

## Zusammenfassung vom 24.04.2024

### Gewöhnliche Differentialgleichungen: Anfangswertproblem

- Problemstellung ist eine DGL der Form  $\dot{\mathbf{y}}(t) \equiv \frac{d}{dt} \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$
- 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  $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{f}$  findet man verschiedene Approximationen
- Euler-Cauchy Verfahren ergibt eine Approximation in 1. Ordnung

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

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

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

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(\mu)} &= y_n^{(\mu)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \left[ f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + (t - t_{n+\frac{1}{2}}) \frac{d}{dt} f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2) \right] \\ &= y_n^{(\mu)} + h f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} + O(h^3) \end{aligned}$$

Trick: höhere Genauigkeit durch Entwicklung am Mittelpunkt des Intervalls

- ergibt unser erstes Verfahren vom Runge-Kutta Typ

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

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

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

Es ergibt sich die Vorschrift:

In der Literatur manchmal auch  
**“verbesserte” Euler-Verfahren**

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

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

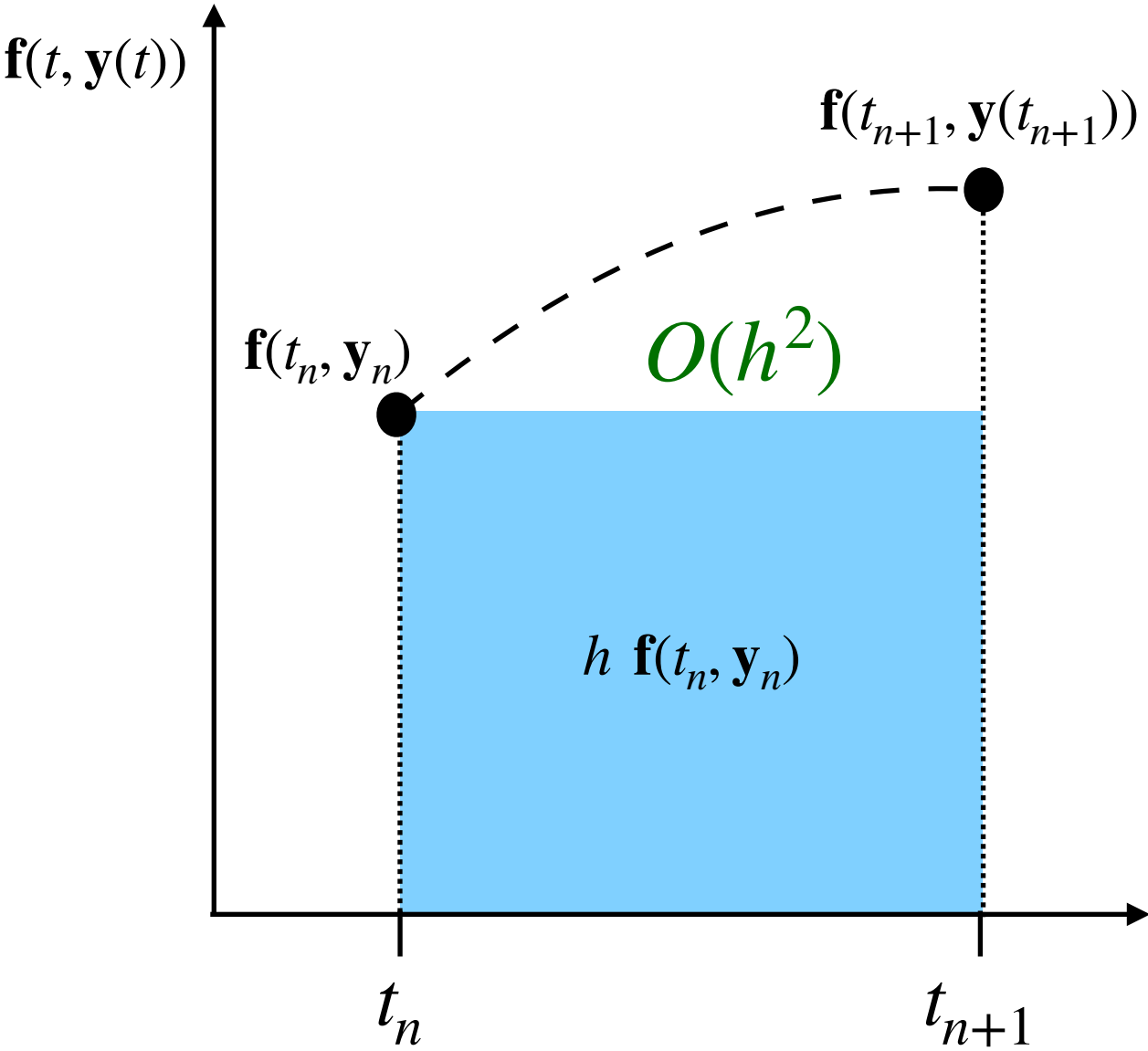
Nach der Taylorentwicklung um  $(t_n, \mathbf{y}_n)$ :

