

Vorlesungsreihe Simulation betrieblicher Prozesse

Simulation von kontinuierlichen Modellen

Prof. Dr.-Ing. Thomas Wiedemann
email: wiedem@informatik.htw-dresden.de



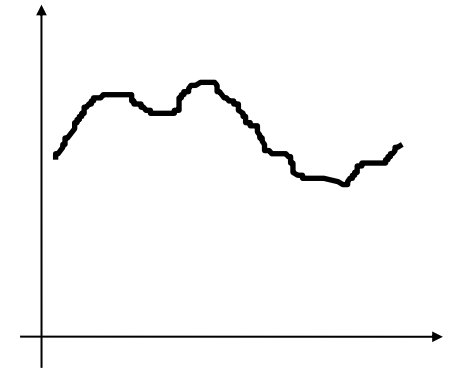
HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN (FH)
Fachbereich Informatik/Mathematik

Simulation von kontinuierlichen Modellen

- Einführung
- Historische Entwicklung am Beispiel der Analogrechen-technik
- Mathematische Beschreibung kontinuierlicher Modelle
- Numerische Lösung von Differentialgleichungssystemen
 - Verfahren nach Euler
 - Fehlerbetrachtungen
 - Weitere Verfahren
 - Spezielle Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungen
- Software für die kontinuierliche Simulation

Grundprinzip

- Bei der Klassifizierung der Simulationsmodelle nach der Art des Zustandsüberganges der Systemparameter wurde zwischen kontinuierlichen und diskontinuierlichen (diskreten) Systemen unterschieden.
- Falls mindestens ein zu analysierender Parameter seinen Wert kontinuierlich, das heißt nicht sprunghaft ändert, kommt die kontinuierliche oder bei gleichzeitigem Vorliegen diskontinuierlicher Übergänge auch die Hybridsimulation zum Einsatz.
- In einigen Fällen kann es technischen Gründen auch zu einer kontinuierlichen Simulation kommen, obwohl die obigen Bedingungen nicht zutreffen:
 - Sehr große Anzahl von Objekten (z.B. Bevölkerung eines Landes / große Anzahl von Lagerobjekten)
 - Börsenkurse im Kontext der Volkswirtschaft als stetige Größe



Entstehung der kontinuierlichen Simulation

Erste Simulationsuntersuchungen mit **Analogrechnern ab den 40iger Jahren**

- **Ausnutzung der Analogie zwischen elektrischen Signalen und anderen technischen Prozessen (Hydraulik, Pneumatik, Mechanik ...)**

Analogrechner

- verfügten über hardwaretechnisch realisierte Baugruppen zum Addieren, Multiplizieren, Integrieren und Differenzieren von Spannungssignalen
- durch die Nachbildung der Modellparameter mittels der Baugruppenparameter (wie Verstärkungskoeffizient, Abschwächung oder Multiplikationsfaktor) konnte das dynamische Verhalten des Systems abgebildet und simuliert werden
- Ergebnisausgabe erfolgte auf Plottern und Oszillographen.

Anwendungen:

- Flugbahnberechnung von Raketen und Geschossen
- Schwingungsanalysen
- Strömungsprobleme in Gasen und Flüssigkeiten
- Temperaturverteilung in Objekten

Analogrechner im Vergleich zu digitaler Rechentechnik

Modellaufbau und Modelleigenschaften:

- manuell durch elektronische Bauelemente (analog zu Softwarekomponenten)
- relativ billig im Vergleich zur damaligen digitalen Rechentechnik
- Probleme mit Temperaturstabilität und Langzeitstabilität (Alterung)

Durchführung der Berechnung (Simulation)

- Anlegen von Eingangssignalen mit begrenzter Genauigkeit
- Probleme mit Grenzfrequenzen der Bauteile (maximal möglich: Schwingungsuntersuchungen im MHz-Bereich, darüber parasitäre Effekte und Überlagerungen)
- Sehr steile Sprünge oder Unstetigkeiten schwierig modellierbar
- **Vorteil gegenüber Digitalrechner: echt kontinuierlicher, unendlich dichter Werteverlauf, bei Bedarf auch in Echtzeit innerhalb von Schaltungen**
- **Hauptnachteile: begrenzte Reproduzierbarkeit und Genauigkeit**

Heutiger Einsatz

- nur noch sehr spezielle Fälle, vor allem im technischen Bereich
- ansonsten befindet sich die Analogrechentechnik im Museum

Mathematische Beschreibung von kontinuierlichen Modellen

- statt der direkten Nachbildung mit Bauelementen werden zur Berechnung kontinuierlicher Modelle auf Digitalrechnern entsprechende mathematische Beschreibungen verwendet
 - universeller Ansatz für beliebige Systeme
 - Keine Probleme mit Langzeitstabilität oder Reproduzierbarkeit
- Nachteil: keine echte kontinuierliche Nachbildung, da alle Eigenschaften auf wert- und zeitdiskrete Zustände im Rechner zurückgeführt werden müssen

Grundlegender Ansatz :

- Definition von Zustandsvariablen (aus Systemanalyse)
- Beschreibung der Relationen zwischen den Variablen durch
 - lineare Abhängigkeiten der Form $y=a*x +b$
 - nichtlineare Abhängigkeiten der Art mit $y=f(x)$
 - **lineare Differentialgleichungen der Form $dx/dt = f(x,y,t)$**
 - **beliebige Differentialgleichungen n-ter Ordnung**

Im allgemeinen Fall treten mehrdimensionale **Systeme** dieser Gleichungen auf.

