Numerische Lösung von Differentialgleichungen

Das Runge-Kutta Verfahren

Bei weitem nicht jede Differentialgleichung lässt sich analytisch lösen. Und selbst wenn, ist eine solche Lösung nur mit viel Erfahrung und Aufwand zu erreichen. Mit numerischen Methoden kann man grundsätzlich jede Differentialgleichung lösen.

Differentialgleichung treten immer dann auf, wenn es um zeitabhängige Vorgänge, z.B. Wärme- und Stofftransportvorgänge wie Temperaturverteilung in Körpern, Diffusion und chemische Reaktionen geht.

Die grundsätzliche Form einer Differentialgleichung lautet:

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x,y)$$

Bekanntlich ist das Lösen von Differentialgleichung nur in einfachen Fällen analytisch lösbar, z.B. durch Trennung der Variablen und Integration beider Seiten. In Fällen, wo eine solche Lösung nicht möglich bzw. nicht bekannt ist, steht als Alternative die numerische Lösung der Differentialgleichung zur Verfügung. Diese funktioniert nach folgendem Prinzip.

Die Differentialgleichung

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x,y)$$

wird als Differenzengleichung umgeschrieben und schrittweise gelöst.

$$y' \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x,y)$$

$$\Delta y = f(x,y)\Delta x$$

$$\Delta y = y_{i+1} - y_i$$

Aus den GrenzenxA = x Anfang und xE = x Ende setzt man xi=xA. yi muß an der Stelle xi bekannt sein. Mit einem möglichst kleinen Δx berechnet man dann aus der Funktion f(xi,yi) das neue yi+1.

Der Vorgang wird solange wiederholt, bis xi=xE ist. In der Literatur (z.B. www.mathematik.ch, Differentialgleichungen.dpf) wird das Verfahren unter dem Namen Euler detailliert beschrieben. Der Näherungsfehler ist dabei proportional der Schrittweite h=Δx., d.h. man muß eine sehr kleine Schrittweote wählen, was die Rechenzeit verlängert.

Die Runge-Kutta-Methode hat einen Näherungsfehler von h^4 und ist damit erheblich genauer als die Euler Methode und für die praktische Anwendung eines der am häufigsten verwendeten Methoden. Wir verzichten hier auf eine Ableitung sowie weitere mathematische Betrachtungen und wenden uns der Praxis zu. Die Runge-Kutta-Methode soll nun an mehreren Beispielen vorgestellt werden. Diese haben wir folgenden Quellen entnommen: Ebert-Ederer [2], eine Fundgrube für numerische Lösungen komplexer Differentialgleichungen, in Basic programmiert und z.T. in Excel-VBA übertragen. Z.B.: Partielle Differentialgleichung, instationäre Wärmeleitung, Chromatographiesäule, Harmonischer Oszillator, Schrödinger-Gleichung, Potenzialgleichung, Bewegung von Molekülen.

Müller-Erlwein [3], eine Fundgrube einfacher und komplexer Reaktionen und deren Berechnung mit numerischen Methoden in Basic. Eine Auswahl davon wurde in Excel-VBA Übertragen, z.B.: Parabolische, hyperbolische, partielle Differentialgleichungen, Rührkesselkaskade, Strömungsrohr mit Axial- und Radialdispersion, Katalysatorpellets, Film- und Porendiffusionsmodell.

Lindner [3]. Papula [6].

Algorithmus der Runge-Kutta-Methode

Damit wir eine Rechenvorschrift erhalten, dir wir in Excel-VBA oder CHEMCAD-VBA betrachten wir den Algorithmus der Runge-Kutta-Methode näher. Dann gilt

$$h = \Delta x$$

$$x_{i+1} = x_i + h$$

Weiter gilt

$$y_{i+1} = y_i + mh$$

Mit m definieren wir die Steigung.

