

## Mehrschrittverfahren

Ein weiterer, häufig benutzter Verfahrenstyp zur numerischen Lösung der Anfangswertaufgabe

$$y' = f(x, y), \quad y(a) = y_0 \quad (1)$$

sind die linearen **Mehrschrittverfahren**, bei denen man zur Berechnung der Näherung  $y_{n+k}$  die bereits ermittelten Näherungen  $y_{n+k-1}, y_{n+k-2}, \dots, y_n$  verwendet. Dazu macht man den Ansatz

$$\sum_{\nu=0}^k a_{\nu} y_{n+\nu} = h \sum_{\nu=0}^k b_{\nu} f_{n+\nu} \quad (2)$$

mit  $f_{n+\nu} := f(x_{n+\nu}, y_{n+\nu})$ , wobei  $a_k \neq 0$  vorausgesetzt wird.

Ist  $b_k \neq 0$ , so kommt  $y_{n+k}$  auf beiden Seiten von (2) vor. Es muss dann in jedem Schritt ein (i.a. nichtlineares) Gleichungssystem gelöst werden, um  $y_{n+k}$  zu bestimmen. In diesem Fall heißt (2) **implizites  $k$ -Schritt Verfahren**.

Ist  $b_k = 0$ , so kann man (2) sofort nach  $y_{n+k}$  auflösen. In diesem Fall heißt (2) **explizites  $k$ -Schritt Verfahren**.

Offenbar ist der erste Wert, den man mit (2) berechnen kann,  $y_k$ . Neben dem gegebenen Wert  $y_0$  müssen also zunächst Näherungen  $y_1, \dots, y_{k-1}$  für  $y(x_1), \dots, y(x_{k-1})$  zur Verfügung gestellt werden. Diese können z.B. mit einem Runge-Kutta Verfahren berechnet werden.

Wegen  $a_k \neq 0$  können wir o.B.d.A.  $a_k = 1$  annehmen. Wir bestimmen die übrigen  $a_\nu, b_\nu$  nun so, dass (2) zu einem brauchbaren Verfahren wird.

Den lokalen Fehler von (2) erhält man wieder, indem man die exakte Lösung  $y(x)$  von (1) in (2) einsetzt:

**Definition:** Der **lokale Fehler** des  $k$ -Schritt Verfahrens (2) ist definiert durch

$$\varepsilon_n := \sum_{\nu=0}^k a_\nu y(x_n + \nu h) - h \sum_{\nu=0}^k b_\nu y'(x_n + \nu h). \quad (3)$$

wobei  $y$  die Lösung der Anfangswertaufgabe (1) bezeichnet.

Das Verfahren (2) heißt **konsistent**, wenn  $\varepsilon_n(h) = o(h)$  gilt, es heißt **von der Ordnung  $p$** , wenn  $\varepsilon_n(h) = O(h^{p+1})$  für alle genügend glatten Funktionen  $y$  gilt.

Ist  $y$   $(m + 1)$ -mal differenzierbar, so liefert der Taylorsche Satz

$$\begin{aligned} \varepsilon_n = & \sum_{\nu=0}^k a_{\nu} \left( \sum_{\mu=0}^m \frac{y^{(\mu)}(x_n)}{\mu!} \nu^{\mu} h^{\mu} + \frac{1}{(m+1)!} y^{(m+1)}(x_n + \theta_{\nu} \nu h) \nu^{m+1} h^{m+1} \right) \\ & - \sum_{\nu=0}^k b_{\nu} \left( \sum_{\mu=0}^{m-1} \frac{y^{(\mu+1)}(x_n)}{\mu!} \nu^{\mu} h^{\mu+1} + \frac{1}{m!} y^{(m+1)}(x_n + \hat{\theta}_{\nu} \nu h) \nu^m h^{m+1} \right). \end{aligned}$$

Damit das Verfahren konsistent ist, müssen sich die Glieder mit dem Faktor  $h^0$  und mit dem Faktor  $h^1$  jeweils gegenseitig aufheben, d.h. es muss gelten

$$\sum_{\nu=0}^k a_{\nu} = 0, \quad \sum_{\nu=0}^k (\nu a_{\nu} - b_{\nu}) = 0. \quad (4)$$

Das Nächstliegende ist nun, die  $a_\nu, b_\nu$  so zu bestimmen, dass in  $\varepsilon_n$  möglichst hohe Potenzen von  $h$  abgeglichen werden.