- Lineare und nichtlineare Abhängigkeiten der Art $y=f(x)$ beschreiben Wechselwirkungen ohne Verzögerung

- Jede Änderung der Eingangsvariablen x führt in der Regel sofort zu einer Änderung der Ausgangsvariablen y

Beispiel:

- Relation : aktueller Umsatz, aktueller Gewinn
- Relation : Mitarbeiteranzahl, Produktionsausstoß

- Differential- oder Integralgleichungen beschreiben Wechselwirkungen mit Verzögerung

Beispiele:

- Monatumsatz = Summe (Tagesumsätze) , Monatsgewinn
- Arbeitsmarktpolitik, Kaufkraft
- Personalpolitik, Firmenbilanz

Lösung von Differentialgleichungssystemen

- Im Ergebnis der Modellierung können bei Vorliegen komplexer Abhängigkeiten Systeme von Differentialgleichungen n -ter Ordnung auftreten.
- Nur in sehr speziellen Fällen lassen sich rein analytische Lösungen für die aufgestellten Gleichungen finden.
- Dies ist auch in der Regel der Fall, wenn einzelne Komponenten des Gleichungssystems empirische Wertetabellen oder entsprechend approximierte Funktionen enthalten
- Auch die Lösung von Integralen ist häufig nicht direkt möglich. Bekannt ist z.B. nicht der Verlauf der Zustandsvariablen als Funktion der Zeit, sondern nur deren Änderung in Abhängigkeit von anderen Größen.
- Es verbleibt als Lösungsoption meist allein die numerische Lösung des Differentialgleichungssystems.
 - Es existieren eine ganze Reihe von Verfahren in der Mathematik.
 - Zum besseren Verständnis soll mit der einfachsten Methode von Euler begonnen werden.
 - Andere Verfahren sind in ähnlicher Weise anwendbar.

Numerische Lösung einer Differentialgleichung nach Euler

- Bei der Vorgehensweise nach Euler geht man von der Differentialgleichung durch eine Approximation zur Differenzengleichung über.

- Bei einer gegebenen Differentialgleichung

$$dx / dt = f(x,t)$$

gilt $(x(t+dt) - x(t)) / dt = f(x,t)$

und damit $x(t+dt) = x(t) + f(x,t)dt$

- Aus der letzten Gleichung gelangt man per Einschrittverfahren nach Euler durch Ersetzen von dt durch Δt zur Differenzengleichung

$$x(t+\Delta t) = x(t) + f(x,t) \Delta t \quad (\text{Gl. 1})$$

- Diese besagt, dass sich der neue Wert für x aus dem bisherigen Wert und dem Zuwachs multipliziert mit dem Zeitintervall Δt berechnen lässt. Der Zuwachs ist dabei mit $f(x,t)$ gegeben.

Iterationsformel nach Euler

- Gleichung 1 bildet die Basis für die numerische Lösung der Differentialgleichung

- Berechnung erfolgt durch schrittweise Iteration mit :

$$\mathbf{x}(n+1) = \mathbf{x}(n) + \mathbf{f}(\mathbf{x}(n), t(n)) * \Delta t$$

- Bei konstantem Δt gilt $t(n) = n * \Delta t$ und damit

$$\mathbf{x}(n+1) = \mathbf{x}(n) + \mathbf{f}(\mathbf{x}(n), n * \Delta t) * \Delta t$$

- Von großer Bedeutung für Lösung ist die Festlegung des Startwertes $x(0)$!
- Allgemein existiert eine Schar von Lösungen für verschiedene $x(0)$!
- Sinnvolle oder gültige Startwerte können durch explizite Kenntnis oder Annahmen zum System oder auch durch zufälliges Festlegen und Ausprobieren definiert werden.

Eigenschaften der Lösungsmenge

Durch die iterative Berechnung der Funktion $x(t)$ ergeben sich folgenden Besonderheiten:

- Der Funktionsverlauf für $x(t)$ liegt nur an diskreten Stützstellen, in von Δt abhängigen Intervallen, als Wertetabelle vor. Werte zwischen zwei Stützstellen sind unbekannt.
- Durch den vorgegebenen Anfangszustand wird nur eine Lösung für die Differentialgleichung bestimmt. Informationen zur Lösungsgesamtheit der Differentialgleichung liegen nicht vor.
- Durch die Approximation der Differentialgleichung mit der Differenzengleichung entsteht ein Fehler, welcher stark von der Größe des Zeitintervalles Δt abhängt.
- Zusätzliche Fehler ergeben sich durch Rundungsfehler während der numerischen Berechnung im Computer.
- Bei der Interpretation der Lösungen sind diese Eigenschaften zu beachten.

