8 Gewöhnliche Differentialgleichungen

Beispiel: Radioaktiver Zerfall

Sei $m(t)$ die Menge radioaktiven Materials zur Zeit t. Der Zerfall des Materials geschieht proportional zur vorhandenen Menge mit dem Proportionalitätsfaktor λ. Somit gilt:

$$\frac{dm(t)}{dt} = -\lambda\, m(t)\ .$$

Alle Funktionen $m(t) = ae^{-\lambda t}$, $a \in \mathbb{R}$, sind Lösungen dieser gewöhnlichen Differentialgleichung. Gibt man zur Zeit t_0 die Menge m_0 des Materials vor, d.h. $m(t_0) = m_0$, so ist $m(t) = m_0 e^{-\lambda(t-t_0)}$ die eindeutige Lösung dieses sogenannten Anfangswertproblems.

Problemstellung:

Definition: Für eine gegebene Funktion $f(t, x)$, heisst

$$\dot{x} = f(t, x) \tag{8.1}$$

(skalare) *gewöhnliche Differentialgleichung* (*1. Ordnung*).

Gesucht ist eine *Lösung* $x(t)$ der Differentialgleichung (8.1), d.h. eine Funktion $x(t)$, für die $\dot{x} = f(t, x(t))$ gilt. Differentialgleichungen haben viele Lösungen. Um eine bestimmte Lösung auszuzeichnen, müssen zusätzliche Bedingungen gestellt werden.

Definition: Verlangt man zusätzlich zu (8.1) noch

$$x(t_0) = x_0 \tag{8.2}$$

für vorgegebenes x_0, t_0, nennt man (8.1), (8.2) ein *Anfangswertproblem.*

Gesucht ist die *Lösung* $x(t)$ des Anfangswertproblems (8.1), (8.2), d.h. eine Funktion $x(t)$, für die gilt:

i) $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$

ii) $x(t_0) = x_0$.

Unter vernünftigen Bedingungen an die Funktion f besitzt ein Anfangswertproblem eine *eindeutige* Lösung.

Beispiel: Gegeben sei das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = \frac{x^2}{t},\ x(1) = 1\,.$$

Die Lösung dieses Anfangswertproblems ist

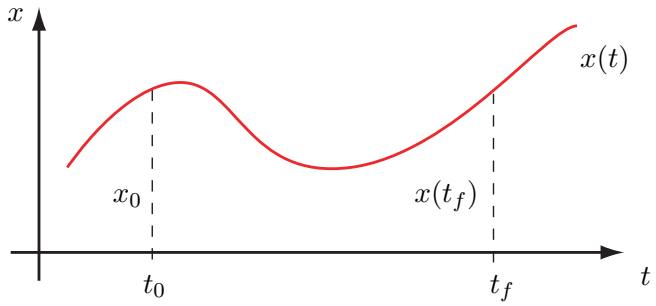
$$x(t) = \frac{1}{1 - \ln t}\,.$$

Da man nur in einfachen Fällen die Lösung eines Anfangswertproblems in geschlossener analytischer Form angeben kann, sind numerische Methoden gefragt.

Numerische Fragestellung
Gegeben seien das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = f(t, x),\ x(t_0) = x_0$$

sowie eine Endstelle t_f, und gesucht sei eine Approximation für $x(t_f)$.



Grundidee: Unterteile das Intervall $[t_0, t_f]$ in Teilintervalle: $t_0 < t_1 < \ldots < t_n = t_f$, und approximiere sukzessive $x(t_1),\ x(t_2),\ \ldots,\ x(t_n)$. Damit wird das ursprünglich globale Problem in eine Folge lokaler Probleme zerlegt.

Dieser Zugang beruht auf der *Taylorformel* für die Funktion x an einer Stelle $t + h$:

$$x(t+h) = x(t) + \dot{x}(t)h + \ddot{x}(t)\frac{h^2}{2} + \ldots + x^{(p)}(t)\frac{h^p}{p!} + \underbrace{x^{(p+1)}(\tau)\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}}_{\text{Restglied}}\,,\quad \tau \in (t, t+h)\,,$$

d.h. aus der Kenntnis der Funktion x an einer Stelle t (mit noch zusätzlichen Ableitungen) erhalten wir Information über die Funktion an der Stelle $t + h$.