Dies führt zu einem linearen (wegen  $a_k = 1$  inhomogenen) Gleichungssystem.

Für  $k = 2$  erhält man

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 &= -1 && \text{(siehe (4))} \\ a_1 - b_0 - b_1 - b_2 &= -2 && \text{(siehe (4))} \\ a_1 - 2b_1 - 4b_2 &= -4 \\ a_1 - 3b_1 - 12b_2 &= -8 \\ a_1 - 4b_1 - 32b_2 &= -16 \end{aligned} \tag{5}$$

mit der Lösung  $a_0 = -1, a_1 = 0, b_0 = \frac{1}{3}, b_1 = \frac{4}{3}, b_2 = \frac{1}{3}$ .

Man erhält also das implizite Verfahren der Ordnung 4:

$$y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3} (f_n + 4f_{n+1} + f_{n+2}).$$

Verlangt man, um die Auflösung einer nichtlinearen Gleichung (bzw. eines nichtlinearen Gleichungssystems) in  $y_{n+2}$  in jedem Schritt zu vermeiden,  $b_2 = 0$ , d.h. ein explizites Verfahren, so kann man nur die ersten vier Gleichungen von (5) erfüllen.

Lösung hiervon ist  $a_0 = -5$ ,  $a_1 = 4$ ,  $b_0 = 2$ ,  $b_1 = 4$ , und man erhält das explizite Verfahren der Ordnung 3:

$$y_{n+2} = -4y_{n+1} + 5y_n + 2h(f_n + 2f_{n+1}). \quad (6)$$

Wendet man (6) auf die Anfangswertaufgabe  $y' = 0$ ,  $y(0) = 1$  mit dem (z.B. durch Rundungsfehler verfälschten) Anfangsfeld  $y_0 = 1$ ,  $y_1 = 1 + 10^{-15}$  an, so erhält man Tabelle 1.

Tabelle 1: AWA mit Anfangsfehler  $10^{-15}$  ( $y \equiv 1$ )

$n$	$y_n$	$n$	$y_n$
0	1.0000000000000000000	16	0.99997176556842504
1	1.000000000000000111	17	1.00014117215787590
2	0.999999999999999556	18	0.99929413921062160
3	1.0000000000000002331	19	1.00352930394689310
4	0.999999999999988454	20	0.98235348026553560
5	1.000000000000057843	21	1.08823259867232314
6	0.999999999999710898	22	0.55883700663838543
7	1.00000000001445621	⋮	⋮
8	0.99999999992772004	34	$-1.077058079E + 0008$
9	1.00000000036140091	35	$5.385290456E + 0008$
10	0.99999999819299656		

Kleinste Anfangsfehler schaukeln sich also auf und machen das Verfahren trotz der Ordnung 3 völlig unbrauchbar.

Die Fehlerordnung allein ist also kein geeignetes Mittel zur Bewertung eines Mehrschrittverfahrens.

Für den Fall  $f(x, y) \equiv 0$  lautet (6)

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = 0. \quad (7)$$

Dies ist eine lineare homogene Differenzengleichung mit konstanten Koeffizienten. Der Ansatz  $y_n = \lambda^n$  für eine Lösung von (7) führt auf die Bedingung

$$\lambda^{n+2} + 4\lambda^{n+1} - 5\lambda^n = 0$$

d.h.  $\lambda^2 + 4\lambda - 5 = 0$  mit den Lösungen  $\lambda_1 = 1$ ,  $\lambda_2 = -5$ .