In der Euler –Methode galt

m=y‘

Nach Runge-Kutta gilt

$$m = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}$$

Darin ist

$$K_1 = f(x_i, y_i)h$$

Dies ist exakt die Anfangssteigung nach der Euler-Methode an der Stelle x_0 ist.

$$K_2 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{K_1}{2})$$

$$K_3 = hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{K_2}{2})$$

$$K_4 = hf(x_i + h, y_i + K_3)$$

Alle K sind Näherungen für y-Schätzungen.

In Ebert-Ederer (S. 249) wird mit der Differentialgleichung

$$y' = xy$$

und der Runge-Kutta-Methode nach 32 Schritten eine 9-stellige Genauigkeit erreicht, während die prädiktive Euler-Cauchy-Methode nach 512 eine 8-stellige und die Euler-Cauchy-Methode nach 2048 Schritten nur eine 4-stellige Genauigkeit erreichen.

Die Anwendung der Runge-Kutta-Methode setzt eine allgemeine Rechenregel voraus:

$$x_{i+1} = x_i + h$$

$$y_{i+1} = y_i + mh$$

Darin ist h die Schrittweite h=Δx. Diese müssen wir zunächst wählen. Gehen wir davon aus, dass diese konstant sei. Es ist günstig, die Differentialgleichung als Unterprogramm DGL1 zu verwenden. Dann können nacheinander K1 bis K4 und daraus m und daraus yi+1 berechnet werden.

Bei K1 setzen wir in DGL1 für x= xi und für y= yi

Bei K2 setzen wir in DGL1 für x= xi + h/2 und für y= yi + K1/2

Bei K3 setzen wir in DGL1 für x= xi + h/2 und für y= yi + K2/2

Bei K4 setzen wir in DGL1 für x=xi + h und für y= yi +K3

Dann berechnen wir

$$m = \frac{K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4}{6}$$

und

$$y_{i+1} = y_i + mh$$

sowie

$$x_{i+1} = x_i + h$$

Definieren wir nun einen Anfangswert für x zu x_A und einen Endwert x zu x_E sowie den Anfangswert y_A und die Schrittzahl SZ, dann ergibt sich

$$h = \frac{x_E - x_A}{SZ}$$

Dazu müssen wir eine Schleife definieren, in der wir x_i von x_A bis X_E in Schritten h verändern. Das läßt sich sowohl in Excel, als auch mit einfachem Basic , aber sehr komfortabel in VBA programmieren.

Differentialgleichung höherer Ordnung

Bei Differenzialgleichungen höherer Ordnung bedient man sich der Substitution, um den Ordnungsgrad zu reduzieren. Dadurch entstehen n Gleichungen erster Ordnung. Das lässt sich leicht an einem Beispiel erläutern. Die allgemeine Form einer Differentialgleichung 2. Ordnung lautet:

$$y'' = f(x, y, y')$$

Das Prinzip ist grundsätzlich einfach. Man substituiert y und y‘‘, y‘ wird daraus gebildet und in die Gleichung eingesetzt

Beispiel:

$$y'' = y' + y$$

Substitutionen

z1 =y

z2=y‘

Dann gelten 2 Differentialgleichungen 1. Grades

z2‘=z2+z1

z1‘=z2

Beispiel Schwingungsleichung:

$$y'' = -ay$$

Substitutionen

z1 =y

z2=y‘

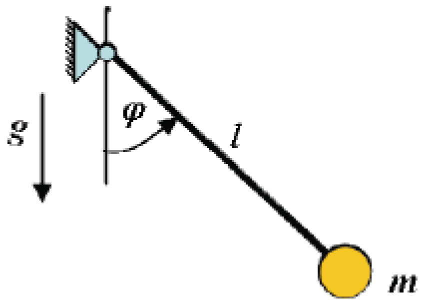
Differentialgleichungen 1. Grades

z2‘=-az1

Beispiel Pendelgleichung:

$$ml^2\varphi'' = -mgl\sin(\varphi)$$

Darin ist m die Pendelmasse, l die Pendellänge, φ der Pendelwinkel, g=9,81 m/s² die Erdbeschleunigung. Der Pendelstab wird ohne Masse angenommen.