Lösung von linearen Differentialgleichungssystemen

- Es läßt sich mathematisch zeigen, daß lineare Differentialgleichungen n.-Ordnung auf ein System von linearen Differentialgleichungen überführt werden können :
- Bsp.: $y''(x) = f(x, y(x), y'(x))$ läßt sich durch Substitution von $y_s(x) = y'(x)$ umwandeln in ein System linearer DGL erster Ordnung

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

$$y'(x) = y_s(x)$$

- Dadurch treten bei der Modellierung häufig Systeme von linearen Differentialgleichungen mit folgender Struktur auf :

$$y'_1 = a_{11} y_1 + a_{12} y_2 + \dots + a_{1n} y_n + f_1(t)$$

$$y'_2 = a_{21} y_1 + a_{22} y_2 + \dots + a_{2n} y_n + f_2(t)$$

.....

$$y'_n = a_{n1} y_1 + a_{n2} y_2 + \dots + a_{nn} y_n + f_n(t)$$

- Als Lösung dieses Systems bezeichnet man die Funktion

$$y_1 = y_1(t), y_2 = y_2(t), \dots, y_n = y_n(t)$$

welche zu sämtlichen Zeiten t alle Gleichungen erfüllt.

- Die Berechnung erfolgt durch parallele Anwendung des Berechnungsverfahrens auf alle Gleichungen des Systems.

Typische Lösungsmengen linearer Differentialgl.-systeme

- Im Sonderfall der hier betrachteten linearen Differentialgleichungen läßt sich mathematisch nachweisen, daß die gesuchte Lösung aus folgenden Teilfunktionen oder deren Kombination bestehen kann:

$$y_1 = c_1 e^{(a t + b)}$$

Exponentialfunktion, charakteristisch für wachsende oder abklingende Systemzustände

$$y_2 = c_2 \sin(a_2 t + b_2)$$

Trigonometrische Funktionen mit Phasenversatz, charakteristisch für Schwingungsfunktionen

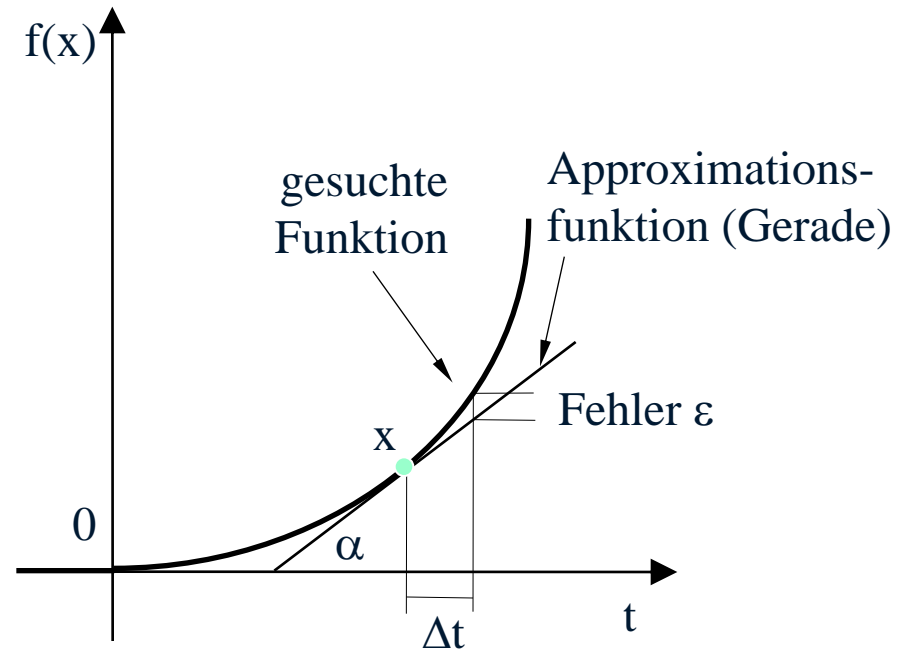
- **Bei vorliegenden numerischen Lösungen kann dadurch oft eine Näherungsgleichung für die Lösung des Differentialgleichungssystems gefunden werden. Man bedient sich dabei der Methoden der mathematischen Statistik, wie z.B. der Regressionsanalyse.**
- Bei nichtlinearen Systemen von Differentialgleichungen existieren keine allgemeinen Aussagen zum Charakter der Lösungsfunktion. Für spezielle nichtlineare Differentialgleichungen kann unter Umständen eine Suche in der Literatur nach möglichen Formelansätzen sinnvoll sein.