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

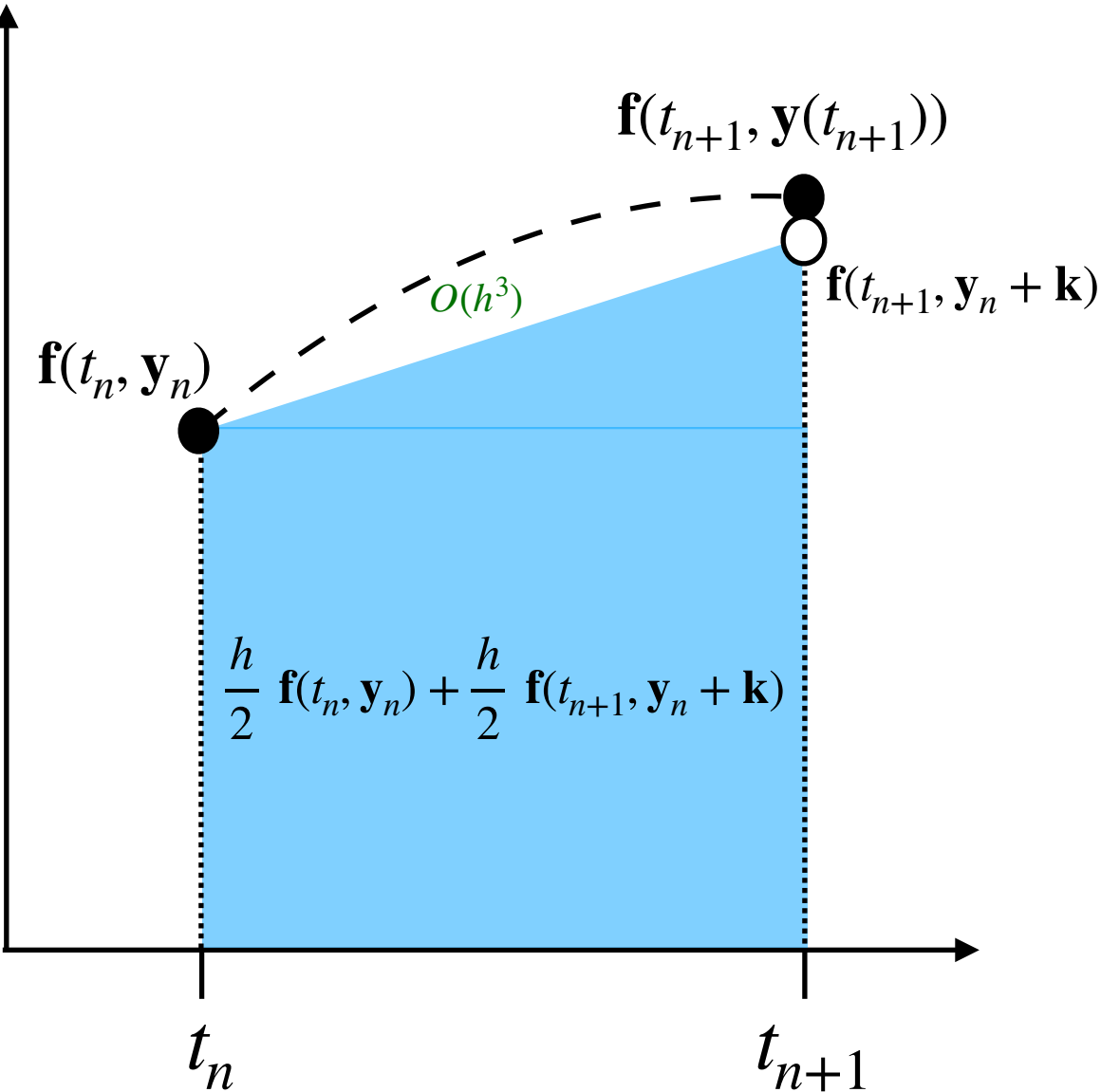
$$= y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + \frac{h^2}{2} \left( \partial_t f_n^{(\mu)} + \left( \partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) f_n^{(\nu)} \right) + O(h^3)$$

