

Explizite Runge-Kutta-Verfahren

Proseminar 'Numerische Mathematik'
Leitung: Professor Dr. W. Hofmann

Dominik Enseleit

06.07.2005

1 Einleitung

Nachdem wir schon einige numerische Verfahren zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen kennengelernt haben, befasse ich mich mit der Herleitung eines Einzelschrittverfahrens höherer Fehlerordnung, dem Runge-Kutta-Verfahren. Hierbei beschränke ich mich zunächst auf das dreistufige Runge-Kutta-Verfahren, d.h. in jedem Schritt des Verfahrens werden drei Funktionsauswertungen vorgenommen. Später werden wir auch vierstufige Runge-Kutta-Verfahren kennenlernen, allerdings wird mit wachsender 'Stufe' die Herleitung der Verfahren immer komplizierter, weshalb ich die grundlegenden Überlegungen an den dreistufigen Verfahren erläutern werde.

2 Herleitung

2.1 Allgemeine Form

Ausgangspunkt ist wie schon bei den vorherigen Verfahren die Integraldarstellung:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx \quad (1)$$

Anstatt jedoch eine bekannte Quadraturformel zur Auswertung des Integrals zu benutzen, wollen wir das Integral mit Hilfe einer allgemein gehaltenen Quadraturformel bestimmen. Unter Verwendung von drei beliebigen Stützstellen ξ_1, ξ_2, ξ_3 im Intervall $[x_k, x_{k+1}]$ und beliebigen Integrationsgewichten c_1, c_2, c_3 erhält die Quadraturformel folgende Gestalt:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x)) dx = h \left[c_1 f(\xi_1, y(\xi_1)) + c_2 f(\xi_2, y(\xi_2)) + c_3 f(\xi_3, y(\xi_3)) \right]$$

Nach Einsetzen in (1) ergibt sich für das Verfahren:

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + h \left[c_1 f(\xi_1, y(\xi_1)) + c_2 f(\xi_2, y(\xi_2)) + c_3 f(\xi_3, y(\xi_3)) \right] \quad (2)$$

Die zunächst beliebig gewählten Stützstellen ξ_1, ξ_2, ξ_3 und Integrationsgewichte c_1, c_2, c_3 sollen später so gewählt werden, dass ein Verfahren möglichst hoher Fehlerordnung entsteht.

Zunächst beschäftigen wir uns mit der Wahl der Unbekannten ξ_i bzw. $y(\xi_i)$ in Gleichung (2). Die Stützstellen ξ_1, ξ_2, ξ_3 im Intervall $[x_k, x_{k+1}]$ legen wir allgemein fest. Hierbei wird $\xi_1 = x_k$ gesetzt, da später $y(\xi_1) = y(x_k) = y_k$ gelten soll. Zur Bestimmung von $y(\xi_1)$ und $y(\xi_2)$ wenden wir die schon bekannte Prädiktor-methode an. Damit erhalten wir:

$$\xi_1 = x_k \quad \xi_2 = x_k + a_2 h \quad \xi_3 = x_k + a_3 h, \quad 0 < a_2, a_3 \leq 1$$

$$\begin{aligned}
y(\xi_1) &= y_k \\
y(\xi_2) &:= y_2^* = y_k + hb_{21}f(x_k, y_k) \\
y(\xi_3) &:= y_3^* = y_k + hb_{31}f(x_k, y_k) + hb_{32}f(\xi_2, y_2^*)
\end{aligned}$$

Nach Einsetzen dieser Ergebnisse in (2) erhält man die allgemeine Form des Einzelschrittverfahrens:

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_k, y_k) \\
k_2 &= f(\xi_2, y(\xi_2)) = f(x_k + a_2h, y_k + hb_{21}k_1) \\
k_3 &= f(\xi_3, y(\xi_3)) = f(x_k + a_3h, y_k + h(b_{31}k_1 + b_{32}k_2)) \\
y_{k+1} &= y_k + h[c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3]
\end{aligned}$$

