - u_n\|_2 \leq \sum_{j=n}^{\infty} \alpha_j \|u_1 - u_0\|_2.$$

Beweis. [5, S. 139]

Nun können wir einen grundlegenden Satz in der Theorie für gewöhnliche Differentialgleichungen beweisen, welcher sich ähnlich wie der Beweis des Satzes von Peano an auf Überlegungen von H. Heuser in [5] beruht. Wir werden in dieser Arbeit die gegebene Beweisidee etwas genauer ausführen.

Satz 2.2.5 (Existenzsatz- und Eindeutigkeitssatz von Picard-Lindelöf) *Quantitative Version:* Seien

$$\mathcal{G} = \{(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n : |t - t_0| \leq \alpha, \quad \|x - x_0\|_2 \leq \beta, \quad \alpha, \beta \geq 0\},$$

$(t_0, x_0) \in \mathcal{G}$ und $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig und Lipschitz-stetig bzgl. x . Dann besitzt das Anfangswertproblem (2.9) genau eine Lösung \hat{x} auf dem Intervall $D = \{t_0 - a, t_0 + a\}$, wobei

$$a = \min\left\{\alpha, \frac{\beta}{M}\right\}, \quad M = \max_{(t, y) \in \mathcal{G}} \|f(t, y)\|_2.$$

Qualitative Version: Seien $\mathcal{G} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ offen und $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig und lokal Lipschitz-stetig bzgl. x auf \mathcal{G} . Dann besitzt das Anfangswertproblem (2.9) für jedes Paar $(t_0, x_0) \in \mathcal{G}$ genau eine lokale Lösung, d.h., es existiert ein $a = a(t_0, x_0) \geq 0$, sodass das Anfangswertproblem (2.9) auf dem Intervall $[t_0 - a, t_0 + a]$ genau eine Lösung \hat{x} hat.

TODO: Induktion korrigieren

Beweis Nun ist f Lipschitz-stetig, also setzen wir $B = C(D)$ mit der Maximumsnorm, $U = K$ und $A : K \rightarrow K$ aus dem Beweis von Satz (2.2.2). Wir zeigen mit Induktion über $j \in \mathbb{N}$, dass

$$\|(A^j u)(t) - (A^j v)(t)\|_2 \leq \frac{|t - t_0|^j}{j!} L^j \|u - v\|_{\infty}$$

für alle $j \in \mathbb{N}$ und $t \in D$ gilt. Die Unendlichkeitsnorm $\|\cdot\|_{\infty}$ wurde bereits in dem Beweis von Satz (2.2.2) definiert.

$$\begin{aligned} (j=1): \quad \|(A^j u)(t) - (A^j v)(t)\|_2 &\leq \underbrace{\|u_0 - v_0\|_2}_{=0} + \left\| \int_{t_0}^t f(s, u(s)) - f(s, v(s)) ds \right\|_2 \\ &\leq L \|u - v\|_{\infty} |t - t_0| \\ \text{(IV):} \quad \|(A^j u)(t) - (A^j v)(t)\|_2 &\leq \frac{|t - t_0|^j}{j!} L^j \|u - v\|_{\infty} \\ (j \rightarrow j+1): \quad \|(A^{j+1} u)(t) - (A^{j+1} v)(t)\|_2 &\leq \underbrace{\|u_0 - v_0\|_2}_{=0} + \left\| \int_{t_0}^t f(s, (A^j u)(s)) - f(s, (A^j v)(s)) ds \right\|_2 \\ &\leq L |t - t_0| \|(A^j u) - (A^j v)\|_{\infty} \\ &= L |t - t_0| \max_{t \in [t_0 - a, t_0 + a]} \|(A^j u)(t) - (A^j v)(t)\|_2 \\ &\stackrel{\text{IV}}{\leq} L |t - t_0| \frac{|t - t_0|^j}{j!} L^j \|u - v\|_{\infty} \\ &= \frac{|t - t_0|^{j+1}}{(j+1)!} L^{j+1} \|u - v\|_{\infty} \end{aligned}$$

Nun folgt direkt

$$\|A^j u - A^j v\|_\infty \leq \frac{(aL)^j}{j!} \|u - v\|_\infty.$$

Die Reihe $\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(aL)^j}{j!}$ ist nach dem Quotientenkriterium offensichtlich konvergent. Also lässt sich der Fixpunktsatz von Weisinger anwenden. Der daraus gewonnene Fixpunkt ist eindeutig und mit ähnlicher Äquivalenz zu dem Beweis von Peano folgt, dass der Fixpunkt die gesuchte eindeutige Lösung ist. \square

Für lineare Differentialgleichungen erster Ordnung (2.6) mit konstanten A gilt wegen

$$\|Ax + g(t) - Ay - g(t)\|_2 \leq \|A\|_2 \|x - y\|_2,$$

dass die rechte Seite Lipschitz-stetig in der x -Variable ist, wodurch mit Satz (2.2.5) eindeutige Lösbarkeit folgt. Die Lösung x kann mit Hilfe der *Matrixexponentialfunktion* [7] angegeben werden:

$$x(t) = e^{A(t-t_0)} x_0 + \int_{t_0}^t e^{A(t-s)} g(s) ds. \quad (2.10)$$

Einfaches Ableiten und Einsetzen von t_0 zeigt, dass diese Funktion die Differentialgleichung (2.6) tatsächlich löst.

2.3 Abhängigkeit der Lösungen von den Daten

In späteren Abschnitten werden wir gewöhnliche Differentialgleichungen betrachten, die zur Simulation/Vorhersage natürlicher Systeme genutzt werden. Darin ist es üblich, dass Anfangsdaten durch Messfehler oder unüblicher Verhalten von tatsächlichen Daten abweichen. Deshalb ist es sinnvoll Aussagen zu betrachten, die zeigen, welche Auswirkungen kleine Störungen auf die Lösung der Differentialgleichungen haben. In dieser Sektion ist die rechte Seite f stetig und Lipschitz-stetig bezüglich der x -Variable, sodass wir die Eindeutigkeit der Lösung durch Picard-Lindelöf garantieren. Der große Vorteil hierfür ist, dass wir keine Maximal- und Minimallösungen betrachten müssen. Um eine Aussage über die stetige Abhängigkeit der Anfangsdaten treffen zu können, beweisen wir zuerst einen wichtigen Hilfssatz. Die grundsätzlichen Überlegungen und Ergebnisse in diesem Kapitel stammen aus [6].

Satz 2.3.1 (Gronwallsche Ungleichung) *Seien $D = [t_0, t_f]$ ein Intervall und die stetige, nicht-negative Funktion $u : D \rightarrow \mathbb{R}$ sowie $a \geq 0, b > 0$ gegeben. Des Weiteren gilt folgende Ungleichung:*

$$u(t) \leq \alpha \int_{t_0}^t u(s) ds + \beta$$

für alle $t \in D$. Dann gilt:

$$u(t) \leq e^{\alpha(t-t_0)} \beta$$

für alle $t \in D$.

Beweis. Definiere zuerst eine Hilfsfunktion

$$v(t) := \alpha \int_{t_0}^t u(s) ds + \beta.$$

Für diese gilt

$$v'(t) = \alpha u(t) \leq \alpha v(t)$$

für alle $t \in D$. Daraus folgt

$$(e^{-\alpha t} v(t))' = e^{-\alpha t} (v(t)' - \alpha v(t)) \leq 0, \quad t \in D.$$

Die Funktion $e^{-\alpha t} v(t)$ ist also monoton fallend, das bedeutet

$$e^{-\alpha t} u(t) \leq e^{-\alpha t} v(t) \stackrel{t \geq t_0}{\leq} e^{-\alpha t_0} v(t_0) = e^{-\alpha t_0} \beta.$$

Daraus folgt die Behauptung. \square

Außerdem benötigen wir noch folgendes Lemma.

Lemma 2.3.2 Sei $T \subset \mathbb{R}^{1+n}$ offen und $f : T \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige Funktion, die zusätzlich Lipschitz-stetig bezüglich der x -Variable ist mit

$$\|f(t, x) - f(t, y)\|_2 \leq L \|x - y\|_2$$

für alle $(t, x), (t, y) \in T$ mit $L > 0$. Ist \hat{x} eine stetig-differenzierbare Funktion auf dem Intervall $D \subset \mathbb{R}$ und eine Lösung des Anfangswertproblems (2.9) und ist \hat{x}_a eine stetig-differenzierbare Funktion und eine Näherungslösung mit $(t, \hat{x}_a(t)) \in T$ für alle $t \in D$ und es gilt

$$\begin{aligned} \|\hat{x}'_a(t) - f(t, \hat{x}_a(t))\|_2 &\leq d_e \quad t \in D, \\ |t_0 - \tilde{t}_0| &\leq d_t, \\ \|x_0 - \hat{x}_a(\tilde{t}_0)\|_2 &\leq d_a \end{aligned}$$

(d_g representiert die Störung der rechten Seite, d_t die Störung der Anfangszeit und d_a die Störung des Anfangswerts). Dann gilt die Abschätzung

$$\|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 \leq e^{L|t-t_0|} (d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2) + \frac{d_g}{L}) - \frac{d_g}{L}.$$

Beweis. Betrachte zuerst die Differenz der Lösung \hat{x} und \hat{x}_a bei $t = t_0$.

$$\begin{aligned} \|\hat{x}(t_0) - \hat{x}_a(t_0)\|_2 &= \left\| \hat{x}_0 - \int_{\tilde{t}_0}^{t_0} \hat{x}'_a(s) ds - \hat{x}_a(\tilde{t}_0) \right\|_2 \\ &\leq \|\hat{x}_0 - \hat{x}_a(\tilde{t}_0)\|_2 \left\| \int_{\tilde{t}_0}^{t_0} [\hat{x}'_a(s) - f(s, \hat{x}_a(s))] ds \right\|_2 \left\| \int_{\tilde{t}_0}^{t_0} f(s, \hat{x}_a(s)) ds \right\|_2 \\ &\leq d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2). \end{aligned}$$

Nun können wir mit Hilfe der Lipschitz-Eigenschaft der rechten Seite f die Differenz für allgemeines $t \in D, t > t_0$ abschätzen:

$$\begin{aligned} \|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 &= \left\| \hat{x}_0 + \int_{t_0}^t f(s, \hat{x}) ds - \hat{x}_a(t_0) - \int_{t_0}^t \hat{x}'_a(s) ds \right\|_2 \\ &\leq \|\hat{x}_0 - \hat{x}_a(t_0)\|_2 + \int_{t_0}^t [\|f(s, \hat{x}(s)) - f(s, \hat{x}_a(s))\|_2 + \|\hat{x}'_a(s) - f(s, \hat{x}_a(s))\|_2] ds \\ &\leq d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2) + \int_{t_0}^t [L \|\hat{x}(s) - \hat{x}_a(s)\|_2 + d_g] ds. \end{aligned}$$

Um das gronwallsche Lemma verwenden zu können, setzen wir $u(t) := \|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 + \frac{d_g}{L}$,

$$\beta := d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2) + \frac{d_g}{L}$$

und $\alpha := L$. Offensichtlich gilt

$$\begin{aligned} u(t) &\leq \alpha \int_{t_0}^t u(s) ds + \beta \\ \Leftrightarrow \|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 + \frac{d_g}{L} &\leq L \int_{t_0}^t \left[\|\hat{x}(s) - \hat{x}_a(s)\|_2 + \frac{d_g}{L} \right] ds + \beta \\ \Leftrightarrow \|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 &\leq d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2) + \int_{t_0}^t [L \|\hat{x}(s) - \hat{x}_a(s)\|_2 + d_g] ds - \frac{d_g}{L} \end{aligned}$$

Also können wir das gronwallsche Lemma anwenden und somit folgt

$$\|\hat{x}(t) - \hat{x}_a(t)\|_2 + \frac{d_g}{L} \leq e^{L(t-t_0)} \left[d_a + d_t(d_g + \sup_{s \in D} \|f(s, \hat{x}_a(s))\|_2) + \frac{d_g}{L} \right].$$

Der Beweis für $t \in D$ mit $t < t_0$ funktioniert analog. \square

Mit diesem Lemma können wir etwas über die stetige Abhängigkeit der Lösung von der Zeitvariable aussagen.

