

zu oben analoge Schrittweitensteuerung durch Kombination von drei- und vierstufigen Runge-Kutta-Methoden ist nicht möglich, weil die betreffenden Gleichungssysteme keine Lösungen zulassen, so daß k_1 , k_2 und k_3 in beiden Verfahren identisch sind.

Die erreichbare Fehlerordnung p einer expliziten m -stufigen Runge-Kutta-Methode ist für $p \leq 9$ gemäß der folgenden Tabelle gegeben.

Tab. 1.4: Maximale Fehlerordnung von expliziten Runge-Kutta-Verfahren

$m =$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$p =$	1	2	3	4	4	5	6	6	7

Von Fehlberg stammt ein eingebettetes Runge-Kutta-Verfahren 3. und 4. Ordnung, in welcher eine Funktionsauswertung doppelt verwendet wird.

0					
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$				
$\frac{4}{9}$	$\frac{4}{81}$	$\frac{32}{81}$			
$\frac{6}{7}$	$\frac{57}{98}$	$-\frac{432}{343}$	$\frac{1053}{686}$		
1	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{27}{52}$	$\frac{49}{156}$	
$y_{k+1}^{(3)}$	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{27}{52}$	$\frac{49}{156}$	0
$y_{k+1}^{(4)}$	$\frac{43}{288}$	0	$\frac{243}{416}$	$\frac{343}{1872}$	$\frac{1}{12}$
$d_{k+1} \approx$	$-\frac{5}{288}$	0	$\frac{27}{416}$	$-\frac{245}{1872}$	$\frac{1}{12}$

Ebenso von Fehlberg stammt eine geschickte Kombination von Runge-Kutta-Verfahren 4. und 5. Ordnung, in welcher die Runge-Kutta-Methode 4. Ordnung fünf der ohnehin sechs der erforderlichen Auswertungen 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	$\frac{8341}{4104}$	$-\frac{32832}{4104}$	$\frac{29440}{4104}$	$-\frac{845}{4104}$	
$\frac{1}{2}$	$-\frac{6080}{20520}$	$\frac{41040}{20520}$	$-\frac{28352}{20520}$	$\frac{9295}{20520}$	$-\frac{5643}{20520}$
y_{k+1}	$\frac{2375}{20520}$	$\frac{11264}{20520}$	$\frac{10985}{20520}$	$-\frac{4104}{20520}$	0
$d_{k+1} \approx$	$\frac{1045}{376200}$	$-\frac{11264}{376200}$	$-\frac{10985}{376200}$	$\frac{7524}{376200}$	$\frac{13680}{376200}$

1.8 IMPLIZITE RUNGE-KUTTA-VERFAHREN

Zur numerischen Lösung von steifen Differentialgleichungen (siehe späteres Kapitel) sind spezielle Methoden erforderlich. Zu diesen gehören die impliziten Runge-Kutta-Verfahren, welche dadurch charakterisiert sind, daß die Steigungen k_1, k_2, \dots durch ein implizites Gleichungssystem definiert werden. Da die Herleitung von mehrstufigen impliziten Runge-Kutta-Methoden sehr aufwendig ist, wollen wir solche Verfahren hier nur definieren.

Das Butcher-Diagramm solcher impliziten Runge-Kutta-Verfahren m -ter Stufe hat die Form

$$\begin{array}{c|cccc} a_1 & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ a_2 & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_m & b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mm} \\ \hline & c_1 & c_2 & \cdots & c_m \end{array}$$

wobei mindestens ein $b_{ij} \neq 0$, ($i \leq j$) gilt. Alternativ schreibt man auch

$$\begin{aligned} k_i &:= f\left(t_k + a_r, y_k + h(b_{i1}k_1 + \dots + b_{im}k_m)\right) \quad (i = 1, \dots, m) \\ y_{k+1} &:= y_k + h\left(c_1k_1 + \dots + c_mk_m\right). \end{aligned} \quad (1.46)$$