Wir folgern aus der Taylorformel, dass das *Taylorpolynom vom Grad p* an der Stelle t,

$$x(t) + \dot{x}(t)h + \ldots + x^{(p)}(t)\frac{h^p}{p!}\,,$$

$x(t + h)$ approximiert mit einem Fehler der Ordnung $O(h^{p+1})$.

8.1 Explizite Einschrittverfahren

8.1.1 Das Eulerverfahren

Wir approximieren $x(t+h)$ durch $x(t)+\dot{x}(t)h$, d.h. durch das Taylorpolynom vom Grad 1, bzw. da $\dot{x}(t) = f(t, x(t))$ durch den Ausdruck $x(t) + h\, f(t, x(t))$, und wir definieren die sogenannte *Verfahrensfunktion* F als

$$F(t, x, h) := x + hf(t, x)\,.$$

Aus der Taylorformel wissen wir, dass die Funktion $F(t, x(t), h)$ die Funktion $x(t + h)$ mit einem Fehler der Ordnung $O(h^2)$ approximiert.

Bemerkung: In der Literatur findet man oft die Verfahrensfunktion Φ, die gegeben ist als $x + h\Phi(t, x) := F(t, x, h)$.

Anwendung:

Einteilung:	$t_0 < t_1 < t_2 \ldots < t_{n-1} < t_n = t_f$
Lösung:	$x_0 = x(t_0),\ x_1 = x(t_1),\ x_2 = x(t_2),\ \ldots,\ x_{n-1} = x(t_{n-1}),\ x_n = x(t_n)$
Schritt:	$h_0 = t_1 - t_0,\ h_1 = t_2 - t_1,\ h_2 = t_3 - t_2,\ \ldots,\ h_{n-1} = t_n - t_{n-1}$
Näherung:	$\tilde{x}_0 = x_0,\ \tilde{x}_1,\ \tilde{x}_2,\ \ldots,\ \tilde{x}_{n-1},\ \tilde{x}_n$

Das *Eulerverfahren* ist wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_0 &= x_0 \\ \tilde{x}_{j+1} &= F(t_j, \tilde{x}_j, h_j),\quad j = 0, 1, \ldots, n-1\,. \end{aligned}$$

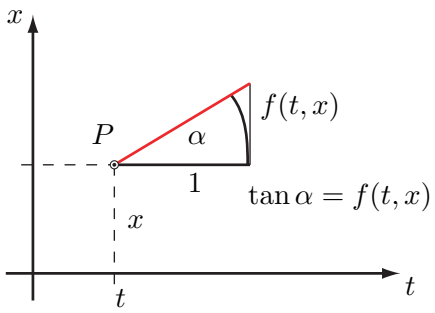
Da $x(t_j + 1) \cong F(t_j, x(t_j), h_j) \cong F(t_j, \tilde{x}_j, h_j) = \tilde{x}_{j+1}$, machen wir also zwei Vernachlässigungen (Fehler) pro Schritt des Eulerverfahrens.

Bemerkung: Oft werden (für die Theorie) die Schritte äquidistant gewählt:

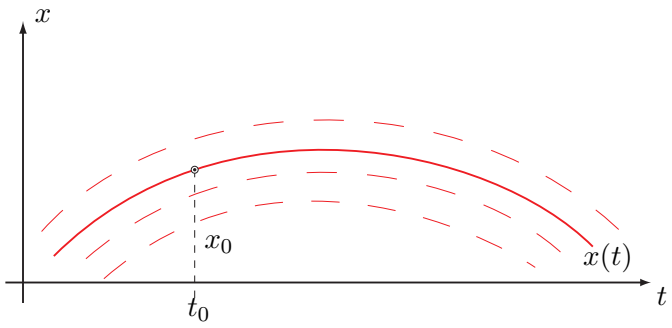
$$h := \frac{t_f - t_0}{n},\ t_j := t_0 + jh\,.$$