Satz 2.3.3 Sei $T \subset \mathbb{R}^{1+n}$ offen und $f : T \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetige Funktion, die Lipschitz-stetig bezüglich der x -Variable mit Konstante $L > 0$ gegeben. Dann hängt die Lösung x des Anfangswertproblems (2.9) stetig von den Anfangsdaten $(t_0, x_0) \in T$ und der rechten Seite f ab. Darunter versteht man: ist eine Lösung x auf einem kompakten Intervall $D \subset \mathbb{R}$, eine Umgebung U des Graphen $\{(t, x(t)) : t \in D\}$ in T und ein $\epsilon > 0$ gegeben, dann existiert ein $\delta(\epsilon, U, f, D) > 0$ in, sodass die Lösung \hat{x} des gestörten Anfangswertproblems

$$\begin{aligned}\hat{x}' &= \hat{f}(t, \hat{x}) \\ \hat{x}(\hat{t}_0) &= \hat{x}_0\end{aligned}$$

auf ganz D existiert und die Abschätzung

$$\|x(t) - \hat{x}(t)\|_2 \leq \epsilon \quad t \in D$$

erfüllt. Voraussetzungen hierfür sind, dass $\hat{t}_0 \in D$, $(\hat{t}_0, \hat{x}_0) \in T$, \hat{f} stetig auf U , Lipschitz-stetig bezüglich der x -Variable und

$$|t_0 - \hat{t}_0| \leq \delta, \quad \|x_0 - \hat{x}_0\|_2 \leq \delta, \quad \|f(t, x) - \hat{f}(t, x)\|_2 \leq \delta \quad \forall (t, x) \in U$$

gilt.

Beweis. [6, S. 67, 68]

Um die Abhängigkeit der Anfangsdaten (t_0, x_0) formulieren zu können, wird im Folgenden eine Notation eingeführt.

Definition 2.3.4 Seien $T \subset \mathbb{R}^{1+n}$ offen und $f : T \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetige Funktion, die Lipschitz-stetig bezüglich der x -Variable ist. Die Abbildung

$$(t, t_0, x_0) \mapsto x(t; t_0, x_0)$$

mit $(t_0, x_0) \in T$ und $t \in I_{\max}(t_0, x_0) = (I^-(t_0, x_0), I^+(t_0, x_0))$ bezüglich der maximalen Lösung des Anfangswertproblems (2.9) und dem maximalen Existenzintervall $I_{\max}(t_0, x_0)$ heißt charakteristische Funktion der gewöhnlichen Differentialgleichung. Dabei nennt man

$$I^-(t_0, x_0) = \sup\{t \in \mathbb{R} : \text{das AWP (2.9) ist auf } [t_0, t] \text{ lösbar}\}$$

und

$$I^+(t_0, x_0) = \inf\{t \in \mathbb{R} : \text{das AWP (2.9) ist auf } [t, t_0] \text{ lösbar}\}$$

die Lebensdauerfunktion.

Satz 2.3.3 besagt, dass die charakteristische Funktion in allen Argumenten (t, t_0, x_0) stetig ist und dass $I^-(t_0, x_0)$ bzw. $I^+(t_0, x_0)$ ober- bzw. unterhalbstetig sind. Dies bedeutet, dass durch kleine Störungen der Anfangswerte (t_0, x_0) sich das maximale Existenzintervall nur stetig verkleinern kann.

Satz 2.3.5 Seien $T \subset \mathbb{R}^{1+n}$ und $f : T \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetige Funktion, die in der x -Variable stetig differenzierbar ist. Dann ist die charakteristische Funktion $x(t; t_0, x_0)$ stetig differenzierbar in $(t_0, x_0) \in T$ und $t \in I_{\max}(t_0, x_0)$.

Beweis. [6, S. 69, 70]

Bemerkung 2.3.6 Man kann zeigen, dass für $T \subset \mathbb{R}^{1+n}$ und eine stetige Funktion $f : T \rightarrow \mathbb{R}^n$, die stetig differenzierbar in der x -Variable ist, gilt: f ist lokal Lipschitz-stetig in der x -Variable. Das bedeutet, dass in Satz 2.3.5 eine verstärkte Voraussetzung an die rechte Seite im Gegensatz zu Satz 2.3.3 verlangt wird.

3 Numerischer Lösungsansatz

Der Abschnitt beruht im Wesentlichen auf [1] und [2]. Wir werden uns im Folgenden hauptsächlich das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} x' &= f(t, x) \\ x(t_0) &= x_0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

betrachten, wobei f stetig ist.

Unser Ziel ist es, eine effektive Methode zu verwenden, um eine Lösung eines Anfangswertproblem finden zu können. Da es nicht immer möglich ist, eine ODE analytisch zu lösen, gibt es sogenannte Ein- und Mehrschrittverfahren, welche eine Lösung der ODE approximiert. Der Grundgedanke dieser Verfahren ist es das Zeitintervall $D = [t_0, t_f]$ zu diskretisieren und beginnend mit dem Anfangswert t_0 eine Näherung $u_i \approx x(t_i)$ für $i = 0 \dots N$, wobei $t_N = t_f$, berechnet. Solche Verfahren werden mit Hilfe von Quadraturformeln der numerischen Integration [8, Numerische Integration] hergeleitet.

Dies basiert darauf, dass die Differentialgleichung auf einem Teilintervall $[t_i, t_{i+1}] \subset D$ integriert wird und nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung auf folgende Gleichung gebracht werden kann:

$$x(t_{i+1}) - x(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} x'(t) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, x(t)) dt.$$

Das Integral kann nun mit einer bereits genannten Quadraturformel approximiert werden, welches je nach Wahl der Quadraturformel ein Einschrittverfahren bildet.

3.1 Einschrittverfahren

Definition 3.1.1 Sei $D = [t_0, t_0 + a]$ ein Zeitintervall und eine Zerlegung von D

$$t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_0 + a$$

mit der Schrittweite $h = \frac{a}{N}$, also $D_h = \{t_i = t_0 + ih \text{ für } i = 0, \dots, N\}$ eine Intervallzerlegung. Ein explizites Einschrittverfahren für das Anfangswertproblem (3.1) hat die Form

$$\begin{aligned} u_0 &= x_0 \\ u_{i+1} &= u_i + h\phi(t_i, u_i, h, f), \quad i = 0, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (3.2)$$

wobei die Lösung $x : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ auf ganz D existiert. Dabei nennt man $\phi : D_h \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times C(D \times K, \mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^n$ die Inkrementfunktion, wobei $K \subseteq \mathbb{R}^n$. Implizite Einschrittverfahren haben die Form

$$\begin{aligned} u_0 &= x_0 \\ u_{i+1} &= u_i + h\phi(t_i, u_i, u_{i+1}, h, f), \quad i = 0, \dots, N-1, \end{aligned}$$

mit $\phi : D_h \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times C(D \times K, \mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^n$.

3.1.1 Konsistenz

Zur Analyse der Approximationsqualität der Verfahren werden neue Begriffe erläutert.

Definition 3.1.2 (lokaler Diskretisierungsfehler) Sei das Anfangswertproblem (3.1) mit Lipschitz-stetiger rechten Seite und ein explizites Einschrittverfahren (3.2) gegeben. Für $\hat{t} \in [t_0, t_0 + a]$ und $0 < h < t_0 + a - \hat{t}$ ist der lokale Diskretisierungsfehler definiert als

$$\tau(\hat{t}, h) := \frac{x(\hat{t} + h) - u_1(\hat{t})}{h},$$

wobei $u_1(\hat{t}) = x(\hat{t}) + h\phi(\hat{t}, x(\hat{t}), h, f)$ ist die Approximation der exakten Lösung nach einem Schritt und mit $x(\hat{t})$ als Startpunkt.

Falls zusätzlich für alle f mit stetiger und beschränkter Ableitung (bis zur Ordnung p) in der x -Variable gilt, dass für alle $\hat{t} \in (t_0, t_0 + a]$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \tau(\hat{t}, h) = 0 \quad (\tau(\hat{t}, h) = \mathcal{O}(h^p) \text{ für } h \rightarrow 0),$$

dann nennt man das Einschrittverfahren konsistent (von der Ordnung p).

Definition 3.1.3 (globaler Diskretisierungsfehler) Mit $\hat{t} = t_i = t_0 + ih, i = 1, \dots, N$ ist der globale Diskretisierungsfehler definiert als

$$e(\hat{t}, h) := x(\hat{t}) - u_i,$$

wobei u_i die vom Einschrittverfahren approximierte Lösung im i -ten Schritt ist.

Falls zusätzlich für alle f mit stetiger und beschränkter Ableitung (bis zur Ordnung p) in der x -Variable gilt, dass für alle $\hat{t} \in (t_0, t_0 + a]$

$$\lim_{h \rightarrow 0} e(\hat{t}, h) = 0 \quad (e(\hat{t}, h) = \mathcal{O}(h^p) \text{ für } h \rightarrow 0),$$

dann nennt man das Einschrittverfahren konvergent (von der Ordnung p).

Es ist uns möglich, eine obere Schranke für den globalen Fehler zu finden. Dazu müssen wir zuerst die diskrete Version der Gronwall Ungleichung 2.3.1 beweisen.

Satz 3.1.4 (diskrete Gronwallsche Ungleichung) Gegeben seien die Folgen $(\alpha)_i, (\beta)_i, (\gamma)_i \geq 0$ mit $i \in \{0, \dots, N\}$ und es gilt

$$\gamma_{i+1} \leq (1 + \alpha_i)\gamma_i + \beta_i \quad \text{für } i = 0, \dots, N-1.$$

Dann gilt

$$\gamma_{i+1} \leq \left(\gamma_0 + \sum_{j=0}^i \beta_j \right) e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_i} \quad \text{für } i = 0, \dots, N-1.$$

Beweis. Da $i = 1, \dots, N$ bietet sich ein Induktionsbeweis nach i an:

$$\begin{aligned} (i=0): \quad \gamma_1 &\leq \underbrace{(1 + \alpha_0)}_{\leq e^{\alpha_0}} \gamma_0 + \underbrace{\beta_0}_{=\beta_0 e^0 \leq \beta_0 e^{\alpha_0}} \leq (\gamma_0 + \beta_0) e^{\alpha_0} \\ \text{(IV):} \quad \gamma_i &\leq \left(\gamma_0 + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_j \right) e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_{i-1}} \\ (i \rightarrow i+1): \quad \gamma_{i+1} &\leq (1 + \alpha_i)\gamma_i + \beta_i \\ &\stackrel{\text{IV}}{\leq} (1 + \alpha_i) \left(\gamma_0 + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_j \right) e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_{i-1}} + \beta_i \\ &\leq e^{\alpha_i} \left(\gamma_0 + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_j \right) e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_{i-1}} + \beta_i e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_i} \\ &\leq \left(\gamma_0 + \sum_{j=0}^i \beta_j \right) e^{\alpha_0 + \dots + \alpha_i} \end{aligned}$$

□

Satz 3.1.5 Sei das Einschrittverfahren (3.2) und das Anfangswertproblem (3.1) gegeben. Ist die Inkrementfunktion ϕ in der x -Variable Lipschitz-stetig, also

$$\|\phi(t, x_1, h, f) - \phi(t, x_2, h, f)\|_2 \leq L \|x_1 - x_2\|_2$$

für alle $(t, x_1, h), (t, x_2, h) \in D \times \mathbb{R}^n \times [0, h_0]$ mit $h_0, L > 0$, dann gilt für den globalen Fehler in $t_i = t_0 + ih$ die obere Schranke

$$\|e(t_i, h)\|_2 \leq (\|e_0\|_2 + (t_i - t_0)\tau_h) e^{L(t_i - t_0)}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Dabei ist $e_0 = x(t_0) - u_0$ und $\tau_h = \max_{k=1, \dots, N} \|\tau(t_k, h)\|_2$.