Einfluss von Rechenfehlern

- Interpretiert man die Funktion $f(x)$ der Differenzengleichung

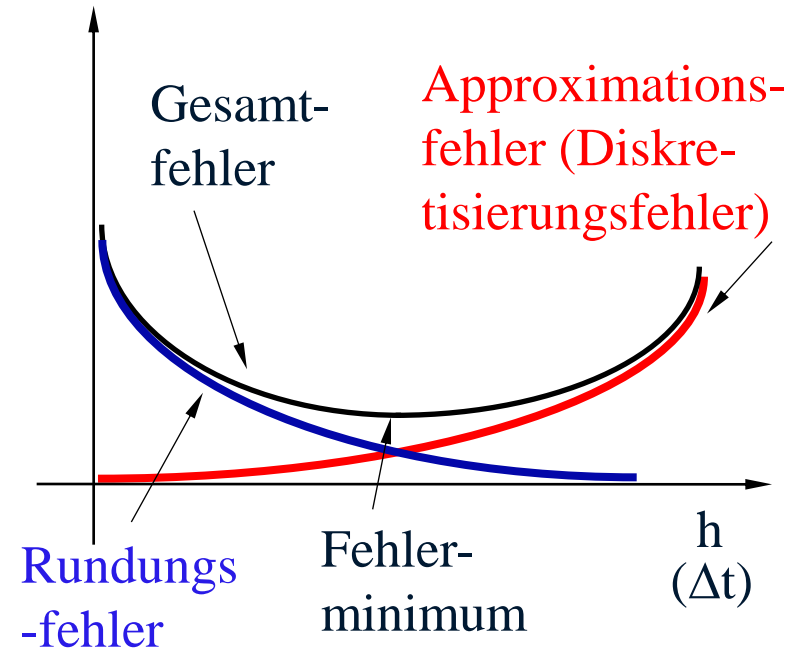
$$x(i+1) = x(i) + f(x) \cdot \Delta t$$

- als $\tan \alpha$ des Anstiegs der Kurve im jeweiligen Punkt x , so kann der entstehende Fehler ε in der Grafik sehr leicht veranschaulicht werden
- Es ist offensichtlich, daß die Größe des Fehlers auch durch den Charakter der gesuchten Funktion bestimmt wird.
- Zur Verringerung des Fehlers können folgende Maßnahmen ergriffen werden:
 - **Anwendung einer besseren Approximationsfunktion**
 - **Verkleinerung der Schrittweite.**
- Beide Verfahren werden bei der Realisierung konkreter Simulationssysteme zur Untersuchung kontinuierlicher Modelle angewandt und machen einen Hauptteil der Entwicklungsarbeiten dieser Softwarepakete aus



Beispiel zur quantitativen Risikoanalyse

- In Ergänzung zum rein mathematisch begründeten Fehler ist zu beachten, daß bei starker Verkleinerung der Schrittweite und sehr komplexen Approximationsfunktion der Rechenfehler, welcher durch die notwendigen Rundungen im Rechenwerk entsteht, bis in die Größenordnung des Approximationsfehlers und darüber hinaus wachsen kann.



- Es entsteht durch die Addition von Approximations- und Rechenfehler letztlich ein Fehlerminimum und damit ein Optimum für die Schrittweite h (bzw. Δt im Beispiel) [Schmi85].
- Die näherungsweise Bestimmung des Fehlerminimums ist eine der Hauptaufgaben bei der Realisierung kontinuierlicher Simulationssysteme.
- Im allgemeinen Fall kann dieses Optimum nur durch die Durchführung mehrerer Experimente ermittelt werden.

Weitere numerische Verfahren

- Das bereits aufgeführte Eulerverfahren läßt sich verallgemeinern zur Differenzengleichung

$$(a_n u_{j+n} + \dots + a_0 u_j) / h - F(h, u_{j-m}, \dots, u_{j+n}, f) = 0 \quad (\text{Gl. 2})$$

mit $j = m, m+1, \dots, n_h - n$ und

den Anfangsbedingungen $u_0 = y_0 \quad u_1 = y_1 \quad \dots \quad u_{m+n-1} = y_{m+n-1}$

- wobei $n_h = (b-a)/h$ die Intervallanzahl bei äquidistanter Schrittweite darstellt.
- Die Funktion F steht dabei für Art des zugrundeliegenden Verfahrens. Falls die Funktion F nur von $u_{j-m} \dots u_{j-n-1}$ und nicht von u_{j+n} abhängt, so ist das F zugrundeliegende Verfahren explizit, ansonsten implizit.
 - Im expliziten Fall kann durch Einsetzen der Werte u_{j-m} bis u_{j-n-1} der Wert für u_{j+n} ermittelt werden. Die Existenz und Eindeutigkeit der Näherungslösungen ist dadurch gegeben.
 - Im impliziten Fall entsteht eine (nichtlineare) Gleichung, welche für jeden Näherungsschritt gelöst werden muß. Aus mathematischer Sicht ist die Eindeutigkeit hierbei zumindest bei hinreichend kleinen h gesichert.

Einschrittverfahren

Das Eulerverfahren ergibt sich aus Gleichung 2 bei $m=0$, $n=1$ $a_1=1$ und $a_0=-1$.

