

11. Einschrittverfahren

A. Allgemeines.

Es geht in diesem Abschnitt um die numerische Lösung einer AWA

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0. \quad (11.1)$$

Aufgabe ist es, zu vorgegebenem $t_b > t_0$ eine numerische Approximation für $y(t_b)$ zu berechnen. Wir setzen voraus, dass f auf einem Gebiet $I \times \mathbb{R}^n$ mit $[t_0, t_b] \subset I$ **hinreichend glatt** ist und dass die AWA eine **eindeutig bestimmte Lösung** y besitzt, die im gesamten Intervall $[t_0, t_b]$ erklärt ist. Mitunter wird eine Lipschitz-Konstante der rechten Seite f benötigt. Damit ist stets eine (lokale) Lipschitz-Konstante gemeint, die zu einem kompakten Quader $Q = [t_0, t_b] \times \tilde{Q}$ gehört, der die Lösung umfasst, d.h. $y(t) \in \tilde{Q}^0$, für alle $t \in [t_0, t_b]$.

Numerische Integratoren arbeiten mit einer **Diskretisierung**, d.h., anstelle einer kontinuierlichen Lösung $y(t)$, $t_0 \leq t \leq t_b$ betrachtet man eine Zerlegung des Integrationsintervalls

$$t_0 < t_1 < \dots < t_m = t_b \quad (11.2)$$

und Näherungen $Y_j \approx y(t_j)$, $j = 0, 1, \dots, m$.

Die t_j heißen **Integrationsknoten**, $I_h = \{t_0, \dots, t_m\}$ heißt das **Integrationsgitter**, die $h_j := t_{j+1} - t_j$, $j = 0, \dots, m - 1$, heißen **Schrittweiten**, $\delta_h := \max h_j$ heißt die **Feinheit** des Gitters I_h .

Schließlich lassen sich die Näherungen auch als Funktionswerte einer so genannten **Gitterfunktion** $Y_h : I_h \rightarrow \mathbb{R}^n$ interpretieren. Unter einem **Diskretisierungsverfahren** versteht man dann eine Vorschrift, die jedem Gitter I_h eine Gitterfunktion Y_h zuordnet.

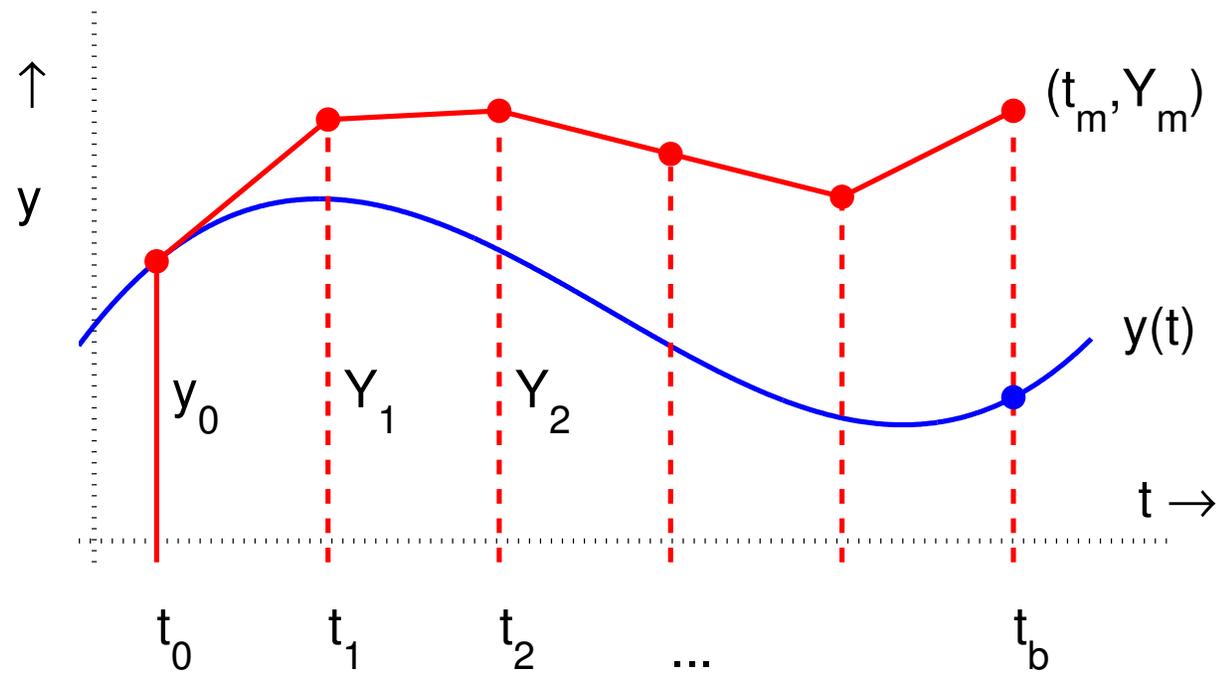


Abb. 11.1. Diskrete Lösung einer DGL

B. Einschrittverfahren.

Einschrittverfahren (ESV) verwenden jeweils nur die zuletzt berechnete Näherung (t_j, \mathbf{Y}_j) , um hieraus eine nächste Näherung $(t_{j+1}, \mathbf{Y}_{j+1})$ zu bestimmen. Sie haben die allgemeine Form

$$\mathbf{Y}_{j+1} = \mathbf{Y}_j + h_j \Phi(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j), \quad t_{j+1} = t_j + h_j. \quad (11.3)$$

Die Funktion Φ heißt **Verfahrensfunktion** oder **Inkrementfunktion** des konkreten Verfahrens. Sie gibt die „Fortschreiterichtung“ eines Integrationsschrittes wieder. Sie hängt natürlich von der rechten Seite f der DGL ab und wird im Allgemeinen mit Hilfe mehrerer f -Auswertungen berechnet.

