Mit der Anfangsbedingung $y_0 = 0$ wird

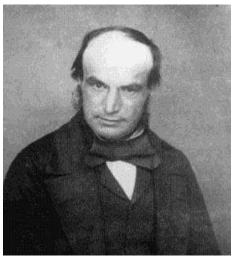
$$y_2 = h_2 f(x_1) + y_1 = h_2 f(x_1) + h_1 f(x_0) + \underbrace{y_0}_{=0}. \tag{5.36}$$

Für $k = N$ erhalten wir deshalb

$$y_N = \sum_{n=1}^{N} h_n f(x_{n-1}) = I_{\mathrm{SR}}(f). \tag{5.37}$$

Dies ist gerade die summierte Rechteck-Regel (4.17a). In analoger Weise kann man für $f = f(x)$ und der Anfangsbedingung $y_0 = 0$ (d.h. für (5.5)) zeigen, daß das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung (5.27) der Trapez-Regel entspricht und das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung (5.34) der Simpson-Regel.

5.1.4. Adams-Bashforth-Verfahren



John Couch Adams 1819–1892

Eine andere Möglichkeit zur Konstruktion von Verfahren höherer Ordnung besteht darin, mehrere zuvor berechnete Punkte y_k zu verwenden. Damit gelangt man zur Klasse der *Adams-Bashforth-Verfahren*.[7] Dahinter steckt die Idee, eine genauere Extrapolation von y_{k+1} zu erhalten, indem man die Ableitung y' im Intervall $[x_k, x_{k+1}]$ durch ein Polynom approximiert, welches man durch Interpolation aus den zuvor berechneten Werten y_n mit $n \leq k$ erhält.

Um diese Strategie anzuwenden, setzen wir an

$$y_{k+1} - y_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} y'(x)\,\mathrm{d}x = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f[x, y(x)]\,\mathrm{d}x \overset{!}{\approx} \int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x)\,\mathrm{d}x, \tag{5.38}$$

wobei $p(x)$ das interpolierende Polynom ist. Man erhält so das Adams-Bashforth-Verfahren

$$y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x)\,\mathrm{d}x. \tag{5.39}$$

Die einfachste Möglichkeit der Interpolation ist es, das Polynom vom Grade Null zu wählen, nämlich die Konstante $p = f(x_k) = \text{const}$. Dies liefert $\int_{x_k}^{x_{k+1}} p(x)\,\mathrm{d}x = h f(x_k)$. Mit dieser Wahl erhält man gerade das Euler-Verfahren (5.13). In der nächsthöheren Ordnung würde man für $p(x)$ die lineare Funktion verwenden, welche die Funktionswerte $f_{k-1} = f(x_{k-1}, y_{k-1})$ und $f_k = f(x_k, y_k)$ interpoliert. Um diese Interpolation zu konstruieren, ist es am bequemsten, die Newton-Interpolation (3.17) zu verwenden. Im vorliegenden Fall liegt es nahe, die

[7] Francis Bashforth, 1819–1912: Mathematiker und Ballistik-Experte. Veröffentlichte zusammen mit Adams 1883 einen Aufsatz (*An Attempt to Test the Theories of Capillary Action*, Cambridge University Press, 1883), in welchem die Methode von Adams zur Berechnung von Tropfenformen verwendet wird.

finiten Differenzen nicht wie in (3.13) in Vorwärtsrichtung zu bilden, sondern in Rückwärtsrichtung. Damit wird

$$\Delta f_k := f_{k-1} - f_k. \tag{5.40}$$

In Analogie zu (3.17) erhalten wir damit das lineare Interpolationspolynom

$$p(x) = p_1 = f_k - \frac{x - x_k}{h} \Delta f_k, \tag{5.41}$$

wobei das Minuszeichen erforderlich wurde, da wir die positive Schrittweite $h = |x_{k-1} - x_k|$ verwenden. Wenn wir nun das Integral in (5.39) ausführen, erhalten wir

$$y_{k+1} = y_k + \left[f_k x - \frac{1}{2} \frac{(x - x_k)^2}{h} \Delta f_k \right]_{x_k}^{x_{k+1}} = y_k + h f_k - \frac{h}{2} \Delta f_k. \tag{5.42}$$

Dies ist das *Adams-Bashforth-Verfahren zweiter Ordnung*. Wenn man die Differenz Δf_k einsetzt, erhalten wir

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + h f_k - \frac{h}{2} (f_{k-1} - f_k) = y_k + \frac{h}{2} (3 f_k - f_{k-1}).} \tag{5.43}$$

Wir können nun so fortfahren und durch das Einbeziehen weiterer Punkte in die Newton-Interpolation (3.17) Adams-Bashforth-Verfahren höherer Ordnung entwickeln. Das Newton-Polynom zweiter Ordnung, welches die Punkte (x_{k-2}, f_{k-2}), (x_{k-1}, f_{k-1}) und (x_k, f_k) interpoliert, lautet

$$p_2 = p_1 + \frac{(x - x_k)(x - x_{k-1})}{2h^2} \Delta^2 f_k = f_k - \frac{x - x_k}{h} \Delta f_k + \frac{(x - x_k)(x - x_{k-1})}{2h^2} \Delta^2 f_k. \tag{5.44}$$

