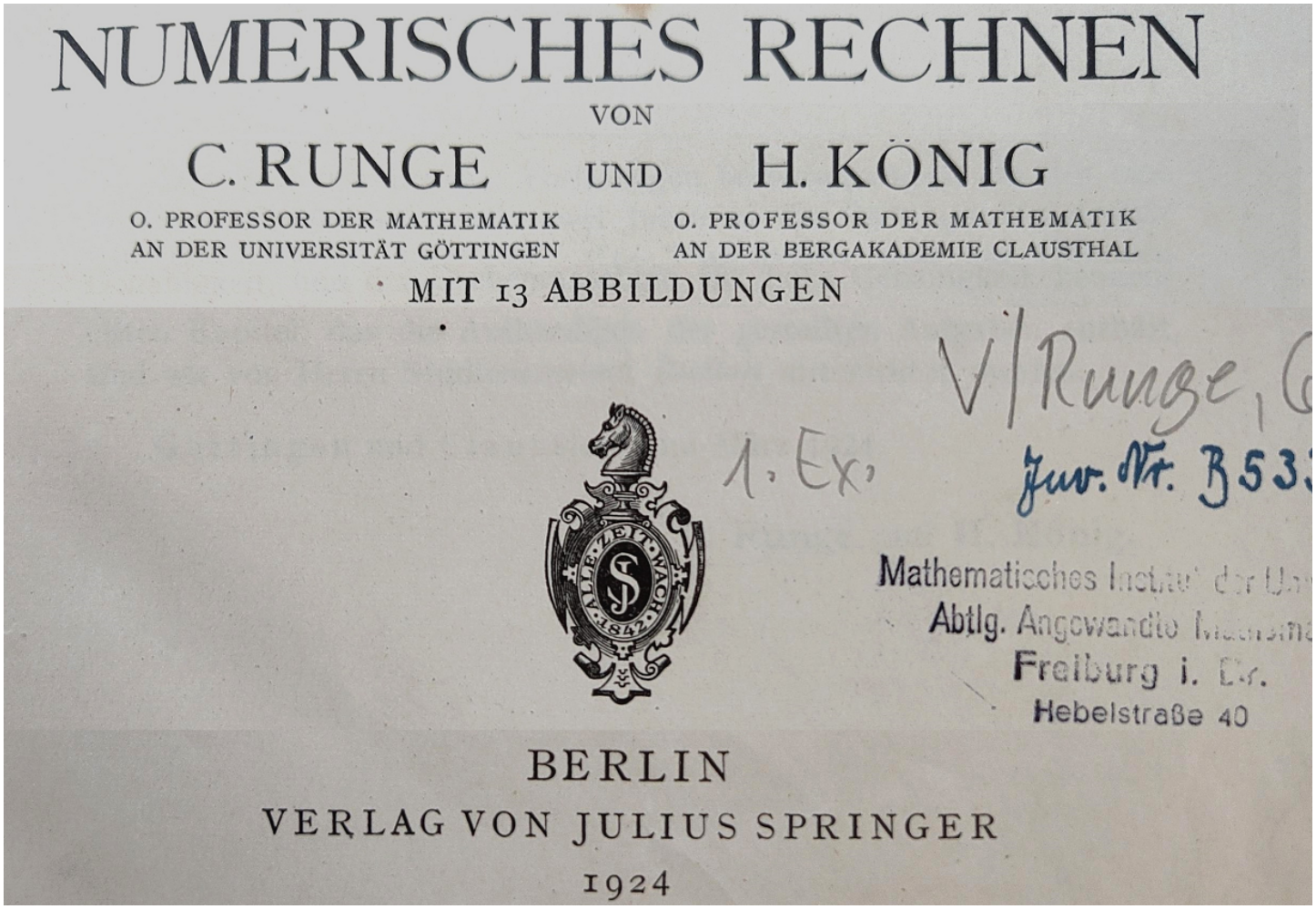
Memo Date 03/07-11-2026 Gasthörer w178854g R.Wurdack
https://xylokopa.github.io/Fy-Nance

```
Review of our last discussion about the discretized
Runge-Kutta and its relation to the Kepler-Simpson-Rule.
```

gewidmet:



NUMERISCHES RECHNEN

VON

C. RUNGE UND H. KÖNIG

O. PROFESSOR DER MATHEMATIK AN DER UNIVERSITÄT GÖTTINGEN

O. PROFESSOR DER MATHEMATIK AN DER BERGAKADEMIE CLAUSTHAL

MIT 13 ABBILDUNGEN

V/Runge, C
1. Ex.
Zur. Nr. B 533
Mathematisches Institut der Univ.
Abtlg. Angewandte Mathematik
Freiburg i. Br.
Hebelstraße 40

BERLIN

VERLAG VON JULIUS SPRINGER

1924

Zitat Vorlesungs-Skript :

Numerical Integration Methods

A numerical simulation routine that approximates the solution map is often called an *integrator*. A simple but very crude way to generate an approximation for $x(t; x_0, u_{\text{const}})$ for $t \in [0, \Delta t]$ is to perform a linear extrapolation based on the time derivative $\dot{x} = f(x, u)$ at the initial time point:

$$\tilde{x}(t; x_0, u_{\text{const}}) = x_0 + t f(x_0, u_{\text{const}}), \quad t \in [0, \Delta t].$$

This is called one *Euler integration step*. For very small Δt, this approximation becomes very good. In fact, the error $\tilde{x}(\Delta t; x_0, u_{\text{const}}) - x(\Delta t; x_0, u_{\text{const}})$ is of second order in Δt. This motivated Leonhard Euler to perform several steps of smaller size, and propose what is now called the *Euler integration method* ...

... In practice, the Euler integrator is rarely competitive,because other methods exist that deliver the desired accuracy levels at much lower computational cost. We discuss several numerical simulation methods later, but present here already one of the most widespread integrators, the *Runge-Kutta Method of Order Four*, which we will often abbreviate as *RK4*. One step of the RK4 method needs four evaluations of f and stores the results in four intermediate quantities $k_i \in \mathbb{R}^{n_x}$, $i = 1, \ldots, 4$. Like the Euler integration method, the RK4 also generates a sequence of values x_j, $j = 0, \ldots, M$, with $x_0 = x_0$. At x_j, and using the constant control input u_c , one step of the method proceeds as follows:

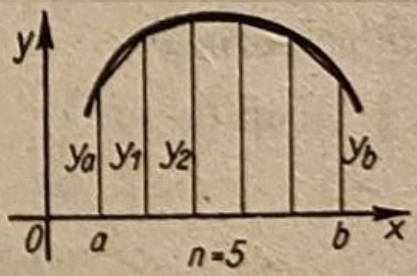
$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(x_j\ , u_c) \\
k_2 &= f(x_j + \frac{h}{2} k_1\ \ , u_c) \\
k_3 &= f(x_j + \frac{h}{2} k_2\ \ , u_c) \\
k_4 &= f(x_j + h\, k_3\ \ , u_c) \\
x_{j+1} &= x_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).
\end{aligned}
$$

==========

Zitat Formelsammlung : VEB Fachbuchverlag Leipzig Dr.Ing. HANS.JOCHEN BARTSCH 21. Auflage erworben 1987 in Prag (bei einer Klassenfahrt ...)

Seite 419 ...

Bild 10.4. Sehnen-Trapezformel



n Anzahl gleicher Stufen

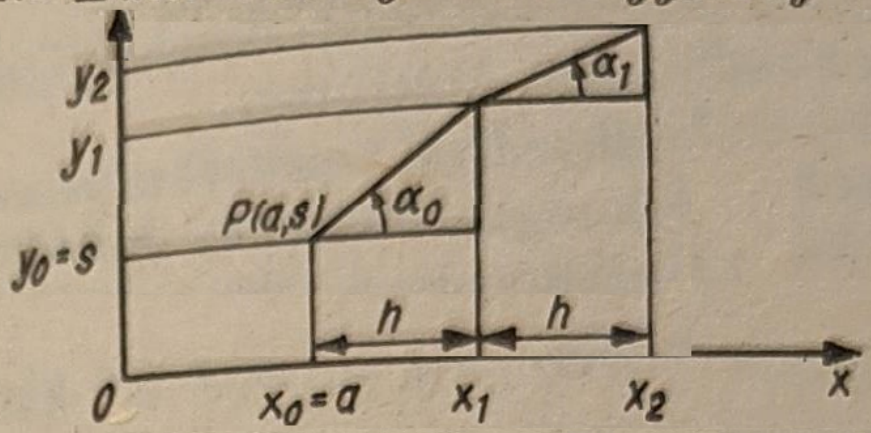
$$dx \approx \frac{b-a}{2n} (y_a + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-1} + y_b)\ y_{n-1} + y_b)$$

Keplersche Faßregel (dgl. für $n = 2$)

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \frac{b-a}{6} (y_a + 4y_1 + y_b)$$

und Seite 468 ...