Bei der Wahl der $a \in \mathbb{R}^m$, $b \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $c \in \mathbb{R}^m$ gibt es verschiedene Ansätze:

1. **Gauß-Form:** Die a, b, c seien beliebig wählbar. Zielsetzung ist die Maximierung der Konsistenzordnung. Man kann zeigen, dass somit die a_i 's Nullstellen der auf das Intervall $[0, 1]$ transformierten Legendre-Polynome $P_m(2t - 1) := \frac{1}{m!} \frac{d^m}{dt^m} (t^m(t - 1)^m)$ sind.
2. **Radau I - Form:** Es gilt $a_1 = 0$ und die a_2, \dots, a_m sind Nullstellen von $\frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}} (t^m(t-1)^{m-1})$
3. **Radau II - Form:** Es gilt $a_m = 1$ und $a_1 \dots a_{m-1}$ sind Nullstellen von $\frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}} (t^{m-1}(t-1)^m)$
4. **Lobatto III - Form:** Es gilt $a_1 = 0$, $a_m = 1$ und $a_2 \dots a_{n-1}$ sind Nullstellen von $\frac{d^{m-2}}{dt^{m-2}} (t^{m-1}(t-1)^{m-1})$

Einige implizite Runge-Kutta-Verfahren m -ter Stufe und p -ter Ordnung in tabellarischer Form:

Gauß-Form

$$m = 1, p = 2$$

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

$$m = 2, p = 4$$

$$\begin{array}{c|cc} \frac{3-\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} \\ \frac{3+\sqrt{3}}{6} & \frac{3+2\sqrt{3}}{12} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Radau I - Form

$$m = 2, p = 3$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{4} & -\frac{5}{12} \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{array}$$

$$m = 3, p = 5$$

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & \frac{1}{9} & \frac{-1-\sqrt{6}}{18} & \frac{-1+\sqrt{6}}{18} \\ \frac{6-\sqrt{6}}{10} & \frac{1}{9} & \frac{88+7\sqrt{6}}{360} & \frac{88-43\sqrt{6}}{360} \\ \frac{6+\sqrt{6}}{10} & \frac{1}{9} & \frac{88+43\sqrt{6}}{360} & \frac{88-7\sqrt{6}}{360} \\ \hline & \frac{1}{9} & \frac{5}{18} & \frac{5}{18} \end{array}$$

Radau II - Form

$$m = 1, p = 1 \text{ (implizites Euler-Verfahren)}$$

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

$$m = 2, p = 3$$

$$\begin{array}{c|cc} \frac{1}{3} & \frac{5}{12} & -\frac{1}{12} \\ 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{array}$$

$$m = 3, p = 5$$

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{4-\sqrt{6}}{10} & \frac{88-7\sqrt{6}}{360} & \frac{296-169\sqrt{6}}{1800} & \frac{-2+3\sqrt{6}}{225} \\ \frac{4-\sqrt{6}}{10} & \frac{296+169\sqrt{6}}{360} & \frac{88+7\sqrt{6}}{1800} & \frac{-2-3\sqrt{6}}{225} \\ 1 & \frac{16-\sqrt{6}}{36} & \frac{16+\sqrt{6}}{36} & \frac{1}{9} \\ \hline & \frac{1}{9} & \frac{5}{18} & \frac{5}{18} \end{array}$$

Lobatto III A - Form ($b_{1j} = 0$)

$$m = 3, p = 4$$

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{5}{24} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{24} \\
 1 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array}$$

Lobatto III B - Form ($b_{in} = 0$)

$$m = 3, p = 4$$

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & 0 \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & 0 \\
 1 & \frac{1}{6} & \frac{5}{6} & 0 \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array}$$

Allgemein gilt, daß ein m -stufiges implizites Runge-Kutta-Verfahren von der Gauß-Form durch geeignete Wahl der $m(m+1)$ freien Parameter die maximal erreichbare Fehlerordnung $2m$ besitzt. Ähnliches gilt auch für die Radau-Formen ($2m - 1$) und Lobatto-Formen ($2m - 2$).