Es entsteht somit aus der Basisgleichung

$$(a_n u_{j+n} + \dots + a_0 u_j) / h - F(h, u_{j-m}, \dots, u_{j+n}, f) = 0 \quad (\text{Gl. 2})$$

die bereits bekannte Form

$$u_{j+1} = u_j + h f(x_j, u_j) \quad [F = f(x_j, y_j)].$$

Bei einer modifizierten Festlegung der Funktion F entsteht das Euler-Rückwärtsverfahren

$$u_{j+1} = u_j + h f(x_{j+1}, u_{j+1}). \quad [F = f(x_{j+1}, y_{j+1})].$$

- Bei beiden Verfahren werden zur Berechnung von u_{j+1} nur die Informationen aus dem vorhergehenden Schritt (d.h. u_j) benutzt. Man bezeichnet diese Verfahren deshalb auch als **Einschrittverfahren**.
- Eine wichtige Eigenschaft von Einschrittverfahren ist der selbststartende Charakter der Berechnung. Es tritt als Anfangswert nur der Wert für y_0 auf.

Das Runge-Kutta-Einschrittverfahren

Am häufigsten wird das Runge-Kutta-Verfahren angewendet.

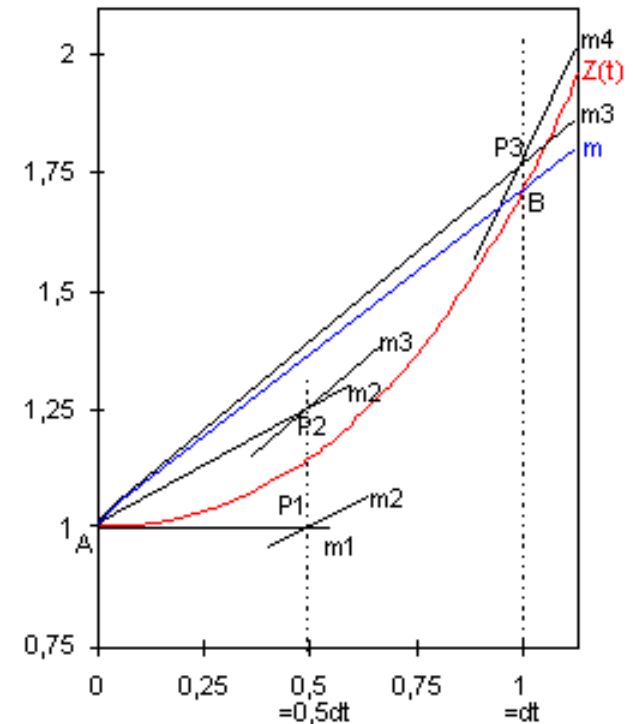
Es ist wie folgt definiert :

$$u_{j+1} = u_j + h (g_1 + 2g_2 + 2g_3 + g_4) / 6$$

$$\text{mit } g_1 = f(y_j, x_j), g_2 = f(y_j + 0,5 * h * g_1, x_j)$$

$$\text{mit } g_3 = f(y_j + 0,5 * h * g_2, x_j), g_4 = f(y_j + 0,5 * h * g_3, x_j)$$

- Durch die mehrfache Berechnung der Steigungen mit unterschiedlichem Schrittmaß ($0,5 * h$ ist die Hälfte des Diskretisierungsintervalles) wird ein MITTELWERT für die Steigung berechnet.
- Das Verfahren stellt, trotz höherem Berechnungsaufwandes, eine relativ schnelle Iterationsmethode großer Genauigkeit dar. Allerdings ist das Verfahren sehr empfindlich gegenüber der Variation der Schrittweite



Mehrschrittverfahren

Werden in $(a_n u_{j+n} + \dots + a_0 u_j) / h - F (h, u_{j-m}, u_{j-n}, f) = 0$ (Gl. 2)

Werte für $m > 0$ bzw. $N > 1$ eingesetzt, so ergeben sich die sogenannten Mehrschrittverfahren.

- Der Wert für u_{j+n} ergibt sich aus einer Menge von zuvor berechneten Werten.
- Ein praktisch angewendetes Verfahren, **die explizite Mittelpunkregel**, ergibt sich bei $m=0$, $n=2$, $a_2 = 0,5$, $a_1 = 0$ und $a_0 = 0,5$:

$$u_{j+2} = u_j + 2hf(x_{j+1}, u_{j+1})$$

- Bei diesem Zweitschrittverfahren muß neben dem Anfangswert $u_0 = y_0$ auch der Wert für $u_1 = y_1$ bekannt sein. Dieses Verfahren und allgemein alle Mehrschrittverfahren sind damit nicht selbststartend.

Typischer Ablauf von Mehrschrittverfahren :

1. **Ermittlung der notwendigen Startwerte per geeigneten Einschrittverfahren**
2. **Start und Durchführung des Mehrschrittverfahrens mit den gefundenen Startwerten**

Aus Gründen der Genauigkeit sollte das zum Finden der Startwerte eingesetzte Einschrittverfahren über eine ähnliche Qualität wie das Mehrschrittverfahren verfügen .