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

Euler-Cauchy-Verfahren



Trapezmethode



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

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

$$\begin{aligned} \text{“Hilfsrichtungen”} \quad \mathbf{k}_q &= h \mathbf{f} \left( t_n + a_q h, \mathbf{y}_n + \sum_{r=1}^{q-1} b_{qr} \mathbf{k}_r \right) \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \sum_{q=1}^p c_q \mathbf{k}_q + O(h^{M+1}) \end{aligned}$$

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:

Euler-Cauchy ( $p=1$ )

$$a_1 = 0$$

$$c_1 = 1$$

RK2 ( $p=2$ )

$$a_1 = 0$$

$$a_2 = \frac{1}{2} \quad b_{11} = \frac{1}{2}$$

$$c_1 = 0 \quad c_2 = 1$$

Trapezmethode ( $p=2$ )

$$a_1 = 0$$

$$a_2 = 1 \quad b_{11} = 1$$

$$c_1 = \frac{1}{2} \quad c_2 = \frac{1}{2}$$

Man kann für die Integration die Simpson-Regel nutzen und erhält ein  
**Runge-Kutta Verfahren 3. Ordnung**

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

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

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

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{1}{6} \left( k_1^{(\mu)} + 4k_2^{(\mu)} + k_3^{(\mu)} \right) + O(h^4)$$

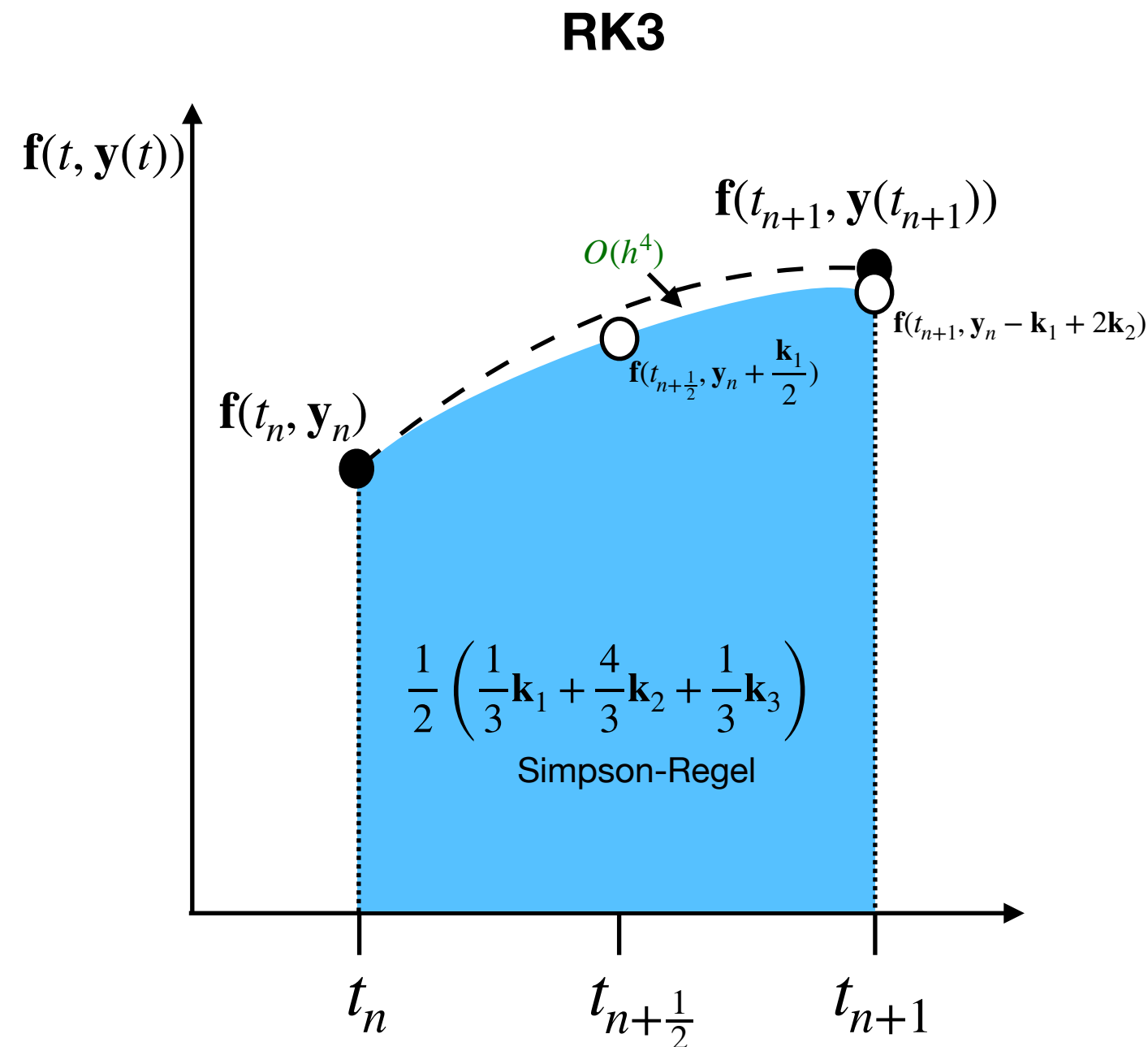
also mit den Koeffizienten:

$$a_1 = 0$$

$$a_2 = \frac{1}{2} \quad b_{11} = \frac{1}{2}$$

$$a_3 = 1 \quad b_{21} = -1 \quad b_{22} = 2$$

$$c_1 = \frac{1}{6} \quad c_2 = \frac{2}{3} \quad c_3 = \frac{1}{6}$$



Hier sind drei Funktionsauswertungen notwendig

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

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

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

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

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

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{1}{6} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) + O(h^5)$$

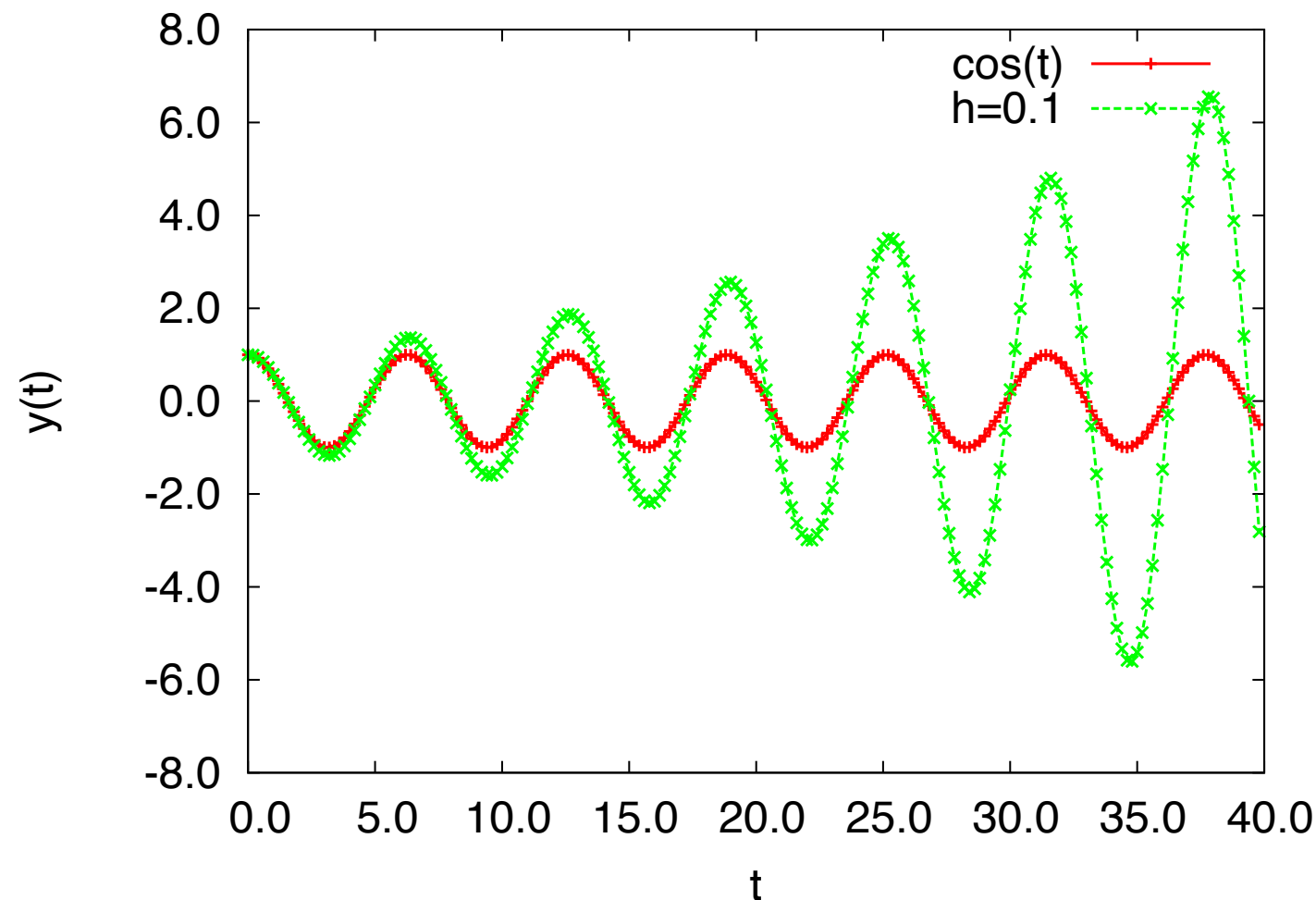
Die Implementierung des Verfahrens erfolgt genauso, wie auch bei den niedrigeren Ordnungen. Codes mit den entsprechenden Funktionen liegen ebenfalls auf Ecampus: `Runge-Kutta-3.c` `Runge-Kutta-4.c`