Aus dem Kräftegleichgewicht erhält man die Differentialgleichung 2. Ordnung (Die vollständige Ableitung findet man vielfach in der Literatur und bei Wikipedia.)

$$\varphi'' = -\frac{g}{l}\sin(\varphi)$$

Mit den Substitutionen $z_1=\varphi$, $z_2=\varphi'$, bzw. $z'_2=\varphi''$

Substituiert man φ und φ'' erhält man

$$z_2' = -\frac{g}{l}\sin(z_1)$$

$$z_1' = z_2$$

Beispiel komplexes Federpendel:

Das hier besprochene Pendel besteht aus einer masselosen Feder mit einer Masse an dessen Ende. Bekannt ist, dass die Masse auf- und abschwingt. Gleichzeitig stellt dieses Pendel aber auch ein normales Pendel dar, dessen Stablänge die Länge der Feder ist. Deshalb ist es in der Lage, hin und her zu schwingen. Tatsächlich kann es beide Bewegungen gleichzeitig ausführen. In einem Versuch lässt sich beobachten, dass die Pendelschwingungen ineinander übergehen. Das sollte die mathematische Lösung ebenfalls ergeben.

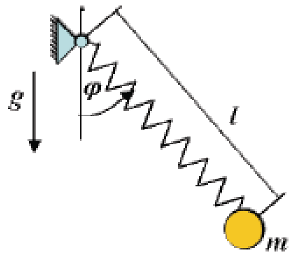
Im Kräftegleichgewicht gilt:

$$
\begin{aligned}
m \cdot (l(t)\ddot{\varphi}(t) + 2\dot{l}(t)\dot{\varphi}(t)) &= -mg\sin(\varphi(t)) \\
m \cdot (\ddot{l}(t) - l(t)\dot{\varphi}^2(t)) &= -c(l(t) - l_F) + mg\cos(\varphi(t))
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$\ddot{\varphi}(t) = \frac{1}{l}(-g\sin(\varphi(t)) - 2\dot{l}(t)\dot{\varphi}(t))$$

$$\ddot{l}(t) = -\frac{c}{m}(l(t) - l_F) + g\cos(\varphi(t)) + l(t)\dot{\varphi}^2(t)$$



Hier haben wir 2 Differentialgleichung 2. Ordnung, die in 4 Differentialgleichungen 1. Ordnung überführt werden müssen. l_f ist darin die Länge der Feder ohne Masse m. Die Substitutionen sind

$z_1=\varphi$, $z_2=l$, $z_3=\varphi'$, $z_4=l'$. Daraus wird $z_3'=\varphi''$ und $z_4'=l''$.

So erhält man

$z_1' = z_3$

$z_2' = z_4$

$$z_3' = \varphi'' = -\frac{1}{z_2}\left(g\sin(z_1) + 2z_4z_3\right)$$

$$z_4' = l'' = -\frac{c}{m}\left(z_2 - l_F\right) + g\cos\left(z_1\right) + z_2z_3^2$$

Nun hat man 4 Differentialgleichungen 1. Grades mit den Variablen $z_1 - z_4$. Die numerische Lösung ist nun wie üblich durchzuführen.

Quelle: Prof. Dr. Warendorf, München

Beispiel: Navier-Stokes Gleichungen, kombiniert mit der Wärmeleitungs- und Kontinuitätsgleichung:

Die nachstehenden Differentialgleichungen beschreiben das Temperatur- und Strömungsgeschwindigkeitsfeld einer Flüssigkeitsschicht, die an der Unterseite beheizt und an der Oberseite gekühlt wird. Man erhält daraus durch Vereinfachungen die sog. Lorenz-Gleichung:

$$\frac{dx}{dt} = -\delta(x - y)$$

$$\frac{dy}{dt} = Rx - y - xy$$

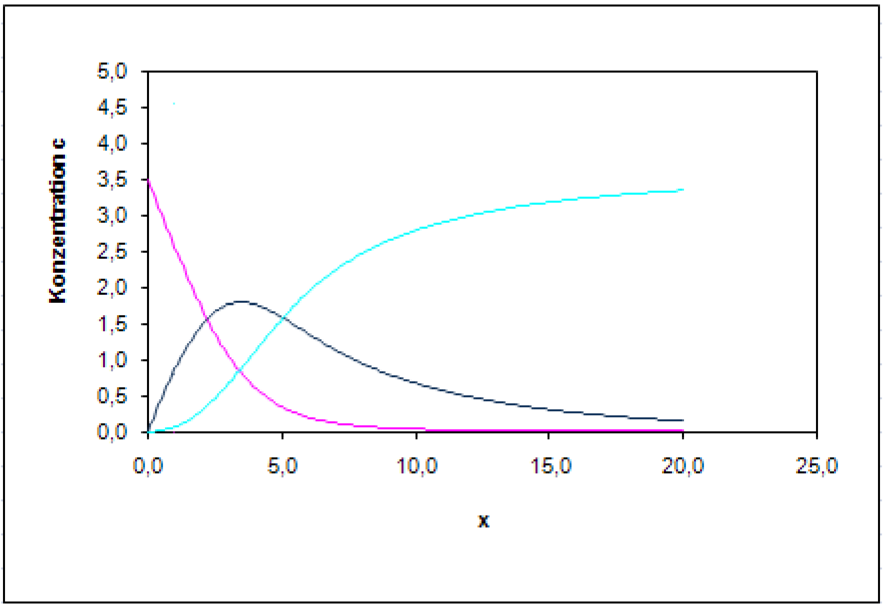
$$\frac{dz}{dt} = xy - by$$

Darin ist x ein Maß für die Rotationsgeschwindigkeit der Konvektionszellen, y ist proportional zur Temperaturdifferenz zwischen aufsteigender und absteigende Strömung, z beschreibt die Abweichung des vertikalen Temperaturprofils von der Linearität. Die Konstanten δ sind die Prandtl Zahl, R die Re Zahl und b ein geometrischer Faktor. Die Gleichungen sind bereits auf den 1. Grad reduziert.

Quelle: Dr. Robert Doerner, Frankfurt

Chemische Reaktion:

Beispiel einer instationären Reaktion in einem Rührkessel für die Folgereaktion A_1 -> A_2 und A_2 -> A_3.



Man erkennt, dass A_1 beginnend mit 3,5 stetig abnimmt, während A_2 beginnend mit 0 zunimmt und nach dem Maximum wieder abnimmt, während A_3 verzögert mit 0 beginnt, um dann stetig zuzunehmen.

Quelle: Prof. Dr. Müller-Erlwein [3]

In der Excel Datei Die numerische Lösung von Differentialgleichungen 2. Ordnung gelingt auch ohne die Reduktion auf Gleichungen der 1. Ordnung mittels Substitution. Während bei der numerischen Lösung der Differentialgleichung 1. Ordnung eine schrittweise Berechnung der Stammfunktion beginnend mit den Anfangswerten erfolgt, wird bei der numerischen Lösung der Differentialgleichung 2. Ordnung zusätzlich die Differentialgleichung 1. Ordnung schrittweise gelöst, d.h. diese wird in die numerische Lösung einbezogen. Dabei liegt der Ansatz vor, den man zur Lösung der Differentialgleichung 1. Ordnung verwendet hat. Es gilt $y = y_0 + y' * h$, und $y' = y'_0 + y'' h$. Jede Gleichung stellt eine numerische Integration dar. Speziell dafür geeignet ist das Runge-Kutta-(Nyström)-Verfahren [9]. Das bisher beschriebene Euler-Verfahren wäre dafür zu ungenau.

In 3 Excelprogrammen wird dieser Lösungsweg vorgestellt.