Bild 11.6 Euler-Cauchyscher Polygonzug



$g(x_i, y_i)$ ist ein *gewichtetes Mittel*

$$g(x_i, y_i) = \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3) + Ah^5$$

mit $k_0 = f(x_i, y_i)$, d. h. die Dgl. selbst

$$k_1 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_0\right)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1\right)$$

$$k_3 = f(x_i + h\ , y_i + hk_2)$$

Für $y_i = 0$ ergibt sich die *Simpsonsche Regel.*

Ordnung des Abbruchfehlers: Ah^5

Fehlerabschätzung:

Feinrechnung mit Schrittweite h: Ah^5

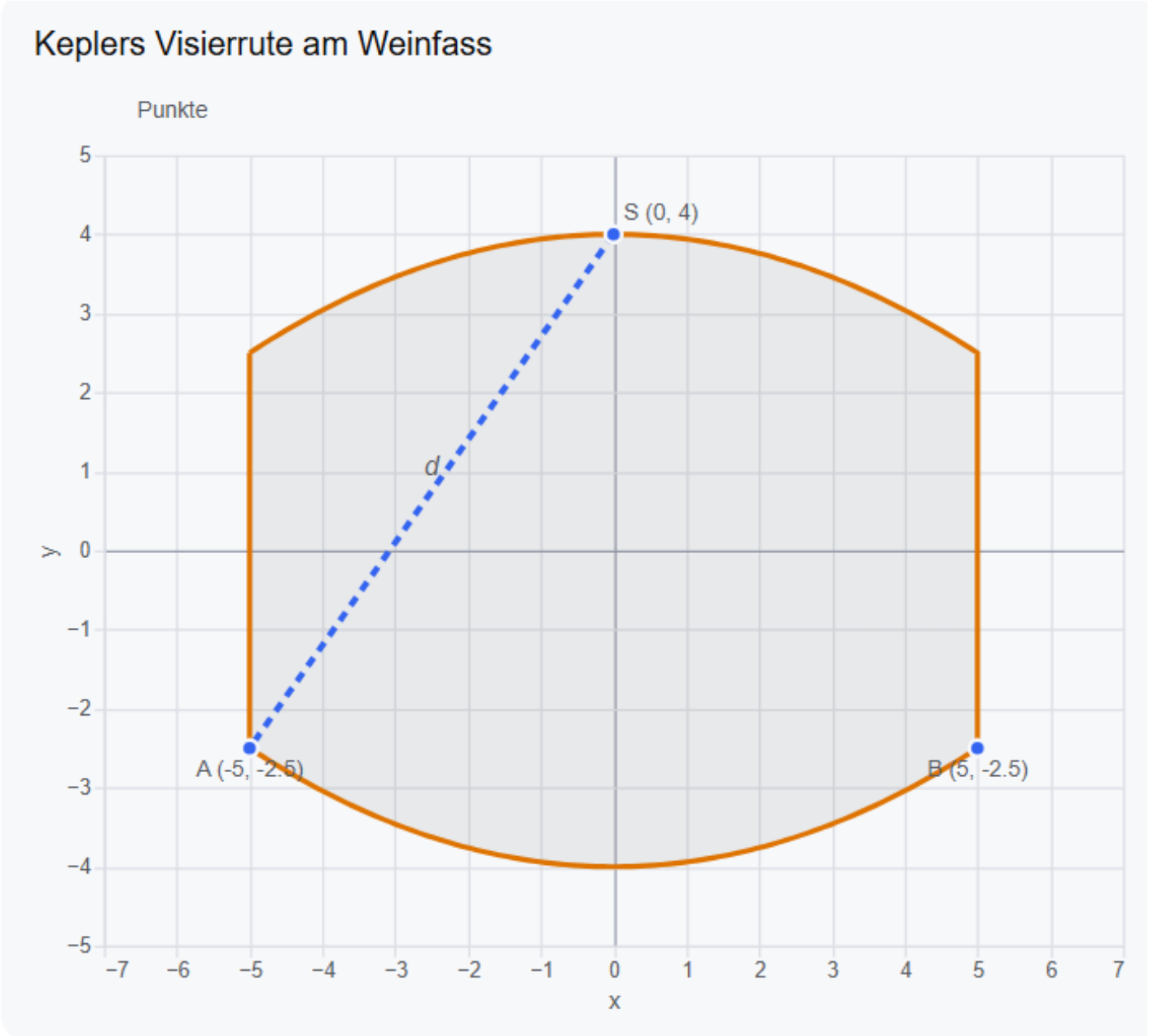
Grobrechnung mit Schrittweite $2h$: $A(2h)^5 = 32Ah^5$

$$\text{Fehler Feinrechnung} \approx \frac{1}{15}(\text{Feinrechnung} - \text{Grobrechnung})$$

Einschub zum Thema $\frac{1}{6}(k_1 + 4 \cdot m + k_4)$

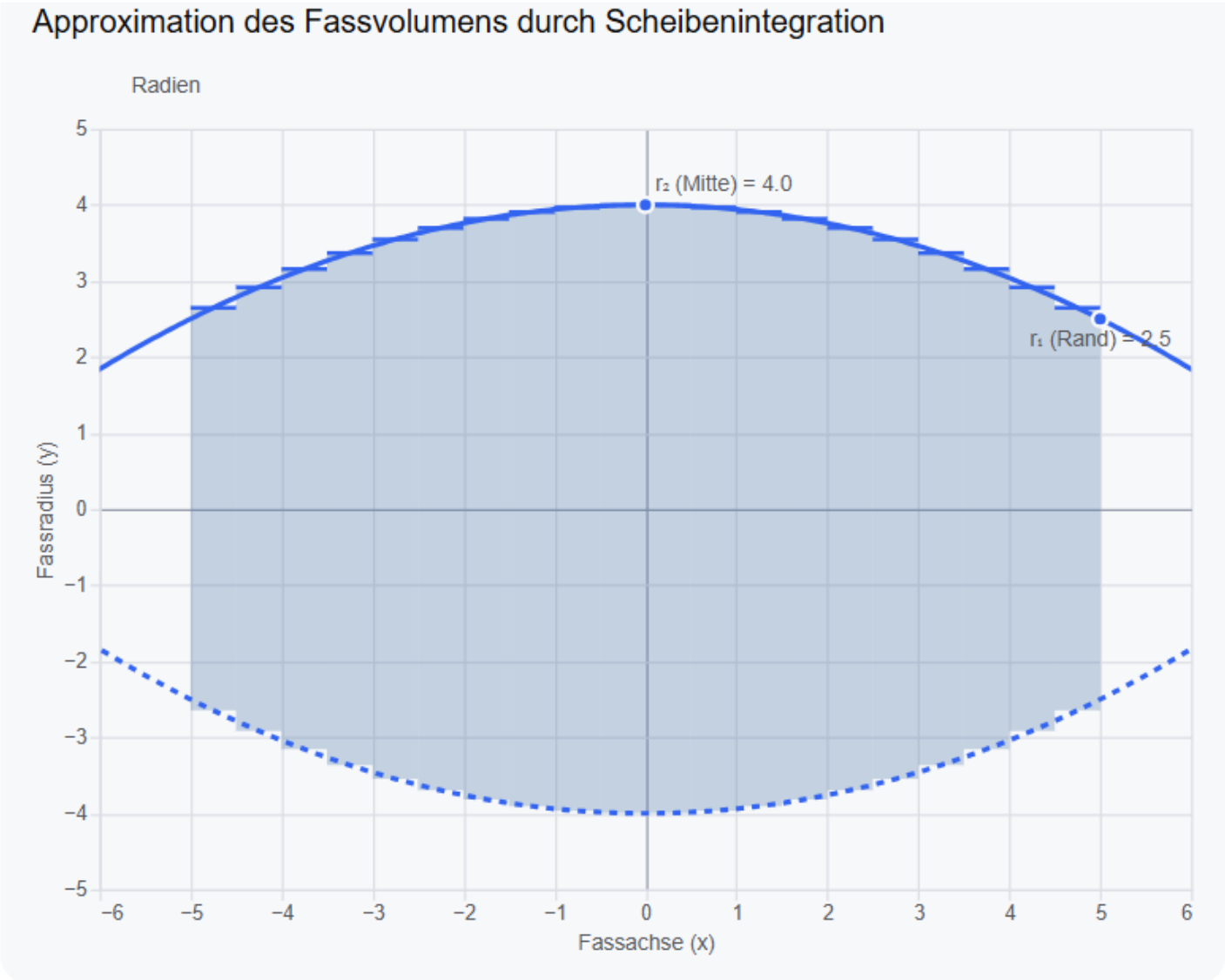
==========

Eine Brücke von der Keplerschen Fassregel (bzw. der Simpsonregel) zum RK4 - Verfahren ist die Erweiterung der Keplerschen Fassregel zur Simpson-Regel als reine Integralrechnung.Beide nutzen die gleiche Gewichtung



Die Dolia Austriaca

Keplers Herleitung zur Volumenbestimmung der österreichischen Weinfässer (Dolia Austriaca) gilt als ein Meilenstein auf dem Weg zur modernen Infinitesimalrechnung.
1. Das Problem: Die Visierrute (Meßstab)
Die Weinhändler in Linz bestimmten das Fassvolumen mit einer Visierrute. Dabei handelte es sich um einen Stab, der diagonal durch das Spundloch S bis zur am weitesten entfernten Bodenecke A eingeführt wurde. Kepler bemerkte empirisch, dass diese Methode bei Fässern unterschiedlicher Form ungenau sein musste. Mathematisch bewies er jedoch, dass das österreichische Fassdesign für diese Messmethode optimal geformt war, da es bei gegebener Diagonale das maximale Volumen besaß.
2. Die geometrische Herleitung: Zerlegung in "Indivisibilien"
Um das tatsächliche Volumen des Fasses zu berechnen, erfand Kepler eine Vorform der Integralrechnung (die Methode der Indivisibilien): 2a. Unendlich dünne Scheiben: Er betrachtete das rotierende Fass als einen Rotationskörper und zerlegte es gedanklich in unendlich viele, unendlich dünne Kreiszylinder (Kreisscheiben) entlang der Längsachse.