Geometrische Interpretation des Eulerverfahrens

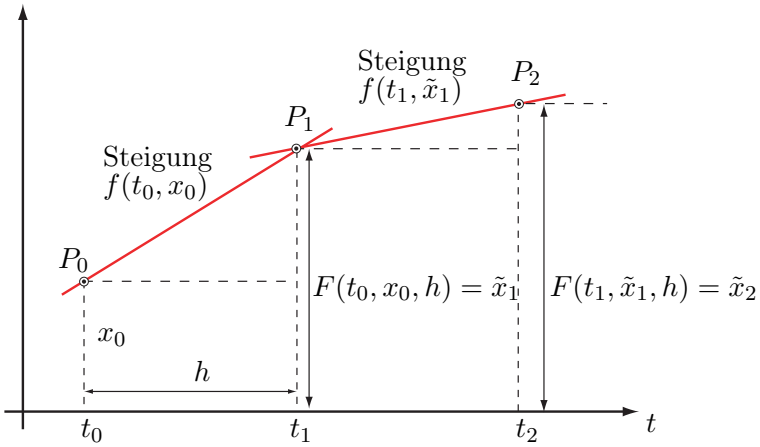
Für die Differentialgleichung (8.1) gilt, dass die Funktion f in jedem Punkt (x, t) ihres Definitionsbereiches eine Steigung (Richtung) definiert:



In jedem Punkt P stimmt die Steigung der Lösungskurve (die Richtung der Tangente der Lösungskurve) mit der Richtung dieses Richtungsfeldes überein:



Hingegen geht das Eulerverfahren von einem Punkt P h-weit in Richtung des Richtungsfeldes in P. Durch das Eulerverfahren wird ein *Polygonzug* definiert:



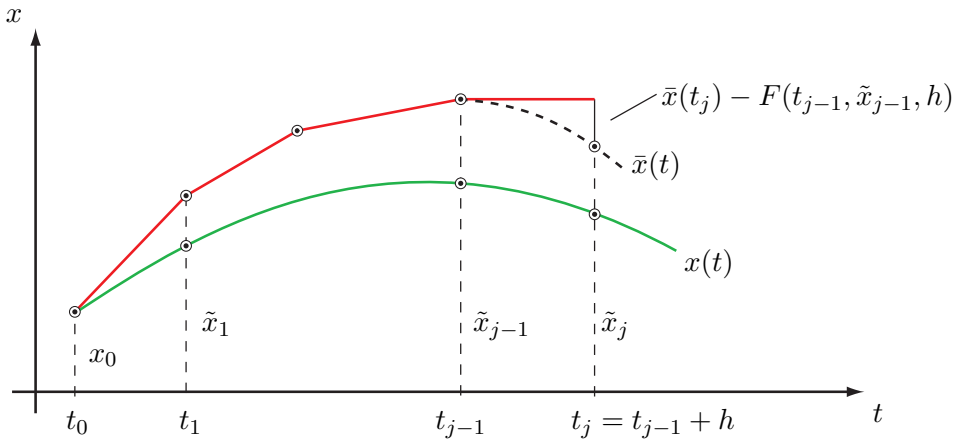
Definition: Der Fehler eines Einschrittverfahrens beim Schritt j heisst *lokaler* (Diskretisations-)*Fehler*.

Bemerkung: Eine übliche Bezeichnung für den lokalen Fehler im Schritt $j+1$ ist

$$\ell(t_j, \tilde{x}_j, h) := \bar{x}(t_j + h) - \underbrace{F(t_j, \tilde{x}_j, h)}_{=\tilde{x}_{j+1}},$$

wobei $\bar{x}(t_j + h)$ die exakte Lösung an der Stelle $t_j + h$ von (8.1) ist mit der Anfangsbedingung $\bar{x}(t_j) = \tilde{x}_j$.

Definition: Die Differenz $x(t_j) - \tilde{x}_j$ heisst *globaler* (Diskretisations-)*Fehler* an der Stelle t_j.



Definition: Die *Fehlerordnung* eines Verfahrens mit Verfahrensfunktion $F(t, x, h)$ ist gleich der Anzahl übereinstimmender Terme in den Taylorentwicklungen nach h von $x(t+h)$ und von $F(t, x(t), h)$. Der *lokale Fehler* des Verfahrens ist dann von der Ordnung $O(h^{p+1})$.

Bemerkungen:

- Man kann zeigen: Ist der lokale Fehler eines Verfahrens von der Ordnung $O(h^{p+1})$, dann ist der *globale Fehler* von der Ordnung $O(h^p)$. (Dies rechtfertigt obige Definition der Fehlerordnung).
- Die *Fehlerkonstante* (der Koeffizient des h^{p+1}-Termes des lokalen Fehlers) hängt im Gegensatz zur Fehlerordnung von der Stelle j ab.