2.2 Bestimmung der Parameter

Unser System hat demnach 8 Parameter $a_2, a_3, b_{21}, b_{31}, b_{32}, c_1, c_2$ und c_3 , die wir beliebig bestimmen können. Allerdings stellt man einige Anforderungen an das Verfahren, so dass man zusätzliche Gleichungen zur Bestimmung der Parameter erhält. Eine Anforderung ist, dass die Prädiktorwerte y_2^* und y_3^* für die Differentialgleichung $y' = f(x, y(x)) = 1$ exakt sein sollen. Da die Lösung der Differentialgleichung $y(x) = x$ ist, erhält man folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}
& y(\xi_2) = \xi_2 \\
\Rightarrow & y_k + hb_{21}f(x_k, y_k) = x_k + a_2h \\
\Rightarrow & hb_{21} = a_2h \quad \Rightarrow a_2 = b_{21} \\
& y(\xi_3) = \xi_3 \\
\Rightarrow & y_k + h(b_{31}f(x_k, y_k) + b_{32}f(\xi_2, y(\xi_2))) = x_k + a_3h \\
\Rightarrow & h(b_{31} + b_{32}) = a_3h \quad \Rightarrow a_3 = b_{31} + b_{32}
\end{aligned}$$

Ausgangspunkt unserer Überlegungen war ein Einzelschrittverfahren möglichst hoher Fehlerordnung zu konstruieren. Daher werden die restlichen Parameter so bestimmt, dass die Fehlerordnung maximal ist. Dafür betrachten wir zunächst den lokalen Diskretisationsfehler:

$$d_{k+1} = y(x_{k+1}) - y(x_k) - h[c_1\bar{k}_1 + c_2\bar{k}_2 + c_3\bar{k}_3], \quad (3)$$

wobei $\bar{k}_i$ die ungerundeten Werte der k_i sind.

Um die Fehlerordnung des Verfahrens zu bestimmen entwickeln wir die Ausdrücke $y(x_{k+1})$ und $\bar{k}_i$ aus (3) in Taylorreihen an der Stelle x_k . Unter Verwendung der bereits im letzten Vortrag benutzten Abkürzungen $F, G, f_y, f_x, f_{xx}, f_{xy}$ und f_{yy} erhält man:

$$\begin{aligned} y(x_{k+1}) &= y(x_k + h) = y(x_k) + hy' + \frac{1}{2}h^2y'' + \frac{1}{6}h^3y''' + O(h^4) \\ &= y(x_k) + hf + \frac{1}{2}h^2F + \frac{1}{6}h^3(Ff_y + G) + O(h^4) \end{aligned}$$

$$\bar{k}_1 = f(x_k, y(x_k)) = f$$

$$\begin{aligned} \bar{k}_2 &= f\left(x_k + a_2h, y(x_k) + a_2hf(x_k, y(x_k))\right) \\ &= f + a_2hf_x + a_2hff_y + \frac{1}{2}a_2^2h^2f_{xx} + a_2^2h^2ff_{xy} + \frac{1}{2}a_2^2h^2f^2f_{yy} + O(h^3) \\ &= f + a_2hF + \frac{1}{2}a_2^2h^2G + O(h^3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{k}_3 &= f\left(x_k + a_3h, y(x_k) + h(b_{31}\bar{k}_1 + b_{32}\bar{k}_2)\right) \\ &= f + a_3hf_x + h(b_{31}\bar{k}_1 + b_{32}\bar{k}_2)f_y + \frac{1}{2}a_3^2h^2f_{xx} + a_3(b_{31}\bar{k}_1 + b_{32}\bar{k}_2)h^2f_{xy} \\ &\quad + \frac{1}{2}(b_{31}\bar{k}_1 + b_{32}\bar{k}_2)^2h^2f_{yy} + O(h^3) \\ &= f + a_3hf_x + hb_{31}ff_y + hb_{32}ff_y + h^2b_{32}a_2Ff_y + \frac{1}{2}h^2a_3^2f_{xx} \\ &\quad + a_3h^2(b_{31} + b_{32})ff_{xy} + \frac{1}{2}h^2(b_{31} + b_{32})^2f^2f_{yy} + O(h^3) \\ &= f + h(a_3f_x + (b_{31} + b_{32})ff_y) + h^2\left[a_2b_{32}Ff_y + \frac{1}{2}a_3^2f_{xx} \right. \\ &\quad \left. + a_3(b_{31} + b_{32})ff_{xy} + \frac{1}{2}(b_{31} + b_{32})^2f^2f_{yy}\right] + O(h^3) \\ &= f + a_3hF + h^2(a_2b_{32}Ff_y + \frac{1}{2}a_3^2G) + O(h^3) \end{aligned}$$