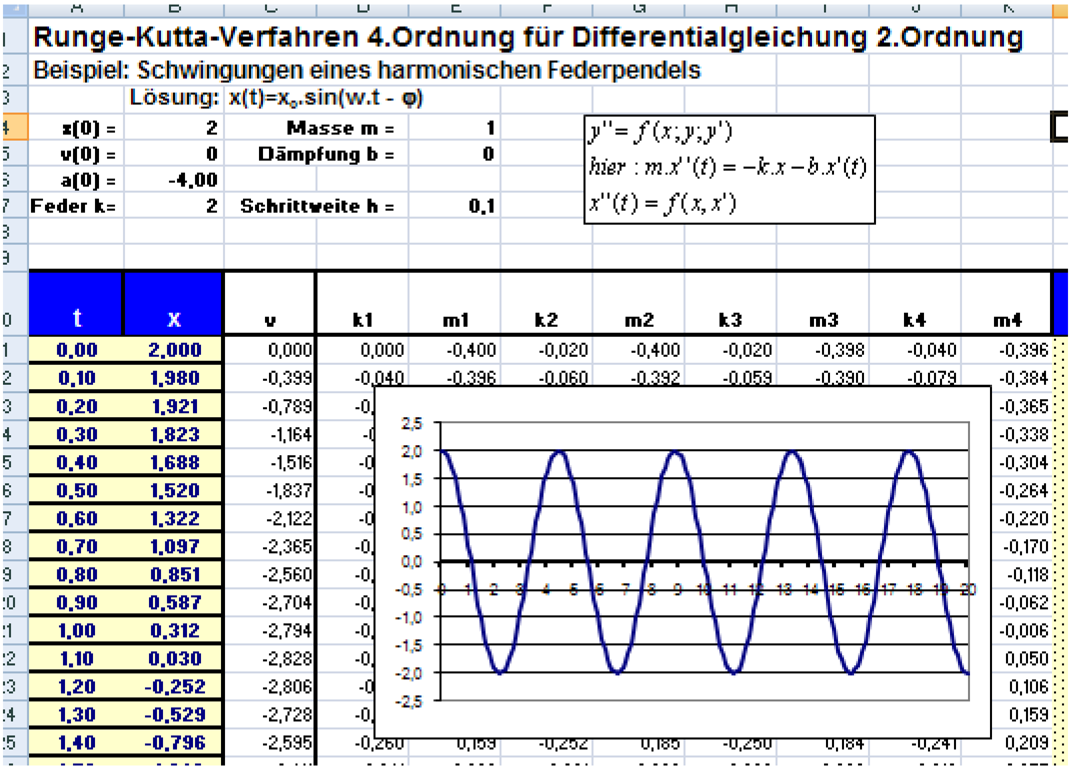
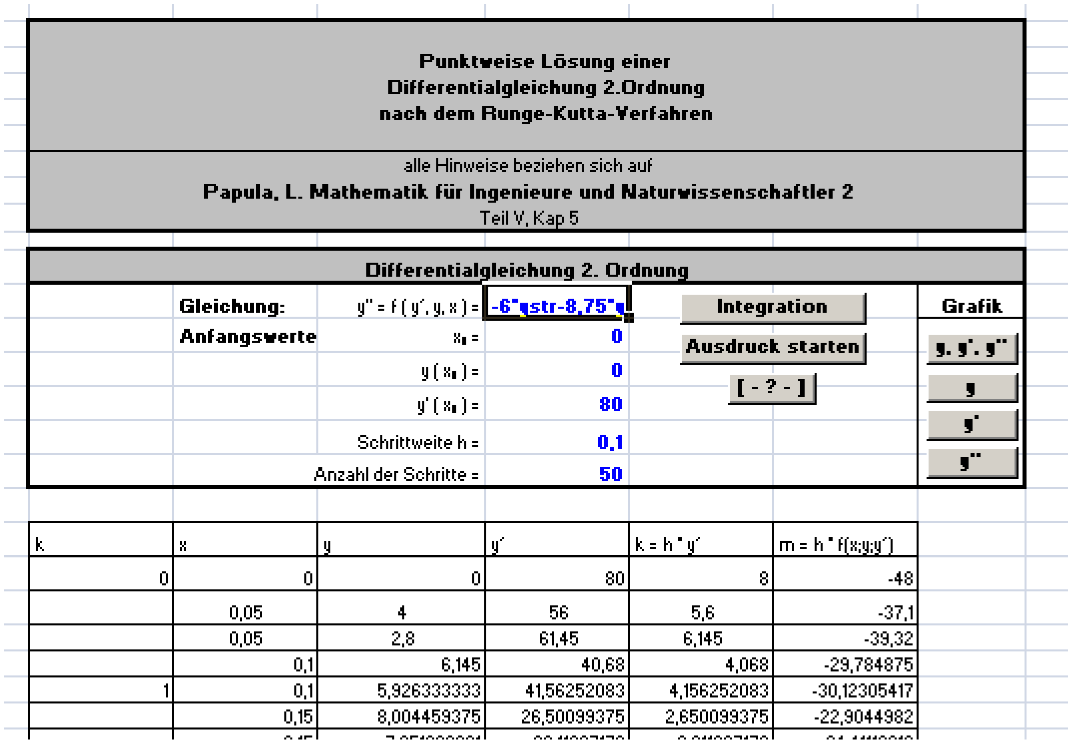