Es gilt: Der lokale Fehler des Eulerverfahrens ist von der Ordnung $O(h^2)$, falls die Schrittlänge h ist. Der globale Fehler des Eulerverfahrens an der Stelle $t_n = t_f$ ist $O(h)$, und somit ist die *Fehlerordnung* des Eulerverfahrens 1. Also konvergiert der Wert $\tilde{x}_n$ für $h = \frac{t_f - t_0}{n} \to 0$ (bei Abwesenheit von Rundungsfehlern) gegen den exakten Wert $x(t_f)$ der Lösung. Man sagt, dass das Eulerverfahren *konsistent* ist.

Beispiel: Für das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = \frac{x^2}{t},\ x(1) = 1$$

sei $x(2)$ gesucht. Die exakte Lösung ist $x(2) = (1 - \ln 2)^{-1} = 3.258891353\ldots$

Das Eulerverfahren für dieses Problem hat die Verfahrensfunktion

$$F(t,x,h) = x + h\frac{x^2}{t}\,.$$

Für eine äquidistante Einteilung erhalten wir damit:

h	$\tilde{x}_n$	Fehler (gerundet)
0.1	2.845	0.414
0.05	3.018	0.241
0.01	3.203	0.056

8.1.2 Taylor-Verfahren höherer Ordnung

Ordnung 2:

Wir approximieren $x(t+h)$ durch $x(t)+\dot{x}(t)h+\ddot{x}(t)\frac{h^2}{2}$, d.h. durch das Taylorpolynom vom Grad 2. Da

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= f(t,x(t))\\ \ddot{x}(t) &= f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))\,\dot{x}(t) = f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))f(t,x(t))\,,\end{aligned}$$

definieren wir die Verfahrensfunktion

$$F(t,x,h) = x + hf(t,x) + \frac{h^2}{2}\left[f_t(t,x) + f_x(t,x)f(t,x)\right]\,.$$

Das *Taylor-Verfahren der Ordnung 2* ist also wie folgt definiert:

$$\tilde{x}_{j+1} = F(t_j,\tilde{x}_j,h_j),\ j = 0,1,\ldots,n-1\,.$$

Es gilt:

- $F(t,x(t),h)$ approximiert $x(t+h)$ mit einem Fehler der Ordnung $O(h^3)$.
- Der lokale Fehler des Verfahrens ist also $O(h^3)$ (äquidistante Schritte h); der globale Fehler ist $O(h^2)$, d.h. die Fehlerordnung ist 2.
- Nachteil dieses Verfahrens: Es werden die partiellen Ableitungen f_t und f_x der Funktion f benötigt.

Beispiel: Für das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = \frac{x^2}{t},\ x(1) = 1$$

sei wieder eine Approximation an $x(2) = 1 - \ln 2)^{-1} = 3.258891353\ldots$ gesucht.

Das Taylor-Verfahren der Ordnung 2 hat die Verfahrensfunktion

$$F(t,x,h) = x + h\frac{x^2}{t} + h^2(x-0.5)\frac{x^2}{t^2}\,.$$

Das folgt aus

$$f = \frac{x^2}{t},\ f_t = \frac{-x^2}{t^2},\ f_x = \frac{2x}{t}\,.$$

Für eine äquidistante Einteilung erhalten wir

h	$\tilde{x}_n$	Fehler (gerundet)
0.1	3.21695	0.042
0.05	3.247044	0.012
0.01	3.25837	0.0005

Ordnung p:

Wir approximieren $x(t+h)$ durch $x(t) + \dot{x}(t)h + \ldots + x^p(t)\frac{h^2}{p!}$, d.h. durch das Taylorpolynom vom Grad p. Alle vorkommenden Ableitungen der Funktion $x(t)$ lassen sich im Prinzip wieder durch f und partielle Ableitungen von f ausdrücken. Das ergibt die Verfahrensfunktion $F(t,x,h)$. Dieses Verfahren hat dann den lokalen Fehler $O(h^{p+1})$ und den globalen Fehler $O(h^p)$, also Fehlerordnung p.

Bemerkung: Der Nachteil diese Verfahrens ist natürlich, dass partielle Ableitungen von f bis zur Ordnung $p-1$ benötigt werden.