Kriterien zur Fehlerbewertung

- Durch den Fehler der Approximationsfunktion vom wahren Wert ergeben sich neben der Abweichung der berechneten Ergebnisfunktion auch weiterreichende Auswirkungen auf den gesamten Ablauf der Berechnung. Zu unterscheiden sind dabei :
 - **die Konsistenz und Konvergenz der Lösung(en)**
 - **und die Stabilität des eingesetzten Verfahrens.**

- Unter der **Konsistenz** ist die Existenz der Lösung des Originalproblems zu verstehen, falls eine Lösung mittels der numerischen Vorgehensweise gefunden wurde. Ein Maß für die Konsistenz ist der Grad der Abhängigkeit des Diskretisierungsfehlers τ von der Schrittweite h

$$\max |\tau^h| = O(h^p) \quad \text{mit } p\text{-Konsistenzordnung.}$$

- Bei konkreten numerischen Verfahren wird die Konsistenzordnung meist mit der Methode der Taylorentwicklung überprüft. Für das Eulerverfahren läßt sich relativ einfach die Konsistenzordnung $p = 1$ nachweisen (vgl. [Krug89]). Damit hängt der Abbruchfehler und indirekt die Konsistenz **linear** von der Schrittweite ab.

Konvergenzeigenschaften der Verfahren

- Besonders wichtig ist die Frage der Konvergenz der numerisch ermittelten Ergebnisse gegen die wahre Lösung oder gegen eine Realisierung aus der gesamten Lösungsmenge.
- Es läßt sich mathematisch nachweisen, daß bei hinreichend kleiner Schrittweite h die numerische Lösung gegen die wahre Lösung strebt. Problematisch ist dabei, daß die aus mathematischer Sicht notwendige Schrittweite infolge der sich kumulierenden Rundungsfehler des Computers unter Umständen gar nicht sinnvoll realisiert werden kann.
- Auch für die Konvergenz läßt sich auf analoge Weise der Grad der Konvergenz ermitteln. So heißt ein Differenzenverfahren konvergent, falls gilt

$$\max |y_j - u_j| = \max |e_j| \rightarrow 0 \text{ für } h \rightarrow 0$$

mit y_j bzw. u_j als wahre bzw. numerische Lösungen

bzw. konvergent von der Ordnung p , falls

$$|e_j| = O(h^p) \text{ für } h \rightarrow 0.$$

Stabilität der Verfahren

- Die Stabilität charakterisiert die Empfindlichkeit des numerischen Verfahrens gegenüber Berechnungsfehlern. Insbesondere wird verlangt, daß für kleine Fehler in den Anfangsbedingungen auch die Fehler in den Lösungen klein bleiben sollen.
- Bei bestimmten Verfahren und großen Schrittweiten treten allerdings neue Lösungsmengen auf, welche bei der Art der vorliegenden Differentialgleichungen eigentlich nicht zu erwarten sind.
- Speziell für die sehr häufig verwendeten linearen Differenzengleichungen existiert die sogenannte Wurzelbedingung. Diese fordert, daß alle Wurzeln (Nullstellen) des charakteristischen Polynoms des numerischen Verfahrens betragsmäßig kleiner als 1 sind und keine mehrfache Nullstelle den Betrag 1 besitzt.
- Im Fall der **Einschrittverfahren**, und damit auch der Eulerverfahren, wird diese Forderung erfüllt und die Verfahren sind stabil.
- Bei den **Mehrschrittverfahren** wird die Bedingung nicht immer erfüllt und es besteht die Gefahr von Instabilitätserscheinungen. Im Fall des expliziten Mittelpunkt-verfahrens existiert eine doppelte Nullstelle bei 1 und damit die Gefahr der Instabilität.

Maßnahmen bei Instabilität der Verfahren

Bei Verdacht auf Instabilität sind folgende Maßnahmen notwendig

- analytische oder auch numerische Voruntersuchung der vorliegenden Differentialgleichungen
- bei möglichen Instabilitäten Ausweichen auf andere numerische Verfahren (häufig Einschrittverfahren oder implizite Verfahren)

Die Mehrschrittverfahren sind jedoch generell interessant, da die Ordnung der Konsistenz und Konvergenz meist größer als 1 sind (beim Mittelpunktverfahren ist $p=2$) und damit eine bessere Genauigkeit und Effizienz des Verfahrens vorliegt.