Das einfachste ESV ist das bereits erwähnte **Eulersche Polygonzugverfahren**.

$$\mathbf{Y}_{j+1} = \mathbf{Y}_j + h_j f(t_j, \mathbf{Y}_j). \quad (11.4)$$

Man erhält das Verfahren, wenn man in der Differentialgleichung $y'(t_j) = f(t_j, Y_j)$ die Ableitung durch den Vorwärts-Differenzenquotienten $(Y_{j+1} - Y_j)/h_j$ ersetzt.

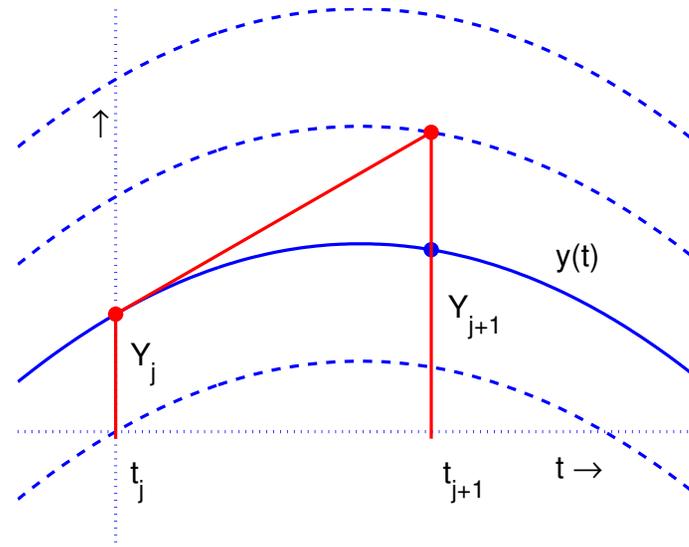


Abb. 11.2. Explizites Euler-Verfahren

Nimmt statt dessen den Rückwärts-Differenzenquotienten $(Y_j - Y_{j-1})/h_{j-1}$, so ergibt sich nach Indexverschiebung das **implizite Euler-Verfahren**

$$Y_{j+1} = Y_j + h_j f(t_{j+1}, Y_{j+1}). \quad (11.5)$$

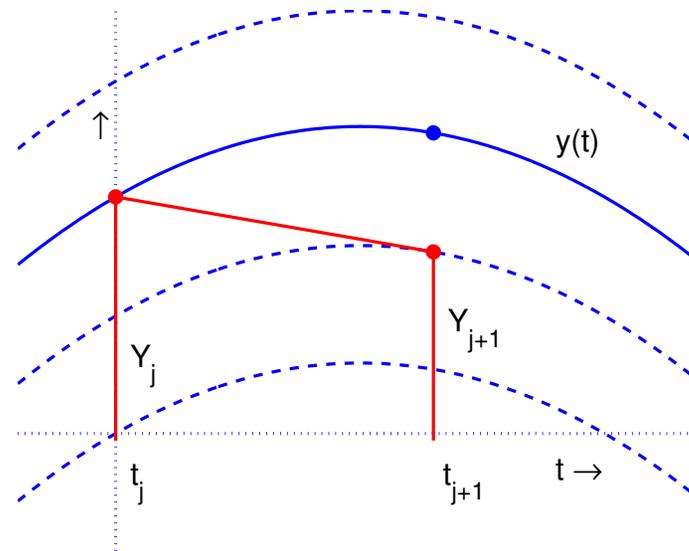


Abb. 11.3. Implizites Euler-Verfahren

Man beachte, dass man auch dieses Verfahren formal als ESV (11.3) schreiben kann, allerdings ist \mathbf{Y}_{j+1} und damit auch $\Phi(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j)$ implizit durch die Beziehung (11.5) festgelegt. Diese ist im Übrigen eine Fixpunktgleichung, die für hinreichend kleine Integrationsschrittweiten kontrahiert.

Aus der geometrischen Bedeutung der beiden Euler-Verfahrens (die Fortschreiterichtung ist gleich der Tangentenrichtung im linken bzw. rechten Punkt) lassen sich sofort „Verbesserungen“ des Euler-Verfahrens finden.

Wählt man z.B. als Fortschreiterichtung den Mittelwert zweier Steigungen, so erhält man das **Verfahren von Heun**:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &:= \mathbf{f}(t_j, \mathbf{Y}_j), \\ \mathbf{k}_2 &:= \mathbf{f}(t_j + h_j, \mathbf{Y}_j + h_j \mathbf{k}_1), \\ \mathbf{Y}_{j+1} &:= \mathbf{Y}_j + h_j \left(\frac{1}{2} \mathbf{k}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{k}_2 \right). \end{aligned} \tag{11.6}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{k}_1 &:= \mathbf{f}(t_j, \mathbf{Y}_j), \\
 \mathbf{k}_2 &:= \mathbf{f}\left(t_j + \frac{1}{2}h_j, \mathbf{Y}_j + h_j\left(\frac{1}{2}\mathbf{k}_1\right)\right), \\
 \mathbf{Y}_{j+1} &:= \mathbf{Y}_j + h_j\mathbf{k}_2.
 \end{aligned}
 \tag{11.7}$$