8.1.3 Ableitungsfreie Verfahren höherer Ordnung

Idee: Simulation der partiellen Ableitungen durch 'Verschachtelung' von Funktionsauswertungen.

Das Verfahren von Heun

Wir definieren die Verfahrensfunktion:

$$F(t,x,h) = x + \frac{h}{2}\left[f(t,x) + f(t+h, x+hf(t,x))\right]$$

und damit das *Verfahren von Heun*

$$\tilde{x}_{j+1} = F(t_j, \tilde{x}_j, h_j),\ j = 0,1,\ldots,n-1\,.$$

Bemerkung: Pro Schritt sind zwei Funktionsauswertungen nötig.

Es gilt: Das Verfahren von Heun hat die Fehlerordnung 2.

Begründung:

$$\begin{aligned} f(t+\delta, x+\Delta) &= f(t,x) + f(t,x)\delta + f_x(t,x)\Delta \\ &\quad + O(\delta^2) + O(\delta\Delta) + O(\Delta^2) \\ f(t+h, x+hf(t,x)) &= f(t,x) + f_t(t,x)h + f_x(t,x)hf(t,x) + O(h^2) \\ \frac{h}{2} f(t+h, x+hf(t,x)) &= \frac{h}{2} f(t,x) + \frac{h^2}{2}\left[f_t(t,x) + f_x(t,x)f(t,x)\right] + O(h^3) \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$F(t,x(t),h) = x(t) + \underbrace{f(t,x(t))}_{\dot{x}(t)} h + \underbrace{\left[f_t(t,x(t)) + f_x(t,x(t))f(t,x(t))\right]}_{\ddot{x}(t)} \frac{h^2}{2} + O(h^3)\,.$$

Also hat das Verfahren (mindestens) den lokalen Fehler der Ordnung $O(h^3)$. (Ganz genau müsste man noch zeigen, dass sich die $O(h^3)$-Terme der beiden Taylor-Entwicklungen unterscheiden). □

Beispiel: Das Verfahren von Heun zur Approximation von $x(2)$ des Anfangswertproblems

$$\dot{x} = \frac{x^2}{t},\ x(1) = 1$$

ergibt:

h	$\tilde{x}_n$	Fehler (gerundet)
0.1	3.22279	0.0361
0.05	3.24898	0.0099
0.01	3.25847	0.0004

Das *Verfahren von Heun* kann auch wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t,x) \\ k_2 &= f(t+h, x+hk_1) \\ \bar{x} &= F(t,x,h) = x + \tfrac{h}{2}[k_1 + k_2]\,, \end{aligned}$$

mit den zwei *Stufen* k_1, k_2 (zwei Funktionsauswertungen). Es ist ein *explizites Runge-Kutta-Verfahren* mit zwei *Stufen* und der Fehlerordnung 2.

Das *Eulerverfahren* ist ein explizites Runge-Kutta-Verfahren mit einer Stufe und der Fehlerordnung 1:

$$k_1 = f(t, x)$$
$$\bar{x} = F(t, x, h) = x + h\, k_1\,.$$

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren

ist wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t, x) \\ k_2 &= f(t + \frac{h}{2}, x + \frac{h}{2} k_1) \\ k_3 &= f(t + \frac{h}{2}, x + \frac{h}{2} k_2) \\ k_4 &= f(t + h, x + h\, k_3) \end{aligned}$$

$$\bar{x} = F(t, x, h) = x + \frac{h}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]\,.$$

Es ist explizit und besitzt 4 Stufen.

Es gilt: Das klassische Runge-Kutta-Verfahren hat die Fehlerordnung 4. (Die Entwicklung nach h von $F(t, x(t), h)$ stimmt bis zu den Gliedern der Ordnung $p = 4$ in h mit der Entwicklung von $x(t + h)$ überein).