Die aufgeführten **Kriterien Konsistenz, Stabilität und Konvergenz** sind eng miteinander verbunden. So läßt sich die Konvergenz durch eine entsprechende Konsistenz und Stabilität des numerischen Verfahrens sichern. Die Konvergenzordnung ergibt sich vielfach aus der Konsistenzordnung. **Untersuchungen der verwendeten numerischen Methoden anhand dieser Kriterien sind bei der kontinuierlichen Simulation ein wesentliches Element der Modellverifizierung und -validierung**

Methoden zur Steuerung der Schrittweite

- Die Realisierung der Simulation auf Digitalrechnern erfordert die Suche nach einem Optimum für die Schrittweite h .
- Trotz zahlreicher Anstrengungen und Theorien zur Fehlerabschätzung existiert bis heute kein universelles Verfahren zur Ermittlung der optimalen Schrittweite.

In der Praxis behilft man sich deshalb mit folgenden Methoden :

- Es wird ein Schritt mit zwei verschiedenen numerischen Näherungsverfahren (häufig auch von unterschiedlicher Konsistenzordnung) berechnet und per Vergleich der Ergebnisse der Abbruch- bzw. Approximationsfehler geschätzt. Oder es wird mit einem einzigen Verfahren der Wert u_{j+1} einmal mit der Schrittweite h und zweites Mal mit $h/2$ berechnet und aus beiden Ergebnissen der Fehler geschätzt.
- Falls der geschätzte Näherungsfehler kleiner als eine vorgegebene Fehlerschranke ist, wird die Schrittweite beibehalten, ansonsten wird die Schrittweite verkleinert.
- In der Regel wird die Schrittweite meist halbiert und die gesamte Prozedur bis zum Unterschreiten der Fehlerschranke wiederholt. Zur Vermeidung unnötig kleiner Schrittweiten wird auch ein Test auf eine untere Schranke des Fehlers durchgeführt und die Schrittweite bei Bedarf wieder vergrößert. Durch diese Vorgehensweise entsteht eine **adaptive Anpassung der Schrittweite** an den Charakter der Lösungsfunktion(en) der Differentialgleichung(en).

Die adaptive Schrittweitensteuerung

Praktische Umsetzung der Schrittweitensteuerung

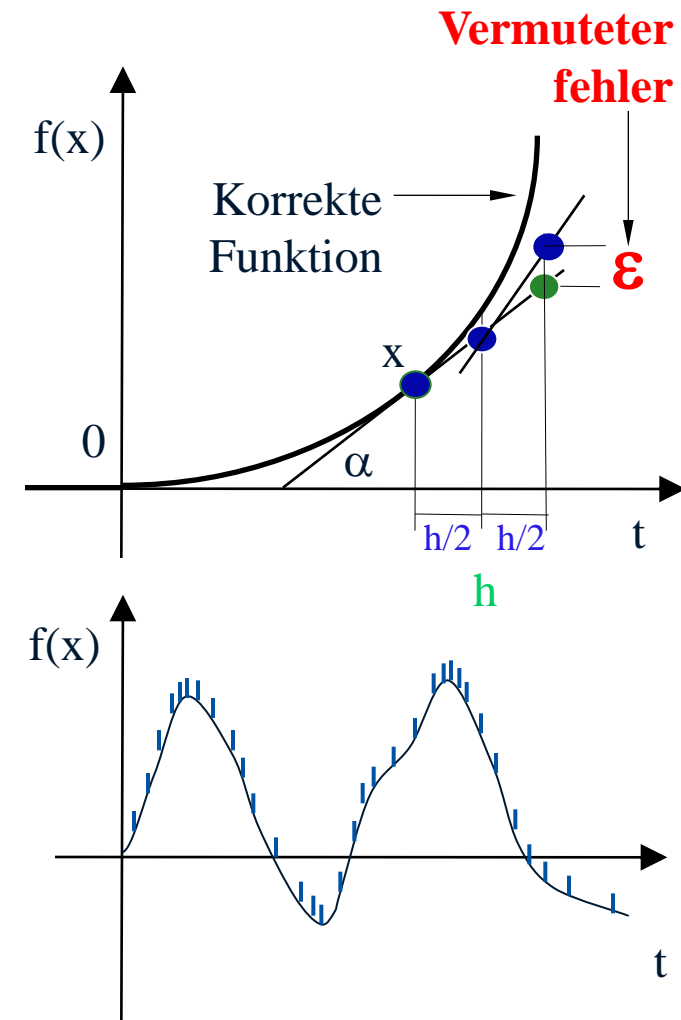
- Jeder Simulationsschritt wird zweimal berechnet : einmal mit dem Schritt h und dann mit $h/2$ (Grafik).
- Ausgehend von der Differenz der beiden Ergebnisse kann eine Schätzung des Fehlers und dann die Schrittweitenanpassungen erfolgen:

If $\varepsilon > \text{upper_bound}$ then $h = h / 2$

If $\varepsilon < \text{lower_bound}$ then $h = h * 2$

- **Ergebnis der Steuerung:**

- Bei einer stark nicht-linearen Ergebniskurve wird die Schrittweite relativ klein.
- Quasi-lineare Abschnitte können mit großen Schrittweiten berechnet werden !
- Achtung: bei der Verkleinerung muss auch eine absolute untere Grenze zur Vermeidung der Rundungsproblematik existieren !