Die Fixpunktiteration zum Lösen von (1.46) ist konvergent für alle Schrittweiten h , die der Bedingung

$$hBL < 1 \quad \text{mit } B := \max_i \sum_j |b_{ij}|$$

genügen und L die Lipschitz-Konstante der Funktion $f(x, y)$ darstellt.

Bemerkung 38 Die impliziten Runge-Kutta-Verfahren besitzen eine Stabilitätseigenschaft, die bei der Integration von steifen Differentialgleichungssystemen entscheidend ist. Für allgemeine Differentialgleichungssysteme sind die impliziten Runge-Kutta-Methoden trotz ihrer hohen Fehlerordnung wenig attraktiv, weil in jedem Integrationsschritt ein im allgemeinen nichtlineares Gleichungssystem für die m Unbekannten k_i ($1 \leq i \leq m$) zu lösen ist.

1.9 MEHRSCHRITTVERFAHREN

Ein Nachteil der Einschrittverfahren ist die hohe Anzahl der Funktionsauswertungen, die für eine hohe Konsistenzordnung und somit für eine hohe Konvergenzordnung nötig sind. Dieser Nachteil tritt bei den folgenden Mehrschrittverfahren nicht auf. Es bleibt im allgemeinen jedoch nur ein deutlicher Vorteil, solange die Schrittweite fest gewählt wird. Für Einschrittverfahren haben wir schon in Kapitel 1.6 gesehen, daß adaptive Schrittweitensteuerung dort recht einfach durchzuführen ist. Dies läßt sich für Mehrschrittverfahren nicht so einfach realisieren.

Es sei $t_j = t_0 + jh$ ($j = 0, 1, 2, \dots$).

Ein k -Schrittverfahren zur Lösung des AWP $y'(t) = f(t, y(t))$, $y(t_0) = y_0$ ist ein Verfahren zur Berechnung von Näherungswerten y_{j+k} zu $y(t_{j+k})$ aus y_j, \dots, y_{j+k-1} durch Lösen der Gleichung

$$\sum_{\ell=0}^k \alpha_{\ell} y_{j+\ell} = h \phi(t_j, y_j, \dots, y_{j+k}, h, f) \quad (1.47)$$

für $j = 0, 1, 2, \dots$ mit geeigneten Startwerten y_0, \dots, y_{k-1} . Dabei ist $\frac{1}{h} \sum_{\ell=0}^k \alpha_{\ell} y_{j+\ell}$ als eine Näherung an die Ableitung y' (bisher $\frac{1}{h}(y_{j+1} - y_j)$) und $\phi(t_j, y_j, \dots, y_{j+k}, h, f)$ als Näherung an $f(t, y(t))$ aufzufassen.

Ein lineares k -Schrittverfahren ist von der Form

$$\sum_{\ell=0}^k \alpha_{\ell} y_{j+\ell} = h \sum_{\ell=0}^k \beta_{\ell} f(t_{j+\ell}, y_{j+\ell}) \quad (j = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.48)$$

mit geeigneten Startwerten y_0, \dots, y_{k-1} . Gilt $\beta_k = 0$ so spricht man von einem expliziten Verfahren, ansonsten von einem impliziten.

Die im allgemeinen nichtlineare Gleichung in y_{j+k} im impliziten linearen k -Schrittverfahren kann aus (1.48) iterativ berechnet werden. Es sei f Lipschitz-stetig in y mit einer Lipschitz-Konstanten L . Dann gilt für die Iteration nach dem Banachschen Fixpunktsatz

$$\begin{aligned} y_{j+k}^{(r+1)} &= h \frac{\beta_k}{\alpha_k} f(t_{j+k}, y_{j+k}^{(r)}) - \frac{1}{\alpha_k} \left(h \sum_{\ell=0}^{k-1} \beta_{\ell} f(t_{j+\ell}, y_{j+\ell}) - \sum_{\ell=0}^{k-1} \alpha_{\ell} y_{j+\ell} \right) \\ &=: \psi(y_{j+k}^{(r)}), \end{aligned}$$

daß diese konvergent ist, falls $|\frac{\beta_k}{\alpha_k}| h L < 1$ gilt.