Beweis. Löse zuerst die Gleichung des lokalen Diskretisierungsfehlers auf $x(t_{j+1})$ auf:

$$x(t_{j+1}) = x(t_j) + h\phi(t_j, x(t_j), h, f) + h\tau(t_j), \quad j = 0, \dots, i-1$$

Dann nutzen wir das Ergebnis für den globalen Fehler

$$e(t_{j+1}, h) = x(t_{j+1}) - u_{j+1} = x(t_j) - u_j + h\tau(t_j) + h(\phi(t_j, x(t_j), h, f) - \phi(t_j, u_j, h, f))$$

und schätzen ab

$$\|e(t_{j+1}, h)\|_2 \leq \|e(t_j, h)\|_2 + h\tau_h + hL \|e(t_j, h)\|_2 = (1 + hL) \|e(t_j, h)\|_2 + h\tau_h.$$

Nun können wir mit $\alpha_j = hL$, $\gamma_j = \|e(t_j, h)\|_2$ und $\beta_j = h\tau_h$ die diskrete Gronwall Ungleichung anwenden und erhalten

$$\begin{aligned} \|e(t_{j+1}, h)\|_2 &\leq \left(\|e_0\|_2 \sum_{i=0}^j h\tau_h e^{\sum_{i=0}^j hL} \right) \\ &= (\|e_0\|_2 + (j+1)h\tau_h) e^{(j+1)hL} \\ &= (\|e_0\|_2 + (t_{j+1} - t_0)\tau_h) e^{L(t_{j+1} - t_0)} \end{aligned}$$

für alle $j = 0, \dots, i-1$, also insbesondere

$$\|e(t_i, h)\|_2 = (\|e_0\|_2 + (t_i - t_0)\tau_h) e^{L(t_i - t_0)}$$

für $j = i-1$. □

Der Satz besagt also, dass die Konsistenz des Einschrittverfahrens bereits die Konvergenz impliziert. Im allgemeinen ist ein Verfahren genau dann konvergent, wenn es konsistent und stabil ist, wie wir später beweisen werden.

3.2 Runge-Kutta-Verfahren

Runge-Kutta-Verfahren sind Einschrittverfahren höherer Ordnung. Um ein RK-Verfahren herleiten zu können, müssen wir zuerst definieren, was eine Quadraturformel ist.

Definition 3.2.1 Eine Quadratur ist eine Abbildung $Q_n : C([a, b]) \rightarrow \mathbb{R}$ für die gilt

$$Q_n(f) = (b-a) \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i) \quad \text{für alle } f \in C([a, b]),$$

wobei $\Delta = \{a = x_0, \dots, x_n = b\}$ die Einteilung Stützstellen und die Zahlen $\alpha_0, \dots, \alpha_n$ (Quadratur Gewichte genannt werden.

Für eine interpolische Quadratur gilt zusätzlich

$$\alpha_i = \int_0^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{t - t_j}{t_i - t_j} dt, \quad t_j = \frac{x_j - a}{b - a}.$$

In unserem Fall ist $(b-a) = h$, da wir das Integral $\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, x(s)) ds$ mit einer Quadratur approximieren:

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, x(s)) ds \approx h \sum_{l=1}^m \alpha_l f(s_l, x(s_l)).$$

Die Stützstellen sind also $s_1 = t_i$, $s_l = t_i + c_l h$ für $l = 2, \dots, m$. Dazu approximieren wir $f(s_l, x(s_l)) \approx k_{l,i}$ mit

$$\begin{aligned} k_{1,i} &= f(t_i, u_i) \\ k_{l,i} &= f(t_i + c_l h, u_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} k_{o,i}), \quad l = 2, \dots, m. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Dies ergibt das m -stufige explizite Runge-Kutta-Verfahren

$$u_{i+1} = u_i + h \sum_{l=1}^m b_l k_{l,i}. \quad (3.4)$$

Wir werden später ein klassisches 4-stufiges RK-Verfahren verwenden, welches wir jetzt herleiten. Dazu benötigen wir die Simpsonregel

$$Q(f) = \frac{b-a}{6} (f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$$

mit $a = (t_i, x(t_i))$, $b = (t_i + h, x(t_i + h))$. Es gilt also die Approximation TODO: Taylor Entwicklung

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, x(s)) ds &\approx \frac{h}{6} (f(t_i, x(t_i)) + 4f((t_i + \frac{h}{2}), x(t_i + \frac{h}{2})) + f(t_i + h, x(t_i + h))) \\ &= h \left(\frac{1}{6} f(t_i, x(t_i)) + \frac{2}{3} f\left(t_i + \frac{h}{2}, x\left(t_i + \frac{h}{2}\right)\right) + \frac{1}{6} f(t_{i+1}, x(t_{i+1})) \right). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich durch mehrfacher Anwendung der Taylor-Entwicklung das 4-stufige klassische Runge-Kutta-Verfahren

$$u_{i+1} = u_i + h \left(\frac{1}{6} k_{1,i} + \frac{1}{3} k_{2,i} + \frac{1}{3} k_{3,i} + \frac{1}{6} k_{4,i} \right)$$

mit den Stufen

$$\begin{aligned} k_{1,i} &= f(t_i, u_i) \\ k_{2,i} &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + \frac{h}{2} k_{1,i}\right) \\ k_{3,i} &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + \frac{h}{2} k_{2,i}\right) \\ k_{4,i} &= f\left(t_i + h, u_i + h k_{3,i}\right). \end{aligned}$$

In diesem Fall haben wir die Koeffizienten

$$b := (b_1, \dots, b_m)^\top = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{6} \end{pmatrix}, \quad c := (c_1, \dots, c_m)^\top = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad A := (a_{lo}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Im Allgemeinen gilt für explizite RK-Verfahren, dass $a_{lo} = 0$ für $l \leq o$.

Bemerkung 3.2.2 Die Koeffizienten charakterisieren ein Runge-Kutta-Verfahren, weshalb sie für üblich in sogenannten Butcher-Tabellen zusammengefasst werden:

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

Da RK-Verfahren Einschrittverfahren sind, gibt es auch implizite Runge-Kutta-Verfahren mit der Form

$$\begin{aligned} k_{1,i} &= f(t_i + c_1 h, u_i + h(a_{11} k_{1,i} + \dots + a_{1m} k_{m,i})) \\ &\vdots \\ k_{m,i} &= f(t_i + c_m h, u_i + h(a_{m1} k_{1,i} + \dots + a_{mm} k_{m,i})) \\ u_{i+1} &= u_i + h(b_1 k_{1,i} + \dots + b_m k_{m,i}) \end{aligned}$$

Hier kann A im Gegensatz zu expliziten RK-Verfahren eine volle Matrix sein.

3.2.1 Konsistenz

Es wurde bereits gezeigt, dass die Konvergenz eines Einschrittverfahrens aus der Konsistenz folgt. Deshalb genügt es sich die Konsistenz(ordnung) der Runge-Kutta-Verfahren zu betrachten. Dabei spielt die Wahl der Koeffizienten eine große Rolle. Ziel ist es, die Koeffizienten so zu wählen, dass die Konsistenzordnung unseres Runge-Kutta-Verfahrens möglichst hoch ist. Dazu zeigen wir zuerst, dass unter bestimmten Voraussetzungen der Koeffizienten ein explizites RK-Verfahren invariant gegenüber Autonomisierung ist, das bedeutet, dass ein RK-Verfahren genau dann ein Anfangswertproblem (3.1) mit der Näherungslösung u_i approximiert, wenn es das autonomisierte Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} z' &= 1, & z(t_0) &= t_0 \\ x' &= f(z, x), & x(t_0) &= x_0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

mit der Näherungslösung $v_i := \begin{bmatrix} t_i \\ u_i \end{bmatrix}$ approximiert.

Satz 3.2.3 *Gegeben sei ein explizites Runge-Kutta-Verfahren. Dies ist genau dann invariant gegenüber Autonomisierung, wenn für die Koeffizienten gilt:*

$$\sum_{j=1}^m b_j = 1 \quad \text{und} \quad c_l = \sum_{j=1}^{l-1} a_{lj}, \quad l = 1, \dots, m.$$

Beweis. Für ein autonomes Anfangswertproblem (??) hat das Runge-Kutta-Verfahren die Form

$$\begin{aligned} \hat{k}_{l,i} &= \begin{bmatrix} \hat{k}_{l,i}^z \\ \hat{k}_{l,i}^x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ f\left(t_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} \cdot \hat{k}_{o,i}^z, u_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} \hat{k}_{o,i}^x\right) \end{bmatrix} \quad l = 1, \dots, m, \\ v_{i+1} &= v_i + h \sum_{l=1}^m b_l \hat{k}_{l,i} = \begin{bmatrix} t_i + h \sum_{l=1}^m b_l \cdot 1 \\ u_i + h \sum_{l=1}^m b_l \hat{k}_{l,i}^x \end{bmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{bmatrix} t_{i+1} \\ u_{i+1} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Es gilt also genau dann $t_i + h \sum_{l=1}^m b_l \cdot 1 = t_{i+1}$, wenn $\sum_{l=1}^m b_l = 1$. Für die zweite Komponente gilt genau dann $u_i + h \sum_{l=1}^m b_l \hat{k}_{l,i}^x = u_{i+1}$, wenn $\hat{k}_{l,i}^x = k_{l,i}$, $l = 1, \dots, m$. Äquivalent dazu muss gelten

$$f\left(t_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} \cdot 1, u_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} \hat{k}_{o,i}^x\right) = f\left(t_i + h c_l, u_i + h \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo} k_{o,i}\right), \quad l = 1, \dots, m,$$

was genau dann erfüllt ist, wenn $c_l = \sum_{o=1}^{l-1} a_{lo}$, $l = 1, \dots, m$. □

Im Folgenden werden wir uns auf autonome Anfangswertprobleme der Form

$$x'^0 = f(x), \quad x(t_0) = x_0 \quad (3.6)$$

beschränken. Unser Ziel ist es Voraussetzungen an die Koeffizienten des RK-Verfahrens zu setzen, so dass wir eine größtmögliche Konsistenzordnung erhalten. Dazu betrachten wir den lokalen Diskretisierungsfehler

$$\begin{aligned} \tau(t_i, h) &= \frac{x(t_i + h) - x(t_i)}{h} - \phi(t_i, x(t_i), h, f) \\ &= \frac{x(t_i + h) - x(t_i)}{h} - \sum_{l=1}^m b_l k_{l,i}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Wenden wir nun die Taylorentwicklung auf die exakte Lösung x für das AWP (3.6) an, erhalten wir

$$\begin{aligned} x(t_{i+1}) &= x(t_i) + hx'(t_i) + \frac{1}{2}h^2x''(t_i) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= x(t_i) + hf(x(t_i)) + \frac{1}{2}h^2Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

wobei für die Ableitungen der Lösung x die Kettenregel benutzt wird

$$\begin{aligned} x'(t_i) &= f(x(t_i)) \\ x''(t_i) &= Df(x(t_i))x'(t_i) = Df(x(t_i))f(x(t_i)) \end{aligned}$$

und $Df(t_i)$ die Jacobi-Matrix von f in $x(t_i)$ ist. Da wir uns nur auf autonome AWP's (3.6) beschränken, hat das explizite Runge-Kutta-Verfahren die Stufen

$$\begin{aligned} k_{i,1} &= f(x(t_i)), \\ k_{i,2} &= f(x(t_i) + ha_{21}k_{1,i}), \\ &\vdots \\ k_{i,m} &= f(x(t_i) + ha_{m1}k_{1,i} + \cdots + ha_{m,m-1}k_{m-1,i}). \end{aligned}$$

Nun wenden ähnlich wie oben die Taylorentwicklung im Punkt $x(t_i)$ an und erhalten

$$\begin{aligned} k_{i,1} &= f(x(t_i)), \\ k_{i,2} &= f(x(t_i)) + ha_{21}Df(x(t_i))k_{1,i} + \mathcal{O}(h^2), \\ &\vdots \\ k_{i,m} &= f(x(t_i)) + ha_{m1}Df(x(t_i))k_{1,i} + \cdots + ha_{m,m-1}Df(x(t_i))k_{m-1,i} + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