Spezielle Probleme bei Lösung von DGL

- Bei einer ganzen Reihe von praktischen Problemen treten gleichzeitig Prozesse mit einem sehr schnellen und sehr langsamen An- oder Abklingen auf. Die entsprechenden Differentialgleichungen werden in Anlehnung an entsprechende mechanische Systeme auch als **steif** bezeichnet.

- Im Beispiel des linearen Differentialgleichungssystems

$$Y'_1 = -500,5 * Y_1 + 499,5 * Y_2 \quad \text{und}$$

$$Y'_2 = 499,5 * Y_1 - 500,5 * Y_2$$

$$\text{mit } Y_1(0) = 2 \text{ und } Y_2(0) = 0$$

ergibt sich als analytische Lösung

$$Y_1 = e^{-x} + e^{-1000x} \quad \text{und} \quad Y_2 = e^{-x} - e^{-1000x}.$$

- Durch die zweite Lösungskomponente mit e^{-1000x} muß die Schrittweite sehr klein sein. Das führt im Fall der ersten Lösungskomponente zu einer langen Rechenzeit und damit zu sehr großen Rundungsfehlern. **Explizite Verfahren versagen deshalb häufig bei steifen Differentialgleichungen.**

Erkennung und Lösung steifer Differentialgleichungen

- Aus mathematischer Sicht liegt Steifheit bereits vor, wenn der Quotient aus dem betragsgrößten und betragskleinsten Eigenwert der Jacobi-Matrix größer als 100 ist. Bereits die Berechnung der Jacobi-Matrix ist jedoch so aufwendig, daß sie in der Praxis keine Anwendung findet !
- Man geht deshalb wieder von der herkömmlichen Schrittweitensteuerung aus und nutzt den Umstand, daß bei steifen Differentialgleichungen der Abbruchfehler selbst bei Verfahren mit verschiedener Konsistenzordnung gleich groß bleibt. In einem solchen Fall muß auf Verfahren zur Lösung steifer Differentialgleichungen gewechselt werden.

Lösung steifer Differentialgleichungen

- Zur Lösung von steifen Differentialgleichungen werden Verfahren eingesetzt, deren Schrittweite ohne Rücksicht auf Stabilitätseinschränkungen gewählt werden kann.

Bewährt haben sich zwei Klassen von Verfahren:

- die linear-impliziten Verfahren.
- die Rückwärts-Differenzen-Formeln von Curtis/Hirschfelder
- Nachteilig ist bei diesen Verfahren, daß bei jedem Schritt nichtlineare Gleichungssysteme zu lösen sind.
- Diese Algorithmen sind heute in vielen Programmpaketen verfügbar oder können als Funktionsbibliotheken eingesetzt werden.

Verfahren zur Lösung steifer DGL in Matlab

- **Matlab ist das gegenwärtig führende Mathematikpaket für den technisch-naturwissenschaftlichen Bereich** - stellvertretend für andere Systeme sollen die speziellen Integrationsalgorithmen genannt werden:
- **ode15s** - der Standard-Integrator für steife Probleme in Matlab
 - ode15s ist insbesondere bei höheren Genauigkeitsanforderungen bei steifen Problemen die erste Wahl unter den steifen Matlab-Integratoren.
 - ode15s verwendet Formeln variabler Ordnung aus der Familie der 'numerical differentiation formulas (NDF)'. Optional können stattdessen die BDF Formeln (Gear'sche Formeln) benutzt werden, die im allgemeinen aber weniger effizient sind. ode15s führt mit jeder Option ein Mehrschritt-Verfahren durch.
- **ode23s** - Einschrittverfahren niedriger Ordnung für steife Systeme
 - basierend auf einer modifizierten Rosenbrock-Formel. Bei geringen Genauigkeitsanforderungen häufig effizienter als ode15s, für hohe Genauigkeitsanforderungen weniger geeignet.
- **ode23t** - Integrator für moderat steife Probleme
 - basierend auf der Trapezregel. verwendbar bei Problemen, bei denen numerische Dämpfung unerwünscht ist. Für hohe Genauigkeitsanforderungen wenig geeignet.
- **ode23tb** - Implementation des TR-BDF2 Verfahrens, das auch als implizites Runge-Kutta Verfahren gedeutet werden kann. Bei geringen Genauigkeits-anforderungen häufig effizienter als ode15s, für hohe Genauigkeitsanforderungen weniger geeignet.

Zusammenfassung zur kontinuierlichen Simulation

- Zu modellierende Systeme werden mit mathematischen Ausdrücken beschrieben
- Am häufigsten werden Systeme von Differentialgleichungen erster Ordnung verwendet
- es existieren verschiedene numerische Lösungsverfahren
- Die Hauptaufgabe bei der kontinuierlichen Simulation ist die Erreichung eines möglichst geringen Fehlers und eines stabilen Lösungsansatzes.
- Da die wirkliche Lösung nicht bekannt ist, kommen Schätzverfahren bzgl. der Fehler zum Einsatz.