Abb. Excel „RungeKutta.xlsm“, Quelle: *teacher.eduhi.at/a**lindner**/Sites/tabkalk/verzeichnis.htm*



Punktweise Lösung einer Differentialgleichung 2.Ordnung nach dem Runge-Kutta-Verfahren

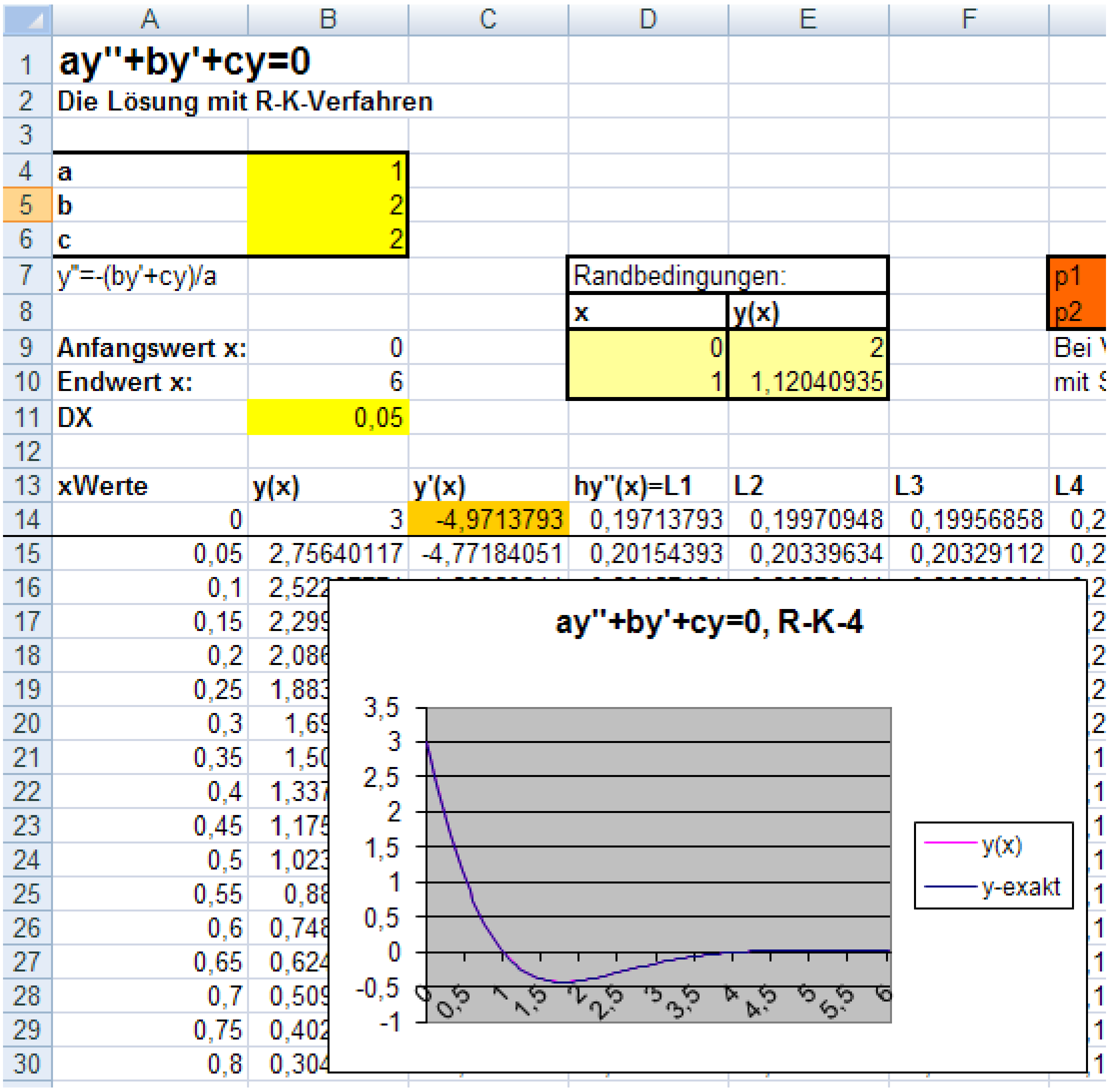
alle Hinweise beziehen sich auf
Papula, L. Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler 2
Teil V, Kap 5