Im nächsten Schritt setzen wir die Stufen sukzessive ein und verwenden

$$hk_{j,i} = hf(x(t_i)) + h^2a_{j-1,l}Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2) = hf(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2),$$

$$\begin{aligned} k_{i,1} &= f(x(t_i)), \\ k_{i,2} &= f(x(t_i)) + ha_{21}Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2), \\ &\vdots \\ k_{i,m} &= f(x(t_i)) + ha_{m1}Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \cdots + ha_{m,m-1}Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Einsetzen in (3.7) ergibt

$$\begin{aligned} \tau(t_i, h) &= f(x(t_i)) + \frac{1}{2}hD(f(x(t_i)))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2) \\ &\quad - \sum_{l=1}^m b_l \left(f(x(t_i)) + h \sum_{j=1}^{m-1} a_{lj}D(f(x(t_i)))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2) \right) \\ &= \left(1 - \sum_{l=1}^m b_l \right) f(x(t_i)) + h \left(\frac{1}{2} - \sum_{l=1}^m \sum_{j=1}^{l-1} b_l a_{lj} \right) Df(x(t_i))f(x(t_i)) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

Hieraus kann schnell abgelesen werden, dass für die gegenüber Autonomisierung invariante Runge-Kutta-Verfahren die Konsistenzordnung $p = 1$ gilt. Außerdem bilden sich weitere Voraussetzungen für höhere Konsistenzordnungen, wie beispielsweise für $p = 2$:

$$\sum_{l=1}^m \sum_{j=1}^{l-1} b_l a_{lj} = \sum_{l=1}^m b_l c_l = \frac{1}{2}.$$

Allgemein lassen sich für höhere Konsistenzordnungen weitere Voraussetzung durch Taylorentwicklungen mit höheren h -Potenzen finden.

Satz 3.2.4 (Butcherschränken) Für die maximale erreichbare Ordnung p eines expliziten Runge-Kutta-Verfahrens mit m Stufen gilt

$$p \leq m.$$

Außerdem kann man folgende Abschätzungen finden

Stufe m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	≥ 9
Ordnung p	1	2	3	4	4	5	6	6	7	$\leq m - 2$

Beweis. ($p \leq m$ Behauptung) [2, S. 173–174]

3.2.2 Schrittweitensteuerung

Wir haben im letzten Abschnitt gesehen, unter welchen Bedingungen die Konvergenz der Runge-Kutta-Verfahren die exakte Lösung der gegebenen Differentialgleichung gewährleistet ist. Unser Ziel ist es nun die bisher konstante Schrittweite h so zu wählen, dass der Rechenaufwand zur Approximation der Lösung so gering wie möglich gehalten wird. Dazu gibt es im Grunde zwei Fälle: Ist der lokale Diskretisierungsfehler größer als eine gegebene Toleranz, so sollten wir die Schrittweite verkleinern, um den Fehler zu verringern. Ein Beispiel hierfür wäre eine oszillierende Lösung, bei der eine zu große Schrittweite zu hohem lokalen Fehler führen würde, da das Einschrittverfahren Wendungspunkte überspringen würde.

Ist der lokale Diskretisierungsfehler aber klein in Relation zur Toleranz, dann können wir die Schrittweite vergrößern, um den Rechenaufwand zu minimieren. Dies tritt beispielsweise bei nahezu linearen Lösungsfunktionen auf.

Also müssen wir uns zuerst überlegen, wie wir den lokalen Diskretisierungsfehler sinnvoll mit minimalen Rechenaufwand abschätzen, ohne die tatsächliche Lösung der DGL zu kennen. Dazu verwenden wir sogenannte *eingebettete Runge-Kutta-Verfahren*, welche aus zwei Einschrittverfahren

$$u_{i+1}^{(1)} = u_i + h_i \Phi_p(t_i, u_i, h_i, f)$$

und

$$u_{i+1}^{(2)} = u_i + h_i \Phi_{p+1}(t_i, u_i, h_i, f)$$

mit den Konsistenzordnungen p und $p + 1$ bestehen. Die Butcherschränken implizieren, dass die Anzahl der Stufen schneller steigt, als die Konsistenzordnung, weshalb es nur bis zu einem gewissen Grad sinnvoll ist, ein Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung für $u^{(2)}$ zu verwenden. Deshalb beschränken wir uns deshalb auf Verfahren mit Konsistenzordnung $p + 1$. Das Verfahren nennt man *eingebettet*, wenn die für $u^{(1)}$ berechneten Stufen bei der Berechnung von $u^{(2)}$ wieder verwendet werden. Dabei werden Funktionsauswertungen gespart, was den Rechenaufwand und die Laufzeit reduziert. Die dazugehörige Butcher-Tabelle wird dementsprechend zu einer *kombinierten* Butcher-Tabelle erweitert

b	A
	$(b^{(1)})^\top$
	$(b^{(2)})^\top$

Dabei sind $b^{(1)}$ Koeffizienten von $u^{(1)}$ und $b^{(2)}$ Koeffizienten von $u^{(2)}$.

Wir definieren

$$\begin{aligned}\Delta_p &:= x(t_i + h_i) - u_{i+1}^{(1)} = x(t_i + h_i) - u_i - h_i \Phi_p(t_i, u_i, h_i, f) = h_i \tau^{(1)}(t_i, h_i) = \mathcal{O}(h_i^{p+1}) \\ \Delta_{p+1} &:= x(t_i + h_i) - u_{i+1}^{(2)} = x(t_i + h_i) - u_i - h_i \Phi_{p+1}(t_i, u_i, h_i, f) = h_i \tau^{(2)}(t_i, h_i) = \mathcal{O}(h_i^{p+2})\end{aligned}$$

Daraus erhalten wir eine Abschätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers mit

$$\begin{aligned}h_i \tau_p &= \Delta_p = \Delta_{p+1} + h_i (\Phi_{p+1}(t_i, u_i, h_i, f) - \Phi_p(t_i, u_i, h_i, f)) \\ &\approx h_i (\Phi_{p+1}(t_i, u_i, h_i, f) - \Phi_p(t_i, u_i, h_i, f)),\end{aligned}$$

da $\Delta_{p+1} \approx 0$ für kleine h_i gilt. Also erhalten wird mit der alten Schrittweite h_{alt}

$$\Delta_{p,\text{alt}} \approx h_i (\Phi_{p+1}(t_i, u_i, h_i, f) - \Phi_p(t_i, u_i, h_i, f)) = \|u^{(2)} - u^{(1)}\|_2.$$

Da wir nun den lokalen Fehler abgeschätzt haben, können wir uns darum kümmern, die Schrittweite anzupassen. Sei die Toleranz mit ϵ gegeben. Bei zu großem Fehler, also $\Delta_{p,\text{alt}} > \epsilon$, wählen wir eine neue Schrittweite h_{neu} und wiederholen den aktuellen Schritt. Unser Ziel dabei ist es, dass der neue Fehler $\Delta_{p,\text{neu}}$ etwas kleiner ist als ϵ , was mit der Approximation $\Delta_{p,\text{neu}} \approx \rho \epsilon$ mit $0 < \rho < 1$ gesichert ist. Da $\Delta_p = \mathcal{O}(h_i^{p+1}) \approx c h_i^{p+1}$ für jede Schrittweite gilt, kann man folgern

$$\begin{aligned}\frac{\rho \epsilon}{h_{\text{neu}}^{p+1}} &\approx \frac{\Delta_{p,\text{neu}}}{h_{\text{neu}}^{p+1}} \approx c \approx \frac{\Delta_{p,\text{alt}}}{h_{\text{alt}}^{p+1}} \\ \Leftrightarrow h_{\text{neu}} &\approx h_{\text{alt}} \sqrt[p+1]{\frac{\rho \epsilon}{\Delta_{p,\text{alt}}}}\end{aligned}$$

Im anderen Fall ist der Fehler zu klein $\Delta_{p,\text{alt}} \approx 0$. Dann können wir die Schrittweite mit Hilfe einer Hochschaltungsbeschränkung anpassen. Dabei setzen wir $h_{\text{neu}} = \min(q h_{\text{alt}}, h_{\text{max}})$, wobei h_{max} die maximale Schrittweite und $q > 1$ der Hochschaltfaktor ist. Wird der Schritt akzeptiert, so setzen wir $u_{i+1} = u^{(2)}$ und führen die Approximation mit der neuen Schrittweite fort.

Wir werden in dieser Arbeit hauptsächlich das *4-5-Runge-Kutta-Verfahren* (oder *Dormand-Prince-Verfahren*) mit der kombinierten Butcher-Tabelle

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

betrachten.

3.3 Mehrschrittverfahren

Durch die Butcherschranken wissen, dass ab einer Konsistenzordnung p eines Runge-Kutta-Verfahren immer mehr Stufen ausgerechnet werden müssen, was wiederum eine erhöhte Anzahl an Funktionsauswertungen bedeutet. Dies wollen wir wenn möglich verhindern. Deshalb führen wir sogenannte *Mehrschrittverfahren* ein, welche im Gegensatz zu Einschrittverfahren die Information aus bereits berechneten Näherungen nutzen. Mehrschrittverfahren haben also den Vorteil, dass (zumindest explizite Verfahren) pro Schritt nur eine Funktionsauswertung benötigen.

Definition 3.3.1 Sei $D = [t_0, t_0 + a]$ ein Zeitintervall und die Zerlegung von D

$$t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_0 + a$$

mit der Schrittweite $h = \frac{a}{N}$, also $D_h \{t_i = t_0 + ih \text{ für } i = 0, \dots, N\}$ eine Intervallzerlegung. Ein k -Schrittverfahren für das Anfangswertproblem (3.1) hat die Form

$$\begin{aligned} &\text{Startwerte } u_0, \dots, u_{k-1}, \\ &\sum_{j=0}^k \alpha_j u_{i+j} = h \Phi(t_i, u_i, \dots, u_{i+k}, h, f), \quad i = 0, \dots, N-k, \end{aligned} \quad (3.8)$$

wobei $\alpha_k \neq 0$. Falls Φ unabhängig von u_{i+k} kann man (3.8) nach u_{i+k} auflösen und hat ein explizites k -Schrittverfahren vorliegen. Im impliziten Fall muss man ein (nichtlineares) Gleichungssystem lösen, um u_{i+k} bestimmen zu können.

Die Startwerte u_0, \dots, u_{k-1} können durch einmalige Verwendung von Einschrittverfahren ermittelt werden.

Definition 3.3.2 Das k -Schrittverfahren (3.8) heißt linear, falls

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j u_{i+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_{i+j}, u_{i+j}), \quad i = 0, \dots, N-k, \quad (3.9)$$

gilt. Für $\beta_k = 0$ ist das Verfahren explizit, sonst implizit. Ersetzt man β_j mit $\beta_j^{(r,l)}$, so erhält man ein lineares k -Schrittverfahren vom Typ (r, l)

$$u_{i+k} - u_{i+r-l} = h \sum_{j=0}^r \beta_j^{(r,l)} f(t_{i+j}, u_{i+j}). \quad (3.10)$$

3.3.1 Konsistenz und Konvergenz

Ähnlich wie bei den Einschrittverfahren definieren wir nun zuerst den lokalen Diskretisierungsfehler der Mehrschrittverfahren.

Definition 3.3.3 Sei ein Mehrschrittverfahren (3.8) und das dazugehörige Anfangswertproblem (3.1) gegeben. Dann ist der lokale Diskretisierungsfehler gegeben durch

$$\tau(t_i, h) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \alpha_j x(t_i + jh) - \Phi(t_i, x(t_i), x(t_i + h), \dots, x(t_i + kh), h, f).$$

(3.8) heißt konsistent von der Ordnung $p \geq 1$, wenn für alle f mit stetiger und beschränkter Ableitung in der x -Variable bis zur Ordnung p gilt, dass $\tau(t_i, h) = \mathcal{O}(h^p)$.

