## Zusammenfassung vom 29.04.2020

#### Gewöhnliche Differentialgleichungen: Anfangswertproblem

- Problemstellung ist eine DGL der Form  $\dot{\mathbf{y}}(t) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$   $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$
- Lösung ergibt sich formal durch Integration  $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \ \mathbf{f}(t,\mathbf{y}(t))$
- Mithilfe der Taylorentwicklung von y und f findet man verschiedene Approximationen
- Euler-Cauchy Verfahren ergibt eine Approximation in 1. Ordnung

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + hf_n^{(\mu)} + O(h^2)$$

## Gewöhnliche Differentialgleichungen: Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung

• Entwicklung zu höheren Ordnung ist natürlich möglich und verbessert das Ergebnis

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \left[ f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + (t - t_{n+\frac{1}{2}}) \frac{d}{dt} f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2) \right]$$

$$= y_n^{(\mu)} + h f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} + O(h^3)$$

Trick: höhere Genauigkeit durch Entwicklung am Mittelpunkt des Intervalls

ergibt unser erstes Verfahren vom Runge-Kutta Typ

$$\mathbf{k} = h \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right) = h \mathbf{f}_n$$

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + h f^{(\mu)} \left( t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k}}{2} \right) + O\left(h^3\right)$$

Die Wahl der Koeffizienten der verschiedenen Integrationsverfahren ist nicht eindeutig.

Z.B. kann man mit der Trapezregel für das Integral die **Trapezmethode Verfahren** (von Heun) herleiten (wird in den Übungen betrachtet und mit den anderen Verfahren verglichen).

Es ergibt sich die Vorschrift:

$$\mathbf{k} = h \ \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right)$$

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f^{(\mu)} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right) + \frac{h}{2} f^{(\mu)} \left( t_n + h, \mathbf{y}_n + \mathbf{k} \right) + O\left( h^3 \right)$$

Nach der Taylorentwicklung um  $(t_n, y_n)$ :

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} \left( h \partial_t f_n^{(\mu)} + \left( \partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) k^{(\nu)} \right) + O\left( h^3 \right)$$

$$= y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + \frac{h^2}{2} \left( \partial_t f_n^{(\mu)} + \left( \partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) f_n^{(\nu)} \right) + O(h^3)$$

Das stimmt mit dem allgemeinen Ausdruck bis zur Ordnung  $O(h^2)$  überein.  $\checkmark$ 



Die Wahl der Koeffizienten der verschiedenen Integrationsverfahren ist nicht eindeutig.

Z.B. kann man mit der Trapezregel für das Integral die **Trapezmethode Verfahren** (von Heun) herleiten (wird in den Übungen betrachtet und mit den anderen Verfahren verglichen).

Es ergibt sich die Vorschrift:

$$\mathbf{k} = h \ \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right)$$

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f^{(\mu)} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right) + \frac{h}{2} f^{(\mu)} \left( t_n + h, \mathbf{y}_n + \mathbf{k} \right) + O\left( h^3 \right)$$

Nach der Taylorentwicklung um  $(t_n, y_n)$ :

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} \left( h \partial_t f_n^{(\mu)} + \left( \partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) k^{(\nu)} \right) + O\left( h^3 \right)$$

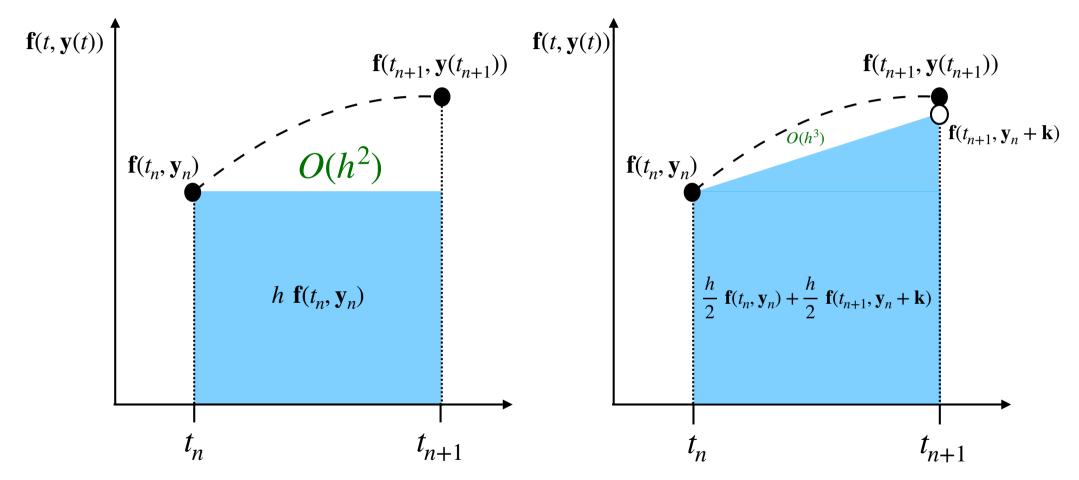
$$= y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + \frac{h^2}{2} \left( \partial_t f_n^{(\mu)} + \left( \partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) f_n^{(\nu)} \right) + O(h^3)$$

