Prof. Dr. Peter Kunkel
Fakultät für Mathematik und Informatik
Universität Leipzig

WS 2021/22

Arbeitsblatt

Numerisches Praktikum

Thema

Automatisches Umschalten zwischen explizitem und implizitem Euler-Verfahren bei stückweise steifen Differentialgleichungen.

Aufgabenstellung

Zu lösen sei ein Anfangswertproblem

$$\dot{x} = f(x), \quad x(t_0) = 0,$$

wobei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $t_0 \in \mathbb{R}$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Sowohl das explizite Euler-Verfahren

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_i)$$

als auch das implizite Euler-Verfahren

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_{i+1})$$

legen (für hinreichend kleines $h > 0$) ausgehend von einer Approximation x_i an die Lösung $x(t_i)$ eine Approximation x_{i+1} an die Lösung $x(t_i + h)$ fest. Im Fall des impliziten Euler-Verfahrens ist x_{i+1} implizit als Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems festgelegt, die man mittels (vereinfachtem) Newton-Verfahren berechnet.
Aus Effizienzgründen wird die aktuelle Schrittweite an den Lösungsverlauf angepaßt. Dabei verwendet man zur Schätzung des Fehlers eine zweite, "bessere" Approximation $\hat{x}_{i+1}$. Diese erhält man, indem man zusätzlich zu einem Schritt mit h zwei Schritte mit $h/2$ durchführt, um eine Approximation $\tilde{x}_{i+1}$ zu erhalten und dann

$$\hat{x}_{i+1} = \tilde{x}_{i+1} + (\tilde{x}_{i+1} - x_{i+1})$$

setzt. Den aktuellen Diskretisierungsfehler schätzt man dann durch

$$\texttt{ERR} = \|\hat{x}_{i+1} - x_{i+1}\|.$$

Gibt man einen maximal zulässigen Fehler $\texttt{TOL} > 0$ vor, so gehört dazu eine "optimale" Schrittweite

$$\overline{h} = \texttt{RED} \cdot h \cdot \sqrt{\frac{\texttt{TOL}}{\texttt{ERR} + \texttt{SAV}}},$$

etwa mit $\texttt{RED} = 0.9$ und $\texttt{SAV} = \texttt{eps}$. Zusätzlich wird $\overline{h}$ eventuell noch so abgeändert, daß $\overline{h}$ der Bedingung

$$\texttt{RMIN} \le \frac{\overline{h}}{h} \le \texttt{RMAX},$$

etwa mit $\texttt{RMIN} = 0.2$ und $\texttt{RMAX} = 2$, genügt. Gilt nun $\texttt{ERR} \le \texttt{TOL}$, so wird der aktuelle Schritt akzeptiert und der nächste Schritt mit $\overline{h}$ versucht. Ansonsten wird der Schritt verworfen und mit $\overline{h}$ wiederholt.

Offensichtlich erfordert das implizite Euler-Verfahren pro Schritt einen wesentlich größeren numerischen Aufwand als das explizite Euler-Verfahren. Dennoch gibt es Situationen, in denen es effizienter sein kann, mit dem impliziten Euler-Verfahren zu arbeiten, weil man damit wesentlich größere Schrittweiten wählen kann. Heuristisch ist das der Fall, wenn $h\|f_x(x_i)\|$ eine bestimmte Schranke γ übersteigt.

Man implementiere das explizite und implizite Euler-Verfahren mit Schrittweitensteuerung zusammen mit einer automatischen Auswahl der Verfahren etwa unter Verwendung von $\gamma = 1.5$ und vergleiche die drei Möglichkeiten explizit/implizit/automatisch an Hand des Problems

$$\begin{aligned}
\dot{x}_1 &= k_1 a x_2 - k_2 x_1 x_2 + k_3 b x_1 - k_4 x_1^2,\\
\dot{x}_2 &= -k_1 a x_2 - k_2 x_1 x_2 + s k_5 x_3,\\
\dot{x}_3 &= 2 k_3 b x_1 - k_5 x_3,
\end{aligned}$$

wobei

$$a = 1.0,\ b = 1.0,\ s = 0.5$$

und

$$k_1 = 1.28e0,\ k_2 = 2.4e5,\ k_3 = 33.6e0,\ k_4 = 3.0e3,\ k_5 = 1.0e0.$$

Als Startwert wähle man

$$x_1(0) = 0.01,\ x_2(0) = 0.02,\ x_3(0) = 0.2\,.$$

Außerdem integriere man mindestens bis $T = 120$.

Quellen

$\emptyset$