Wir können unter bestimmten Bedingungen die Konsistenzordnungen der linearen Mehrschrittverfahren vom Typ (r, l) (3.10) explizit angeben.

Satz 3.3.4 Unter den Bedingungen, dass f $(r+1)$ -mal stetig differenzierbar ist, hat das lineare Mehrschrittverfahren vom Typ (r, l) (3.10) die Konsistenzordnung $p = r + 1$.

Beweis. [9, S. 93, 94]

Um die Konsistenz allgemeiner linearer k -Schrittverfahren angeben zu können, benötigen wir noch die Definitionen für das erste und zweite charakteristische Polynom.

Definition 3.3.5 Für ein lineares k -Schrittverfahren (3.9) sind die Polynome

$$\rho(z) := \sum_{j=0}^k \alpha_j z^j \quad \text{und} \quad \sigma(z) := \sum_{j=0}^k \beta_j z^j$$

definiert. $\rho(z)$ nennt man das erste charakteristische Polynom und $\sigma(z)$ das zweite charakteristische Polynom des gegebenen Verfahrens.

Damit können wir nun folgende Aussage für die Konsistenzordnung der linearen Mehrschrittverfahren beweisen.

Satz 3.3.6 Für das lineare k -Schrittverfahren (3.9) sind folgende Aussagen äquivalent:

1. (3.9) ist konsistent von der Ordnung p .
2. Für das Anfangswertproblem $x' = x$, $x(0) = 1$ gilt $\tau(t_i, h) = \mathcal{O}(h^p)$.
3. $\frac{\rho(z)}{\ln(z)} - \sigma(z)$ hat eine p -fache Nullstelle in $z = 1$, d.h. $\frac{\rho(z)}{\ln(z)} - \sigma(z) = \mathcal{O}((z-1)^p)$ für $z \rightarrow 0$.
4. $\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0$ zusammen mit $\sum_{j=0}^k j^m \alpha_j = \sum_{j=0}^k m j^{m-1} \beta_j$, für $m = 0, 1, \dots, p$.

Insbesondere ist für stetig differenzierbares f das lineare k -Schrittverfahren (3.9) konsistent, falls

$$\rho(1) = 0 \quad \text{und} \quad \rho'(1) = \sigma(1).$$

Beweis. Wir beginnen mit 1) \Rightarrow 2): Wegen 1) ist das Verfahren schon für allgemeine gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung konsistent also auch für den speziellen Fall \Rightarrow 2).

2) \Rightarrow 3): Wir können die Lösung des Anfangswertproblems in 2) explizit berechnen: $x(t) = e^t$. Jetzt können wir den lokalen Diskretisierungsfehler angeben

$$\tau(t_i, h) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \alpha_j e^{t_i+jh} - \sum_{j=0}^k \beta_j e^{t_i+jh} = e^{t_i} \left(\frac{1}{h} \rho(e^h) - \sigma(e^h) \right).$$

Es gilt $\tau(t_i, h) = \mathcal{O}(h^p) \Leftrightarrow \frac{1}{h} \rho(e^h) - \sigma(e^h) = \mathcal{O}(h^p)$. Betrachte die Taylor-Entwicklung der Funktion $\ln z$ mit der Entwicklungsstelle $z_0 = 1$. Dann ergibt sich

$$\ln z = \ln(1 + (z-1)) = \ln 1 + \mathcal{O}(z-1) = \mathcal{O}(z-1).$$

Setzen wir nun $z = e^h \Leftrightarrow h = \ln z$ und es folgt

$$\frac{\rho(z)}{\ln(z)} - \sigma(z) = \mathcal{O}(h^p) = \mathcal{O}((\ln z)^p) = \mathcal{O}((z-1)^p).$$

3) \Rightarrow 4): Mit der umgekehrten Substitution des vorherigen Schritts hat folgt aus

$$\frac{1}{h} \rho(e^h) - \sigma(e^h) = \mathcal{O}(h^p)$$

mit $\cdot h$ auf beiden Seiten

$$\mathcal{O}(h^{p+1}) = \rho(e^h) - h\sigma(e^h) = \sum_{j=0}^k \alpha_j e^{jh} - h \sum_{j=0}^k \beta_j e^{jh}.$$

Für die Taylor-Entwicklung von der Funktion e^{jh} um 0 bis zur p -ten Ordnung gilt

$$e^{jh} = \sum_{m=0}^p \frac{j^m}{m!} h^m + \mathcal{O}(h^{p+1}) = 1 + \sum_{m=1}^p \frac{j^m}{m!} h^m + \mathcal{O}(h^{p+1}).$$

Einsetzen in die obige Gleichung ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(h^{p+1}) &= \sum_{j=0}^k \alpha_j \left(1 + \sum_{m=1}^p \frac{j^m}{m!} h^m \right) - h \sum_{j=0}^k \beta_j \left(1 + \sum_{m=1}^p \frac{j^m}{m!} h^m \right) \\ &= \sum_{j=0}^k \alpha_j + \sum_{m=0}^p h^m \sum_{j=0}^k \left(\frac{j^m}{m!} \alpha_j - \frac{j^{m-1}}{(m-1)!} \beta_j \right) + \mathcal{O}(h^{p+1}). \end{aligned}$$

Wir können die Summationsreihenfolge tauschen, da beide Summen endlich sind. Damit die Gleichung erfüllt ist, muss gelten:

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0, \quad \sum_{j=0}^k \left(\frac{j^m}{m!} \alpha_j - \frac{j^{m-1}}{(m-1)!} \beta_j \right) = 0 \quad \text{für } m = 1, \dots, p.$$

$\Rightarrow 4)$.

4) $\Rightarrow 1)$: Wir betrachten die Taylor-Entwicklungen

$$\begin{aligned} x(t_i + jh) &= \sum_{m=0}^p \frac{(jh)^m}{m!} x^{(m)}(t_i) + x^{(p+1)}(\xi) \frac{(jh)^{p+1}}{(p+1)!}, \quad \xi \in [t_i, t_i + jh], \\ x'(t_i + jh) &= \sum_{m=0}^{p-1} \frac{(jh)^m}{m!} x^{(m+1)}(t_i) + x^{(p+1)}(\eta) \frac{(jh)^{p+1}}{(p+1)!}, \quad \eta \in [t_i, t_i + jh]. \end{aligned}$$

Für den lokalen Diskretisierungsfehler gilt dann

$$\begin{aligned} \tau(t_i, h) &= \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \alpha_j x(t_i + jh) - \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_i + jh, x(t_i + jh)) \\ &= \sum_{j=0}^k \left(\frac{1}{h} \alpha_j \left(\sum_{m=0}^p \frac{(jh)^m}{m!} x^{(m)}(t_i) \right) - \beta_j \left(\sum_{m=1}^p \frac{(jh)^{m-1}}{(m-1)!} x^{(m)}(t_i) \right) \right) + \mathcal{O}(h^p) \\ &= x(t_i) \frac{1}{h} \sum_{j=0}^k \alpha_j + \sum_{m=1}^p h^{m-1} x^{(m)}(t_i) \sum_{j=0}^k \left(\frac{j^m}{m!} \alpha_j - \frac{j^{m-1}}{(m-1)!} \beta_j \right) + \mathcal{O}(h^p) \\ &= \mathcal{O}(h^p), \end{aligned}$$

wobei $f(t_i + jh, x(t_i + jh)) = x'(t_i + jh)$ und im letzten Schritt wurden die Eigenschaften von 4) genutzt.

Mit $\rho(1) = 0$ und $\rho'(1) = \sigma(1)$ gilt

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{j=0}^k j \alpha_j = \sum_{j=0}^k \beta_j$$

Also ist 4) für $m = 1 = p$ erfüllt und daraus folgt mit 1) die Konsistenz (von Ordnung $p = 1$). \square

3.4 Verfahren für steife Differentialgleichungen

Durch Betrachtung steifer (2.1.5) Testgleichungen lässt sich leicht bemerken, dass die Verwendung allgemeiner Ein- oder Mehrschrittverfahren nicht sinnvoll ist (evtl bsp in Anhang). Deshalb werden wir ein Mehrrschritverfahren mit möglichst großem Stabilitätsgebiet \mathcal{S} herleiten. Die daraus resultierenden Verfahren werden *Rückwärtsdifferenzenverfahren* (oder BDF) genannt. Hierbei beschränken wir uns auf lineare steife Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten (2.1.5). Zur Herleitung eines BDF-Verfahrens interpolieren wir zuerst die Lösung $x(t)$ von (3.1) durch ein Polynom $p \in \mathbb{R}_k[t]$ mit $p(t_{i+j}) = x(t_{i+j})$ für $j = 0, \dots, k$. Unter Verwendung der Lagrange-Interpolationsformel

$$p(t) = \sum_{l=0}^k x(t_{i+j}) \mathcal{L}_{i+j}(t) \quad \text{mit} \quad \mathcal{L}_{i+j}(t) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^k \frac{t - t_{i+l}}{t_{i+j} - t_{i+l}}$$

erhalten wir die Abschätzung

$$f(t_{i+k}, x(t_{i+k})) = x' \approx p'(t_{i+k}) = \sum_{l=0}^k x(t_{i+j}) \mathcal{L}'_{i+j}(t_{i+k}).$$

Durch Ersetzen der unbekannten Werte $x(t_i + j)$ durch Näherungen u_{i+j} resultiert das BDF-Verfahren

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j u_{i+j} = h f(t_{i+k}, u_{i+k})$$

mit

$$\alpha_j = h \mathcal{L}'_{i+j}(t_{i+k}), \quad j = 0, \dots, k,$$

welches ein implizites lineares k-Schrittverfahren ist.

Satz 3.4.1 *K-Schritt-BDF-Verfahren sind genau dann nullstabil, wenn $k \leq 6$.*

Beweis. [2, S. 381–383]

4 neuronale Netze

In diesem Abschnitt werden wir eine weitere Möglichkeit betrachten, ein Anfangswertproblem zu lösen. Dabei gehen wir genauer auf neuronale Netze ein. Dieser Abschnitt bezieht sich hauptsächlich auf [10]. Obwohl die bisher besprochenen numerischen Verfahren wie Runge-Kutta- und Mehrschrittverfahren heutzutage extrem effizient in Bezug auf Fehlertoleranz und Rechenaufwand sind, gibt es dennoch Vorteile neuronale Netze zu benutzen. Falls beispielsweise die Interesse besteht, die Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung nur in einem bestimmten Zeitpunkt \hat{t} auszuwerten, so müssen in numerischen Verfahren von der Anfangszeit t_0 bis zur gewünschten Zeit \hat{t} iteriert werden. Ein *trainiertes* neuronales Netz repräsentiert jedoch die gesuchte Lösung und ist deshalb in der Lage eine Funktionsauswertung in \hat{t} auszuführen, was im Gegensatz zu den numerischen Verfahren viel Rechenarbeit spart. Neuronale Netze haben in unserem Anwendungsgebiet noch einen ausschlaggebenden Vorteil in Bezug auf Recheneffizienz, welchen wir in Abschnitt 4.2 betrachten werden.