Da (7) linear und homogen ist, ist auch

$$y_n = A\lambda_1^n + B\lambda_2^n = A + B(-5)^n, \quad A, B \in \mathbb{R},$$

eine Lösung (sogar die allgemeine Lösung). Die Konstanten  $A$  und  $B$  kann man aus dem Anfangsfeld  $y_0$  und  $y_1$  bestimmen. Man erhält

$$y_n = \frac{1}{6}(5y_0 + y_1) + (-5)^n \frac{1}{6}(y_0 - y_1).$$

Der zweite Term hiervon führt dazu, dass sich die Fehler (bei alternierendem Vorzeichen) aufschaukeln.

Im allgemeinen Fall (2) hätte man statt (7) für  $f(x, y) \equiv 0$  die Differenzengleichung  $\sum_{\nu=0}^k a_{\nu} y_{n+\nu} = 0$  mit der charakteristischen Gleichung

$$\rho(\lambda) := \sum_{\nu=0}^k a_{\nu} \lambda^{\nu} = 0.$$

Sind  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  die verschiedenen Nullstellen von  $\rho$  mit den Vielfachheiten  $m_1, \dots, m_r$ , so sind alle Lösungen von

$$\sum_{\nu=0}^k a_{\nu} y_{n+\nu} = 0$$

Linearkombinationen von  $\lambda_j^n, n\lambda_j^n, \dots, n^{m_j-1}\lambda_j^n$ ,  $j = 1, \dots, r$  (vgl. die allgemeine Lösung der homogenen Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten).

Fehler im Anfangsfeld  $y_0, \dots, y_{k-1}$  werden daher nicht verstärkt, wenn  $|\lambda_j| \leq 1$  für alle Nullstellen  $\lambda_j$  von  $\rho$  gilt und die Nullstellen mit  $|\lambda_j| = 1$  einfach sind.

### Definition

Das Mehrschrittverfahren (2) heißt **stabil**, wenn für alle Nullstellen  $\lambda_j$  des charakteristischen Polynoms  $\rho(\lambda)$  gilt  $|\lambda_j| \leq 1$  und wenn die Nullstellen mit  $|\lambda_j| = 1$  einfach sind.

Wegen der Konsistenzbedingung ist stets  $\lambda = 1$  eine Nullstelle von  $\rho$ . Gilt  $|\lambda_j| < 1$  für alle anderen Nullstellen  $\lambda_j$  von  $\rho$ , so heißt das Verfahren **stark stabil**.

Die obigen Überlegungen zeigen, dass die Stabilität neben der Konsistenz die Mindestanforderung an ein  $k$ -Schritt Verfahren ist.

Umgekehrt kann man zeigen, dass konsistente und stabile Verfahren konvergieren (vgl. *Hairer, Nørsett, Wanner*, p. 395).

Dabei müssen wir die Definition der Konvergenz gegenüber den Einschrittverfahren nun ein wenig modifizieren, da das Verfahren (2) nicht nur von dem in (1) gegebenen Anfangswert  $y_0$  abhängt, sondern auch von dem gewählten Anfangsfeld  $y_1, \dots, y_{k-1}$ .

## Definition

Das lineare  $k$ -Schritt Verfahren (2) heißt **konvergent**, wenn für jedes Anfangswertproblem (1)

$$y(x) - y_n \rightarrow 0 \quad \text{für } h \rightarrow 0 \text{ und } n \rightarrow \infty \text{ mit } x_0 + nh \rightarrow x$$

gilt für alle Anfangsfelder  $y_1(h), \dots, y_{k-1}(h)$  mit

$$y(x_0 + jh) - y_j(h) \rightarrow 0 \quad \text{für } h \rightarrow 0, \quad j = 1, \dots, k - 1.$$

Das Verfahren heißt konvergent **von der Ordnung  $p$** , wenn für jede Anfangswertaufgabe (1) mit genügend glatter rechter Seite  $f$  es ein  $h_0 > 0$  gibt mit

$$\|y(x_0 + jh) - y_j(h)\| \leq Ch^p \quad \text{für } h \leq h_0$$

für alle Anfangsfelder mit

$$\|y(x_0 + jh) - y_j(h)\| \leq C_0 h^p \quad \text{für } h \leq h_0 \text{ und } j = 1, \dots, k - 1.$$