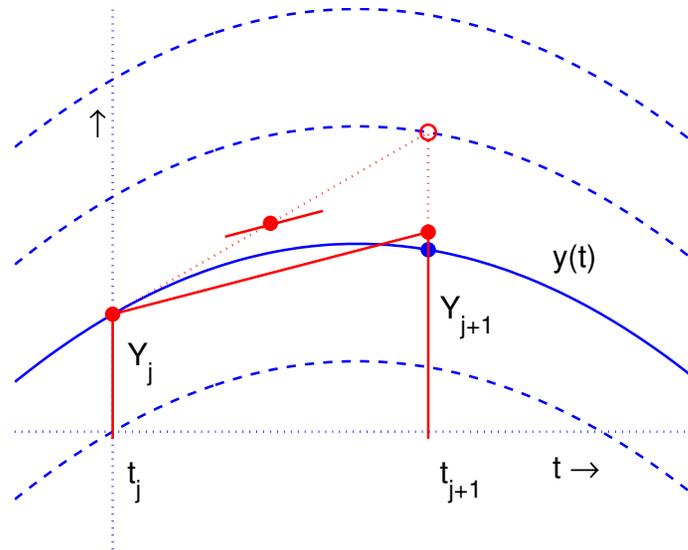


Abb. 11.5. Modifiziertes Euler-Verfahren

Beispiel (11.8) Wir bestimmen numerisch die Lösung der AWA

$$y' = t^2 + y^2, \quad y(0) = 1.$$

im Punkt $t_b = 0.95$ mit jeweils konstanter Schrittweite und bestimmen den *relativen Fehler* der Näherungslösung in t_b .

Referenzwert ist $y(t_b) \approx 0.50471867247946 \times 10^2$.

m	Schrittweite	Euler-Verf.	Heun-Verf.	Modif. Euler-V.
19	0.500D-01	0.830D+00	0.468D+00	0.516D+00
95	0.100D-01	0.591D+00	0.820D-01	0.107D+00
190	0.500D-02	0.446D+00	0.258D-01	0.358D-01
950	0.100D-02	0.156D+00	0.120D-02	0.178D-02
1900	0.500D-03	0.862D-01	0.305D-03	0.456D-03
9500	0.100D-03	0.189D-01	0.124D-04	0.186D-04
19000	0.500D-04	0.956D-02	0.309D-05	0.465D-05
95000	0.100D-04	0.193D-02	0.124D-06	0.186D-06
190000	0.500D-05	0.967D-03	0.310D-07	0.466D-07

C. Konsistenz und Konvergenz.

Die Güte eines ESV wird durch den **lokalen Diskretisierungsfehler** gemessen. Dieser gibt an, wie sich für einen einzelnen Integrationsschritt die Fortschreiterichtung $\Phi(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j)$ von der theoretisch exakten Fortschreiterichtung unterscheidet.

Definition (11.9)

Zu einer aktuellen Näherung $(t_j, \mathbf{Y}_j) \in Q$ bezeichne \mathbf{z} , genauer $\mathbf{z}(t; t_j, \mathbf{Y}_j)$ die Lösung der **lokalen AWA**

$$\mathbf{z}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{z}(t)), \quad \mathbf{z}(t_j) = \mathbf{Y}_j.$$

a) Zu hinreichend kleiner Schrittweite $h > 0$ heißt

$$\Delta(t_j, \mathbf{Y}_j; h) := \frac{\mathbf{z}(t_j + h) - \mathbf{Y}_j}{h} \quad (11.10)$$

das **exakte Inkrement** oder die **exakte Fortschreiterichtung**.

b) Die Differenz zwischen exakter und numerischer Fortschreiterichtung

$$\boldsymbol{\tau}(t_j, \mathbf{Y}_j; h) := \boldsymbol{\Delta}(t_j, \mathbf{Y}_j; h) - \boldsymbol{\Phi}(t_j, \mathbf{Y}_j; h) \quad (11.11)$$

heißt der **lokale Diskretisierungsfehler** des ESVs.

c) Ein ESV heißt **konsistent**, falls für alle hinreichend oft stetig differenzierbaren rechten Seiten \mathbf{f} und Näherungen $(t_j, \mathbf{Y}_j) \in Q$ eine Abschätzung der folgenden Form gilt:

$$\|\boldsymbol{\tau}(t_j, \mathbf{Y}_j; h)\| \leq \sigma(h), \quad \text{mit } \sigma(h) \rightarrow 0 \text{ (} h \rightarrow 0 \text{)}. \quad (11.12)$$

Hier und im Folgenden bezeichne $\|\cdot\|$ die Maximumsnorm im \mathbb{R}^n . Die Konsistenzbedingung fordert also die *gleichmäßige* Konvergenz des lokalen Diskretisierungsfehlers für alle Schrittweitenfolgen $h \rightarrow 0$.

d) Wir sagen, das ESV besitzt die **Konsistenzordnung** $p \in \mathbb{N}$, falls gilt:

$$\|\tau(t_j, \mathbf{Y}_j, h)\| \leq \sigma(h), \quad \text{mit} \quad \sigma(h) = O(h^p), \quad (11.13)$$

d.h., es gibt zwei nur von \mathbf{f} und Q abhängige Konstante $C, h_0 > 0$, so dass gilt: $\forall h \in]0, h_0] : \|\tau(t_j, \mathbf{Y}_j; h)\| \leq C h^p$.

Zur **Bestimmung der Ordnung** eines vorgegebenen ESV vergleicht man die Taylor–Entwicklungen von $\Phi(t, \mathbf{Y}; h)$ bezüglich h (Entwicklungspunkt: $h = 0$) mit der entsprechenden Entwicklung von $\Delta(t, \mathbf{Y}; h)$.