2b. Summation: Das Gesamtvolumen V ist die Summe der Volumina aller einzelnen infinitesimalen Scheiben. Jede Scheibe im Abstand x hat den Radius(r(x) und die Breite dx. Da Kepler die exakte mathematische Kurve der Fassdauben (oft eine Parabel oder ein Kreisbogen) nicht als Funktion integrieren konnte, vereinfachte er die Geometrie. Er ersetzte das gekrümmte Fass näherungsweise durch eine Kombination einfacherer geometrischer Körper (wie Kegelstümpfe). Daraus leitete er die berühmte Keplersche Fassregel (Simpson-Regel) ab. Sie berechnet das Volumen anhand von nur drei Querschnittsflächen:

Die mathematische Summenformel, die Kepler gedanklich (ohne moderne Integralschreibweise) nutzte, entspricht:

$$V = \int_{-h/2}^{h/2} \pi \cdot [r(x)]^2 \, dx$$

- A_G: Fläche des Bodens (Grundfläche mit Radius r_1)
- A_M: Fläche in der Mitte beim Spundloch (Bauchfläche mit Radius r_2)
- A_D: Fläche des Deckels (identisch mit Boden, Radius r_1)

Bei einer Gesamthöhe (Länge) h des Fasses lautet seine Formel in heutiger Notation:

$$\mathbf{V \approx \frac{h}{6} \cdot (A_G + 4A_M + A_D)}$$

Da $A = \pi \cdot r^2$ ist, ergibt sich ausgedrückt durch den Radius des Bodens (r_1) und den Radius des Bauches (r_2):

$$V \approx \frac{\pi \cdot h}{6} \cdot (2r_1^2 + 4r_2^2) = \frac{\pi \cdot h}{3} \cdot (r_1^2 + 2r_2^2)$$

4. Warum das "Österreichische Fass" perfekt war:
Kepler bewies in der Nova Stereometria, dass die Dolia Austriaca genau so proportioniert waren, dass das Verhältnis von Höhe zu Bauchdurchmesser den Raum ideal ausnutzte. Wenn man den Messstab diagonal einführte, führten Abweichungen in der Fassform kaum zu Fehlern im gemessenen Volumen, da ein maximales Volumen bei diesen Proportionen der Erfahrung nach erreicht wurde. Keplers Werk bildete somit gleichzeitig das Fundament für die spätere Differenzial- und Integralrechnung von Bonaventura Cavalieri und Isaac Newton.
Die Simpson-Formel (bzw. -Regel) ist die moderne Schreibweise von Keplers Fassregel. Der Clou an der Simpson-Formel ist: Während Kepler das Fass vereinfacht als Kombination aus geraden Kegelstümpfen sah, legt die Simpson-Formel eine elegante Parabel durch die drei gemessenen Punkte (Boden, Mitte, Deckel), da die Daubenform echter Weinfässer einer Parabel ziemlich nahe kommt.
Rechenbeispiel:

- Länge (Höhe) des Fasses (h): 120 cm
- Radius am Boden (r_B): 30 cm (Radius der Endflächen)
- Radius in der Mitte (r_M): 40 cm (Radius am Spundloch)
- Radius am Deckel (r_D): 30 cm (identisch zum Boden)

Kepler's bzw. Simpson's Formel als rotierende Parabel :

$$V \approx \tfrac{h}{6} \cdot (A_B + 4A_M + A_D)$$

Schritt 1: Die drei Querschnittsflächen berechnen ($A = \pi \cdot r^2$)

- Fläche am Boden (A_B): $A_B = \pi \cdot 30^2 = 900\pi \approx 2.827$ cm^2
- Fläche in der Mitte (A_M): $A_M = \pi \cdot 40^2 = 1.600\pi \approx 5.027$ cm^2
- Fläche am Deckel (A_D): $A_D = \pi \cdot 30^2 = 900\pi \approx 2.827$ cm^2

Schritt 2: Werte einsetzen

- Da wir die Höhe $h = 120$ cm haben, teilen wir diese zuerst durch 6 ($\frac{120}{6} = 20$):

$$V \approx 20 \cdot (900\pi + 4 \cdot 1.600\pi + 900\pi)$$

- Jetzt fassen wir die Werte in der Klammer zusammen:

$$V \approx 20 \cdot (900\pi + 6.400\pi + 900\pi)\ V \approx 20 \cdot 8.200\pi\ V \approx 164.000\pi$$

- Setzt man $\pi \approx 3,14159$ ein,folgt als Volumen in Kubikzentimetern (cm^3):

$$V \approx 164.000 \cdot 3,14159 \approx 515.221\ \text{cm}^3 \approx \mathbf{515,2}\ \text{Liter}$$

Unser Beispielfass fasst nach der Simpson-Methode also exakt rund 515 Liter Wein. Weil die Daubenkurve durch die Parabelform realistisch nachgezeichnet wird, weicht der Wert meist um weniger als 1% vom tatsächlichen physikalischen Inhalt ab.

Nun der Brückenschlag von der Simpson-Regel zu Runge-Kutta:

Während Kepler und Simpson das Fassvolumen über eine feste geometrische Formel (Flächenaufteilung) berechnet haben, betrachten wir das Problem mit Runge-Kutta als Beschreibung der Krümmung des Fasses durch eine Differenzialgleichung (DGL) und lassen diese numerisch mit dem Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung, kurz RK4, Schritt für Schritt entlang der Fass-Form entlangwandern, um das Volumen aufzusummieren.

Möglichst anschaulich mit passenden Zahlenwerten:

1. Das mathematische Modell (Die Differenzialgleichung)

- Das Volumen eines Rotationskörpers von der linken Seite ($x = -60$) bis zu einer beliebigen Stelle x wächst umso schneller, je größer der Querschnitt an dieser Stelle ist. Die mathematische Änderung des Volumens $V(x)$ ist also:

$$\frac{dV}{dx} = \pi \cdot [r(x)]^2$$

- Nutzen wir nun das Fassprofil aus dem vorherigen Simpson-Beispiel. Die Daubenlinie werde durch die Parabelfunktion $r(x) = 40 - \frac{10}{3600}x^2$ beschrieben. Unsere Differenzialgleichung lautet dann:

$$\mathbf{V'(x) = \pi \cdot \left(40 - \frac{10}{3600}x^2\right)^2}$$

- Am Startwert $x = -60$ (links am Fassboden) ist das Volumen Null: $V(-60) = 0$.
- Am Zielwert $x = 60$ ist dann das Volumen $V(60)$ des Fasses erreicht.

2. Wie funktioniert hier Runge-Kutta (RK4)?

Anstatt das Integral auf einmal zu lösen, teilt RK4 die Gesamtlänge des Fasses (120 cm) in kleine Schritte der Breite h_{step} auf (nicht zu verwechseln mit der Fasshöhe h).

- An jedem Punkt berechnet RK4 vier verschiedene Steigungen (k_1, k_2, k_3, k_4), wirft einen Blick voraus, mittelt diese Werte und macht dann den präzisesten Schritt nach vorne.

  Da unsere rechte Seite der Gleichung nur von x abhängt, vereinfachen sich die RK4-Gewichtungsschritte zu:

- $k_1 = V'(x)$ (Steigung am aktuellen Punkt)
- $k_2 = V'(x + \frac{h_{step}}{2})$ (Steigung in der Mitte des Schritts, basierend auf k_1)
- $k_3 = V'(x + \frac{h_{step}}{2})$ (Nochmalige Steigung in der Mitte)
- $k_4 = V'(x + h_{step})$ (Steigung am Zielpunkt des Schritts)
- Der nächste Volumenwert berechnet sich aus: $V_{neu} = V_{alt} + \frac{h_{step}}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

Hinweis zum Brückenschlag: RK4 mit nur einem einzigen großen Schritt über das ganze Fass ($h_{step} = 120$) ist identisch mit der Simpson-Regel!

3. Visualisierung des RK4-Weges am Fass:
Das Verfahren startet links bei $V = 0$ und integriert (summiert) die Kreisflächen Schicht für Schicht auf, bis rechts das finale Gesamtvolumen erreicht ist.
4. Ergebnis der Iteration:
Wenn man RK4 mit einem Computerprogramm schrittweise von $x = -60$ bis $x = 60$ laufen lässt, erhält man folgende Werte für das anwachsende Volumen (umgerechnet in Liter):

- Position am Fass (x in cm) Berechnetes Teilvolumen (Liter)
- $x = -60$ Start am linken Boden $0,0$ L
- $x = -30$ Ein Viertel des Fasses $107,3$ L
- $x = 0$ Die Hälfte (beim Spundloch) $257,6$ L
- $x = 30$ Drei Viertel des Fasses $407,9$ L
- $x = 60$ Ende am rechten Deckel $515,2$ L

Das RK4-Verfahren liefert am Ende exakt 515,2 Liter.
Fazit des Brückenschlags:
Johannes Kepler zerlegte das Fass 1615 intuitiv in dünne Scheiben (Indivisibilien). Thomas Simpson goss diese Idee 1743 in seine geometrische Dreipunkt-Formel. Und die Mathematiker Carl Runge und Martin Kutta entwickelten um 1900 ein dynamisches Schrittverfahren, das Keplers Prinzip für jede beliebige, komplexe mathematische Kurve auf Knopfdruck am Computer berechenbar macht. Folgender Python-Code zeichnet diese Runge-Kutta-Schleife für das Weinfass nach und zum Abschluss der mathematischen Exkursion erfolgt eine Deutung, derzufolge beide Verfahren im Kern Zwillinge sind, gefolgt vom Python-Code, der die RK4-Simulation durchführt und den Fortschritt der Approximation visualisiert.