4.1 Struktur neuronaler Netze

Zur Übersicht beschränken wir uns zuerst auf ein neuronales Netz mit einer Eingangsschicht mit 3 Neuronen, zwei versteckte Schichten mit jeweils 3 Neuronen und eine Ausgangsschicht mit 2 Neuronen wie in (1) dargestellt. Die gelben Neuronen repräsentieren hier jeweils ein *on-Neuron*, oder *bias*, welches konstant $x_0^{(l)} = -1$ ist. Allgemein haben wir L Schichten und $n^{(l)}$, $0 \leq l \leq L$, Neuronen pro Schicht, wobei der bias ausgeschlossen ist. Die Gewichte ω_{ij}^l geben an, in welcher Relation die Neuronen der vorherigen Schicht $l-1$ zu den Neuronen der nächsten Schicht l stehen. Dabei werden die Gewichte der Bias-Neuronen mit $b_j^{(l)} := \omega_{0j}^{(l)}$ von den anderen Gewichten unterschieden. Die Signale der Neuronen ab der ersten versteckten Schicht bilden sich aus der Summe

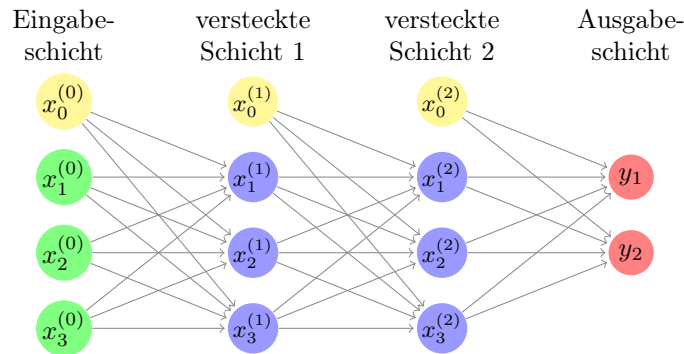


Abbildung 1: neuronales Netzwerk mit 3 Eingabeneuronen (grün), bias (gelb), zwei versteckte Schichten (blau) und 2 Ausgabeneuronen (rot)

aller vorherigen Signale mit entsprechender Gewichtung:

$$s_j^{(l)} = \sum_{i=1}^{n^{(l)}} \omega_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)} - b_j^{(l)}. \quad (4.1)$$

Darauffolgend ergeben sich die Ausgaben der nächsten Schicht l

$$x_j^{(l)} = \Psi(s_j^{(l)}). \quad (4.2)$$

Dabei ist $\Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die sogenannte *Aktivierungsfunktion*. In unserer Anwendung werden wir hauptsächlich den *Tangens hyperbolicus*

$$\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

als Aktivierungsfunktion nutzen. Das Trainieren eines neuronalen Netzes lässt sich im Grunde auf ein Minimierungsproblem einer *Kostenfunktion*

$$C : \mathbb{R}^{(n^{(l-1)}+1) \times n^{(l)} \times L} \rightarrow \mathbb{R}$$

reduzieren. Dazu werden die Konzepte der Forward- und Backwardpropagation, sowie ein *Gradientenverfahren* benötigt, was wir in den folgenden Teilabschnitten besprechen werden.

4.1.1 Forwardpropagation

Forward propagation wird der Vorgang genannt, in dem man das neuronale Netz Schritt für Schritt durchgeht um die Ausgaben der versteckten Schichten zu berechnen. Dabei wird für alle $1 \leq l \leq L$ zuerst (4.1) angewendet, um die jeweiligen Signale zu berechnen und im Anschluss nutzen wir (4.2). Im letzten Schritt der Forwardpropagation erhalten wir die Ausgangsschicht y_j , $1 \leq j \leq n^{(L)}$. Die Forwardpropagation ist eine Vorbereitung des zweiten Schrittes des Lernprozesses, der *Backpropagation*.

4.1.2 Backwardpropagation

Sei $C(Y)$ die oben genannte Kostenfunktion des neuronalen Netzwerks mit der Ausgabe $Y := (y_j)_j$. Dabei ist Y offensichtlich abhängig von den Gewichten ω und den Bias b . Der Gradient der Kostenfunktion ist gegeben durch $\nabla C = (\nabla_\omega C, \nabla_b C)$. (Definition Gradient siehe Appendix)

Das Gewicht $\omega_{ij}^{(l)}$ fügt das Signal des Neurons in der $(l-1)$ -ten Schicht zu dem Signal des Neurons der l -ten Schicht unabhängig von jeglichen anderen Gewichten hinzu. Also ergibt sich folgendes für den Gradienten der Kostenfunktion.

Satz 4.1.1 Die Komponenten des Gradienten ∇C der Kostenfunktion sind gegeben durch

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} &= \frac{\partial C}{\partial s_j^{(l)}} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} \\ \frac{\partial C}{\partial b_j^{(l)}} &= \frac{\partial C}{\partial s_j^{(l)}} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial b_j^{(l)}}\end{aligned}$$

mit $0 \leq i \leq n^{(l-1)}, 1 \leq j \leq n^{(l)}, 1 \leq l \leq L$.

Beweis Es ist $x_j^{(l)} = \phi(s_j^{(l)})$ wie in (4.2). Wir zeigen die Gleichung für $\nabla_\omega C(w, b)$, der Beweis für $\nabla_b C(w, b)$ funktioniert analog mit $i = 0$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial C(\omega, b)}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} &= \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial x_j^{(l)}}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} = \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial \phi(s_j^{(l)})}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} \\ &= \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial \phi(s_j^{(l)})}{\partial s_j^{(l)}} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} = \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial s_j^{(l)}} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}}\end{aligned}$$

Wobei in der letzten Gleichheit die Kettenregel benutzt wurde:

$$\frac{\partial C(\omega, b)}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial \phi(s_j^{(l)})}{\partial s_j^{(l)}} = \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial x_j^{(l)}}{\partial s_j^{(l)}} = \frac{\partial C(\omega, b)}{\partial s_j^{(l)}}$$

□

Nun definieren wir $\delta_j^{(l)} = \frac{\partial C}{\partial s_j^{(l)}}$, welches die Änderung des Fehlers im Bezug zum Signal $s_j^{(l)}$ angibt.

Der zweite Faktor des Gradienten kann man mit Hilfe von (4.1) explizit ausgerechnet werden und somit folgt

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial \omega_{i,j}^{(l)}} &= \delta_j^{(l)} x_i^{(l-1)} \\ \frac{\partial C}{\partial b_j^{(l)}} &= \delta_j^{(l)} x_0^{(l-1)} = -\delta_j^{(l)}.\end{aligned}$$

Hiermit kann der Gradient der Kostenfunktion vereinfacht werden zu

$$\nabla C = \delta_j^{(l)} (x_i^{(l-1)}, -1).$$

Es fällt auf, dass für die Berechnung des Gradienten der Kostenfunktion nur die verschiedenen $\delta_j^{(l)}$ benötigt werden, da wir die $x_i^{(l-1)}$ schon in der Forwardpropagation berechnet haben. Diese $\delta_j^{(l)}$ werden mit dem sogenannten *Backpropagation*-Algorithmus berechnet. Diesen werden wir im folgenden herleiten. Im Beweis von Satz (4.1.1) haben wir gesehen, dass für $\delta_j^{(L)}$ gilt

$$\delta_j^{(L)} = \frac{\partial C}{\partial x_j^{(L)}} \frac{\partial x_j^{(L)}}{\partial s_j^{(L)}} = \frac{\partial C}{\partial x_j^{(L)}} \phi'(s_j^{(L)}) = \frac{\partial C}{\partial y_j} \phi'(s_j^{(L)}).$$

Betrachtet man nun die vorletzte Schicht bzw. die letzte versteckte Schicht, so fällt auf, dass das Signal $s_j^{(L-1)}$ jedes Signal in der Ausgangsschicht beeinflusst und damit folgt mit Hilfe der mehrdimensionalen Kettenregel, dass

$$\delta_i^{(L-1)} = \sum_{j=1}^{n^{(L)}} \frac{\partial C}{\partial s_j^{(L)}} \frac{\partial s_j^{(L)}}{\partial s_i^{(L-1)}} = \sum_{j=1}^{n^{(L)}} \delta_j^{(L)} \frac{\partial s_j^{(L)}}{\partial s_i^{(L-1)}}.$$

Allgemein betrachtet beeinflusst das Signal $s_j^{(l-1)}$ ausschließlich alle Signale in der nachfolgenden Schicht, also folgt aus der oben hergeleiteten Formel

$$\delta_i^{(l-1)} = \sum_{j=1}^{n^{(l)}} \delta_j^{(l)} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial s_i^{(l-1)}}, \quad 1 \leq i \leq n^{(l-1)}. \quad (4.3)$$

Der zweiten Teil der Summe kann explizit ausrechnen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial s_i^{(l-1)}} &= \frac{\partial}{\partial s_i^{(l-1)}} \left(\sum_{i=0}^{n^{(l-1)}} \omega_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial s_i^{(l-1)}} \left(\sum_{i=1}^{n^{(l-1)}} \omega_{ij}^{(l)} \phi(s_i^{(l-1)}) - b_j^{(l)} \right) \\ &= \omega_{ij}^{(l)} \phi'(s_i^{(l-1)}). \end{aligned}$$

Setzen wir jetzt das Ergebnis in (4.3), so erhält man die zentrale Formel des *Backpropagation*-Algorithmus:

$$\delta_i^{(l-1)} = \phi'(s_i^{(l-1)}) \sum_{j=1}^{n^{(l)}} \delta_j^{(l)} \omega_{ij}^{(l)} \quad 1 \leq i \leq n^{(l-1)}. \quad (4.4)$$

4.1.3 Gradientenverfahren

Ein allgemeines Gradientenverfahren mit der *learning rate* $\eta > 0$ hat die Form

$$\begin{aligned} \omega_{ij}^{(l)[k+1]} &= \omega_{ij}^{(l)[k]} - \eta \delta_j^{(l)[k]} x_i^{(l-1)[k]} \\ b_{ij}^{(l)[k+1]} &= b_{ij}^{(l)[k]} + \eta \delta_j^{(l)[k]}. \end{aligned}$$

Unser Fokus in Bezug auf Gradientenverfahren wird auf der *Adam* (engl. Adaptive moment Estimation) liegen. Sei $g^{[k]} := \nabla C(\omega^{[k]})$ der Gradient der Kostenfunktion nach den Gewichten (inklusive bias) in der k -ten Iteration. Dann ist das Adams-Verfahren mit den Variablen $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1)$ und den Momenten $m^{[0]} = 0, v^{[0]} = 0$

$$\begin{aligned} m^{[k]} &= \beta_1 m^{[k-1]} + (1 - \beta_1) g^{[k]} \\ v^{[k]} &= \beta_2 v^{[k-1]} + (1 - \beta_2) (g^{[k]})^2 \end{aligned}$$

und deren Korrekturen

$$\begin{aligned} \hat{m}^{[k]} &= \frac{m^{[k]}}{(1 - \beta_1^k)} \\ \hat{v}^{[k]} &= \frac{v^{[k]}}{(1 - \beta_2^k)} \end{aligned}$$

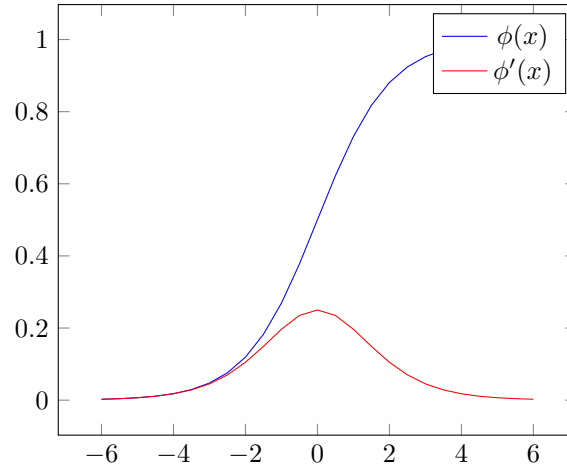


Abbildung 2: Graphen der Aktivierungsfunktion Sigmoid und dessen Ableitung.

gegeben durch

$$\omega_{ij}^{[k+1]} = \omega_{ij}^{[k]} - \eta \frac{\hat{m}^{[k]}}{\sqrt{(|\hat{v}^{[k]}|) + \epsilon}}.$$

Dabei ist $\eta > 0$ die learning rate und $\epsilon > 0$ verhindert eine Division durch 0. Eine Voreinstellung der Parameter wäre beispielsweise $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.99$, $\epsilon = 10^{-8}$ und $\eta = 0.001$. Zu Beginn ($k = 0$) müssen jedoch schon Gewichte gegeben sein, um g_k berechnen zu können. Dazu werden wir uns in Abschnitt(4.3) genauere Gedanken machen.