Für $\Delta(t, \mathbf{Y}; h)$ finden wir mittels Taylor–Entwicklung von $\mathbf{z}(t+h)$ um $h = 0$:

$$\begin{aligned}\Delta(t, \mathbf{Y}; h) &= \frac{\mathbf{z}(t+h) - \mathbf{Y}}{h} = \frac{\mathbf{z}(t+h; t, \mathbf{Y}) - \mathbf{Y}}{h} \\ &= \mathbf{z}'(t) + \frac{h}{2!} \mathbf{z}''(t) + \frac{h^2}{3!} \mathbf{z}'''(t) + \dots\end{aligned}$$

Wir verwenden nun die vorgegebene DGL $\mathbf{z}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{z})$, die wir so oft wie benötigt mittels Kettenregel weiter differenzieren, also

$$\begin{aligned}\mathbf{z}''(t) &= \mathbf{f}_t(t, \mathbf{z}) + \mathbf{f}_y(t, \mathbf{z}) \cdot \mathbf{f}(t, \mathbf{z}), \quad \mathbf{z}(t) = \mathbf{Y}, \\ \mathbf{z}'''(t) &= \mathbf{f}_{tt} + 2 \mathbf{f}_{ty} \mathbf{f} + \mathbf{f}_{yy} (\mathbf{f}, \mathbf{f}) + \mathbf{f}_y \mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}_y \mathbf{f}\end{aligned}$$

und so fort. Damit finden wir:

$$\begin{aligned}\Delta &= \mathbf{f} + \frac{h}{2} (\mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}) \\ &+ \frac{h^2}{6} (\mathbf{f}_{tt} + 2\mathbf{f}_{ty} \mathbf{f} + \mathbf{f}_{yy} (\mathbf{f}, \mathbf{f}) + \mathbf{f}_y \mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}_y \mathbf{f}) + O(h^3).\end{aligned}\tag{11.14}$$

Hierbei sind f und sämtliche partiellen Ableitungen von f (außer denen im hier nicht angegebenen Restglied) jeweils im aktuellen Bezugspunkt (t, \mathbf{Y}) auszuwerten.

Ferner ist zu beachten, dass es sich sowohl bei f wie bei y um vektorwertige Funktionen handeln kann. Der Term $\mathbf{f}_{yy}(\mathbf{f}, \mathbf{f})$ beispielsweise ist in Koordinaten folgendermaßen zu lesen:

$$\sum_{k,l} \frac{\partial^2 f}{\partial y_k \partial y_l} f_k f_l. \quad \text{Analog ist } \mathbf{f}_y \mathbf{f}_y \mathbf{f} = \sum_{k,l} \frac{\partial f}{\partial y_k} \frac{\partial f_k}{\partial y_l} f_l.$$

Beispiel (11.15)

a) Für das Euler–Verfahren ist $\Phi = \mathbf{f}(t, \mathbf{Y}) = \mathbf{f}$, also:

$$\tau = \Delta - \Phi = \frac{h}{2} (\mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}) + \mathcal{O}(h^2).$$

Das Verfahren ist also konsistent und hat die Ordnung $p = 1$.

b) Für das Heun–Verfahren

$$\Phi = 0.5 f(t, \mathbf{Y}) + 0.5 f(t + h, \mathbf{Y} + h f(t, \mathbf{Y}))$$

erhält man durch Taylor–Entwicklung

$$\Phi = \mathbf{f} + \frac{h}{2} (\mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}) + \frac{h^2}{4} (\mathbf{f}_{tt} + 2\mathbf{f}_{ty} f + \mathbf{f}_{yy}(\mathbf{f}, \mathbf{f})) + \mathcal{O}(h^3).$$

Zusammen mit (11.14) ergibt sich für $\tau = \Delta - \Phi$

$$\tau = \frac{h^2}{12} \left\{ 2(\mathbf{f}_y \mathbf{f}_t + \mathbf{f}_y \mathbf{f}_y \mathbf{f}) - (\mathbf{f}_{tt} + 2\mathbf{f}_{ty} f + \mathbf{f}_{yy}(\mathbf{f}, \mathbf{f})) \right\} + \mathcal{O}(h^3).$$

Das Verfahren ist also konsistent und besitzt die Ordnung $p = 2$.

Satz (11.16) (Konvergenzsatz)

Die Lösung der AWA existiere in $t_0 \leq t \leq t_b$. Ein ESV sei konsistent und von der Ordnung p , also $\|\tau(t, \mathbf{Y}; h)\| \leq C h^p$.

Ferner sei die Verfahrensfunktion Φ auf Q Lipschitz–stetig bezüglich der Variablen Y : $\|\Phi(t, \widetilde{Y}; h) - \Phi(t, Y; h)\| \leq L_{\Phi} \|\widetilde{Y} - Y\|$.
 Dann gilt für die Näherungen $Y_m = Y(t_b; I_h)$ im Endpunkt t_b :

$$\|Y(t_b; I_h) - y(t_b)\| \leq \frac{C}{L_{\Phi}} \left(e^{L_{\Phi}(t_b - t_0)} - 1 \right) \cdot h_{\max}^p. \quad (11.17)$$

Bemerkungen (11.18)

- a)** Der Satz zeigt, dass die (lokale) Konsistenzordnung mit der globalen Konvergenzordnung übereinstimmt. Jedes konsistente Einschrittverfahren ist auch konvergent.
- b)** Für viele Einschrittverfahren impliziert die lokale Lipschitz-Stetigkeit der rechten Seite f auch unmittelbar die (lokale) Lipschitz-Stetigkeit der Verfahrensfunktion.

c) Man könnte versuchen, aus (11.17) eine optimale, äquidistante Schrittweite zu berechnen. Hierzu würde man fordern

$$\frac{C}{L_{\Phi}} \left(e^{L_{\Phi}(t_b - t_0)} - 1 \right) \cdot h^p = \|\mathbf{Y}_h\|_{\infty} \cdot \text{TOL},$$

wobei TOL (von Toleranz) eine (vom Benutzer vorzugebende) Schranke für den relativen Fehler bezeichnet und $\|\mathbf{Y}_h\|_{\infty}$ die Maximumnorm der Gitterfunktion ist, also $\|\mathbf{Y}_h\|_{\infty} := \max\{\|\mathbf{Y}_j\| : j = 0, \dots, m\}$.