Differentialgleichung 2. Ordnung

Gleichung:	y'' = f (y´, y, x) =	-6*ystr-8,75*y	Integration	Grafik
Anfangswerte	x_0 =	0	Ausdruck starten	y, y', y''
	y (x_0) =	0	[- ? -]	y
	y' (x_0) =	80		y'
	Schrittweite h =	0,1		y''
	Anzahl der Schritte =	50		

k	x	y	y´	k = h * y´	m = h * f(x;y;y´)
0	0	0	80	8	-48
	0,05	4	56	5,6	-37,1
	0,05	2,8	61,45	6,145	-39,32
	0,1	6,145	40,68	4,068	-29,784875
1	0,1	5,926333333	41,56252083	4,156252083	-30,12305417
	0,15	8,004459375	26,50099375	2,650099375	-22,9044982

Abb. Excel „Runge.xlsm“ Quelle: *www.utd.hs-rm.de/prof/kuveler/students/Excel.../*



	A	B	C	D	E	F	
1	ay''+by'+cy=0						
2	Die Lösung mit R-K-Verfahren						
3							
4	a	1					
5	b	2					
6	c	2					
7	y''=-(by'+cy)/a			Randbedingungen:			p1
8				x	y(x)		p2
9	Anfangswert x:	0		0	2		Bei \
10	Endwert x:	6		1	1,12040935		mit S
11	DX	0,05					
12							
13	xWerte	y(x)	y'(x)	hy''(x)=L1	L2	L3	L4
14	0	3	-4,9713793	0,19713793	0,19970948	0,19956858	0,2
15	0,05	2,75640117	-4,77184051	0,20154393	0,20339634	0,20329112	0,2
16	0,1	2,522					2
17	0,15	2,299					2
18	0,2	2,086					2
19	0,25	1,883					2
20	0,3	1,69					2
21	0,35	1,50					1
22	0,4	1,337					1
23	0,45	1,175					1
24	0,5	1,023					1
25	0,55	0,88					1
26	0,6	0,748					1
27	0,65	0,624					1
28	0,7	0,509					1
29	0,75	0,402					1
30	0,8	0,304					1

Abb.: Excel DifGl.xlsm Tabelle B2-RK4 aus dem Buch von Mesina „Numerische Mathematik mit Excel“

Diese 3 Beispiele mögen zunächst genügen, die Leistungsfähigkeit des Runge-Kutta-Verfahrens und ihre Anwendung zu demonstrieren. Damit dürfte es nicht allzu schwer fallen, eigene Differentialgleichungen zu lösen. Dennoch sind weitere Beispiele aus der unten erwähnten Literatur geplant.