Fordert man in (5) neben  $b_2 = 0$  (Explizitheit), dass  $\rho(\lambda)$  die Nullstellen  $\lambda_1 = 1$  (Konsistenz) und  $\lambda_2 = 0$  (um die Stabilität zu erzwingen) besitzt, so kann man nur die ersten drei Gleichungen von (5) erfüllen und erhält das explizite Verfahren der Ordnung 2:

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2} (-f_n + 3f_{n+1}).$$

## Beispiel

Wir betrachten erneut

$$y' = y^2, \quad y(0.8) = \frac{5}{6}, \quad x \in [0.8, 1.8].$$

Die folgende Tabelle enthält die Fehler des verbesserten Polygonzugverfahrens, des Verfahrens von Heun und des Zweischrittverfahrens.

Tabelle 2: Verfahren der Ordnung 2

$h$	verb. Poly.	Heun	2-Schritt
1/5	$1.01e + 0$	$8.51e - 1$	$1.66e + 0$
1/10	$4.34e - 1$	$3.38e - 1$	$9.26e - 1$
1/20	$1.47e - 1$	$1.07e - 1$	$3.89e - 1$
1/40	$4.27e - 2$	$2.98e - 2$	$1.28e - 1$
1/80	$1.14e - 2$	$7.82e - 3$	$3.66e - 2$
1/160	$2.96e - 3$	$2.00e - 3$	$9.68e - 3$
1/320	$7.51e - 4$	$5.04e - 4$	$2.48e - 3$
1/640	$1.89e - 4$	$1.27e - 4$	$6.28e - 4$
1/1280	$4.75e - 5$	$3.17e - 5$	$1.58e - 4$

Wir geben nun einen Weg an, wie man stark stabile Mehrschrittverfahren konstruieren kann. In Übereinstimmung mit der Literatur numerieren wir dabei nun die an der Mehrschrittformel beteiligten Näherungswerte mit  $y_{n-k+1}, \dots, y_n, y_{n+1}$ , wobei  $y_{n-k+1}, \dots, y_n$  als aus den vorhergehenden Schritten bekannt angenommen werden und  $y_{n+1}$  in dem aktuellen Schritt zu bestimmen ist.



Für die Lösung  $y$  der Anfangswertaufgabe (1) gilt

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(t) dt = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t)) dt. \quad (8)$$

Wir ersetzen daher bei gegebenen Näherungen  $y_j \approx y(x_j)$ ,  $j = n, n-1, \dots, n-k+1$ , und damit bekannten Näherungen

$$f_j := f(x_j, y_j) \approx f(x_j, y(x_j)) = y'(x_j), \quad j = n, n-1, \dots, n-k+1,$$

die Funktion  $y'$  im Integranden durch ihr Interpolationspolynom

$$p \in \Pi_{k-1} : p(x_j) = f_j, \quad j = n, n-1, \dots, n-k+1,$$

und berechnen die neue Näherung gemäß

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p(t) dt.$$

An der Lagrangeschen Integrationsformel

$$p(x) = \sum_{j=0}^{k-1} f_{n-j} \cdot \ell_j(x), \quad \ell_j(x) := \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k-1} (x - x_{n-i}) / \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k-1} (x_{n-j} - x_{n-i}),$$

erkennt man, dass

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=0}^{k-1} f_{n-j} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \ell_j(t) dt$$

tatsächlich die Gestalt eines  $k$ -Schritt Verfahrens hat.

Mit der Variablentransformation  $t := x_n + h \cdot s$  erhält man

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} \ell_j(t) dt = h \cdot \int_0^1 \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k-1} (i + s) / \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{k-1} (i - j) ds =: h\alpha_j.$$

Die Integrale über das Interpolationspolynom lassen sich also schreiben als

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} p(t) dt = h \cdot \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j f_{n-j},$$

wobei die Koeffizienten  $\alpha_j$  unabhängig von den  $y_j$  und von den speziellen Knoten  $x_j$  und der Schrittweite  $h$  sind, und daher in Dateien bereitgestellt werden können.