## Stabilität

Hier ist die Lösung der DGL

$$\ddot{y}(t) = -y(t) \quad (\text{harmonischer Oszillator})$$

beim Euler-Cauchy 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  $\dot{\mathbf{y}}(t) \equiv \frac{d}{dt} \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$

und das Lösungsverfahren kann mithilfe einer Abbildung  $\mathbf{T}$  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 entwickeln

$$\mathbf{T}(t_n, \mathbf{y}_n + \mathbf{e}_n) = \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y}_n) + (\mathbf{e}_n \cdot \nabla) \mathbf{T}(t_n, \mathbf{y}_n) + O(|\mathbf{e}_n|^2)$$

wobei der zweite Term das Produkt aus der **Richtungsableitung**  $(D_{\mathbf{e}_n} \mathbf{f})(\mathbf{y}) \equiv \frac{1}{|\mathbf{e}_n|} \frac{d}{d\lambda} \mathbf{f}(\mathbf{y} + \lambda \mathbf{e}_n) \Big|_{\lambda=0}$  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) :

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

Spektralradius von  $\mathbf{G}$ :  $\varrho(\mathbf{G}) = \max\{|\lambda_j(\mathbf{G})|\}$  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  $n \rightarrow \infty$  mit  $nh = t = \text{const.}$   $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \lambda \frac{t}{n}\right)^n = e^{-\lambda t}$  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  $|\mathbf{G}(t_n, \mathbf{y}_n)| = \varrho(\mathbf{G})$ :