Für den lokalen Diskretisationsfehler (3) ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} d_{k+1} &= y(x_k) + hf + \frac{1}{2}h^2F + \frac{1}{6}h^3(Ff_y + G) + O(h^4) - y(x_k) - hc_1f \\ &\quad - [hc_2f + h^2c_2a_2F + \frac{1}{2}h^3c_2a_2^2G + O(h^4)] \\ &\quad - [hc_3f + h^2c_3a_3F + h^3c_3(a_2b_{32}Ff_y + \frac{1}{2}a_3^2G) + O(h^4)] \\ &= hf(1 - c_1 - c_2 - c_3) + h^2F\left(\frac{1}{2} - a_2c_2 - a_3c_3\right) \\ &\quad + h^3\left(Ff_y\left(\frac{1}{6} - a_2c_3b_{32}\right) + G\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}a_2^2c_2 - \frac{1}{2}a_3^2c_3\right)\right) + O(h^4) \end{aligned} \tag{4}$$

Damit wir ein Verfahren 3.Ordnung erhalten, müssen alle Terme in (4) bis auf $O(h^4)$ verschwinden. Mit dieser Bedingung erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 + c_3 &= 1 \\ a_2 c_2 + a_3 c_3 &= \frac{1}{2} \\ a_2 c_3 b_{32} &= \frac{1}{6} \\ a_2^2 c_2 + a_3^2 c_3 &= \frac{1}{3} \end{aligned}$$

Da das System 6 Unbekannte und 4 Gleichungen aufweist, erhält man eine zwei-parametrische Lösungsmenge. Wir wählen (beliebig) a_2 und a_3 als Parameter und erhalten durch einfache Umformungen, unter der Voraussetzung $a_2 \neq a_3$ und $a_2 \neq \frac{2}{3}$, eine Darstellung der 6 Variablen in Abhängigkeit von a_2 und a_3 :

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{6a_2 a_3 + 2 - 3(a_2 + a_3)}{6a_2 a_3} \\ c_2 &= \frac{3a_3 - 2}{6a_2(a_3 - a_2)} \\ c_3 &= \frac{2 - 3a_2}{6a_3(a_3 - a_2)} \\ b_{21} &= a_2 \\ b_{32} &= \frac{a_3(a_3 - a_2)}{a_2(2 - 3a_2)} \\ b_{31} &= a_3 - b_{32} \end{aligned} \quad (5)$$

Wie die beiden freien Parameter gewählt werden ist im Grunde völlig beliebig, so dass die Parameter je nach Anforderung gewählt werden können. Beispielsweise war man anfänglich daran interessiert einfache Zahlenwerte für die Handrechnung oder Werte, die gegenüber der Rundung unanfällig sind, zu erhalten. Heutzutage werden die Werte jedoch eher abhängig von einer Schrittweitensteuerung gewählt oder auch so, dass der Hauptanteil des lokalen Diskretisierungsfehler für eine spezielle Klasse von Differentialgleichungen möglichst klein ausfällt.