Das stimmt mit dem allgemeinen Ausdruck bis zur Ordnung  $O(h^2)$  überein.  $\checkmark$ 



# **Euler-Cauchy-Verfahren**

# **Trapezmethode**



$$\mathbf{k} = h \ \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right)$$

Um höhere Ordnung zu erreichen, lassen sich allgemeine Runge-Kutta (RK) Verfahren in der Form

"Hilfsrichtungen" 
$$\mathbf{k_q} = h \mathbf{f} \left( t_n + a_q h, \mathbf{y}_n + \sum_{r=1}^{q-1} b_{qr} \mathbf{k_r} \right)$$

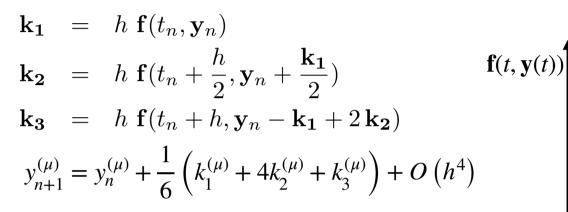
$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{q=1}^p c_q \mathbf{k_q} + O(h^{M+1})$$

schreiben. Die Koeffizienten werden dabei (nicht eindeutig) durch die allgemeine Taylor-Entwicklung festgelegt. Man findet, dass  $M \leq p \leq M+2$ , also optimal ist p=M

# Beispiele:

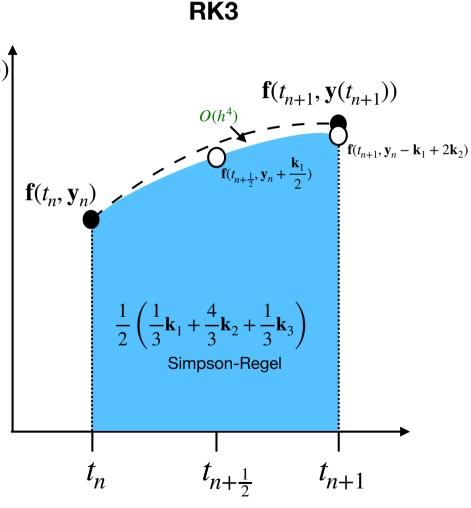
# Man kann für die Integration die Simpson-Regel nutzen und erhält ein

## Runge-Kutta Verfahren 3. Ordnung



#### also mit den Koeffizienten:

$$a_1 = 0$$
 $a_2 = \frac{1}{2}$   $b_{11} = \frac{1}{2}$ 
 $a_3 = 1$   $b_{21} = -1$   $b_{22} = 2$ 
 $c_1 = \frac{1}{6}$   $c_2 = \frac{2}{3}$   $c_3 = \frac{1}{6}$ 



Hier sind drei Funktionsauswertungen notwendig

# Das Standard Runge-Kutta Verfahren (RK4) erfüllt diese Bedingung in 4. Ordnung

$$\mathbf{k_1} = h \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n)$$

$$\mathbf{k_2} = h \mathbf{f}(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k_1}}{2})$$

$$\mathbf{k_3} = h \mathbf{f}(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k_2}}{2})$$

$$\mathbf{k_4} = h \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{y}_n + \mathbf{k_3})$$