Man würde hieraus die folgende Formel für die Schrittweite erhalten:

$$h = \left[\frac{L_{\Phi} \|\mathbf{Y}_h\|_{\infty} \text{TOL}}{C (e^{L_{\Phi}(t_b - t_0)} - 1)} \right]^{1/p}. \quad (11.19)$$

Natürlich ist diese Beziehung für die praktische Bestimmung von h wenig hilfreich, da die Größen C und L_{Φ} im Allgemeinen kaum abgeschätzt werden können.

D. Runge-Kutta Verfahren.

Die meist verwendeten ESV sind so genannten Runge–Kutta–Verfahren (kurz: RK–Verfahren) benannt nach **Carl Runge (1856–1927)** und **Martin Wilhelm Kutta (1867–1927)**. Es handelt sich dabei um ESV, die die Verfahrensfunktion als Linearkombination von Auswertungen der rechten Seite f ansetzen.

Beispiele hierfür haben wir mit dem Verfahren von Heun, vgl. (11.6), und dem modifizierten Euler-Verfahren, vgl. (11.7), schon kennengelernt. Die allgemeine Form eines (expliziten) RK–Verfahrens lautet:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{j+1} &= \mathbf{Y}_j + h_j \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{k}_i(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j) \\ \mathbf{k}_1(t, \mathbf{Y}; h) &= \mathbf{f}(t, \mathbf{Y}) \\ \mathbf{k}_i(t, \mathbf{Y}; h) &= \mathbf{f}\left(t + c_i h, \mathbf{Y} + h \sum_{\ell=1}^{i-1} a_{i\ell} \mathbf{k}_\ell(t, \mathbf{Y}; h)\right), \end{aligned} \tag{11.20}$$

Dabei heißt s die **Stufenzahl** des RK–Verfahrens, die c_i heißen **Knoten**, die b_i **Gewichte** und die (a_{ij}) werden zu einer **Verfahrensmatrix** zusammengefasst. Alle Koeffizienten b_i , c_i und a_{ij} , welche ja das konkrete Verfahren festlegen, werden üblicherweise in einem Tableau, dem so genannten **Butcher–Schema** angeordnet:

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
\vdots	\vdots	\vdots	\dots		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	\dots	b_{s-1}	b_s

Beispiele mit Stufenzahl und Ordnung $s = p = 3$ sind die so genannte **Kutta-Regel** und ein weiteres auf **Heun** zurück gehendes Verfahren:

0				
1/2	1/2			
1	-1	2		
	1/6	2/3	1/6	

0				
1/3	1/3			
2/3	0	2/3		
	1/4	0	3/4	

Zwei Beispiele vierter Ordnung gehen auf **Kutta** zurück. Dies ist zum Einen das klassische Runge-Kutta Verfahren **RK4** und zum Andern die so genannte **3/8-Regel**. Die Schemata sind in der folgenden Tabelle angegeben.

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

0				
1/3	1/3			
2/3	-1/3	1		
1	1	-1	1	
	1/8	3/8	3/8	1/8

In den bisher angegebenen Beispielen stimmt jeweils die Stufenzahl s mit der Ordnung p des Verfahrens überein. Dies ist allerdings für Verfahren höherer Ordnung nicht mehr der Fall. So werden für ein RK–Verfahren der Ordnung sieben bereits neun, für ein Verfahren der Ordnung acht sogar elf Stufen benötigt (Butcher, 1987).

Zur **Konstruktion von RK–Verfahren** hat man für die allgemeine Verfahrensfunktion $\Phi(t, \mathbf{Y}; h) := \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{k}_i(t, \mathbf{Y}; h)$ einen Taylor–Abgleich mit dem exakten Inkrement $\Delta(t, \mathbf{Y}; h)$ gemäß (11.10) und (11.14) durchzuführen.

Durch Abgleich des Absolutterms ($h = 0$) findet man

Lemma (11.21) *Ein RK–Verfahren ist genau dann konsistent, falls gilt*

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1.$$

Zumeist schränkt man sich bei der Aufstellung der Ordnungsbedingungen auf den Fall autonomer Differentialgleichungen ein. Dies ist, wie der folgende Satz zeigt, gerechtfertigt, wenn die so genannte **Knotenbedingung** erfüllt ist:

$$c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, \quad i = 2, \dots, s. \quad (11.22)$$

Satz (11.23)

Hat ein RK–Verfahren die Ordnung p für alle autonomen DGL und ist die Knotenbedingung (11.22) erfüllt, so ist das Verfahren auch von gleicher Ordnung für alle nichtautonomen DGL.