Zusammenfassung, warum RK4 einer Anwendung der Kepler-Simpson-Regel entspricht:

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren (RK4) ist so konstruiert, dass es für Polynome bis zum Grad 3 exakt ist. Wenn eine Differenzialgleichung $V'(x) = f(x)$ nur von x abhängt (und nicht vom sich ändernden Volumen V selbst), vereinfacht sich ein RK4-Schritt. Schauen wir uns RK4 für einen einzigen großen Schritt über die gesamte Fasslänge h von Startpunkt x_0 bis Endpunkt x_1 an:

- 1. $k_1 = f(x_0)$ (Die Fläche am Boden, A_B)
- 2. $k_2 = f(x_0 + \frac{h}{2})$ (Die Fläche in der Mitte, A_M)
- 3. $k_3 = f(x_0 + \frac{h}{2})$ (Nochmals die Fläche in der Mitte, A_M)
- 4. $k_4 = f(x_0 + h)$ (Die Fläche am Deckel, A_D)

Setzt man diese vier Steigungen in die RK4-Schrittformel ein, erhält man:

- $V_{neu} = V_{alt} + \frac{h}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
- $V_{neu} = V_{alt} + \frac{h}{6} \cdot (A_B + 2A_M + 2A_M + A_D)$
- $\mathbf{V_{neu} = V_{alt} + \frac{h}{6} \cdot (A_B + 4A_M + A_D)}$

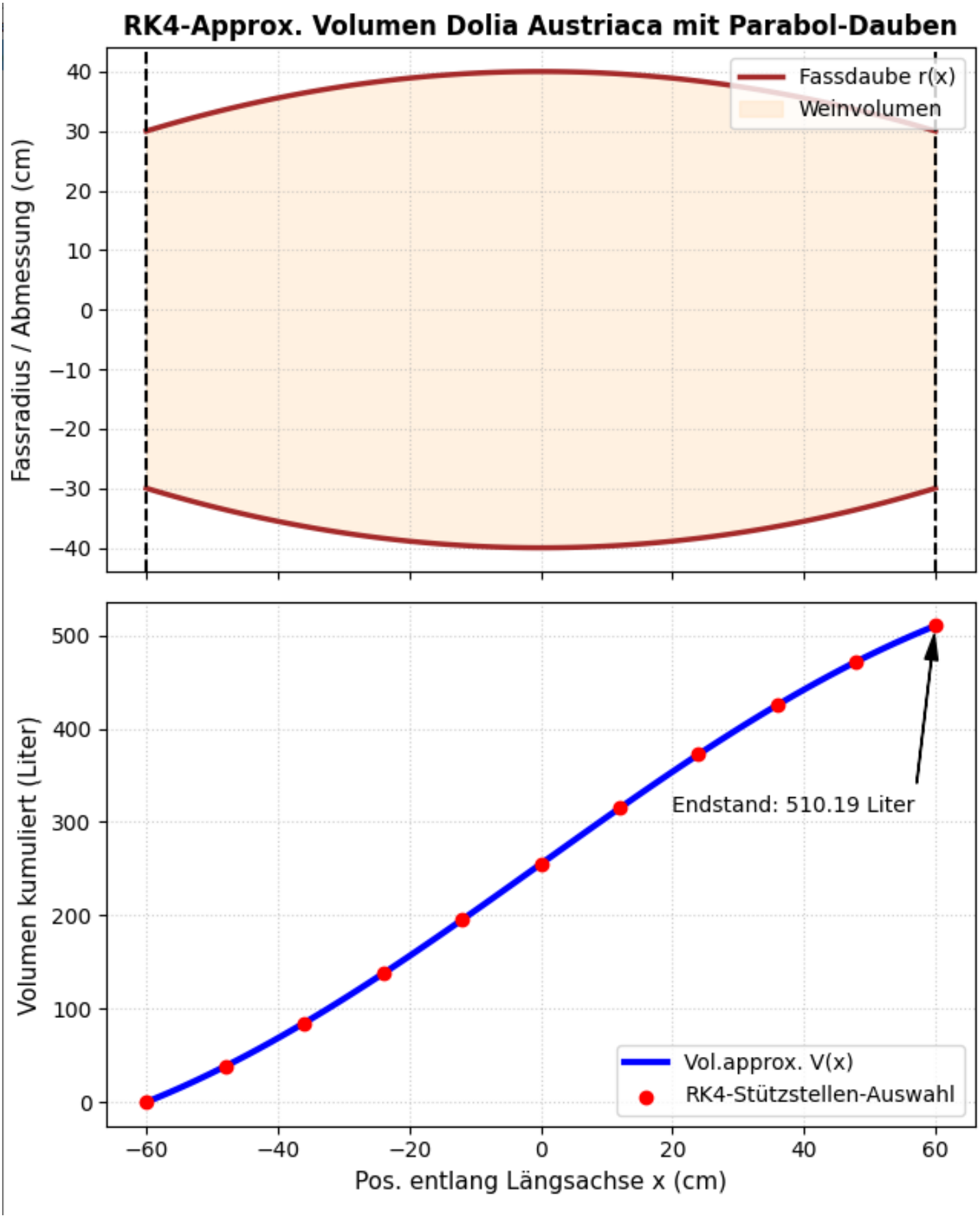
Das ist exakt die Simpson-Formel! Das Runge-Kutta-Verfahren ist folglich nichts anderes als ein iterative Anwendung der Kepler-Simpson-Regel zur schrittweise Auswertung des gesamten Intervalls. Python-Code zur RK4-Schleife mit Diagramm :

Der Code simuliert das schrittweise Auffüllen des Fasses von links nach rechts mit RK4. Gleichzeitig erzeugt er ein Diagramm, das im oberen Teil die Fassform (die Daube) abbildet und im unteren Teil den exakten Stand der Volumen-Approximation (in Litern) synchron zur Position x mitlaufen lässt

```python
# Dolia_RK4_01.py DOLIA-AUSTRIACA 05-11-26
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# 1. Parameter der Dolia Austriaca
x_start = -60.0  # Linker Boden bei -60 cm
x_end = 60.0     # Rechter Deckel bei +60 cm
Länge = 120.0    # Gesamtlänge h = 120 cm
# Radiales Parabol-Dauben-Profil (Radius in Abh. von x)
def r(x):
    return 40.0 - (10.0 / 3600.0) * (x**2)
# Differenzialgleichung: Volumen-Änderung dV/dx per x
def dV_dx(x):
    return np.pi * (r(x)**2)
# 2. Runge-Kutta-4 (RK4) Simulation
num_steps = 100
h_step = Länge / num_steps
# Arrays zur Speicherung der berechneten Werte
x_vals = np.linspace(x_start, x_end, num_steps + 1)
V_vals = np.zeros(num_steps + 1)
```

```
# RK4-Schleife (Integration)
for i in range(num_steps):
    x = x_vals[i]
    V = V_vals[i]
    k1 = dV_dx(x)
    k2 = dV_dx(x + h_step/2.0)
    k3 = dV_dx(x + h_step/2.0)
    k4 = dV_dx(x + h_step)
    # RK4-Gewichtung bei Schritt nach vorne
    V_vals[i+1] = V + (h_step / 6.0) * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)
# Umrechnung Volumen cm³ in Liter (1 Liter = 1000 cm³)
V_liter = V_vals / 1000.0
# 3. Schnittbild und Plot der Integrations-Schleife
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(2, 1, figsize=(10, 8), sharex=True)
# Oberes Diagramm: Fassprofil
ax1.plot(x_vals, r(x_vals), 'brown', lw=2.5, label='Fassdaube r(x)')
ax1.plot(x_vals, -r(x_vals), 'brown', lw=2.5) # Untere Symmetriehälfte
ax1.axvline(x=x_start, color='black', linestyle='--')
ax1.axvline(x=x_end, color='black', linestyle='--')
ax1.fill_between(x_vals, r(x_vals), -r(x_vals),
                 color='bisque', alpha=0.5, label='Weinvolumen')
ax1.set_ylabel('Fassradius / Abmessung (cm)', fontsize=11)
ax1.set_title('RK4-Approx. Volumen Dolia Austriaca mit Parabol-Dauben',
                 fontsize=12, fontweight='bold')
ax1.grid(True, linestyle=':', alpha=0.6)
ax1.legend(loc='upper right')
# Unteres Diagramm: Stand der Approximation (Volumenkurve)
ax2.plot(x_vals, V_liter, 'blue', lw=3, label='Vol.approx. V(x)')
# Markierungspunkte entlang der RK4-Schleife
ax2.scatter(x_vals[::10], V_liter[::10], color='red',
                       zorder=5, label='RK4-Stützstellen-Auswahl')
ax2.set_xlabel('Pos. entlang Längsachse x (cm)', fontsize=11)
ax2.set_ylabel('Volumen kumuliert (Liter)', fontsize=11)
ax2.grid(True, linestyle=':', alpha=0.6)
ax2.legend(loc='lower right')
# Endwert im Diagramm als Text einblenden
final_volume = V_liter[-1]
ax2.annotate(f'Endstand: {final_volume:.2f} Liter',
    xy=(x_end, final_volume), xytext=(20, final_volume - 200),
    arrowprops=dict(facecolor='black', shrink=0.05,
                                width=0.25, headwidth=6))
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Das Matplotlib-Diagramm zeigt wie das Runge-Kutta-Verfahren ”denkt”: Wenn der Programmcode ausgeführt wird, sieht man, wie das Volumen im Bauch des Fasses (nahe $x = 0$) durch den größeren Querschnitt am steilsten ansteigt und sich am Ende bei mathematisch vorhergesagten 515,22 Litern einpendelt. So schliesst sich der Kreis von Keplers Geometrie zur computergestützten Illustration des Runge-Kutta Verfahrens.



Das Aufdecken von Schwachstellen gehört zum Verständnis numerischer Verfahren. Wenn man die Schrittweite bei Runge-Kutta zu groß wählt, fördert man evtl. rechnerisches 'Chaos' zutage. Beim Weinfass (einer glatten Parabel) ist RK4 sichtbar gutmütig, aber die Schwachstelle lässt sich an zwei Phänomenen illustrieren, die bei zu großen Schrittweiten zu 'unangenehmen' Folgen führen: Abschneidefehler (Trunkierung) und Numerische Instabilität (Oszillation oder sogar 'Explosion').

Mit einem kurzen Skript lässt sich die Schwachstelle sichtbar machen. Es vergleicht die exakte Simpson-Lösung mit einer RK4-Integration, bei der wir die Anzahl der Schritte absichtlich auf ein Minimum reduzieren (z.B. nur 2 gigantische Schritte für das ganze Fass), um den Fehler künstlich zu provozieren:

```python
# Dolia_RK4_02.py DOLIA-AUSTRIACA 05-11-26
import numpy as np
def r(x):
    return 40.0 - (10.0 / 3600.0) * (x**2)
def dV_dx(x):
    return np.pi * (r(x)**2)
V_exakt = 515.221
print(f"Exakter Sollwert: {V_exakt:.3f} Liter\n")
print(f"{'Schritte':<10} | {'Schrittweite (cm)':<18} | {'RK4-Ergebnis (L)':<18}
print("-" * 75)
# Erzeugt Zahlen von 2 bis 120
schritt_liste = list(range(2, 121, 20))
for steps in schritt_liste:
    h_step = 120.0 / steps
    x = -60.0
    V = 0.0
    for _ in range(steps):
        k1 = dV_dx(x)
        k2 = dV_dx(x + h_step/2.0)
        k3 = dV_dx(x + h_step/2.0)
        k4 = dV_dx(x + h_step)
        V += (h_step / 6.0) * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4)
        x += h_step
    V_lit = V / 1000.0
    fehler = abs(V_lit - V_exakt)
    print(f"{steps:<10} | {h_step:<18.1f} | {V_lit:<18.3f} | {fehler:<20.3e}")
```

```
= RESTART: C:\SYNC\texlive\tex-editing\UNI\SYSCOP-NOC\NUMCTR\RKK\Dolia_RK4_02.py