Die Mehrstellenformel erhält damit die Gestalt

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j f_{n-j}.$$

Das charakteristische Polynom ist (man beachte die geänderte Nummerierung der Koeffizienten in der  $k$ -Schritt Formel)

$$\rho(\lambda) = \lambda^k - \lambda^{k-1}$$

mit der einfachen Nullstelle  $\lambda = 1$  und der  $(k - 1)$ -fachen Nullstelle  $0$ . Die Mehrstellenformel ist also stark stabil.

So konstruierte Mehrstellenformeln heißen **Adams–Bashforth Verfahren**.

Sie sind explizit und aus der Fehlerdarstellung des Interpolationspolynoms erhält man, dass ihre Ordnung  $k$  ist.

Die ersten Adams–Bashforth Formeln sind:

$$k = 1 : y_{n+1} = y_n + hf_n$$

$$k = 2 : y_{n+1} = y_n + 0.5h(3f_n - f_{n-1})$$

$$k = 3 : y_{n+1} = y_n + h(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})/12$$

$$k = 4 : y_{n+1} = y_n + h(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})/24$$

$$k = 5 : y_{n+1} = y_n + h(1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4})/720$$

Für  $k = 1$  ergibt sich also das Eulersche Polygonzugverfahren.

## Beispiel

Wir betrachten erneut

$$y' = y^2, \quad y(0.8) = \frac{5}{6}, \quad x \in [0.8, 1.8].$$

Dann erhält man mit dem Adams-Bashforth Verfahren die Fehler der folgenden Tabelle, wobei die Anfangsfelder alle mit dem klassischen Runge-Kutta Verfahren der Ordnung 4 bestimmt wurden:

Tabelle 3: Fehler der Adams-Bashforth Verfahren

$h$	$k = 2$	$k = 3$	$k = 4$	$k = 5$
1/5	$1.63e + 0$	$1.15e + 0$	$8.31e - 1$	$5.16e - 1$
1/10	$9.20e - 1$	$5.14e - 1$	$3.22e - 1$	$2.20e - 1$
1/20	$3.88e - 1$	$1.42e - 1$	$6.32e - 2$	$3.25e - 2$
1/40	$1.28e - 1$	$2.74e - 2$	$7.75e - 3$	$2.67e - 3$
1/80	$3.65e - 2$	$4.27e - 3$	$7.02e - 4$	$1.47e - 4$
1/160	$9.68e - 3$	$5.96e - 4$	$5.36e - 5$	$6.28e - 6$
1/320	$2.48e - 3$	$7.88e - 5$	$3.71e - 6$	$2.32e - 7$
1/640	$6.28e - 4$	$1.01e - 5$	$2.45e - 7$	$7.90e - 9$
1/1280	$1.58e - 4$	$1.29e - 6$	$1.57e - 8$	$2.60e - 10$

Nachteil der Adams–Bashforth Formeln ist, dass bei ihrer Konstruktion das Interpolationspolynom  $p$  im Intervall  $[x_n, x_{n+1}]$  verwendet wird, während die Interpolationsknoten außerhalb dieses Intervalls liegen.

Wir wissen bereits, dass der Fehler eines Interpolationspolynoms außerhalb des kleinsten Intervalls  $[x_{n-k+1}, x_n]$ , das alle Knoten enthält, sehr schnell anwächst.

Es ist daher naheliegend, die Funktion  $y'$  in (8) durch das Interpolationspolynom

$$p \in \Pi_k : p(x_j) = f(x_j, y_j), j = n + 1, n, n - 1, \dots, n - k + 1$$

zu ersetzen.



Wie eben kann man das Verfahren schreiben als

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^k \beta_j f_{n+1-j}$$

mit

$$\beta_j := \frac{1}{h} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^k (t - x_{n+1-i}) / \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^k (x_{n+1-j} - x_{n+1-i}) dt.$$

Diese Verfahren heißen **Adams–Moulton Verfahren**.

Sie sind wie die Adams–Bashforth Verfahren stark stabil und haben die Ordnung  $k + 1$  (Beachten Sie, dass der Grad des Interpolationspolynoms hier  $k$  ist, beim Adams–Bashforth Verfahren aber nur  $k - 1$ ).