Untersuchen wir nun zuerst, ob die Diskretisierung der Differentialgleichung lokal vernünftig ist.

Definition 39 Der lokale Diskretisierungsfehler des Mehrschrittverfahrens (1.47) ist

$$d_{j+k}(t_j, h, f) = \sum_{\ell=0}^k \alpha_{\ell} y(t_{j+\ell}) - h \phi(t_j, y(t_j), \dots, y(t_{j+k-1}), y_{j+k}, h, f).$$

Das Mehrschrittverfahren heißt mit einer Differentialgleichung $y' = f(t, y)$ konsistent, falls

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{d_{j+k}(t_j, h, f)}{h} = 0$$

gilt. Es heißt konsistent von der Ordnung p , falls

$$d_{j+k}(t_j, h, f) = \mathcal{O}(h^{p+1})$$

gilt.

Beispiel 40 (eines Mehrschrittverfahrens) Man betrachte die Taylor-Entwicklungen

$$\begin{aligned} y(t+h) &= y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) + \mathcal{O}(h^3) \\ y(t-h) &= y(t) - hy'(t) + \frac{h^2}{2} y''(t) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

Subtraktion beider Gleichungen liefert

$$y(t+h) - y(t-h) = 2hy'(t) + \mathcal{O}(h^3) = 2hf(t, y(t)) + \mathcal{O}(h^3).$$

Dies motiviert das lineare 2-Schrittverfahren

$$y_{k+1} = 2hf(t_k, y_k) + y_{k-1}, \quad k = 1, 2, 3, \dots,$$

welches als Quadratur der Mittelpunktsregel entspricht. Die Konsistenzordnung ist 2, was sich aus der Herleitung sofort ergibt.

Im Gegensatz zu Einschrittverfahren impliziert Konsistenz nicht immer Konvergenz, welches wir später untersuchen werden.

Betrachten wir nun zuerst die Entwicklung der wichtigsten Mehrschrittverfahren, die man über numerische Integration herleiten kann, ähnlich wie Runge-Kutta-Verfahren.

Es gilt

$$y(t_{j+k}) - y(t_{j+r-\ell}) = \int_{t_{j+r-\ell}}^{t_{j+k}} f(t, y(t)) dt. \quad (1.49)$$

Dabei sei $y(t_{j+k})$ der Wert, welcher approximiert werden soll. Es ist nun eine naheliegende Idee, den Integranden f durch ein Interpolationspolynom $P_{r,j}(s) = P_f(s|t_j, \dots, t_{j+r})$ vom Grade r zu ersetzen, welches an den Stellen t_j, \dots, t_{j+r} interpoliert.

Dabei betrachtet man das Integral über $(t_{j+r-\ell}, t_{j+k})$, während nur auf $[t_j, t_{j+r}]$ interpoliert wird. Dieses Vorgehen ist graphisch in Abbildung 1.10 dargestellt.

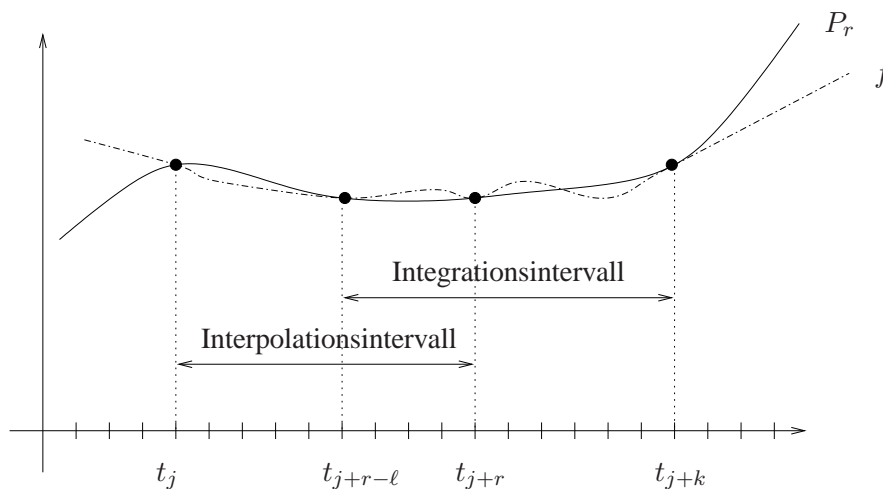


Abb. 1.10: Exemplarische Darstellung von Interpolations- und Integrationsintervall

