Numerische Lösungsverfahren für gewöhnliche Differenzialgleichungen

Gewöhnliche Differenzialgleichungen (ordinary differential equations = ODEs) haben allgemein folgende Form:

$$\dot{x} = f\left(t, x\right).$$

Viele ODEs kann man nicht analytisch lösen, weshalb man auf numerische Lösungsverfahren zurückgreifen muss. ODEs und die entsprechenden Lösungsverfahren lassen sich dabei schön im **Richtungsfeld** der ODE darstellen (siehe Zusatzmaterial "Was ist ein Richtungsfeld?").
Jedes Lösungsverfahren verwendet ein Startwertpaar (t_0, x_0) um durch Funktionsauswertungen von $f(t, x)$ spätere Wertepaare $(t_1, x_1), (t_2, x_2), \cdots$ zu bestimmen. Eine Funktionsauswertung hat dabei auch eine anschauliche Bedeutung: Durch die Bestimmung von $f(t, x)$ bestimmen wir die Tangente im Punkt (t, x).
Wir nehmen an, wir befinden uns im k–ten Zeitschritt, kennen also (t_k, x_k) und möchten gerne den $k + 1$–ten Zeitschritt bestimmen. Die Schrittweite h bestimmt dabei, wie groß ein Zeitschritt, also der Abstand von t_k zu t_{k+1}, ist.
Grundsätzlich muss man außerdem zwischen **expliziten** und **impliziten** Verfahren unterscheiden.

- Bei expliziten Verfahren ist die komplette rechten Seite der Iterationsformel ($x_{k+1} = \cdots$) explizit gegeben und wir müssen die bekannten Werte x_k, t_k und h einfach einsetzen um den neuen Wert x_{k+1} zu erhalten.
- Bei impliziten Verfahren kennt man nicht alle auf der rechten Seite der Iterationsformel benötigten Zahlenwerte. Der neue Zeitschritt x_{k+1} ist also nicht explizit über die Iterationsformel gegeben, sondern er ist implizit gegeben und muss (nachdem man die bekannten Werte $x_k, t_k, t_{k+1} = t_k + h$ und h eingesetzt hat) durch Auflösen der Iterationsformel nach x_{k+1} bestimmt werden.

Explizites Eulerverfahren

$$\boxed{x_{k+1} = x_k + hf\left(t_k, x_k\right)}$$

Dieses Verfahren ist das einfachste Lösungsverfahren, das es gibt. Wir legen einfach an den bekannten Punkt (t_k, x_k) die Tangente in diesem Punkt $f(t_k, x_k)$ an und legen je nach Schrittweite h von diesem Punkt aus eine bestimmte Entfernung in Richtung der Tangente zurück. Dort, wo die Tangente endet, zeichnen wir den neuen Punkt (t_{k+1}, x_{k+1}) ein.

Implizites Eulerverfahren

$$\boxed{x_{k+1} = x_k + hf\left(t_{k+1}, x_{k+1}\right)}$$

Dieses Verfahren ist das einfachste implizite Lösungsverfahren, das es gibt. Im Gegensatz zum expliziten Eulerverfahren möchte man hier jedoch für den Zeitschritt nicht die Tangente im Startpunkt (t_k, x_k), sondern im Endpunkt (t_{k+1}, x_{k+1}) verwenden.
Das ist natürlich problematisch, weil man den Endpunkt erst kennt, sobald man den Zeitschritt gemacht hat, für den Zeitschritt ist jedoch die Tangente im Endpunkt notwendig. Dieses Problem löst man, indem man die obenstehende Formel nicht als explizite Iterationsformel betrachtet, sondern als Gleichung, die man selbstverständlich nach einer Unbekannten y_{k+1} auflösen kann. Dadurch ist der neue Wert y_{k+1} durch die Iterationsformel implizit gegeben und kann bestimmt werden.

Mittelpunktsregel (implizites Verfahren)

$$x_{k+1} = x_k + hf\left(\frac{t_k + t_{k+1}}{2}, \frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right)$$

Die Mittelpunktsregel verwendet die Tangente, die genau in der Mitte zwischen Start– und Endpunkt liegt. Dadurch, dass wir für die Bestimmung des Mittelpunktes zwischen (t_k, x_k) und (t_{k+1}, x_{k+1}) natürlich beide Punkte benötigen, ist auch dieses Verfahren implizit.

Runge–Kutta–Verfahren vierter Ordnung (explizites Verfahren)

$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

mit

$$k_1 = f\left(t_k, x_k\right), \quad k_2 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}k_1\right), \quad k_3 = f\left(t_k + \frac{h}{2}, x_k + \frac{h}{2}k_2\right), \quad k_4 = f\left(t_k + h, x_k + hk_3\right)$$

Auch, wenn dieses Verfahren auf den ersten Blick sehr kompliziert aussieht, ist es dennoch ein explizites Verfahren. Für den Zeitschritt verwendet man hierbei vier verschiedene, unterschiedlich gewichtete Tangenten k_1 bis k_4.

- k_1 ist die Tangente im Startpunkt (t_k, x_k).
- k_2 wird unter Verwendung von k_1 in einem Punkt in der Mitte zwischen Start– und Endpunkt bestimmt. Um diesen Punkt anzunähern macht man also einen expliziten Eulerschritt mit halber Schrittweite.
- k_3 bestimmt man ebenso wie k_2 durch einen expliziten Eulerschritt mit halber Schrittweite, man verwendet nun jedoch k_2 anstatt k_1 als Tangente.
- k_4 bestimmt man schließlich durch einen expliziten Eulerschitt mit voller Schrittweite mit der Tangente k_3.

Durch Zusammenfügen dieser Tangenten erhält man schließlich den neuen Wert x_{k+1}.

Warum ist das so kompliziert?

Man sollte immer im Hinterkopf behalten, dass numerische Lösungen für ODEs Näherungen an die tatsächliche Lösung darstellen. Stark vereinfacht ausgedrückt kann man mit den vielen verschiedenen Verfahren steuern, unter welchen Gesichtspunkten die Näherung möglichst exakt sein sollte, an welchen Stellen eine genaue Näherung nicht notwendig ist, sowie das Lösungsverfahren an die Struktur der ODE anpassen.

Als erster Anhaltspunkt sollte man sich merken, dass man mit explizitem und implizitem Euler meist nur eine sehr grobe Näherung an die tatsächliche Lösung, mit der Mittelpunktsregel eine etwas bessere Näherung und mit dem Runge–Kutta–Verfahren eine noch bessere Näherung erhält (siehe Zusatzmaterial: "Verfahren unterschiedlicher Ordnung").

Schließlich ist auch die Unterscheidung zwischen impliziten und expliziten Verfahren besonders wichtig, da bestimme Probleme sich besser mit impliziten Verfahren lösen lassen, was den höheren Aufwand der Lösung einer impliziten Gleichung gegenüber einer expliziten Iterationsformel rechtfertigt (siehe Zusatzmaterial: "Steife Probleme").