4.1.4 Verschwindender und explodierender Gradient

Die Berechnung des Gradienten ∇C ist fehleranfällig wobei zwei folgende Probleme auftreten können:

verschwindender Gradient Das Problem des verschwindenden Gradienten charakterisiert sich durch immer kleiner werdende $\delta_j^{(l)}$, was wiederum direkt zu einem verschwindenden Gradienten, also $\nabla C \approx 0$, führt.

Angenommen: Die Aktivierungsfunktion Φ ist gegeben durch die Sigmoidfunktion, d.h. $\phi(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ und die Gewichte sind zufällig initialisiert, wobei für alle $\omega_{ij}^{(l)} < 1$ gilt.

Sobald $|x|$ groß wird, ist die Ableitung $\phi'(x) \approx 0$ (siehe Fig (2)). Dies hat die Auswirkung, dass $\delta_j^{(L)}$ bei betragsmäßig großen Signalen um den Faktor $\phi'(s_j^{(L)})$ kleiner wird. Dadurch werden die nachfolgenden Werte

$$\delta_i^{(l-1)} = \phi'(s_i^{(l-1)}) \sum_{j=1}^{n^{(l)}} \delta_j^{(l)} \omega_{ij}^{(l)}$$

auch immer kleiner, da sowohl $\delta_j^{(l)}$ als auch $\omega_{ij}^{(l)}$ klein sind. Die Werte von δ_i werden so klein, dass sie gewichtet mit hinreichend kleiner learning rate ($\mu < 1$) im Gradientenverfahren keine Auswirkung auf das neue Gewicht haben. Für ein allgemeines Gradientenverfahren gilt dann

$$\omega_{ij}^{(l)[k+1]} = \omega_{ij}^{(l)[k]} - \underbrace{\mu \delta_j^{(l)[k]} x_i^{(l-1)[k]}}_{\approx 0} \approx \omega_{ij}^{(l)[k]}.$$

Um diesem Problem entgegenzuwirken, gibt es mehrere Verbesserungsmöglichkeiten.

Möglichkeit 1 : Man wählt eine andere Aktivierungsfunktion. Die Effektivität des allgemeinen Gradientenverfahren sinkt rapide bei Funktionen mit Plateaus. Da die Sigmoidfunktion bei betragsmäßig großen Signalen für einen verschwindenden Gradienten ∇C sorgt (was zu Plateaus führt), ist sie für neuronale Netze mit mehreren versteckten Schichten nicht geeignet. Aktivierungsfunktionen,

wie zum Beispiel die ReLU-Funktion ($\phi(x) = \max(0, x)$) mit der Ableitung $\phi'(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$,

sind besser geeignet für tiefe neuronale Netze, da dessen Ableitungen keine verkleinernde Wirkung auf δ_i haben, sodass der Gradient ∇C nicht verschwindet.

Möglichkeit 2 : Eine geschicktere Initialisierung der Gewichte $\omega_{ij}^{(l)}$ wie in Abschnitt (4.3)

explodierender Gradient Analog zum verschwindenden Gradienten existiert auch das Problem des *explodierenden* Gradienten, in dem $\delta_j^{(l)} > 1$ ist.

Angenommen: Die Gewichte sind zufällig initialisiert, wobei für alle $\omega_{ij}^{(l)} > 1$ und $b_j^{(l)} = 0$ gilt. Bei linearer Regression werden die Signale $s_j^{(l)}$ beispielsweise für wachsendes l immer größer, da

$$x_j^{(l)} = \phi(s_j^{(l)}) = s_j^{(l)} = \sum_{i=1}^{n^{(l)}} \underbrace{\omega_{ij}^{(l)} x_i^{(l-1)}}_{>1}$$

gilt. Solange $\frac{\partial C}{\partial y_i} > 1$ gilt bei einer Aktivierungsfunktion mit $\phi'(x) > 1$ auch $\delta_j^{(L)} > 1$, was zu einem explodierenden Gradienten ∇C führt. Falls $\phi'(x) = 1$ (wie beispielsweise ReLU bei positiver Eingabe oder linearer Aktivierungsfunktion), so werden die Werte der δ_i zwar nicht direkt von der Ableitung der Aktivierungsfunktion beeinflusst, aber bei einem sehr tiefgehendem Netz ($L > 50$) werden die Werte der δ_i trotzdem groß, da $\omega_{ij}^{(l)} > 1$ gilt. Ähnlich wie beim verschwindenden Gradienten werden wir später eine geschickte Initialisierung der Gewichte herleiten, um diesem Problem entgegenzuwirken.

4.1.5 Batch training

Während des Lernprozesses eines neuronalen Netzes wird über die gesamten Eingangsdaten $X^{(0)}$ iteriert. Dabei nennt man ein einzelnes Element von $X^{(0)}$ *Probe* (engl. sample). Eine Ansammlung an samples heißt wiederum *Batch*. Außerdem werden die Lernprozesse auch *Epochen* genannt, dessen Anzahl angibt, wie oft das neuronale Netz die gegebenen Eingangsdaten zum Training nutzt. Es macht Sinn, die Eingangsdaten in Batches einzuteilen, denn so wird Speicherplatz gespart und an Rechengeschwindigkeit gewonnen, da die Gewichte erst nach dem Durchgang eines Batches aktualisiert werden, anstatt sie nach jeder Probe zu berechnen. Dies wird realisiert, indem wir die Gradienten der Proben in einem Batch mit Hilfe der Backpropagation berechnen und im Anschluss den Durchschnitt

$$\widetilde{\nabla C} = \frac{1}{|B|} \sum_{i=1}^{|B|} \nabla C(X^{(0,i)})$$

verwendet, wobei $|B|$ die Größe der Batches angibt und $X^{(0,i)}$, $1 \leq i \leq |B|$, eine Probe des Batches B ist. Dieser Mittelwert wird dann durch das gegebene Gradientenverfahren verwendet, um die Gewichte $\omega_{ij}^{(l)}$ zu aktualisieren. Dabei spielt die Größe der Batches $|B|$ eine wichtige Rolle, denn wenn $|B|$ zu klein ist, so werden die Abschätzungen des Durchschnitts zu ungenau, was wiederum den Lernprozess verlangsamen würde.

4.2 Prinzip der Lösungspakete

Wir werden uns in diesem Abschnitt an der wissenschaftliche Arbeit [11] orientieren. Unsere Problemstellung liefert im Allgemeinen keine beschriebene Datenmenge (engl. labeled data), mit dem wir unser neuronales Netz trainieren können. Wir haben lediglich die gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung

$$x' = f(t, x) \tag{4.5}$$

mit den Anfangsbedingungen $x(t_0) = x_0$ gegeben. Nun werden wir diese parametrisiert durch physikalische Parameter θ nach 0 auflösen. Dabei definieren wir die Funktion

$$\begin{aligned} G : \mathbb{R}^n \times C([t_0, t_f], \mathbb{R}) \times [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^p &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ G(x, x', t, \theta) &= 0, \end{aligned} \tag{4.6}$$

wobei p die Anzahl der physikalischen Parametern ist. Hierfür werden wir ein sogenanntes *Lösungspaket* (engl. solution bundle) bilden, welches aus den Lösungen der Gleichung (4.6) besteht.

Definition 4.2.1 Seien die Teilmengen $X_0 \subset \mathbb{R}^n$, $\Theta \subset \mathbb{R}^p$ und $[t_0, t_f] \subset \mathbb{R}$ gegeben. Dann heißt

$$x(t; x_0, \theta)$$

Lösungspaket der gewöhnlichen Differentialgleichung (4.6), wobei $t \in [t_0, t_f]$, $x_0 \in X_0$ und $\theta \in \Theta$.

Unser Ziel ist es diese Lösungspakete mit Hilfe neuronaler Netze zu approximieren. Wir definieren die Approximation der Lösung über (X_0, Θ) mit

$$\hat{x}(t; x_0, \theta) = x_0 + a(t)N(t; x_0, \theta; \omega), \quad (4.7)$$

wobei $N : \mathbb{R}^{1+n+p} \rightarrow \mathbb{R}^n$ das neuronale Netz mit den Gewichten ω repräsentiert und $a : [t_0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}$ hat die Eigenschaft $a(t_0) = 0$. Hierdurch wird das Erfüllen der Anfangswertbedingungen in der Abschätzung (4.7) sichergestellt. Durch wurde Tests in [11] wurde herausgefunden, dass sich für a die Form

$$a(t) = 1 - e^{t_0 - t}$$

besonders gut eignet. Zusammengefasst wollen wir für jedes Lösungspaket (t_i, x_{0i}, θ_i) eine Approximation \hat{x} finden, so dass

$$G(\hat{x}(t_i; x_{0i}, \theta_i), \hat{x}'(t_i; x_{0i}, \theta_i), t_i; \theta_i) \approx 0.$$

Die Kostenfunktion ergibt sich dann durch

$$L = \frac{1}{|B|} \sum_{(t_i, x_{0i}, \theta_i) \in B} b(t_i) \|G(\hat{x}(t_i; x_{0i}, \theta_i), \hat{x}'(t_i; x_{0i}, \theta_i), t_i; \theta_i)\|_2^2, \quad (4.8)$$

wobei $b : [t_0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}$ durch $b(t) = e^{\lambda(t_0 - t)}$ gegeben ist. Die Batches B bestehen aus Ansammlungen von 3-Tupel (t_i, x_{0i}, θ_i) , also $B = \{(t_i, x_{0i}, \theta_i) \in [t_0, t_f] \times X_0 \times \Theta\}$ mit der batch size $|B|$. Mit vorgegebenen Gebieten für X_0 und Θ durch die Problemstellung (bspw. physikalische Zusammenhänge der gegebenen Differentialgleichung) können die Eingabewerte bestimmt werden. Dafür genügt in den meisten Fällen eine zufällige Wahl aus einer Gleichverteilung der Intervalle X_0 und Θ . Da wir in unserer Anwendung theoretisch unendlich Eingangsdaten zur Verfügung haben, kann der Begriff einer *Epoche* nicht definiert werden. Stattdessen repräsentiert jeder Batch eine einzigartige Probe die für den Trainingsablauf genutzt wird, wobei eine steigende Anzahl der samples eine bessere Approximation liefert. Das Problem des *Overfittings* kann hierbei nicht auftreten, da es nicht zu viele relevante Variablen bzw. Trainingsdaten gibt. Der Korrekturfaktor $b(t_i)$ wird zur Beeinflussung des lokalen Fehlers

$$\tau(t_i; x_{0i}, \theta_i) := G(\hat{x}(t_i; x_{0i}, \theta_i), \hat{x}'(t_i; x_{0i}, \theta_i), t_i; \theta_i)$$

eingeführt. Ähnlich wie in Satz (3.1.5) für Einschrittverfahren können wir auch hier einen Zusammenhang des lokalen und dem globalen Fehlers des neuronalen Netzes zeigen. Dabei ist der globale Fehler des neuronalen Netzes gegeben mit $e(t) = \hat{x}(t) - x(t)$, wobei x die Lösung von (4.5) ist.

Satz 4.2.2 Für (4.5) ist der lokale Fehler τ gegeben durch $\tau(t) = \hat{x}'(t) - f(t, \hat{x})$. Es gilt

$$\|e(t)\|_2 = \frac{\tau_{t_f}}{L} \left(e^{L(t-t_0)-1} \right),$$

wobei $\tau_{t_f} = \max_{t_0 \leq t \leq t_f} \|\tau(t)\|_2$ und L die Lipschitz-Konstante der rechten Seite f .