$$|1 - h\lambda| < 1$$

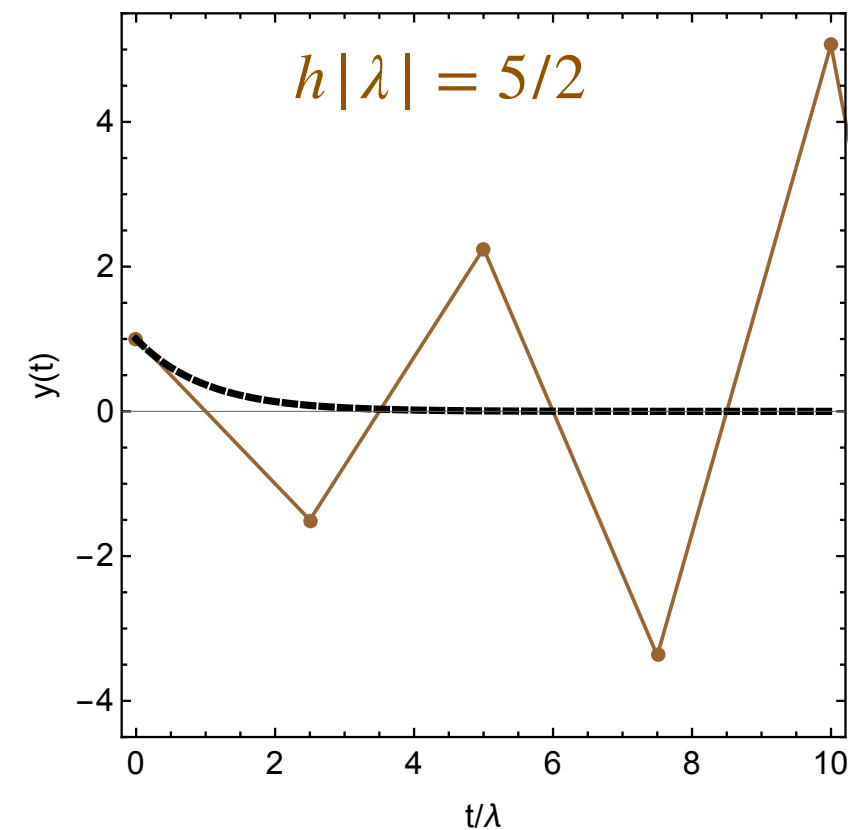