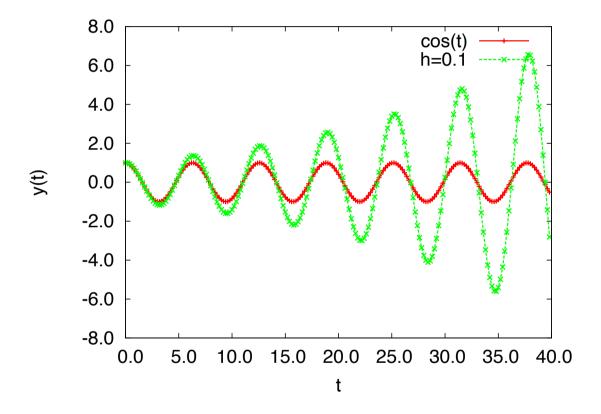
$$\mathbf{y_{n+1}} = \mathbf{y_n} + \frac{1}{6} (\mathbf{k_1} + 2\mathbf{k_2} + 2\mathbf{k_3} + \mathbf{k_4}) + O(h^5)$$

Die Implementierung des Verfahrens erfolgt genauso, wie auch bei den niedrigeren Ordnungen. Codes mit den entsprechenden Funktionen liegen ebenfalls auf Ecampus: Runge-Kutta-3.c Runge-Kutta-4.c

SS 2020 Computerphysik

#### **Stabilität**

In den Übungen betrachten wir auch den harmonischen Oszillator mit dem Euler-Verfahren.



Es ist einfach zu sehen, dass der Fehler der numerischen Lösung mit der Zeit stark zunimmt. Wir wollen im Folgenden deswegen an Hand dieses Beispiels die **Stabilität des Verfahrens** untersuchen, d.h. wie ein Verfahren Fehler akkumuliert.

Zunächst hat unser Problem die generelle Form  $\dot{\mathbf{y}}(t) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \; \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t,\mathbf{y}(t))$ 

und das Lösungsverfahren kann mithilfe einer Abbildung T dargestellt werden:  $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y}_n)$ 

Welchen Einfluss hat ein Fehler  $\mathbf{e}_n$  in der Anfangsbedingung zur Zeit  $t_n$  auf die Näherung zur Zeit  $t_{n+1}$ ?

$$\mathbf{y}_{n+1} + \mathbf{e}_{n+1} = \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y}_n + \mathbf{e}_n)$$

Für genügend kleine Fehler kann man die Abbildung in einer Taylor-Reihe entwicklen

$$\mathbf{T}\left(t_{n}, \mathbf{y_{n}} + \mathbf{e_{n}}\right) = \mathbf{T}\left(t_{n}, \mathbf{y_{n}}\right) + \left(\mathbf{e_{n}} \cdot \nabla\right) \mathbf{T}\left(t_{n}, \mathbf{y_{n}}\right) + O(|e_{n}|^{2})$$

wobei der zweite Term das Produkt aus der **Richtungsableitung**  $\left(D_{e_n} \mathbf{f}\right)(\mathbf{y}) \equiv \frac{1}{|\mathbf{e_n}|} \frac{d}{d\lambda} \mathbf{f}(\mathbf{y} + \lambda \mathbf{e_n})\right|_{\lambda=0}$  und  $|\mathbf{e_n}|$  ist. Dieses Produkt hängt von der Richtung und Größe des Fehlervektors ab.

Bis zur ersten Ordnung im Fehler bedeutet das

$$\mathbf{y_{n+1}} + \mathbf{e_{n+1}} \approx \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y_n}) + (\mathbf{e_n} \cdot \nabla) \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y_n})$$

und damit erkennt man, wie sich (in erster Ordnung) ein Fehler im Integrationsschritt fortpflanzt ( $\mathbf{G}(t, \mathbf{y}_n)$  wird **Vergrößerungsmatrix** genannt) :

$$\mathbf{e}_{\mathbf{n+1}} \approx (\mathbf{e}_n \cdot \nabla) \mathbf{T} (t_n, \mathbf{y}_n) \equiv \mathbf{G} (t_n, \mathbf{y}_n) \mathbf{e}_n$$

Spektralradius von G:  $\varrho(G) = \max\{|\lambda_j(G)|\}$  zur Beurteilung der Stabilität für lin. Sys.