Beispiel: Das klassische Runge-Kutta-Verfahren zur Approximation der Lösung $x(2)$ des Anfangswertproblems

$$\dot{x} = \frac{x^2}{t}\,,\ x(1) = 1$$

ergibt:

h	$\tilde{x}_n$	Fehler (gerundet)
0.1	3.25882141	$7 \cdot 10^{-5}$
0.05	3.25888661	$5 \cdot 10^{-6}$
0.01	3.25889134	$1 \cdot 10^{-8}$

Das Butcher-Tableau

Ein explizites Runge-Kutta-Verfahren mit s Stufen kann durch sein Butcher-Tableau wie folgt beschrieben werden:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} \quad b_s \end{array} \qquad c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}$$

$$\begin{aligned} k_i &= f(t + c_i h, x + h \textstyle\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j),\ i = 1, \ldots, s && \text{(Stufen)} \\ \bar{x} &= x + h \textstyle\sum_{i=1}^{s} b_i k_i && \text{(Approximation bei } t + h) \end{aligned}$$

Beispiele:

Eulerverfahren:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array} \qquad \begin{aligned} s &= 1 \\ p &= 1 \end{aligned}$$

Verfahren von Heun:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \qquad \begin{aligned} s &= 2 \\ p &= 2 \end{aligned}$$

Klassisches Runge-Kutta-Verfahren:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{6} & \frac{2}{6} \quad \frac{1}{6} \end{array} \qquad \begin{aligned} s &= 4 \\ p &= 4 \end{aligned}$$

Bemerkung: (*Butcher Barrier*) Für $p \geq 5$ existiert kein explizites Runge-Kutta-Verfahren der Fehlerordnung p mit $s = p$ Stufen.

8.1.4 Variable Schrittweiten

Wunsch: Wenn die Lösung stark variiert, möchte man eine hohe Auflösung (kleine Schritte), wenn sie wenig variiert, eine geringere Auflösung (grosse Schritte).

Ziel: Die Schrittweiten h_j sollen so gewählt werden, dass der lokale Fehler gleich einer vorgegeben Toleranz TOL ist:

$$|\ell(t_j, \tilde{x}_j, h_j)| = TOL\,.$$

Da ℓ nicht bekannt ist, begnügt man sich mit einer Schätzung $\bar{\ell}$ des lokalen Fehlers.

Idee für die Schätzung $\bar{\ell}$:

- Berechne $\tilde{x}_{j+1} = F(t_j, \tilde{x}_j, h)$ mit einem ersten Verfahren F.
- Berechne $\hat{\tilde{x}}_{j+1} = \hat{F}(t_j, \tilde{x}_j, h)$ mit einem Vergleichsverfahren $\hat{F}$.
- Setze $\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) := \hat{F}(t_j, \tilde{x}_j, h) - F(t_j, \tilde{x}_j, h)$.

Es gilt: Falls F von der Fehlerordnung p ist und $\hat{F}$ von der Fehlerordnung $\hat{p}$ mit $\hat{p} > p$, dann ist

$$\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) = O(h^{p+1})$$

und

$$\ell(t_j, \tilde{x}_j, h) = \bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) + O(h^{\hat{p}+1})\,.$$

Begründung: Sei $z(t)$ die Lösung von (8.1) mit der Anfangsbedingung $z(t_j) = \tilde{x}_j$, und sei $z_{j+1} := z(t_j + h)$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \ell(t_j, \tilde{x}_j, h) &= z_{j+1} - \tilde{x}_{j+1} = z_{j+1} - \hat{\tilde{x}}_{j+1} + \hat{\tilde{x}}_{j+1} - \tilde{x}_{j+1} \\ &= \hat{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) + \bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) = \bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) + O(h^{\hat{p}+1})\,, \end{aligned}$$

da $\hat{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) = O(h^{\hat{p}+1})$. Da $\ell(t_j, \tilde{x}_j, h) = O(h^{p+1})$ ist, folgt daraus mit $\hat{p} > p$ auch, dass $\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h) = O(h^{p+1})$.

□

Variante A (*Richardson-Extrapolation*)

Wir illustrieren das Vorgehen ohne Einschränkung der Allgemeinheit für $p = 1$ und das Eulerverfahren für F. Für $\hat{F}$ wählen wir zwei Euler-Schritte mit Schrittweite $\frac{h}{2}$:

$$\begin{aligned} \hat{\tilde{x}}_{j+1} &= \tilde{x}_j + \frac{h}{2} f(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h}{2} f(t_j + \frac{h}{2}, \tilde{x}_j + \frac{h}{2} f(t_j, \tilde{x}_j)) \\ &\overset{\text{Taylor}}{=} \tilde{x}_j + \frac{h}{2} f(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h}{2}[f(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h}{2} f_t(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h}{2} f_x(t_j, \tilde{x}_j) f(t_j, \tilde{x}_j) + \ldots] \\ &= \tilde{x}_j + h f(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h^2}{4} \underbrace{[f_t(\ldots) + f_x(\ldots) f(\ldots)]}_{\ddot{z}(t_j)} + O(h^3)\,, \end{aligned}$$