Konstruktion für $s = p = 3$:

Man hat die Funktionen

$$\Phi = b_1 \mathbf{k}_1 + b_2 \mathbf{k}_2 + b_3 \mathbf{k}_3,$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{Y}), \quad \mathbf{k}_2 = \mathbf{f}(\mathbf{Y} + h a_{21} \mathbf{k}_1),$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{f}(\mathbf{Y} + h (a_{31} \mathbf{k}_1 + a_{32} \mathbf{k}_2))$$

bzgl. der Schrittweite h in eine Taylor-Reihe zu entwickeln und diese bis zur Potenz h^2 mit der exakten Inkrementfunktion

$$\Delta = \mathbf{f} + \frac{h}{2} (\mathbf{f}'\mathbf{f}) + \frac{h^2}{6} (\mathbf{f}''(\mathbf{f}, \mathbf{f}) + \mathbf{f}'\mathbf{f}'\mathbf{f}) + O(h^3),$$

abzugleichen. Wir schreiben hier \mathbf{f}' anstelle von \mathbf{f}_y , vgl. (11.14).

Die Terme \mathbf{f} , $\mathbf{f}'\mathbf{f}$, $\mathbf{f}''(\mathbf{f}, \mathbf{f})$ und $\mathbf{f}'\mathbf{f}'\mathbf{f}$ heißen **elementare Differentiale**. Sie treten ganz analog bei der Taylor-Entwicklung der Verfahrensfunktion auf. Man erhält

$$\begin{aligned}
\Phi &= (\sum b_i) f + h [b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32})] f' f \\
&+ \frac{h^2}{2} \left[(b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2) f''(f, f) \right. \\
&\left. + 2 b_3 a_{21} a_{32} f' f' f \right] + O(h^3).
\end{aligned}$$

Nun sind die elementaren Differentiale (bei hinreichend großem n) linear unabhängig, so dass die Entwicklungen von Δ und Φ auch bzgl. der elementaren Differentiale übereinstimmen müssen.

Mittels Koeffizientenvergleich erhalten wir damit die folgenden vier Ordnungsgleichungen für die sechs Unbekannten b_i, a_{ik} :

$$\begin{aligned}
b_1 + b_2 + b_3 &= 1 \\
b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32}) &= 1/2 \\
b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2 &= 1/3 \\
b_3 a_{21} a_{32} &= 1/6.
\end{aligned} \tag{11.24}$$

Ein dreistufiges RK-Verfahren besitzt also genau dann die Konsistenzordnung $p = 3$, wenn das obige Gleichungssystem erfüllt ist. Man überzeugt sich, dass die auf Seite 267 angegebenen dreistufigen RK-Verfahren dieses Gleichungssystem lösen. Die Parameter c_i sind jeweils durch die Knotenbedingung (11.22) festgelegt.

E. Schrittweitensteuerung.

Es geht hierbei um die automatische Generierung eines Integrationsgittes I_h , das einerseits fein genug sein soll, um eine vorgegebene Genauigkeit der numerischen Lösung zu garantieren, andererseits aber auch nicht zu fein, um den numerischen Aufwand und den Einfluss von Rundungsfehlern gering zu halten.

Beispiel (11.25) (Restringsiertes Dreikörper Problem)

Das Beispiel beschreibt die ebenen Bewegung eines Satelliten im Kraftfeld von Erde und Mond, vgl. auch (1.17). Die Position (x, y) des Satelliten genügt dem folgenden DGL-System

$$\begin{aligned}x'' &= x + 2y' - \mu' \frac{x + \mu}{[(x + \mu)^2 + y^2]^{3/2}} - \mu \frac{x - \mu'}{[(x - \mu')^2 + y^2]^{3/2}} \\y'' &= y - 2x' - \mu' \frac{y}{[(x + \mu)^2 + y^2]^{3/2}} - \mu \frac{y}{[(x - \mu')^2 + y^2]^{3/2}},\end{aligned}$$

wobei $\mu = 1/82.45$ das Verhältnis von Mond- zur Erdmasse bezeichnet und $\mu' := 1 - \mu$. Für die Anfangswerte

$$\begin{aligned}x(0) &= 1.2 \quad , \quad x'(0) = 0 \\y(0) &= 0 \quad , \quad y'(0) \doteq -1.0493 \ 57510\end{aligned}$$

ergibt sich eine periodische Bahn mit Periode $t_b \doteq 6.1921 \ 69331$.