Dafür erstmal ein Beispiel:  $\dot{y}(t) = -\lambda y(t)$  ,  $\lambda > 0$  ; y(0) = 1 (  $= y_0$ )

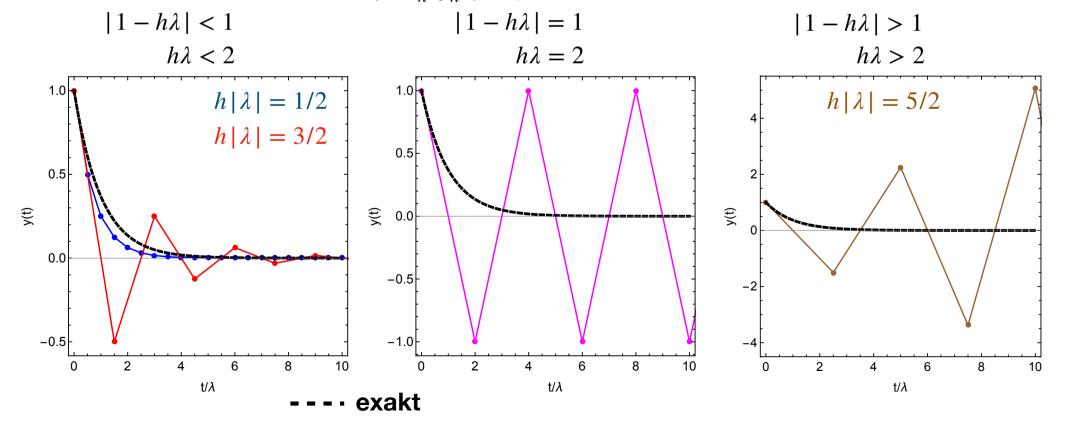
Beim Euler-Cauchy Verfahren mit Schrittweite h haben wir

$$y_{n+1} = y_n + h(-\lambda y_n) = (1 - h\lambda) \ y_n = (1 - h\lambda)^2 \ y_{n-1} = \dots = (1 - h\lambda)^{n+1} \ y_0 = (1 - h\lambda)^{n+1}$$

Für  $n \to \infty$  mit nh = t = const.  $\lim_{n \to \infty} \left(1 - \lambda \frac{t}{n}\right)^n = e^{-\lambda t}$  aber für festes h ist  $y_n$  ganz anders als dieses Konvergenzverhalten

Für die Störung  $\mathbf{e}_{n+1}$  gilt auch:  $\mathbf{e}_{n+1} = (1 - h\lambda)\mathbf{e}_n \implies \mathbf{G}(t_n, \mathbf{y}_n) = (1 - h\lambda)$ 

Wir unterscheiden 3 Fälle für  $|\mathbf{G}(t_n, \mathbf{y}_n)| = \varrho(\mathbf{G})$ :



Die Eigenwerte  $\lambda_j(\mathbf{G})$  der Vergrößerungsmatrix  $\mathbf{G}(t_n, \mathbf{y}_n)$  entscheiden über die Stabilität eines Verfahrens.

- mit  $\varrho(\mathbf{G}) = \max\{|\lambda_i(\mathbf{G})|\} > 1$  ist das Verfahren **unstabil**, weil Fehler kontinuierlich ansteigen.
- mit  $\varrho(\mathbf{G}) = \max\{|\lambda_i(\mathbf{G})|\} = 1$  ist das Verfahren marginal stabil
- $mit \ \varrho(\mathbf{G}) = max\{|\lambda_i(\mathbf{G})|\} < 1 \ ist \ das \ Verfahren \ \mathbf{stabil}$

Man kann die Stabilität eines Verfahrens nur bestimmen, wenn man auch die DGL kennt. Wir betrachten hier den harmonischen Oszillator für  $\omega=1$ :

$$\ddot{y}(t) = -y(t) \implies \dot{\mathbf{y}}(t) = \begin{pmatrix} y^{(2)}(t) \\ -y^{(1)}(t) \end{pmatrix}$$

Damit ist der Integrationsschritt nach dem Euler-Verfahren durch

$$\begin{pmatrix} y_{n+1}^{(1)} \\ y_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{pmatrix}} \cdot \begin{pmatrix} y_n^{(1)} \\ y_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

gegeben. Die Vergrößerungsmatrix kann in dem Fall direkt abgelesen werden, weil die Vorschrift linear ist.

Die Eigenwerte von 
$$\mathbf{G}(t_n, \mathbf{y}_n)$$
 sind  $\lambda_j = \lambda_{\pm} = 1 \pm ih$ . Damit sind  $\varrho(\mathbf{G}) = |\lambda_{\pm}| = \sqrt{1 + h^2} > 1 \quad \forall h > 0$ !

Das Verfahren ist für den harmonischen Oszillator instabil!