wobei $z(t)$ die Lösung von (8.1) sei mit der Anfangsbedingung $z(t_j) = \tilde{x}_j$. Da $z(t_j + h)$ die Taylorentwicklung

$$z(t_j + h) = \tilde{x}_j + hf(t_j, \tilde{x}_j) + \frac{h^2}{2}\ddot{z}(t_j) + O(h^3)$$

besitzt, erhalten wir für den lokalen Fehler des Verfahrens F

$$z(t_j + h) - \tilde{x}_{j+1} = \frac{h^2}{2}\ddot{z}(t_j) + O(h^3)\,. \tag{8.3}$$

Da $\dot{z}(t) = f(t, z)$ ist, ergibt sich

$$\ddot{z}(t) = f_t(t, z) + f_z(t, z)\dot{z}(t) = f_t(t, z) + f_z(t, z)f(t, z)\,.$$

Also ist der lokale Fehler von $\hat{F}$

$$z(t_j + h) - \hat{\tilde{x}}_{j+1} = \frac{h^2}{4}\ddot{z}(t_j) + O(h^3)\,. \tag{8.4}$$

Subtrahiert man vom Zweifachen der Gleichung (8.4) die Gleichung (8.3), erhält man

$$\underbrace{z(t_j + h) - \hat{\tilde{x}}_{j+1}}_{=\hat{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h)} = \underbrace{\hat{\tilde{x}}_{j+1} - \tilde{x}_{j+1}}_{=\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h)} + O(h^3)\,.$$

Daraus folgt, dass $\hat{F}(t_j, \tilde{x}_j, h) - F(t_j, \tilde{x}_j, h)$ eine Schätzung des lokalen Fehlers $\hat{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h)$ des Verfahrens $\hat{F}$ liefert zur Ordnung $O(h^3)$.

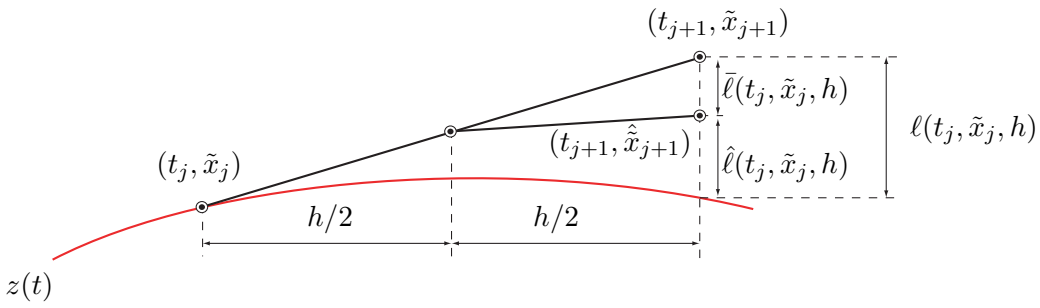
Bemerkung:

- $2\,\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h)$ ergibt eine Schätzung zur Ordnung $O(h^3)$ des lokalen Fehlers $\ell(t_j, \tilde{x}_j, h)$ des Verfahrens F.
- Für allgemeine Ordnung p gilt:

$$z(t_j + h) - \hat{\tilde{x}}_{j+1} = \underbrace{\frac{\hat{\tilde{x}} - \tilde{x}_{j+1}}{2^p - 1}}_{=\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h)} + O(h^{p+1})\,.$$

Dieses Vorgehen heisst *Richardson-Extrapolation*, da dabei der unbekannte Fehlerterm $\frac{h^2}{\cdot}\ddot{z}(t_j)$ in (8.3) und (8.4) eliminiert wird (vergleiche die Romberg-Extrapolation bei der numerischen Integration).