Die ersten Adams-Moulton Formeln sind:

$$k = 0 : y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$$

$$k = 1 : y_{n+1} = y_n + 0.5h(f_{n+1} + f_n)$$

$$k = 2 : y_{n+1} = y_n + h(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})/12$$

$$k = 3 : y_{n+1} = y_n + h(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})/24$$

$$k = 4 : y_{n+1} = y_n + h(251f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3})/720.$$

und für  $k = 5$

$$y_{n+1} = y_n + h(475f_{n+1} + 1427f_n - 798f_{n-1} + 482f_{n-2} - 173f_{n-3} + 27f_{n-4})/1440.$$

Das Adams-Moulton Verfahren mit  $k = 1$  heißt das **implizite Euler Verfahren**, dasjenige für  $k = 2$  die **Trapezregel**.

Die Adams–Moulton Verfahren haben wesentlich bessere Konvergenzeigenschaften als die Adams–Bashforth Verfahren gleicher Ordnung.

Nachteilig ist, dass sie implizit sind, man also in jedem Schritt ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen hat.

Man kombiniert daher beide Verfahren zu einem **Prädiktor-Korrektor Verfahren**:

Sind bereits Näherungen  $y_j = y(x_j)$ ,  $j = 0, \dots, n$ , bekannt ( $n \geq k$ ), so bestimme man mit dem Adams–Bashforth Verfahren der Ordnung  $k$  eine vorläufige Näherung

$$\tilde{y}_0 := y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j f_{n-j}$$

für  $y(x_{n+1})$  und verbessere diese iterativ unter Benutzung der Adams–Moulton Formel der Ordnung  $k + 1$ :

$$\tilde{y}_{i+1} = y_n + h \left( \beta_0 f(x_{n+1}, \tilde{y}_i) + \sum_{j=1}^k \beta_j f_{n+1-j} \right), \quad i = 0, 1, \dots$$

Erfüllt  $f$  eine Lipschitz Bedingung und ist  $h$  genügend klein gewählt, so ist diese Iteration konvergent. In der Regel genügen ein oder zwei Verbesserungsschritte (sonst ist die Schrittweite  $h$  zu groß).

Das so gefundene  $\tilde{y}_1$  oder  $\tilde{y}_2$  wird als  $y_{n+1}$  gewählt und es wird der nächste Prädiktor-Korrektor-Schritt ausgeführt.

Eine typische Implementierung eines Prädiktor-Korrektor Verfahrens hat also die folgende Gestalt: **P** (Auswertung der Prädiktorformel) **E** (Evaluation von  $f$ ) **C** (Auswertung der Korrektorformel) **E** (Evaluation von  $f$ ) oder **PECECE**.

Mit den Adams-Bashforth und Adams-Moulton Formeln für  $k = 1$  (dem expliziten Euler Verfahren und der Trapezregel) erhält man also das PECECE Verfahren

$$P \quad y_{n+1}^{[1]} = y_n + hf_n$$

$$E \quad f_{n+1}^{[1]} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[1]})$$

$$C \quad y_{n+1}^{[2]} = y_n + 0.5h(f_{n+1}^{[1]} + f_n)$$

$$E \quad f_{n+1}^{[2]} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[2]})$$

$$C \quad y_{n+1} = y_n + 0.5h(f_{n+1}^{[2]} + f_n)$$

$$E \quad f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[2]}).$$

Vorteil der Mehrschrittverfahren ist, dass auch bei größeren Ordnungen nur in jedem Schritt eine Funktionsauswertung von  $f$  im expliziten Fall bzw. 2 oder 3 Auswertungen beim Prädiktor-Korrektor Verfahren benötigt werden, während beim Einschrittverfahren die Zahl der Funktionsauswertungen bei Steigerung der Ordnung sehr rasch wächst.

Mehrschrittverfahren werden daher vor allem verwendet, wenn die Auswertung von  $f$  sehr teuer ist.