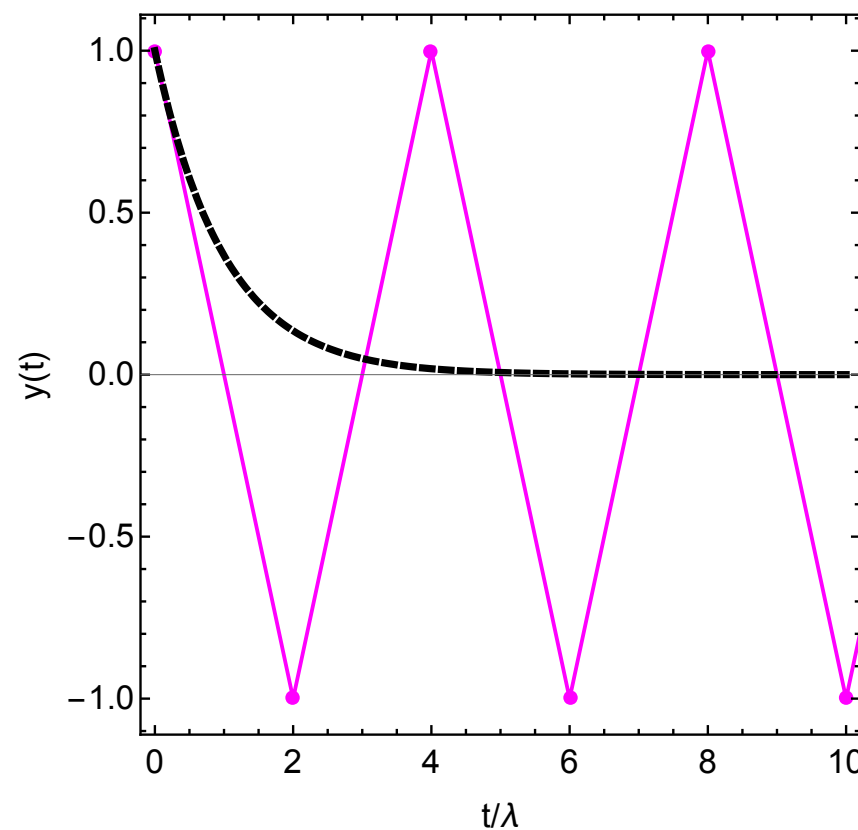
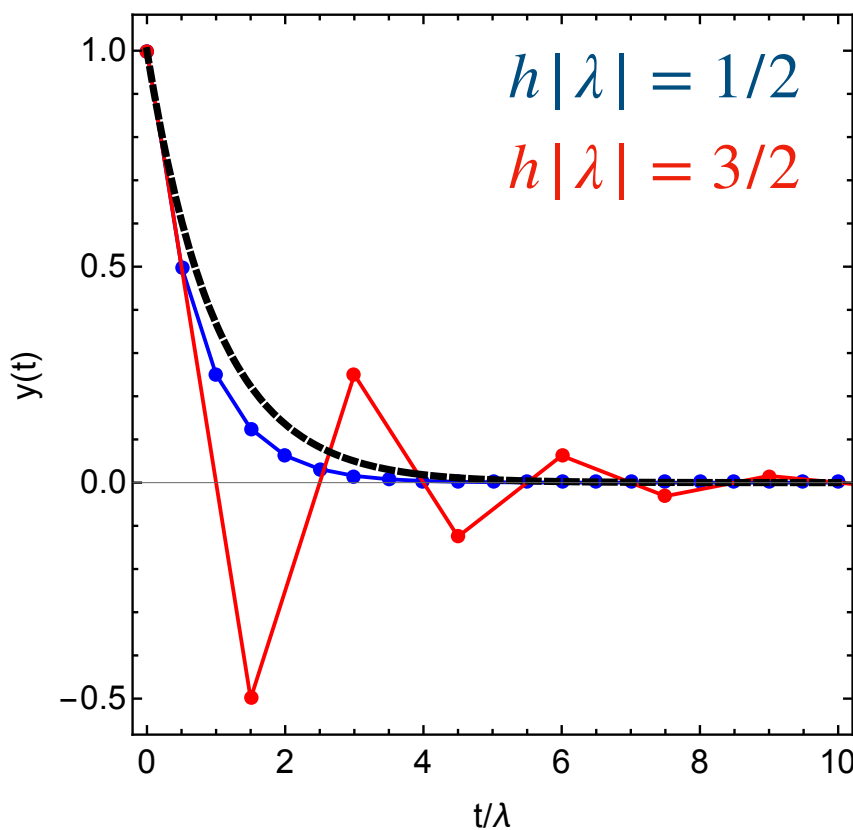
$$h\lambda < 2$$