Die Lagrangesche Darstellungsform für das Interpolationspolynom $P_{r,j}(s)$ sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned} P_{r,j}(s) &= \sum_{i=0}^r f(t_{j+i}, y_{j+i}) \prod_{\substack{p=0 \\ p \neq i}}^r \frac{s - t_{j+p}}{t_{j+i} - t_{j+p}} \\ &= \sum_{i=0}^r f(t_{j+i}, y_{j+i}) \prod_{\substack{p=0 \\ p \neq i}}^r \frac{s - t_{j+p}}{(i-p)h} \end{aligned}$$

Also erhalten wir, falls $P_{r,j}(s)$ in (1.49) für f eingesetzt wird:

$$y_{j+k} - y_{j+r-\ell} \approx h \sum_{i=0}^r f(t_{j+i}, y_{j+i}) \beta_i^{(r,\ell)}, \quad (1.50)$$

wobei

$$\begin{aligned} h\beta_i^{(r,\ell)} &= \int_{t_{j+r-\ell}}^{t_{j+k}} \prod_{\substack{p=0 \\ p \neq i}}^r \frac{s - t_{j+p}}{(i - p)} ds \\ &= h \int_{-\ell}^{k-r} \prod_{\substack{p=0 \\ p \neq i}}^r \frac{r - p + \tilde{s}}{i - p} d\tilde{s} \end{aligned}$$

ist. Dabei erhält man den letzten Schritt durch Substitution $s = t_j + (r + \tilde{s})h$. Die Rechenvorschrift lautet somit

$$u_{j+k} = u_{j+r-\ell} + h \sum_{i=0}^r \beta_i^{(r,\ell)} f(t_{j+i}, y_{j+i}).$$

Übliche Wahlen für r und ℓ :

r	ℓ	Name	Art
$k - 1$	0	Adams-Bashforth	Extrapolation, explizites Verfahren
$k - 1$	1	Nyström	Extrapolation, explizites Verfahren
k	1	Adams-Moulton	Interpolation, implizites Verfahren
k	2	Milne-Simpson	Interpolation, implizites Verfahren

Literaturverzeichnis

- [A] R.A. ADAMS, "Sobolev Spaces", Pure Appl. Math. 65, Academic Press, New York, 1975.
- [G] G. H. GOLUB, C. F. VAN LOAN, Matrix Computations, 3. ed., Hopkins Univ. Press, 1996.
- [H] W. HACKBUSCH, Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme, 2. Auflage, Teubner-Verlag, Stuttgart, 1993.
- [HH] G. HÄMMERLIN, K.-H. HOFFMANN, Numerische Mathematik, 4. Auflage, Springer-Verlag, Berlin u.a., 1994.
- [P] R. PLATO, Numerische Mathematik kompakt, Vieweg-Verlag.
- [Sc] H. R. SCHWARZ, Numerische Mathematik, 4. Auflage, Teubner-Verlag, Stuttgart, 1997.
- [St] J. STÖR, R. BULIRSCH, Numerische Mathematik 1 und 2, Springer-Verlag, Berlin u.a., 1994.
- [SW] K. STREHMEL, R. WEINER, Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen, Teubner-Verlag, Stuttgart, 1995.
- [TS] W. TÖRNIG, P. SPELLUCCI, Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker, Band 1 & 2, Springer-Verlag, Berlin u.a.
- [W] W. WALTER, Gewöhnliche Differentialgleichungen, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin u.a., 1996.