**Beispiel:** Wir betrachten erneut die Anfangswertaufgabe

$$y' = y^2, \quad y(0.8) = 5/6, \quad 0.8 \leq x \leq 1.8.$$

Mit dem klassischen Runge–Kutta Verfahren mit äquidistanter Schrittweite  $h = 1/64$  ist der Fehler im Endpunkt 1.8 des Intervalls  $2.55 \cdot 10^{-6}$ . Hierzu muss die rechte Seite an  $4 \cdot 64 = 256$  Stellen ausgewertet werden.

Mit dem PECE Verfahren mit den Adams–Bashforth und Adams–Moulton Formeln für  $k = 5$  erhält man einen vergleichbaren Fehler  $2.53 \cdot 10^{-6}$  mit der Schrittweite  $h = 1/80$ . Hierzu benötigt man zur Bestimmung des Anfangsfeldes  $y_1, y_2, y_3, y_4$  mit dem klassischen Runge–Kutta Verfahren 16 Funktionsauswertungen und für die weiteren 76 Schritte je zwei Auswertungen, insgesamt also 168. Das Prädiktor–Korrektor Verfahren erfordert also wesentlich geringeren Aufwand.

□



Nachteil der Mehrschrittverfahren ist, dass die Schrittweitensteuerung komplizierter als beim Einschrittverfahren ist. Man muss

- entweder nicht äquidistante Knoten  $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{n-k+1}$  verwenden und kann dann die  $\alpha_j$  bzw.  $\beta_j$  nicht einer Tabelle entnehmen, sondern muss sie nach jeder Veränderung der Schrittweite während der nicht äquidistanten Phase neu berechnen
- oder bei geänderter Schrittweite  $\tilde{h}$  Näherung für  $y(x_n - j \cdot \tilde{h})$  aus einem Interpolationspolynom berechnen.

Der zweite Zugang wird in Hairer, Nørsett, Wanner zusammen mit einer kombinierten Schrittweiten- und Ordnungskontrolle diskutiert.

In MATLAB 6.1 ist als Funktion ODE113 ein PECE Verfahren von Adams-Bashforth-Moulton zur Lösung von nicht-steifen Anfangswertaufgaben implementiert.

Die Adams Formeln wurden durch numerische Berechnung des Integrals in (8) konstruiert. Es gibt weitere Mehrschrittverfahren, die auf Integralgleichungen beruhen, die der Anfangswertaufgabe (1) äquivalent sind.

Betrachtet man z.B. die Integralgleichung

$$y(x_{n+1}) - y(x_{n-1}) = \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(t, y(t)) dt, \quad (9)$$

und ersetzt man die unbekannte Funktion  $f(t, y(t))$  durch das Interpolationspolynom zu den Daten  $(x_{n-k+1}, f_{n-k+1}), \dots, (x_{n-1}, f_{n-1}), (x_n, f_n)$ , so erhält man die expliziten **Nyström Formeln**.

Für  $k = 1$  (und  $k = 2$ ) ist dies die **Mittelpunktregel**

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf_n$$

und für  $k = 3$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h(7f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2})/3.$$

Ersetzt man in (9) den Integranden  $f(t, y(t))$  durch das Interpolationspolynom zu den Daten  $(x_{n-k+1}, f_{n-k+1}), \dots, (x_n, f_n), (x_{n+1}, f_{n+1})$ , so erhält man die impliziten **Milne–Simpson Formeln**.

Für  $k = 0$  ist dies das **implizite Euler Verfahren**

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf_{n+1}$$

zur Schrittweite  $2h$ , für  $k = 1$  erhält man erneut die Mittelpunkregel, für  $k = 2$  die **Milne Formel**

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1})/3$$

und für  $k = 4$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h(29f_{n+1} + 124f_n + 24f_{n-1} + 4f_{n-2} - f_{n-3})/90.$$

Es ist klar, dass die Nyström Formeln und die Milne–Simpson Regeln stabil, aber nicht stark stabil sind, denn das zugehörige Polynom

$$\rho(\lambda) = (\lambda^2 - 1)\lambda^{k-2}$$

besitzt die einfachen Nullstellen 1 und  $-1$  und die  $(k-2)$ -fache Nullstelle 0.