$$|1 - h\lambda| = 1$$

$$h\lambda = 2$$

$$|1 - h\lambda| > 1$$

$$h\lambda > 2$$



--- exakt

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

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

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

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!

Die Stabilität hängt von der Wahl des Algorithmus und nicht nur von der Ordnung ab.

Anstatt wie bei Euler-Verfahren

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) = \mathbf{y}_n + h \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n) + O(h^2)$$

kann man das Integral auch auf Basis des Endpunktes approximieren:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) = \mathbf{y}_n + h \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}) + O(h^2)$$

Damit das zu einem nützlichen Verfahren werden kann, muss man die Gleichung für  $\mathbf{y}_{n+1}$  erst lösen (**implizites Verfahren**).

Für den harmonischen Oszillator erhält man

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} y_{n+1}^{(1)} \\ y_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} y_n^{(1)} \\ y_n^{(2)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & h \\ -h & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_{n+1}^{(1)} \\ y_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} y_n^{(1)} \\ y_n^{(2)} \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\frac{1}{1+h^2} \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{pmatrix}}_{\equiv \mathbf{G}} \cdot \begin{pmatrix} y_n^{(1)} \\ y_n^{(2)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

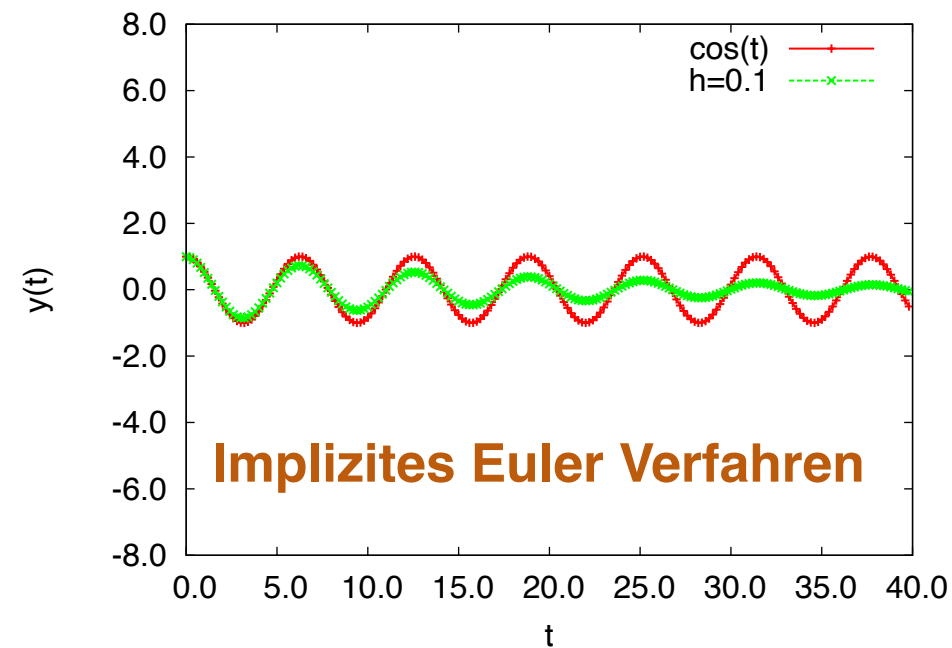
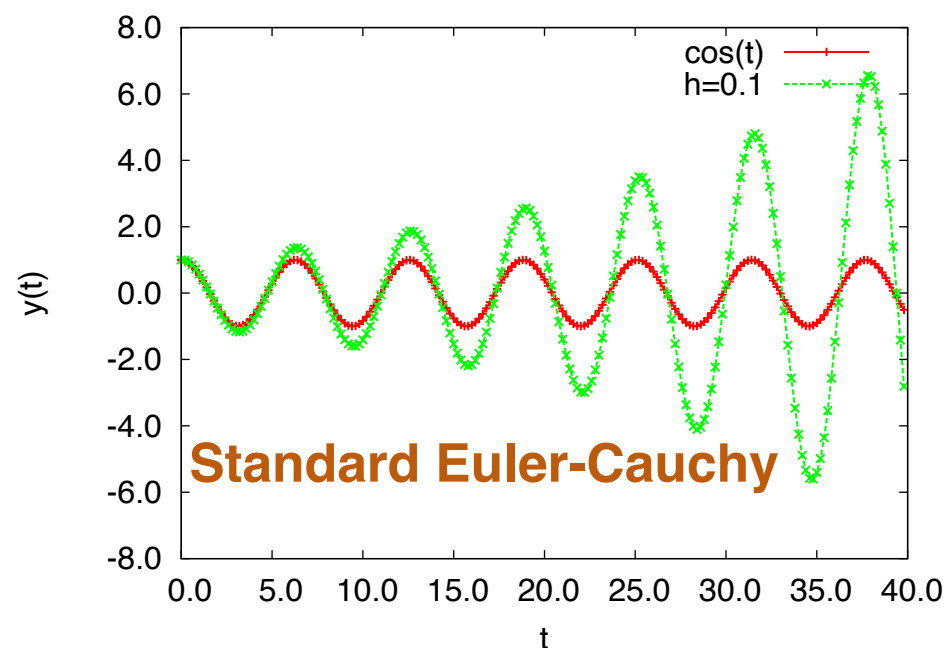
Wir können wieder die Vergrößerungsmatrix ablesen.

Die Eigenwerte der Matrix sind jetzt  $\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm ih}{1 + h^2}$

und damit sind die Beträge  $\varrho(\mathbf{G}) = |\lambda_{\pm}| = \frac{1}{\sqrt{1 + h^2}} < 1 \quad \forall h > 0$

Dieses **implizite Verfahren** hat die **gleiche Ordnung** wie das einfache Euler Verfahren. Es ist aber für den harmonische Oszillator **stabil**.

Der Vergleich der Ergebnisse für gleiche Schrittweite zeigt, dass die Fehler beim stabilen Verfahren sich nicht unkontrolliert erhöhen.



- implizite Verfahren sind meist stabiler als herkömmliche Verfahren.
- die Implementierung ist kompliziert wegen der notwendigen Invertierung
- ein Ausweg ist die iterative Verbesserung eines “expliziten” Verfahrens durch Wiedereinsetzen in ein implizites Verfahren (**Prädiktor-Korrektor Verfahren**)