Beweis. Der lokale Fehler ergibt sich durch einfaches Konstituieren von G . Für den globalen Fehler gilt

$$\begin{aligned} e(t) &= \hat{x}(t) - x(t) \\ \Leftrightarrow \hat{x}(t) &= e(t) + x(t). \end{aligned}$$

Einsetzen in den lokalen Fehler ergibt

$$\begin{aligned} \tau(t) &= e'(t) + x'(t) - f(t, e(t) + x(t)) \\ \Leftrightarrow e'(t) &= \tau(t) - x'(t) + f(t, e(t) + x(t)). \end{aligned}$$

x die Lösung von (4.5), also ist $x' = f(t, x(t))$. Des Weiteren ist f Lipschitz-stetig, das heißt es gilt $\|f(t, x(t) + e(t)) - f(t, x(t))\|_2 \leq L \|e(t)\|_2$. Also kann man die Norm der rechten Seite obiger Gleichung schreiben als

$$\begin{aligned} \|\tau(t) + f(t, e(t) + x(t)) - x'(t)\|_2 &= \|\tau(t) + f(t, e(t) + x(t)) - f(t, x(t))\|_2 \\ &\leq \|\tau(t)\|_2 + L \|e(t)\|_2 \\ &\leq \tau_{t_f} + L \|e(t)\|_2. \end{aligned}$$

Dabei wurde die Dreiecksungleichung benutzt und der lokale Fehler wird durch das Maximum aller lokalen Fehler abgeschätzt. Jetzt suchen wir eine Funktion $E(t)$ die folgende Gleichung erfüllt

$$E'(t) = \tau_{t_f} + LE(t),$$

wobei $0 \leq \|e(t)\|_2 \leq E(t)$ und $E(t_0) = 0$ gilt. Also haben wir eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung welche mit (2.10) berechnen lässt

$$\begin{aligned} E(t) &= e^{L(t-t_0)} E(t_0) + \int_{t_0}^t e^{L(t-s)} \tau_{t_f} ds \\ &= \tau_{t_f} e^{Lt} \int_{t_0}^t e^{-Ls} ds \\ &= \frac{\tau_{t_f}}{L} \left(e^{L(t-t_0)} - 1 \right). \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\|e(t)\|_2 \leq \frac{\tau_{t_f}}{L} \left(e^{L(t-t_0)} - 1 \right),$$

was sich mit (3.1.5) vergleichen lässt. \square

Hierdurch erkennt man, dass der globale Fehler durch einen frühen lokalen Fehler exponentiell mit der Zeit wachsen kann. Deshalb ist es sinnvoll, die exponentiell fallende Korrekturfunktion b zu nutzen, um den lokalen Fehler in frühen Zeitpunkten zu skalieren.

4.2.1 curriculum learning

TODO: Titel überarbeiten

Bei Menschen oder auch Tieren lässt sich beobachten, dass sie unter Verfolgung eines Lehrplans effektiver Sachverhalte lernen und verstehen. Ein ähnliches Prinzip können sich auf neuronale Netze übertragen. Genauere Diskussion dieses Prinzips lässt sich in [12] nachlesen. Es gibt in unserer Anwendung der Lösungspakete Fälle, in den sich eine „Vereinfachung“ der Trainingsdaten bzw. Batches anbietet. Ein genaues Beispiel werden wir in (5) betrachten. Hierzu werden wir die Batches B bearbeiten, in dem wir das Zeitintervall verkleinern, also erhalten wir neue Batches B' mit

$$B' := \{(t_i, x_{0i}, \theta_i) \in [t_0, t_m] \times X_0 \times \Theta\},$$

wobei $t_m < f_f$ und m die Anzahl der bereits trainieren Batches ist. Wir lassen also das neuronale Netz zuerst mit einer kleinen Menge an Daten trainieren und erhöhen diese in Abhängigkeit der bereits trainierten Batches.

4.3 Gewichtsinitialisierung

Die Gewichtsinitialisierung ist ein entscheidender Faktor um Probleme des explodierenden und verschwindenden Gradienten entgegenzuwirken. In diesem Abschnitt werden wir ein Intervall bestimmen, welches dann zur Initialisierung der Gewichte ω_{ij} genutzt wird. Dazu werden betrachten wir die $(l-1)$ -te und l -te Schicht eines neuronalen Netzes und die zugehörigen Gewichte $\omega_{ij} := \omega_{ij}^{(l)}$ sowie $x_i^{(l-1)}$ als unabhängige, identisch verteilte Zufallszahlen betrachten. Außerdem gilt für den Erwartungswert der Gewichte $\mathbb{E}(\omega_{ij}) = 0$ und die bias b werden mit 0 initialisiert. Für die Varianz der Ausgabe der l -ten Schicht $x_i^{(l)}$ ergibt sich durch

$$\begin{aligned} \text{Var}(x_j^{(l)}) &= \text{Var} \left(\Phi \left(\sum_i \omega_{ij} x_i^{(l-1)} \right) \right) \\ &= n^{(l-1)} \Phi'(0)^2 \text{Var}(\omega_{ij}) \text{Var}(x_i^{(l-1)}). \end{aligned}$$

(Berechnung siehe Anhang) Unter der Voraussetzung, dass die Varianz der beiden Schichten gleich bleibt, also $Var(x_j^{(l)}) = Var(x_j^{(l-1)})$, so ergibt sich für die Varianz der Gewichte

$$Var(\omega_{ij}) = \frac{1}{n^{(l-1)}\Phi'(0)}.$$

Die gegebene Voraussetzung macht Sinn um die oben erwähnten Probleme des explodierenden bzw. verschwindenden Gradienten zu vermeiden. Genau wie bei der Varianz der Ausgaben $x_j^{(l-1)}$ und $x_j^{(l)}$ ist es auch vorteilhaft die Varianz der Kostenfunktion ausgehend von der Backpropagation gleichzustellen. Also folgt aus

$$Var\left(\frac{\partial C}{\partial \omega_{ij}^{(l-1)}}\right) = Var\left(\frac{\partial C}{\partial \omega_{ij}^{(l)}}\right)$$

mit Hilfe einiger stochastischer Umformungen und der Annahme, dass $\Phi(x) = x$, die Gleichung

$$Var(\delta_j^{(l-1)}) = Var(\delta_j^{(l)}),$$

wobei δ_j eine aus der Backpropagation resultierende Variable ist. Hiermit folgt für Varianz der Gewichte

$$Var(\omega_{ij}) = \frac{1}{n^{(l)}}.$$

Das Erfüllen beider Voraussetzungen führt zu einer restriktiven Bedingung $n^{(l-1)} = n^{(l)}$, weshalb man sich für

$$Var(\omega_{ij}) = \frac{2}{n^{(l-1)} + n^{(l)}}$$

einigt. Werden die Gewichte nun gleichverteilt auf $[-a, a]$, dessen Varianz $\frac{a^2}{3}$ gleichgestellt mit den der Gewichte $a = \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n^{(l-1)} + n^{(l)}}}$ ergibt, also

$$\omega_{ij}^{(l)} \sim \left[-\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n^{(l-1)} + n^{(l)}}}, \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n^{(l-1)} + n^{(l)}}} \right]$$

für alle $1 \leq i \leq n^{(l-1)}$, $1 \leq j \leq n^l$, $1 \leq l \leq L$ Diese Verteilung heißt *Xavier-* oder *Glorot-Initialisierung*. In Betracht der Aktivierungsfunktion $\Phi(x) = \tanh(x)$ kann man durch ähnliches Vorgehen eine Initialisierung mit der Gleichverteilung

$$\omega_{ij}^{(l)} \sim \left[-\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n^{(l-1)}\tanh(2)}}, \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n^{(l-1)}\tanh(2)}} \right]$$

erzielen.

4.4 Fortsetzen einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

Es ist möglich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der Anfangsbedingungen diese mit Hilfe sowohl eines Runge-Kutta-Verfahrens als auch neuronalen Netzen fortzusetzen. Der Vorteil hierbei ist es beispielsweise bei der die Wahrscheinlichkeit der Position eines Körpers im Weltall zu einem bestimmten Zeitpunkt t berechnen zu können. Für Details zur Nutzung von (impliziten) Runge-Kutta-Verfahren wird auf [13] verwiesen. Obwohl Runge-Kutta-Verfahren sehr genau sind, haben neuronale Netze den Vorteil, eine Funktion simulieren zu können. Es muss also für die gefragte Zeit t nicht iteriert werden, sondern kann einfach eingesetzt werden. Außerdem können so für mehrere verschiedene physikalische Parameter Wahrscheinlichkeitsverteilungen angegeben werden, ohne jede Approximation einzeln berechnen zu müssen. Sei also ein trainiertes neuronales Netz gegeben. Das Lösungspaket $x(t; x_0)$ gibt eine Koordinatentransformation von x_0 nach x_t an. Unter der Annahme, dass die Transformation $f : X_0 \rightarrow X_t, f(x_0) = x(t; x_0)$ invertierbar und differenzierbar ist, kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines späteren Zeitpunktes t angegeben werden mit

$$p_t(x_t) = p_0(f^{-1}(x_t)) \|J_{f^{-1}}\|_2,$$

wobei $f^{-1}(x_t)$ das Inverse der Transformation $f(x_0) = x(t; x_0)$ und $J_{f^{-1}} = \frac{\partial x_0}{\partial x_t}$ die Jacobi-Matrix von f^{-1} ist. Falls jedoch die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Anfangszeit $p_0(x_0)$ gesucht ist, so lässt sich diese ohne Inverse berechnen lassen:

$$p_0(x_0) = p_t(f(x_0))|J_f|,$$

wobei $J_f = \frac{\partial x_t}{\partial x_0}$ die Jacobi-Matrix von f ist. Da das Generieren einer Zufallszahl aus der Wahrscheinlichkeitsverteilung p in der Regel mit hohem Rechenaufwand verbunden ist, nutzt man bei zu großen Dimensionen der Anfangsbedingungen und physikalischen Parametern stattdessen sogenannte *Markow-Ketten-Monte-Carlo-Verfahren* (kurz MCMC-Verfahren). Diese wählen die gesuchten Daten mit Hilfe einer Markow-Kette und sind Dimensionsunabhängig: Genauer zu MCMC-Verfahren kann in [14] nachgelesen werden.

5 Anwendungsbeispiele

Literatur

- [1] Peter Deufhard, Folkmar Bornemann: *Numerische Mathematik 2 Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 3. Auflage. Berlin, New York: Walter de Gruyter.
- [2] Ernst Hairer, Gerhard Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations I Nonstiff Problems*. Springer.
- [3] Bernd Aulbach: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2004.
- [4] Jan Frederik Sundermeier: „Der Fixpunktsatz von Schauder“. In: (), S. 31.
- [5] Harro Heuser: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 6. Auflage. ISBN: 978-3-8348-0705-2.
- [6] Lisa Beck: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 12. Feb. 2018.
- [7] *Matrixexponential*. URL: <https://www.biancahoege1.de/mathe/analysis/matrixexponential.html> [17. Feb. 2022].
- [8] Guido Walz: *Lexikon der Mathematik*. 1. Bd. 1. Spektrum Akademischer Verlag. ISBN: 3-8274-0439-8.
- [9] Tatjana Stykel: *Skript zur Vorlesung Numerik Gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Sommersemester 2020.
- [10] Ovidiu Calin: *Deep Learning Architectures A Mathematical Approach*. Springer. ISBN: 978-3-030-36720-6.
- [11] Cedric Flamant, Pavlos Protopapas und David Sondak: *Solving Differential Equations Using Neural Network Solution Bundles*. 16. Juni 2020. arXiv: 2006.14372 [physics]. URL: <http://arxiv.org/abs/2006.14372> [15. Feb. 2022].
- [12] Yoshua Bengio u. a.: „Curriculum Learning“. In: *Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning - ICML '09*. The 26th Annual International Conference. Montreal, Quebec, Canada: ACM Press, 2009, S. 1–8. ISBN: 978-1-60558-516-1. URL: <http://portal.acm.org/citation.cfm?doid=1553374.1553380> [19. Feb. 2022].
- [13] Jeffrey M Aristoff, Joshua T Horwood und Aubrey B Poore: „IMPLICIT RUNGE-KUTTA METHODS FOR UNCERTAINTY PROPAGATION“. In: (), S. 8.
- [14] *Sampling Methods*. URL: <https://ermongroup.github.io/cs228-notes/inference/sampling/> [20. Feb. 2022].

Abbildungsverzeichnis

1	neuronales Netzwerk mit 3 Eingabeneuronen (grün), bias (gelb), zwei versteckte Schichten (blau) und 2 Ausgabeneuronen (rot)	21
2	Graphen der Aktivierungsfunktion Sigmoid und dessen Ableitung.	24