Die Richardson-Extrapolation für das Euler-Verfahren lässt sich wie folgt skizzieren:



Variante B (*Eingebettete Runge-Kutta-Formeln*)

Wir betrachten zwei Runge-Kutta-Verfahren (für $\tilde{x}_{j+1}$ und für $\hat{\tilde{x}}_{j+1}$) mit den gleichen Funktionsauswertungen und den Fehlerordnungen p und $\hat{p}$, wobei $\hat{p} = p+1$ (oder $\hat{p} = p-1$). (Die bekannteste Methode ist DOPRI5 von Dormand/Prince mit $p = 5$, $\hat{p} = 4$ ($s = 7$).)

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

$$\begin{aligned}\tilde{x}_{j+1} &= \tilde{x}_j + h\textstyle\sum_{i=1}^{s} b_i k_i \quad \text{(Fehlerordnung } p\text{)}\\ \hat{\tilde{x}}_{j+1} &= \tilde{x}_j + h\textstyle\sum_{i=1}^{s} \hat{b}_i k_i \quad \text{(Fehlerordnung } \hat{p} = p+1\text{)}\end{aligned}$$

Damit gilt:

$$\bar{\ell}(t_j,\tilde{x}_j,h) = \hat{\tilde{x}}_{j+1} - z(t_j+1) + z(t_j+1) - \tilde{x}_{j+1} = \underbrace{-\hat{\ell}(t_j,\tilde{x}_j,h)}_{O(h^{p+2})} + \underbrace{\ell(t_j,\tilde{x}_j,h)}_{O(h^{p+1})} = O(h^{p+1})$$

und

$$\ell(t_j,\tilde{x}_j,h) = \bar{\ell}(t_j,\tilde{x}_j,h) + O(h^{\hat{p}+1})\,,$$

und $\bar{\ell}(t_j,\tilde{x}_j,h) = \hat{F}(t_j,\tilde{x}_j,h) - F(t_j,\tilde{x}_j,h)$ liefert also eine Schätzung des lokalen Fehlers $\ell(t_j,\tilde{x}_j,h)$ des Verfahrens F von der Ordnung $O(h^{\hat{p}+1}) = O(h^{p+2})$.

Praktische Schrittweitensteuerung

Wähle ein Verfahren F der Fehlerordnung p und ein Verfahren $\hat{F}$ der Fehlerordnung $\hat{p}$ mit $\hat{p} \geq p$ und bilde

$$\bar{\ell}(t_j,\tilde{x}_j,h) = \hat{F}(t_j,\hat{x}_j,h) - F(t_j,\tilde{x}_j,h)\,.$$

(Bei der Richardson-Extrapolation bilde $\bar{\ell} = \frac{1}{2^{p-1}}[\hat{F} - F]$).

Es gilt:

$$\begin{aligned} |\bar{\ell}| &\cong C \cdot h^{p+1} && \Rightarrow C \cong \frac{|\bar{\ell}|}{h^{p+1}} \\ C \cdot h_{opt}^{p+1} &\cong TOL && \Rightarrow h_{opt} \cong \left(\frac{TOL}{C}\right)^{\frac{1}{p+1}} \\ & && \Rightarrow h_{opt} \cong h \left(\frac{TOL}{|\bar{\ell}|}\right)^{\frac{1}{p+1}} , \end{aligned}$$

dabei ist h die aktuell durchgeführte Schrittlänge und h_{opt} das optimale h für diesen Schritt.

Algorithmus: (Schrittweitensteuerung)

1. Berechne $\bar{\ell}(t_j, \tilde{x}_j, h_j) = \hat{\tilde{x}}_{j+1} - \tilde{x}_{j+1}$ [für Richardson: $\cdot \frac{1}{2^{p-1}}$]
2. Falls $|\bar{\ell}| > TOL$:
   - Verwerfe die Approximation $\tilde{x}_{j+1}$
   - Wähle eine neue (kleinere) Schrittweite

     $$h^* = h_j \left(\frac{TOL}{|\bar{\ell}|}\right)^{\frac{1}{p+1}} \cdot Fak\,,$$

     wobei Fak ein Sicherheitsfaktor ist, z.B. $Fak = 0.8$.
   - Setze $h_j := h^*$; goto 1.
3. Falls $|\bar{\ell}| \leq TOL$:
   - Akzeptiere $\tilde{x}_{j+1}$ als Approximation für $x(t_{j+1})$
   - Bestimme den Vorschlag für h_{j+1} als

     $$h_{j+1} = h_j \left(\frac{TOL}{|\bar{\ell}|}\right)^{\frac{1}{p+1}} \cdot Fak\,.$$