Exakter Sollwert: 515.221 Liter

Schritte   | Schrittweite (cm)  | RK4-Ergebnis (L)   | Absoluter Fehler (L)
---------------------------------------------------------------------------
2          | 60.0               | 510.509            | 4.712e+00
22         | 5.5                | 510.195            | 5.026e+00
42         | 2.9                | 510.195            | 5.026e+00
62         | 1.9                | 510.195            | 5.026e+00
82         | 1.5                | 510.195            | 5.026e+00
102        | 1.2                | 510.195            | 5.026e+00
```

Im Screenshot sieht man das erste 'unangenehme' Phänomen per IDLE-Shell. :

- Bei 2 Schritten (Schrittweite 60.0 cm) liegt das Ergebnis bei 510.509 Litern.
- Sobald die Schritte feiner werden (ab 22 Schritten), pendelt sich das RK4-Verfahren stabil bei 510.195 Litern ein.
- Der persistente Unterschied zum theoretischen Sollwert von 515.221 Litern zeigt den verbleibenden Modellierungs-bzw Trunkierungsfehler, wenn man eine kontinuierliche Fasskrümmung rein numerisch über diskrete Stufen approximiert.

AUSZUG AUS "NUMERISCHES RECHNEN" VON C.RUNGE UND H.KÖNIG Springer.Verlag 1924 Seiten 286 bis 298

Jede Gleichung, die neben den unabhängigen Veränderlichen und der Funktion auch noch deren Ableitungen enthält, bezeichnet man als Differentialgleichung. Die Ordnung einer Differentialgleichung ist gleich der Ordnung der höchsten Ableitung, die in der Gleichung auftritt. Hängt die Funktion nur von einer Veränderlichen ab, so spricht man von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Andernfalls kommen in der Gleichung partielle Ableitungen vor. Dann hat man es mit partiellen Differentialgleichungen zu tun.

Die gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung enthält außer der Funktion y und der unabhängigen Veränderlichen x nur noch den Differentialquotienten $y' = \frac{dy}{dx}$. Wir denken uns die Gleichung nach y' aufgelöst und schreiben sie in der Form

$$y' = f(x, y). \tag{1}$$

Geometrisch gesprochen ordnet diese Gleichung jedem Punkte der $x\,y$-Ebene, in dem die rechte Seite definiert ist, eine oder mehrere Richtungen zu. Als Lösungen sind alle die Kurven zu bezeichnen, die in jedem ihrer Punkte die durch die Differentialgleichung vorgeschriebene Richtung besitzen.

Um aus der Schar der Lösungen eine bestimmte herauszugreifen, schreiben wir vor, daß die Kurve durch einen Anfangspunkt mit den Koordinaten x_0, y_0 hindurchgehen soll. Wir gelangen zu einer Reihe weiterer Punkte der Lösungskurve, wenn wir jedesmal x um h wachsen lassen und die zugehörigen Änderungen k von y berechnen. Die numerische Integration der Differentialgleichung führt daher auf die Aufgabe, von einem beliebigen Punkte (x, y) ausgehend die Zunahme k von y zu berechnen, wenn x um den Betrag h wächst.

§ 82. Das Verfahren von Runge-Kutta.

Allgemein können wir von der Taylorschen Reihe ausgehen und die Zunahme von y durch die Entwicklung

$$k = h\frac{dy}{dx} + \frac{h^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{d^4y}{dx^4} + \dots \tag{2}$$

finden. Die einzelnen Differentialquotienten lassen sich nacheinander aus $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ ableiten. Es wird

$$\begin{aligned}
\frac{d^2y}{dx^2} &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}, \\
\frac{d^3y}{dx^3} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) + f\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial f}{\partial y}\right) \\
&= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial y} + f\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2.
\end{aligned}$$

Setzt man die Reihe (2) hinreichend weit fort, so kann k mit beliebiger Genauigkeit berechnet werden. In den meisten Fällen würde die Rechnung allerdings außerordentlich

umständlich werden. Die Differentialquotienten werden mit wachsender Ordnungszahl bald so reich an Gliedern, daß dieses Verfahren praktisch nicht in Frage kommen kann.

Man kann indessen, auf einem anderen Wege vorgehend, sich die vielen Differentiationen ersparen. Wie bei dem Integrationsverfahren von *Gauß* bilden wir k als Mittelwert aus vier mit geeigneten Gewichten R_1, R_2, R_3, R_4 zu versehenden Werten k_1, k_2, k_3, k_4. Diese Werte sollen folgendermaßen bestimmt sein:

$$\begin{cases} k_1 = f(x, y)\, h, \\ k_2 = f(x + \alpha\, h, \quad y + \beta k_1)\, h, \\ k_3 = f(x + \alpha_1\, h, \quad y + \beta_1 k_1 + \gamma_1 k_2)\, h, \\ k_4 = f(x + \alpha_2\, h, \quad y + \beta_2 k_1 + \gamma_2 k_2 + \delta_2 k_3)\, h. \end{cases} \tag{3}$$

Die hierbei auftretenden neun Größen $\alpha, \beta, \ldots \delta_2$ sollen zusammen mit den Gewichten $R_1 \ldots R_4$ so bestimmt werden, daß der Ausdruck

$$k = R_1 k_1 + R_2 k_2 + R_3 k_3 + R_4 k_4 \tag{4}$$

bis zu den Gliedern vierter Ordnung in h einschließlich mit der Entwicklung (2) übereinstimmt.

Wir drücken zunächst die in der Entwicklung (2) auftretenden Differentialquotienten durch die Funktion $f(x, y)$ und ihre partiellen Ableitungen aus. Zur Abkürzung führen wir den Operator

$$D = \frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y}$$

ein. Wenden wir diesen Operator auf eine Funktion $u(x, y)$ an, so ist

$$Du = \frac{\partial u}{\partial x} + f\frac{\partial u}{\partial y}.$$

Aus D gewinnen wir durch formale Anwendung des binomischen Lehrsatzes die weiteren Operatoren:

$$\begin{aligned} D^2 &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2f\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + f^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \\ D^3 &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y}\right)^3 = \frac{\partial^3}{\partial x^3} + 3f\frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial y} + 3f^2\frac{\partial^3}{\partial x \partial y^2} + f^3\frac{\partial^3}{\partial y^3}, \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ D^n &= \left(\frac{\partial}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial y}\right)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} f^k \frac{\partial^n}{\partial x^{n-k} \partial y^k}. \end{aligned}$$

Wendet man den Operator auf die Summe oder das Produkt zweier Funktionen an, so gelten dieselben Regeln wie bei der gewöhnlichen Differentiation. Es ist

$$\begin{aligned} D(u + v) &= Du + Dv, \\ D(uv) &= u\, Dv + v\, Du. \end{aligned}$$

Wendet man schließlich den Operator D auf den Ausdruck $D^n u$ an, so wird

$$D(D^n u) = D^{n+1} u + n\, Df\, D^{n-1} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right).$$

Die einzelnen Differentialquotienten der Entwicklung (2) erhalten wir nun aus dem ersten durch wiederholte Anwendung des Operators D. Es ist daher

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,y), \\ \dfrac{d^2y}{dx^2} = Df, \\ \dfrac{d^3y}{dx^3} = D^2f + f_y\, Df, \\ \dfrac{d^4y}{dx^4} = D^3f + f_y\, D^2f + f_y^2\, Df + 3\, Df\, Df_y. \end{cases} \tag{5}$$

Dabei ist f_y für $\frac{\partial f}{\partial y}$ gesetzt worden.

Um die beiden Ausdrücke (2) und (4) bis zur vierten Potenz von h zur Übereinstimmung zu bringen, entwickeln wir nun auch k_2, k_3, k_4 nach Potenzen von h.

Die Taylor-Entwicklung für zwei Veränderliche lauten allgemein symbolisch

$$f(x+p,\, y+q) = f(x,y) + \left(p\frac{\partial}{\partial x} + q\frac{\partial}{\partial y}\right) f + \frac{1}{2!}\left(p\frac{\partial}{\partial x} + q\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f + \frac{1}{3!}\left(p\frac{\partial}{\partial x} + q\frac{\partial}{\partial y}\right)^3 f + \dots$$

Für die Entwicklung von k_2 führen wir daher den neuen Operator

$$D_1 = \alpha\frac{\partial}{\partial x} + \beta\frac{\partial}{\partial y}$$

ein, denn unter Benutzung des Wertes für k_1 ist

$$\alpha\, h\frac{\partial}{\partial x} + \beta\, k_1\frac{\partial}{\partial y} = h\left(\alpha\frac{\partial}{\partial x} + f\beta\frac{\partial}{\partial y}\right) = h\, D_1.$$

Damit erhalten wir die Entwicklung

$$k_2 = h\left(f + h\, D_1 f + \frac{h^2}{2!}D_1^2 f + \frac{h^3}{3!}D_1^3 f + \dots\right).$$

Weiter führen wir den Operator

$$D_2 = \alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + f(\beta_1 + \gamma_1)\frac{\partial}{\partial y}$$

ein. Setzt man wieder $f\, h$ für k_1 und die soeben gefundene Entwicklung für k_2 ein, so wird der Operator zur Bildung von k_3 gleich

$$h\, D_2 + h^2\gamma_1\left(D_1 f + \frac{h}{2!}D_1^2 f + \dots\right)\frac{\partial}{\partial y}.$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} k_3 = h\Big(& f + h\, D_2 f + \frac{h^2}{2!} D_2^2 f + \frac{h^3}{3!} D_2^3 f + \dots \\ & + h^2 \gamma_1 f_y\, D_1 f + \frac{h^3}{2!} \gamma_1 f_y\, D_1^2 f + \dots \\ & + h^3 \gamma_1\, D_1 f\, D_2 f_y + \dots \Big). \end{aligned}$$

Schließlich führen wir noch den Operator

$$D_3 = \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} + f(\beta_2 + \gamma_2 + \delta_2) \frac{\partial}{\partial y}$$

ein. Dann erhalten wir unter Benutzung der Entwicklungen für k_2 und k_3 zur Entwicklung von k_4 den Operator

$$h\, D_3 + h^2 \left[\gamma_2 \left(D_1 f + \frac{h}{2!} D_1^2 f + \dots \right) + \delta_2 \left(D_2 f + \frac{h}{2!} \left(D_2^2 f + 2\gamma_1 f_y\, D_1 f \right) + \dots \right) \right] \frac{\partial}{\partial y}.$$

Damit wird

$$\begin{aligned} k_4 = h\Big(& f + h\, D_3 f + \frac{h^2}{2!} D_3^2 f + \frac{h^3}{3!} D_3^3 f + \dots + h^2 (\gamma_2\, D_1 f + \delta_2\, D_2 f) f_y \\ & + \frac{h^3}{2!} (\gamma_2\, D_1^2 f + \delta_2\, D_2^2 f + 2\gamma_1 \delta_2 f_y\, D_1 f) f_y + \dots \\ & + h^3 (\gamma_2\, D_1 f + \delta_2\, D_2 f) D_3 f_y + \dots \Big). \end{aligned}$$