Durch Integration erhalten wir gemäß (5.39)

$$\begin{aligned} y_{k+1} = y_k + \Bigg\{ & f_k x - \frac{1}{2} \frac{(x - x_k)^2}{h} \Delta f_k \\ & + \frac{1}{2h^2} \left[\frac{1}{3} (x - x_{k-1})^3 - \frac{1}{2} (x_k - x_{k-1}) (x - x_{k-1})^2 \right] \Delta^2 f_k \Bigg\}_{x_k}^{x_{k+1}}. \end{aligned} \tag{5.45}$$

Dies führt auf

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h f_k - \frac{h}{2} \Delta f_k + \frac{1}{2h^2} \left(\frac{1}{3} 8h^3 - \frac{h}{2} 4h^2 - \frac{1}{3} h^3 + \frac{h}{2} h^2 \right) \Delta^2 f_k \\ &= y_k + h f_k - \frac{h}{2} \Delta f_k + \frac{5h}{12} \Delta^2 f_k \end{aligned} \tag{5.46}$$

Wenn wir die Rückwärtsdifferenz zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} \Delta^2 f_k &= \Delta (f_{k-1} - f_k) = (f_{k-2} - f_{k-1}) - (f_{k-1} - f_k) \\ &= f_{k-2} - 2 f_{k-1} + f_k \end{aligned} \tag{5.47}$$

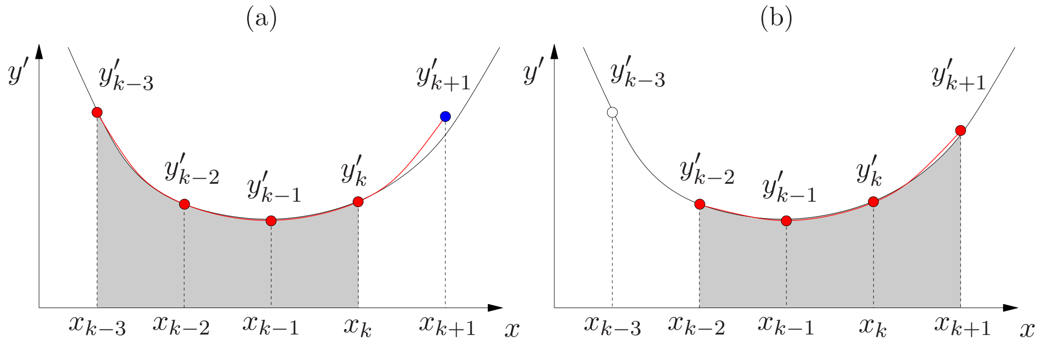


Abbildung 5.3.: Schematische Darstellung der Adams-Bashforth- (a) und der Adams-Moulton-Strategie (b). Bei Adams-Bashforth (a) werden die vier zuletzt berechneten Funktionswerte y_k verwendet, um die Ableitungen $y'_k = f(x_k, y_k)$ (rote Punkte) zu gewinnen und daraus y'_{k+1} (blauer Punkt) zu prognostizieren. Aus der Integration über $[x_k, x_{k+1}]$ gewinnt man dann $y_{k+1} - y_k$. Bei Adams-Moulton (b) werden die vier roten Punkte verwendet, um y'_{k+1} *implizit* vorherzusagen. Der Bereich, über den sich die Interpolation (rote Kurve) erstreckt, ist grau angedeutet. Die dünne schwarze Kurve soll die exakte Funktion $y' = f(x, y)$ andeuten.

einsetzen, erhalten wir

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}(3f_k - f_{k-1}) + \frac{5h}{12}(f_{k-2} - 2f_{k-1} + f_k)\,, \tag{5.48}$$

oder

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + \frac{h}{12}(23f_k - 16f_{k-1} + 5f_{k-2})} \tag{5.49}$$

Dies ist das *Adams-Bashforth-Verfahren dritter Ordnung*.

In analoger Weise kann man das *Adams-Bashforth-Verfahren vierter Ordnung* konstruieren (Hausaufgabe), und erhält

$$\boxed{y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24}(55f_k - 59f_{k-1} + 37f_{k-2} - 9f_{k-3})\,.} \tag{5.50}$$

Dies kann man nun bis zu beliebiger Ordnung fortsetzen. Die Adams-Bashforth-Verfahren sind *Mehrschritt-Verfahren*, da zur Berechnung der neuen Näherung y_{k+1} die Werte von y_k aus vorangegangenen Schritten verwendet werden. Die Strategie ist in Abb. 5.3a für das Adams-Bashforth-Verfahren vierter Ordnung (5.50) dargestellt.

Anders als die Einschritt-Verfahren, wie etwa die Runge-Kutta-Verfahren, tritt bei Mehrschritt-Verfahren ganz allgemein die Problematik der Startwerte auf. Denn zu Beginn der Rechnung liegen noch nicht hinreichend viele berechnete Funktionswerte vor, um ein Mehrschritt-Verfahren anwenden könnte. In diesem Fall behilft man sich meist mit der Verwendung eines Einschritt-Verfahrens derselben Fehlerordnung, bis man hinreichend viele Punkte berechnet hat. Ähnliches gilt, wenn man innerhalb der Rechnung die Schrittweite h wechseln möchte.