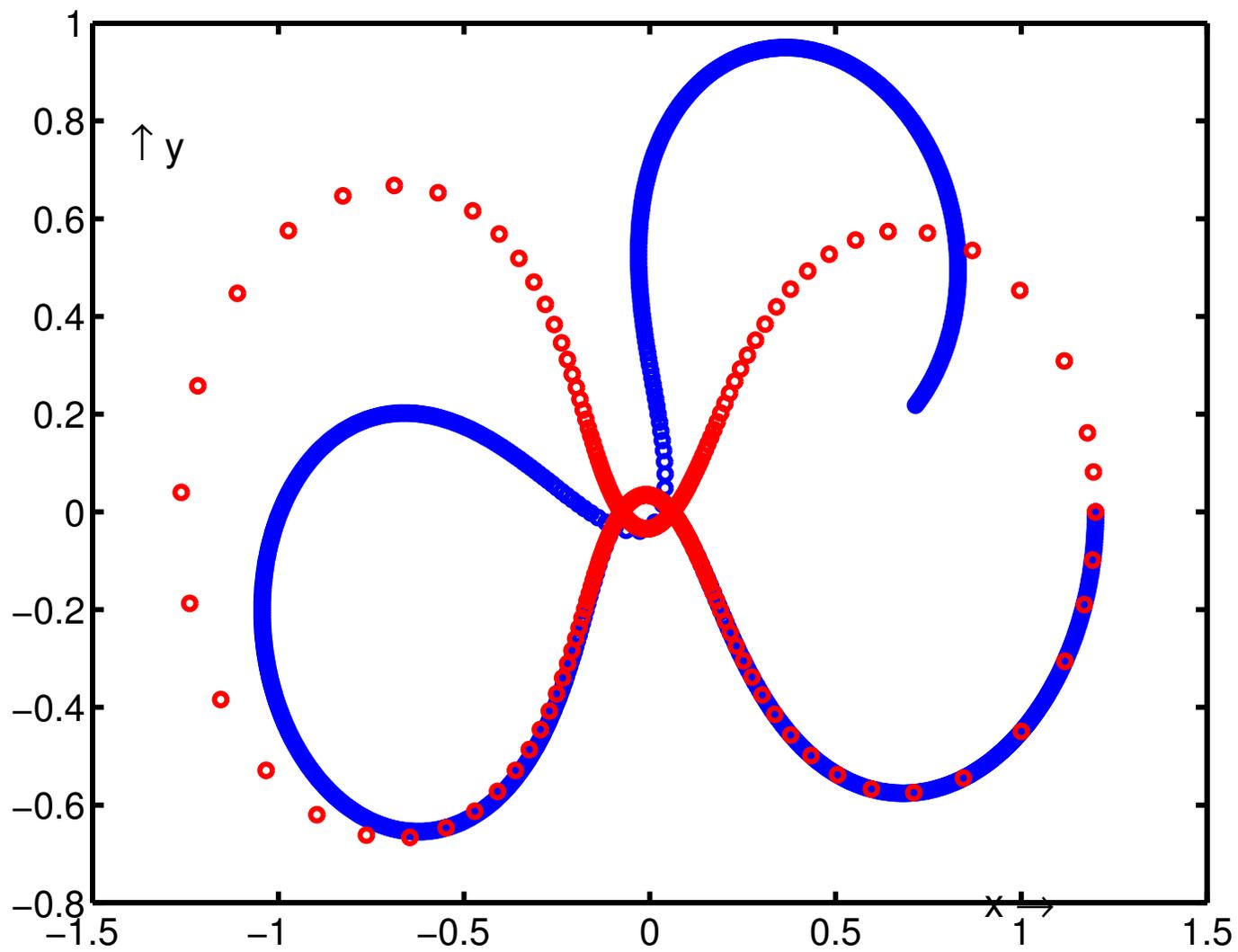
Wir lösen diese AWA über dem Intervall $[0, t_b]$, wobei wir auf zwei verschiedene Arten das gleiche fünfstufiges RK–Verfahren der Ordnung vier (Fehlberg, 1969) verwenden.

a) Konstante Schrittweite $h := t_b/1000$. Es werden also 1000 Integrationsschritte mit je 5 f -Auswertungen ausgeführt.

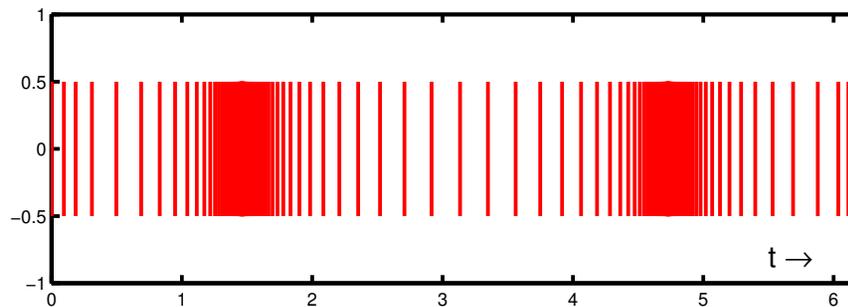
b) Automatische Schrittweitensteuerung nach Fehlberg, Genauigkeitsforderung $TOL = 10^{-5}$.

a) liefert ein völlig falsches Ergebnis,

b) ergibt einen relativer/absoluter Fehler $\leq 1.4 \times 10^{-4}$ und benötigt nur 2196 Auswertungen der rechten Seite, ist also weniger als halb so teuer wie die Rechnung a) mit konstanter Schrittweite!



In der folgenden Abbildung ist das von der Schrittweitensteuerung erzeugte Gitter dargestellt.



Algorithmen zur Schrittweitensteuerung arbeiten mit einer *Schätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers*, d.h. zu jedem Integrationsschritt $(t_j, \mathbf{Y}_j) \rightarrow (t_j + h, \mathbf{Y}_j + h\Phi(t_j, \mathbf{Y}_j; h))$ mit einer aktuellen Schrittweite $h > 0$ wird zugleich ein Schätzwert τ_{est} (est von Estimation) des lokalen Fehlers ermittelt:

$$\tau_{\text{est}}(t_j, \mathbf{Y}_j; h) \approx (1/h) \left[y(t_{j+1}; t_j, \mathbf{Y}_j) - (\mathbf{Y}_j + h\Phi(t_j, \mathbf{Y}_j; h)) \right] .$$