Um nun die Größen $\alpha, \alpha_1 \dots \delta_2$ und die Gewichte R_1, R_2, R_3, R_4 zu berechnen, bilden wir wie vorhin den Ausdruck

$$k = R_1 k_1 + R_2 k_2 + R_3 k_3 + R_4 k_4$$

und vergleichen ihn mit der Entwicklung

$$k = h\, f + \frac{h^2}{2!} Df + \frac{h^3}{3!} (D^2 f + f_y\, Df) + \frac{h^4}{4!} (D^3 f + f_y\, D^2 f + f_y^2\, Df + 3\, Df\, Df_y) + \dots,$$

die aus (2) durch Einsetzen der Differentialquotienten (5) gewonnen wird.

Sollen beide Ausdrücke bis zu den Gliedern vierter Ordnung für beliebige Werte von h und beliebige Funktionen $f(x, y)$ übereinstimmen, so müssen nicht nur die Koeffizienten gleicher Potenzen von h einander gleich sein, sondern innerhalb dieser Koeffizienten auch die Teile, die in den partiellen Ableitungen gleich gebildet sind. Die beiden ersten Potenzen liefern je eine Gleichung. Die dritte Potenz liefert jedoch zwei Gleichungen, denn es müssen die Glieder mit D^2 und mit $f_y D$ einzeln übereinstimmen. Die Koeffizienten der vierten Potenz schließlich liefern vier Gleichungen. Dadurch erhalten wir die folgenden

acht Gleichungen:

$$\begin{aligned}
R_1 + R_2 \quad + R_3 \qquad\quad & + R_4 & &= 1,\\
R_2 D_1 f + R_3 D_2 f \qquad & + R_4 D_3 f & &= \frac{1}{2!} D f,\\
R_2 D_1^2 f + R_3 D_2^2 f \qquad & + R_4 D_3^2 f & &= \frac{2!}{3!} D^2 f,\\
R_2 D_1^3 f + R_3 D_2^3 f \qquad & + R_4 D_3^3 f & &= \frac{3!}{4!} D^3 f,\\
R_3 \gamma_1 D_1 f \qquad & + R_4(\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f) & &= \frac{1}{3!} D f,\\
R_3 \gamma_1 D_1^2 f \qquad & + R_4(\gamma_2 D_1^2 f + \delta_2 D_2^2 f) & &= \frac{2!}{4!} D^2 f,\\
R_3 \gamma_1 D_1 f \, D_2 f_y \quad & + R_4(\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f) D_3 f_y & &= \frac{3}{4!} D f \, D f_y,\\
& R_4 \gamma_1 \delta_2 D_1 f \cdot f_y & &= \frac{1}{4!} D f \cdot f_y.
\end{aligned}$$

Die acht Gleichungen müssen nun in sämtlichen einzelnen Ableitungen der Operatoren D, D_1, D_2, D_3 übereinstimmen. Das ist nur möglich, wenn

$$\begin{cases} \alpha = \beta \\ \alpha_1 = \beta_1 + \gamma_1 \\ \alpha_2 = \beta_2 + \gamma_2 + \delta_2 \end{cases} \tag{6}$$

ist. Dann wird

$$\begin{aligned} D_1 &= \alpha \, D, \\ D_2 &= \alpha_1 \, D, \\ D_3 &= \alpha_2 \, D, \end{aligned}$$

und man erkennt, dass sich die Operatoren aus den Gleichungen herausheben. Damit werden die Gleichungen unabhängig von der speziellen
Form der Funktion $f(x, y)$. Nach Streichung der Operatoren D erhalten wir die Gleichungen:

$$\begin{cases} R_1 + R_2 \quad + R_3 & +R_4 & = 1, \\ R_2\alpha + R_3\alpha_1 & +R_4\alpha_2 & = \dfrac{1}{2}, \\ R_2\alpha^2 + R_3\alpha_1^2 & +R_4\alpha_2^2 & = \dfrac{1}{3}, \\ R_2\alpha^3 + R_3\alpha_1^3 & +R_4\alpha_2^3 & = \dfrac{1}{4}, \\ R_3\alpha\gamma_1 & +R_4(\alpha\gamma_2 + \alpha_1\delta_2) & = \dfrac{1}{6}, \\ R_3\alpha^2\gamma_1 & +R_4(\alpha^2\gamma_2 + \alpha_1^2\delta_2) & = \dfrac{1}{12}, \\ R_3\alpha\alpha_1\gamma_1 & +R_4\alpha_2(\alpha\gamma_2 + \alpha_1\delta_2) & = \dfrac{1}{8}, \\ & R_4\alpha\gamma_1\delta_2 & = \dfrac{1}{24}. \end{cases} \tag{7}$$

Aus der zweiten, dritten und vierten Gleichung eliminieren wir R_2 und R_4, indem wir die zweite Gleichung mit $\alpha\alpha_2$, die dritte mit $-(\alpha + \alpha_2)$ multiplizieren. Die Summe der drei Gleichungen ergibt dann

$$R_3\alpha_1(\alpha - \alpha_1)(\alpha_2 - \alpha_1) = \frac{\alpha\alpha_2}{2} - \frac{\alpha + \alpha_2}{3} + \frac{1}{4}. \tag{8}$$

Aus der fünften und siebenten Gleichung eliminieren wir R_4 und erhalten

$$R_3\alpha\gamma_1(\alpha_2 - \alpha_1) = \frac{\alpha_2}{6} - \frac{1}{8}. \tag{9}$$

Schließlich eliminieren wir noch R_3 aus der fünften und sechsten Gleichung:

$$R_4\alpha_1\delta_2(\alpha_1 - \alpha) = \frac{1}{12} - \frac{\alpha}{6}.$$

Daraus ergibt sich zusammen mit der achten Gleichung:

$$\alpha\gamma_1 = \frac{\alpha_1(\alpha_1 - \alpha)}{2(1 - 2\alpha)}.$$

Setzen wir diesen Wert in (9) ein, so folgt

$$\frac{R_3 \cdot \alpha_1(\alpha - \alpha_1)(\alpha_2 - \alpha_1)}{2(2\alpha - 1)} = \frac{\alpha_2}{6} - \frac{1}{8}. \tag{10}$$

Die Gleichungen (8) und (10) ergeben jetzt

$$\frac{\alpha\alpha_2}{2} - \frac{\alpha + \alpha_2}{3} + \frac{1}{4} = \left(\frac{\alpha_2}{6} - \frac{1}{8}\right) 2(2\alpha - 1)$$

oder

$$\alpha\alpha_2 = \alpha,$$
$$\alpha(\alpha_2 - 1) = 0.$$

Da nach der achten Gleichung α nicht verschwinden kann, so ist

$$\alpha_2 = 1. \tag{11}$$

Die zweite, dritte und vierte der Gleichungen (7) können nach R_2, R_3 und R_4 aufgelöst werden, vorausgesetzt, dass die Determinante

$$\begin{vmatrix} \alpha & \alpha_1 & \alpha_2 \\ \alpha^2 & \alpha_1^2 & \alpha_2^2 \\ \alpha^3 & \alpha_1^3 & \alpha_2^3 \end{vmatrix} = \alpha\,\alpha_1\,\alpha_2\,(\alpha - \alpha_1)(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha) \tag{12}$$

nicht verschwindet. Zusammen mit der ersten Gleichung ergeben sie mit dem Werte $\alpha_2 = 1$:

$$\begin{cases} R_1 = \dfrac{1}{2} + \dfrac{1}{12} \cdot \dfrac{1 - 2(\alpha + \alpha_1)}{\alpha\,\alpha_1}, \\ R_2 = \dfrac{1}{12} \cdot \dfrac{2\alpha_1 - 1}{\alpha\,(\alpha_1 - \alpha)(1 - \alpha)}, \end{cases} \qquad \begin{cases} R_3 = \dfrac{1}{12} \cdot \dfrac{1 - 2\alpha}{\alpha_1\,(\alpha_1 - \alpha)(1 - \alpha_1)}, \\ R_4 = \dfrac{1}{2} + \dfrac{1}{12} \cdot \dfrac{2(\alpha + \alpha_1) - 3}{(1 - \alpha)(1 - \alpha_1)}. \end{cases} \tag{13}$$

Die beiden Größen α und α_1 bleiben unbestimmt, denn die noch fehlenden Unbekannten γ_1, γ_2, δ_2 können aus den drei folgenden Gleichungen durch α und α_1 ausgedrückt werden, vorausgesetzt, dass auch ihre Determinante

$$\begin{vmatrix} R_3\,\alpha & R_4\,\alpha & R_4\,\alpha_1 \\ R_3\,\alpha^2 & R_4\,\alpha^2 & R_4\,\alpha_1^2 \\ R_3\,\alpha\,\alpha_1 & R_4\,\alpha\,\alpha_2 & R_4\,\alpha_1\,\alpha_2 \end{vmatrix} = R_3\,R_4^2\,\alpha^2\,\alpha_1\,(\alpha_1 - \alpha)(\alpha_1 - \alpha_2) \tag{14}$$

nicht verschwindet. Wir finden

$$\begin{cases} \gamma_1 = \dfrac{\alpha_1(\alpha_1 - \alpha)}{2\alpha(1 - 2\alpha)}, \\ \gamma_2 = \dfrac{1 - \alpha}{2\alpha(\alpha_1 - \alpha)} \cdot \dfrac{\alpha + \alpha_1 - 1 - (2\alpha_1 - 1)^2}{6\alpha\,\alpha_1 - 4(\alpha + \alpha_1) + 3}, \\ \delta_2 = \dfrac{1 - 2\alpha}{\alpha_1(\alpha_1 - \alpha)} \cdot \dfrac{(1 - \alpha)(1 - \alpha_1)}{6\alpha\,\alpha_1 - 4(\alpha + \alpha_1) + 3}. \end{cases} \tag{15}$$

Aus den Gleichungen (6) ergeben sich schließlich β, β_1 und β_2. Wir erhalten demnach eine zweifach unendliche Mannigfaltigkeit von Lösungen, aus der wir einzelne Lösungen nach bestimmten Gesichtspunkten herausgreifen können.

Um eine symmetrische Lösung zu erhalten, können wir beispielsweise vorschreiben, dass

$$R_1 = R_4 \quad \text{und} \quad R_2 = R_3$$

ist. Diese Bedingungen sind erfüllt, wenn

$$\alpha + \alpha_1 = 1$$

ist. Dann nehmen die Gleichungen (13) und (15) die einfache Form an:

$$\begin{cases} 12R_1 = 12R_4 = 6 - \dfrac{1}{\alpha\,\alpha_1}, & \alpha + \alpha_1 = 1, \\ 12R_2 = 12R_3 = \dfrac{1}{\alpha\,\alpha_1}, & \alpha_2 = 1, \\ \gamma_1 = \dfrac{\alpha_1}{2\alpha}, & \delta_2 = \dfrac{\alpha}{6\alpha\,\alpha_1 - 1}. \\ \gamma_2 = -\dfrac{\alpha_1}{2\alpha} \cdot \dfrac{\alpha_1 - \alpha}{6\alpha\,\alpha_1 - 1}, & \end{cases} \tag{16}$$

Sollen die Abszissen gleichmäßig über das Intervall von x bis $x+h$ verteilt sein, dann müssen wir

$$\alpha = \frac{1}{3}, \quad \alpha_1 = \frac{2}{3}$$

setzen. Wir erhalten die Lösung:

$$\begin{array}{llllll} R_1 = \frac{1}{8}, & & & & & \\ R_2 = \frac{3}{8}, & \alpha = \frac{1}{3}, & \beta = \frac{1}{3}, & & & \\ R_3 = \frac{3}{8}, & \alpha_1 = \frac{2}{3}, & \beta_1 = -\frac{1}{3}, & \gamma_1 = 1, & & \\ R_4 = \frac{1}{8}, & \alpha_2 = 1, & \beta_2 = 1, & \gamma_2 = -1, & \delta_2 = 1. \end{array}$$

Zu einer besonders bequemen Lösung gelangt man, wenn man

$$\alpha = \alpha_1$$

annimmt. Dann verschwinden die Größen β, β_2 und γ_2, und es wird

$$\begin{array}{llllll} R_1 = \frac{1}{6}, & & & & & \\ R_2 = \frac{1}{3}, & \alpha = \frac{1}{2}, & \beta = \frac{1}{2}, & & & \\ R_3 = \frac{1}{3}, & \alpha_1 = \frac{1}{2}, & \beta_1 = 0, & \gamma_1 = \frac{1}{2}, & & \\ R_4 = \frac{1}{6}, & \alpha_2 = 1, & \beta_2 = 0, & \gamma_2 = 0, & \delta_2 = 1. \end{array} \tag{17}$$

Betrachtet man die Fälle, in denen die Determinanten (12) und (14) und verschwinden, so ergeben sich endliche Lösungen nur in den drei Fällen:

1. $\alpha = \alpha_1$,
2. $\alpha = \alpha_2 = 1$,
3. $\alpha_1 = 0$.

Jedesmal bleibt eins der Gewichte unbestimmt, und zwar kann im ersten Fall R_3, im zweiten R_2 und im dritten R_1 willkürlich gewählt werden. In jedem Falle sind jedoch die Werte $R_3 = 0$ und $R_4 = 0$ auszuschließen. Setzt man im ersten Falle $R_2 = R_3$, so gelangt man wieder zu der Lösung (17).

In den beiden anderen Fällen kann eins der Gewichte zum Verschwinden gebracht werden. Setzt man im zweiten Falle $R_2 = 0$, so ergibt sich:

$$\begin{array}{llllll} R_1 = \frac{1}{6}, & & & & & \\ R_2 = 0, & \alpha = 1, & \beta = 1, & & & \\ R_3 = \frac{2}{3}, & \alpha_1 = \frac{1}{2}, & \beta_1 = \frac{1}{8}, & \gamma_1 = \frac{3}{8}, & & \\ R_4 = \frac{1}{6}, & \alpha_2 = 1, & \beta_2 = -\frac{1}{2}, & \gamma_2 = -\frac{1}{2}, & \delta_2 = 2. \end{array}$$

Der dritte Fall liefert für $R_1 = 0$ die Lösung:

$$\begin{array}{llllll} R_1 = 0, & & & & & \\ R_2 = \frac{3}{8}, & \alpha = \frac{1}{2}, & \beta = \frac{1}{2}, & & & \\ R_3 = \frac{1}{2}, & \alpha_1 = 0, & \beta_1 = -\frac{1}{2}, & \gamma_1 = \frac{1}{2}, & & \\ R_4 = \frac{1}{8}, & \alpha_2 = 1, & \beta_2 = -\frac{1}{2}, & \gamma_2 = \frac{3}{8}, & \delta_2 = 1. \end{array}$$

Die Größe k_1 muß natürlich auf jeden Fall berechnet werden, wenn auch das entsprechende Gewicht verschwindet. Höchstens könnte die Genauigkeit ein wenig geringer sein. Dieser Vorteil bedeutet jedoch so wenig gegenüber der bequemen Gestalt der Lösung (17), daß wir dieser Lösung fernerhin den Vorzug geben werden.

Die vier Größen k_1, k_2, k_3, k_4 sind nach (17) folgendermaßen bestimmt:

$$\begin{cases} k_1 = f(x, y)\, h, \\ k_2 = f\left(x + \dfrac{h}{2},\ y + \dfrac{k_1}{2}\right) h, \\ k_3 = f\left(x + \dfrac{h}{2},\ y + \dfrac{k_2}{2}\right) h, \\ k_4 = f(x + h,\ y + k_3)\, h. \end{cases} \tag{18}$$

Aus ihnen erhalten wir den Zuwachs

$$k = \tfrac{1}{6}k_1 + \tfrac{1}{3}k_2 + \tfrac{1}{3}k_3 + \tfrac{1}{6}k_4$$

bis auf Glieder fünfter Ordnung in h.

Den Fehler des Verfahrens könnte man durch Berechnung der Glieder fünfter Ordnung abschätzen. Bedeutend bequemer ist es jedoch, das Verfahren ein zweites Mal mit doppelter Intervallbreite anzuwenden. Der Fehler der ersten Berechnung beträgt dann etwa $\frac{1}{15}$ des Unterschiedes beider Resultate.

Trägt man die Lösungen (13) in die Reihenentwicklungen für k_2 und k_3 ein, dann wird

$$k_2 = h\left[f + \frac{h}{2}Df + \frac{h^2}{8}D^2 f + \frac{h^3}{48}D^3 f + \dots\right],$$

$$k_3 = h\left[f + \frac{h}{2}Df + \frac{h^2}{8}(D^2 f + 2f_y\, Df) + \frac{h^3}{48}(D^3 f + 3f_y\, D^2 f + 6\, Df\, Df_y) + \dots\right]$$

und es folgt

$$k_2 - k_1 = \frac{h^2}{2}\left[Df + \frac{h}{4}D^2f + \frac{h^2}{24}D^3f + \dots\right],$$

$$k_3 - k_2 = \frac{h^3}{4}\left[f_y\,Df + \frac{h}{4}f_y\,D^2f + \frac{h}{2}Df\,Df_y + \dots\right].$$

Durch Division erhält man bis auf Glieder dritter Ordnung

$$\frac{k_3 - k_2}{k_2 - k_1} = \frac{h}{2}\left(f_y + \frac{h}{2}Df_y + \dots\right) = \frac{h}{2}f_y\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_1}{2}\right).$$

Da $k_2 - k_1$ von zweiter Ordnung in h ist, so ergibt sich bis auf Glieder fünfter Ordnung die Beziehung

$$k_3 = k_2 + \frac{h}{2}(k_2 - k_1)f_y\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_1}{2}\right). \tag{19}$$

Von dieser Formel zur Berechnung von k_3 wird man zweckmäßig Gebrauch machen, wenn f_y leicht gebildet werden kann. Da $\frac{h}{2}(k_2 - k_1)$ von dritter Ordnung ist, braucht man $f_y\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_1}{2}\right)$ nur bis auf Glieder erster Ordnung genau zu berechnen.

Ist die rechte Seite der Differentialgleichung frei von y, so führen die Formeln (18) auf die Simpsonsche Regel. Denn aus der Gleichung

$$y' = f(x)$$

erhält man das Integral:

$$k = \int_0^h f(x)\,dx = \frac{h}{6}\left[f(x) + 4f\left(x + \frac{h}{2}\right) + f(x+h)\right].$$

Bei der praktischen Ausführung wollen wir die Rechnung in folgender Form anordnen:

$\underline{h = \dots}$

x	y	$f(x,y)$	$k = h \cdot f$	(k)
x	y	$f(x,y)$	k_1	$\frac{1}{2}(k_1 + k_4)$
$x + \frac{h}{2}$	$y + \frac{k_1}{2}$	$f\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_1}{2}\right)$	k_2	$k_2 + k_3$
$x + \frac{h}{2}$	$y + \frac{k_2}{2}$	$f\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_2}{2}\right)$	k_3	Summe
$x + h$	$y + k_3$	$f(x + h,\ y + k_3)$	k_4	$k = \frac{1}{3} \cdot$ Summe
$x + h$	$y + k$			

Zwischen die zweite und dritte Spalte werden nach Bedarf weitere Spalten für die Berechnung von $f(x,y)$ eingeschaltet. Um die Abrundungsfehler möglichst niedrig zu halten, wird man gerne ein bis zwei Dezimalen mehr mitnehmen, als für das Resultat erforderlich ist.

Beispiel: Die Differentialgleichung

$$y' = \frac{1}{10}y^2 - xy$$

ist für die Anfangswerte $x_0 = 0, y_0 = 1$ zu integrieren.

Als Intervallbreite wählen wir $h = 0{,}2$. Nach dem oben aufgestellten Schema ergibt sich folgende Rechnung:

$h = 0{,}2$

x	y	$f(x,y)$	$k = h \cdot f$	(k)
0	1	01	002	0000 000
01	101	0001 010	0000 202	0000 204
01	1000 101	0000 010	0000 002	0000 204
02	1000 002	−0100000	−0020000	−0000068
02	1000 068	−0100000	−0020000	−0039194
03	0990 068	−0198997	−0039799	−0079395
03	0980 168	−0197977	−0039595	−0118589
04	0960 472	−0291938	−0058388	−0039530
04	0960 538	−0291952	−0058390	−0074476
05	0931 343	−0378932	−0075786	−0151025
05	0922 645	−0376195	−0075239	−0225501
06	0885 299	−0452804	−0090561	−0075167
06	0885 371	−0452834	−0090567	−0101764
07	0840 088	−0517487	−0103497	−0206306
07	0833 622	−0514043	−0102809	−0308070
08	0782 562	−0564809	−0112962	−0102690
08	0782 681	−0564886	−0112977	−0118398
09	0726 192	−0600837	−0120167	−0239792
09	0722 597	−0598123	−0119625	−0358190
10	0663 056	−0619092	−0123818	−0119397
10	0663 284	−0619289	−0123858	−0123631
11	0601 355	−0625328	−0125066	−0250013
11	0600 751	−0624736	−0124947	−0373644
12	0538 337	−0617024	−0124947	−0124548
12	0538 736			

Um den Fehler abschätzen zu können und um gleichzeitig eine Kontrolle zu besitzen, führen wir die Rechnung noch einmal mit doppelter Intervallbreite durch:

$h = 0{,}4$

x	y	$f(x,y)$	k	(k)
0	1	01	004	−0038369
02	102	−0099960	−0039984	−0079968
02	0980 008	−0099960	−0039984	−0118337
04	0960 016	−0291843	−0116737	−0039446
04	0960 554	−0291955	−0116782	−0171316
06	0902 163	−0459908	−0183963	−0362244
06	0868 572	−0445701	−0178281	−0533560
08	0782 273	−0564623	−0225849	−0177853
08	0782 701	−0564899	−0225960	−0236074
10	0669 721	−0624868	−0249947	−0495734
10	0657 727	−0614467	−0245787	−0731808
12	0536 914	−0615469	−0246188	−0243936
12	0538 765			

An der Stelle $x = 1{,}2$ beträgt der Unterschied beider Lösungen 29 Einheiten der letzten Stelle. Der Fehler der ersten Lösung ist daher an dieser Stelle etwa gleich 2 Einheiten der sechsten Dezimale.

Die Differentialgleichung

$$y' = \frac{1}{10}y^2 - xy$$

läßt sich auch in geschlossener Form lösen. Für die gegebenen Anfangswerte ist

$$y = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{1 - \frac{\sqrt{2}}{10}\int_0^{\frac{x}{\sqrt{2}}} e^{-t^2}\,dt}. \tag{20}$$

Daraus können durch Reihenentwicklungen leicht genauere Werte berechnet werden. Als Resultat erhalten wir:

x	y	Fehler etwa	genauerer Wert
0,2	1,000 068		
0,4	0,960 538	1	0,960 5374
0,6	0,885 371		
0,8	0,782 681	1	0,782 6798
1,0	0,663 284		
1,2	0,538 736	2	0,538 7334

Sollte im Laufe der Rechnung ein kleiner Fehler unterlaufen sein, so ist es durchaus nicht nötig, die ganze Rechnung von der fehlerhaften Stelle an zu wiederholen. Man kann vielmehr durch eine einfache Rechnung, vorausgesetzt, daß es sich wirklich nur um einen kleinen Fehler handelt, den Einfluß des Fehlers auf die späteren Werte ermitteln.

Hat man etwa an einer Stelle statt des richtigen Funktionswertes y fälschlich den Wert $\overline{y} = y + \delta$ gebildet, so ist daraus irrtümlich $\overline{k}_1 = f(x,\, y + \delta)\, h$ berechnet worden. Für hinreichend kleine Fehler kann man diesen Ausdruck entwickeln und nach dem ersten Gliede abbrechen:

$$\overline{k}_1 = h\,(f(x, y) + \delta f_y) = k_1 + h\delta f_y.$$

Weiter ist dann

$$\begin{aligned}
\overline{k}_2 &= f\left(x + \frac{h}{2},\ y + \delta + \frac{\overline{k}_1}{2}\right) h \\
&= f\left(x + \frac{h}{2},\ y + \frac{k_1}{2}\right) h + h\delta f_y = k_2 + h\delta f_y, \\
\overline{k}_3 &= k_3 + h\delta f_y, \\
\overline{k}_4 &= k_4 + h\delta f_y.
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich

$$\overline{k} = k + h\delta f_y,$$

und damit wird

$$\overline{y} + \overline{k} = y + k + \delta(1 + h f_y).$$

An Stelle des Wertes $\overline{y} + \overline{k}$ ist also der richtige Wert

$$y + k = \overline{y} + \overline{k} - \delta(1 + h f_y) \tag{21}$$

zu setzen. Man bildet für alle auf die fehlerhafte Stelle folgenden Werte den Ausdruck $1 + h f_y$; durch Multiplikation mit δ erhält man schrittweise aus einer Korrektur die folgende.

Man kann diese Rechnung auch dazu benutzen, um abzuschätzen, wie stark ein Abrundungsfehler, der eine halbe Einheit der letzten Stelle ausmacht, die folgenden Werte beeinflußt.

Beispiel: Für die oben aufgelöste Differentialgleichung ist

$$f_y = \tfrac{1}{5}y - x.$$

An der Stelle $x = 0{,}2$ kann der Abrundungsfehler eine halbe Einheit der letzten Stelle betragen. Dieser Fehler pflanzt sich durch die Rechnung fort, und bei jedem Schritt kann außerdem ein weiterer Abrundungsfehler hinzutreten. Den höchstens möglichen Abrundungsfehler erhalten wir durch folgende Rechnung:

x	y	$1 + h f_y$	Abrundungsfehler
0,2	1,00	1,00	0,5
0,4	0,96	0,96	1,0
0,6	0,89	0,92	1,5
0,8	0,78	0,87	1,8
1,0	0,66	0,83	2,1
1,2			2,2

Der Abrundungsfehler beträgt danach für $x = 1{,}2$ ungünstigenfalls etwa zwei Einheiten der sechsten Dezimale.

Man könnte versuchen, die Genauigkeit weiter als bis zu den Gliedern vierter Ordnung zu treiben. Es zeigt sich jedoch, daß sich die Formeln nicht so wählen lassen, daß *sämtliche* Glieder fünfter Ordnung richtig dargestellt werden. Wohl aber können einzelne dieser Glieder zwischen den Ausdrücken (2) und (4) zur Übereinstimmung gebracht werden. Wenn die rechte Seite der Differentialgleichung y nur schwach enthält, dann kann man in den Gliedern fünfter Ordnung alle die Ausdrücke vernachlässigen, die f_y enthalten. Unter dieser Voraussetzung läßt sich eine Lösung so wählen, daß neben den Gliedern fünfter Ordnung sogar noch die Glieder sechster Ordnung richtig wiedergegeben werden.