Die bisherigen Mehrschrittverfahren basierten auf der numerischen Lösung der Integralgleichung (8) bzw. (9). Die folgende Klasse von Verfahren wird mit Hilfe der numerischen Differentiation konstruiert.

Es seien bereits Näherungen  $y_{n-k+1}, \dots, y_n$  der Lösung der Anfangswertaufgabe (1) an den Knoten  $x_{n-k+1}, \dots, x_n$  bekannt. Um  $y_{n+1} \approx y(x_{n+1})$  zu bestimmen betrachten wir das Interpolationspolynom  $q$  zu den Daten  $(x_{n-k+1}, y_{n-k+1}), \dots, (x_n, y_n), (x_{n+1}, y_{n+1})$ .

Dann kann man  $q$  nach der Newtonschen Darstellung des Interpolationspolynoms mit den **rückwärtsgenommenen Differenzen**

$$\nabla^0 y_n := y_n, \quad \nabla^{j+1} y_n := \nabla^j y_n - \nabla^j y_{n-1}$$

schreiben als

$$q(s) = y(x_n + sh) = \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{-s+1}{j} \nabla^j y_{n+1}. \quad (10)$$

Der Unbekannte Wert  $y_{n+1}$  wird nun so bestimmt, dass das Polynom  $q$  die Differentialgleichung an einem Gitterpunkt erfüllt:

$$q'(x_{n+l}) = f(x_{n+l}, y_{n+l}), \quad \ell \in \{0, 1, \dots\}. \quad (11)$$

Für  $\ell = 0$  erhält man explizite Formeln, und zwar für  $k = 1$  das explizite Euler Verfahren und für  $k = 2$  die Mittelpunkregel. Die Formeln für  $k \geq 3$  sind instabil und daher wertlos.

Für  $\ell = 1$  erhält man implizite Formeln, die **BDF Methoden** (backward differentiation formulas)

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j \nabla^j y_{n+1} = h f_{n+1}$$

mit den Koeffizienten

$$\alpha_j = (-1)^j \frac{d}{ds} \binom{-s+1}{j} \Big|_{s=1}.$$

Mit

$$(-1)^j \binom{-s+1}{j} = \frac{1}{j!} (s-1)s(s+1)\dots(s+j-2)$$

folgt

$$\alpha_0 = 0, \quad \alpha_j = \frac{1}{j} \text{ für } j \geq 1,$$

und daher

$$\sum_{j=1}^k \frac{1}{j} \nabla^j y_{n+1} = h f_{n+1}. \quad (12)$$



Für  $k \leq 6$  rechnet man leicht aus, dass gilt

$$k = 1 \quad : \quad y_{n+1} - y_n = hf_{n+1}$$

$$k = 2 \quad : \quad 3y_{n+1} - 4y_n + y_{n-1} = 2hf_{n+1}$$

$$k = 3 \quad : \quad 11y_{n+1} - 18y_n + 9y_{n-1} - 2y_{n-2} = 6hf_{n+1}$$

$$k = 4 \quad : \quad 25y_{n+1} - 48y_n + 36y_{n-1} - 16y_{n-2} + 3y_{n-3} = 12hf_{n+1}$$

$$k = 5 \quad : \quad 137y_{n+1} - 300y_n + 300y_{n-1} - 200y_{n-2} + 75y_{n-3} - 12y_{n-4} = 60hf_{n+1}$$

$$k = 6 \quad : \quad 147y_{n+1} - 360y_n + 450y_{n-1} - 400y_{n-2} + 225y_{n-3} \\ - 72y_{n-4} + 10y_{n-5} = 60hf_{n+1}.$$

Durch Diskussion des Polynoms

$$\rho(\lambda) = \sum_{j=1}^k \frac{1}{j} \lambda^{k-j} (\lambda - 1)^j$$

sieht man für  $k \leq 6$  leicht, dass diese BDF-Formeln stabil sind. Für  $k \geq 7$  sind sie instabil (vgl. *Hairer, Nørsett, Wanner*, p. 380).