Von einer *optimalen* lokalen Schrittweite h_j^* wird nun gefordert:

$$\|\tau(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j^*)\| = \text{TOL},$$

wobei TOL eine vom Benutzer vorzugebenden Genauigkeitsanforderung ist. Zusammen mit der Ordnungseigenschaft: $\tau(t_j, \mathbf{Y}_j; h) = \mathbf{C}(t_j) h^p + \mathcal{O}(h^{p+1})$ folgt hiermit die Heuristik:

$$\begin{aligned} \text{TOL} &= \|\tau(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j^*)\| \approx \|\mathbf{C}(t_j)\| (h_j^*)^p = \|\mathbf{C}(t_j) h^p\| (h_j^*/h)^p \\ &\approx \|\tau(t_j, \mathbf{Y}_j; h)\| (h_j^*/h)^p \approx \|\tau_{\text{est}}\| (h_j^*/h)^p \end{aligned}$$

und somit

$$h_j^* \approx \left(\frac{\text{TOL}}{\|\tau_{\text{est}}\|} \right)^{(1/p)} h. \quad (11.26)$$

Diese Beziehung wird für die praktische Anwendung noch modifiziert: Die Schrittweite wird etwas kleiner gewählt (Sicherheitsfaktor $q \in]0, 1[$) als optimal, um die Zahl der nicht erfolgreichen Integrationsschritte klein zu halten.

Ferner werden Schranken $0 < \nu < 1 < \mu$ eingeführt, mit denen ein starkes Oszillieren der Schrittweite vermieden werden soll.

Algorithmus (11.27) (Schrittweitensteuerung)

Start: Toleranzschranke: $\text{TOL} > 0$, Parameter: $q, \nu \in]0, 1[$, $\mu > 1$,
 $j := 0$, $Y_0 := y_0$, Startschrittweite: h_0 mit $0 < h_0 \leq (t_b - t_0)$,
Minimale Schrittweite: $h_{\min} > 0$;

Iteration: $Y_{j+1} := Y_j + h_j \Phi(t_j, Y_j; h_j)$, $\tau_{\text{est}}(t_j, Y_j; h_j)$,

$h := q (\text{TOL} / \|\tau_{\text{est}}\|)^{(1/p)} h_j$,

$h := \max[\min(h, \mu h_j), \nu h_j]$, Falls: $h < h_{\min}$, Stop!

Falls: $\|\tau_{\text{est}}\| > \text{TOL}$ (Integrationsschritt wird verworfen)

$h_j := h$, gehe zu *Iteration*;

Sonst: (Integrationsschritt wird akzeptiert)

$t_{j+1} := t_j + h_j$, $h_{j+1} := \min(h, t_b - t_{j+1})$, $j := j + 1$;

Falls: $t_j = t_b$, Stop! Sonst: Gehe zu *Iteration*.

F. Eingebettete Runge-Kutta Verfahren.

Eine effiziente Methode, den lokalen Diskretisierungsfehler zu schätzen, besteht in der Verwendung eingebetteter RK-Verfahren. Hierunter versteht man ein Paar von RK-Verfahren mit gemeinsamen Knoten c_i , gemeinsamer Verfahrensmatrix (a_{ij}) , aber unterschiedlichen Gewichten.

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
\vdots	\vdots	\vdots	\dots		
c_s	a_{s1}	a_{s2}	\dots	$a_{s,s-1}$	
	b_1	b_2	\dots	b_{s-1}	b_s
	\hat{b}_1	\hat{b}_2	\dots	\hat{b}_{s-1}	\hat{b}_s

Das Verfahren $\Phi(t, Y; h) = \sum b_i \mathbf{k}_i$ habe die Ordnung p , das zweite Verfahren $\hat{\Phi}(t, Y; h) = \sum \hat{b}_i \mathbf{k}_i$ habe die Ordnung \hat{p} , wobei zumeist $\hat{p} = p-1$ oder $\hat{p} = p+1$ ist. Man bezeichnet solche Verfahren auch kurz mit **RK $_p$ (\hat{p})**. Das Verfahren Φ ist das eigentliche Integrationsverfahren, das Verfahren $\hat{\Phi}$ dient dagegen nur zur Schätzung des lokalen Diskretisierungsverfahrens:

$$\tau_{\text{est}}(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j) := \sum_{i=1}^s (\hat{b}_i - b_i) \mathbf{k}_i(t_j, \mathbf{Y}_j; h_j). \quad (11.28)$$

Die ersten eingebetteten RK–Verfahren sind von **Merson (1957)**, **Ceschino (1962)** und **Zonneveld (1963)** konstruiert worden. Viele Verfahren dieser Klasse, die in den Anwendungen besonders erfolgreich waren und sind, gehen auf **Fehlberg (1969)** zurück. In der folgenden Tabelle sind die Koeffizienten des Fehlbergschen **RKF4(5)** Verfahrens angegeben. Dieses Verfahren haben wir zur Lösung des Beispiels (11.25) verwendet.

0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$\frac{845}{4104}$		
$\frac{1}{2}$	$\frac{8}{27}$	2	$\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$\frac{11}{40}$	
	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$\frac{1}{5}$	0
	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$

Alle von Fehlberg angegebenen Verfahren sind vom Typ $\text{RK}_p(q)$ mit $q > p$, in der Regel $q = p + 1$.

Dormand und Price (1980) bemühten sich statt dessen, eingebettete RK-Verfahren zu konstruieren, bei denen die Fehlerkoeffizienten des Verfahrens *höherer* Ordnung minimiert werden und verwenden dann auch dieses Verfahren als eigentliches Integrationsverfahren. Sie konstruierten so die vielfach verwendeten Verfahren vom Typ $\text{RK5}(4)$ und $\text{RK8}(7)$, auch **DOPRI5** und **DOPRI8** genannt. Die Koeffizienten beider Verfahren (respektive eine genaue rationale Approximation dieser) findet man bei Deuffhard, Bornemann. Anwendungen dieser Verfahren auf das restringierte Dreikörperproblem sind in Hairer, Norsett und Wanner beschrieben.