Zum Schluß noch eine kurze Behandlung eines Systems 3. Ordnung.

Die Substitution von Differentialgleichung 3. Ordnung führt erwartungsgemäß zu 3 Gleichungen 1. Ordnung.

Beispiel:

$$y''' + y * y' = 0$$

d.h. $y''' = -y * y'$

Substitution: y1=y, y2=y‘, y3=y‘‘

Ableitungen: y1‘=y‘, y2‘=y“, y3‘ = y“‘

Nun kann man wieder ersetzen: y1‘=y2, y2“=y3.

Eingesetzt: y3‘ = -y1*y2

Weiterhin gilt: y1‘ = y2, y2‘=y3

Es ergeben sich 3 Differentialgleichungen erster Ordnung:

y1‘=y2 numerisch: Δy1=y2 * Δx:

y2‘=y3 numerisch: Δy2 = y3 * Δx

y3‘=-y1*y2 numerisch: Δy3 = -y1 * y2 * Δx

Das sich ergebende Gleichungssystem ist nach demselben Schema wie oben beschrieben Zeile für Zeile zu lösen. Die erste Zeile berechnet aus y2 und Δx den nächsten Schritt für y1. Die zweite Zeile berechnet aus y3 und Δx den nächsten Schritt für y2. Die dritte Zeile berechnet aus y1 und y2 den nächsten Schritt für y3.

Weitere bekannte Beispiele für die numerische Lösung komplexer Differentialgleichungen sind:

Räuber-Beute Modell [12], Epidemieausbreitung, Radioaktiver Zerfall, Schwingkreise, Regelkreise, schiefer Wurf mit Reibung, Umlaufbahnen von Kometen, Planeten und Satelliten, Meteorologische Simulation, Klimasimulation, Molekülsimulation, Finite Elemente, CFD-Rührersimulation, Strömungssimulation.

Der instationäre Batchreaktor wird in CHEMCAD nach dem Runge-Kutta Modell 4. Ordnung gelöst, die anderen dynamischen Unitoperations sowie die dynamischen Flowsheets werden mit der verbesserten Euler-Methode berechnet. Diese Methoden sind für sog. steife Differenzialgleichungen, die bekanntlich schlecht konvergieren, weiterentwickelt worden. Grundsätzlich wurden alle Methoden optimiert und werden ständig weiterentwickelt, sodaß sie schnell und fehlerfrei arbeiten.

Literatur, die uns vorliegt, aber z.T. vergriffen ist:

1. Schnauder: VDI-Ingenieurmathematik
2. Ebert, Ederer: Computeranwendungen in der Chemie
3. Müller-Erlwein: Computeranwendungen in der Chemischen Reaktionstechnik
4. Stiefel: Einführung in die Numerische Mathematik, 1993, Teubner
5. Schwarz: Numerische Mathematik, S.412 ff, 1997, Teubner
6. Papula: Mathematik für Ingenieure und Wissenschaftler, Band 2, 2009, Vieweg + Teubner
7. Mesina: Numerische Mathematik mit Excel, 2001, Franzis
8. Bronstein: Taschenbuch der Mathematik, 2008, Verlag Harry Deutsch
9. Arens: Mathematik, Spektrum
10. Zurmühl: Praktische Mathematik, S. 380 ff, 1965, Springer
11. Engel-Müllges: Numerik-Algorithmen, 1996, VDI-Verlag

12. Fleischhauer: Excel in Naturwissenschaft und Technik
13. Lindner: www.mathematik.ch

Autor: Wolfgang Schmidt

Febr. 2014