3 Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung

Zur Veranschaulichung werde ich 2 bekannte Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung angeben, so dass ersichtlich wird, wie das Verfahren aus den zwei wählenden Parametern a_2 und a_3 entsteht.

3.1 Die Methode von Heun dritter Ordnung:

Mit den Koeffizienten $a_2 = \frac{1}{3}$ und $a_3 = \frac{2}{3}$ erhält man aus (5): $c_1 = \frac{1}{4}$, $c_2 = 0$, $c_3 = \frac{3}{4}$, $b_{21} = \frac{1}{3}$, $b_{32} = \frac{2}{3}$, $b_{31} = 0$ und damit hat die Methode von Heun dritter Ordnung folgende Form:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_k, y_k) \\k_2 &= f(x_k + \frac{1}{3}h, y_k + \frac{1}{3}hk_1) \\k_3 &= f(x_k + \frac{2}{3}h, y_k + \frac{2}{3}hk_2) \\y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3)\end{aligned}$$

Bei dem so konstruierten Verfahren wird der Wert von k_2 also nur zur Berechnung von k_3 benötigt, denn für die Berechnung von y_{k+1} werden nur die Steigungen von k_1 und k_3 berücksichtigt.

3.2 Methode von Kutta dritter Ordnung:

Mit den Koeffizienten $a_2 = \frac{1}{2}$ und $a_3 = 1$ erhält man aus (5): $c_1 = \frac{1}{6}$, $c_2 = \frac{2}{3}$, $c_3 = \frac{1}{6}$, $b_{21} = \frac{1}{2}$, $b_{32} = 2$, $b_{31} = -1$ und damit hat die Methode von Kutta dritter Ordnung folgende Form:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_k, y_k) \\k_2 &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1) \\k_3 &= f(x_k + h, y_k - hk_1 + 2hk_2) \\y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)\end{aligned}$$

Nachdem wir zu Beginn eine allgemeine Quadraturformel zur Herleitung benutzt haben, erhalten wir bei obiger Wahl der Koeffizienten die uns bereits bekannte Simpsonregel als Quadraturformel.

4 Schrittweitenanpassung

Ähnlich wie beim adaptiven Simpsonverfahren ist auch bei der numerischen Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit dem Runge-Kutta-Verfahren eine Schrittweitenanpassung möglich und sinnvoll. Hierbei wird der lokale Diskretisierungsfehler mit Hilfe eines Verfahrens höherer Ordnung abgeschätzt. Um den Aufwand möglichst gering zu halten, benutzt man für diese Abschätzung Runge-Kutta-Verfahren, in denen die gleichen k_i verwendet werden, wie in dem Ausgangsverfahren. Mit dieser Abschätzung wird dann nach jedem Schritt der

Fehler berechnet und die Schrittweite je nach vorgegebener Fehlerschranke angepasst.

4.1 Die verbesserte Polygonzugmethode

Die verbesserte Polygonzugmethode (VP) ist ein Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung in folgender Form:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_k, y_k) \\ k_2 &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1) \\ y_{k+1} &= y_k + hk_2 \end{aligned}$$

Zur Abschätzung der verbesserten Polygonzugmethode eignet sich die gerade vorgestellte Methode von Kutta (K), ein Runge-Kutta-Verfahren 3. Ordnung, denn es gilt:

$$\begin{aligned} k_1^{VP} &= f(x_k, y_k) = k_1^K \quad \text{und} \\ k_2^{VP} &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}hk_1) = k_2^K \end{aligned}$$

Die lokalen Diskretisationsfehler der beiden Verfahren sind:

$$\begin{aligned} d_{k+1}^{VP} &= y(x_{k+1}) - y(x_k) - h\bar{k}_2 \\ d_{k+1}^K &= y(x_{k+1}) - y(x_k) - \frac{h}{6}(\bar{k}_1 + 4\bar{k}_2 + \bar{k}_3) \end{aligned}$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen erhält man für den lokalen Diskretisationsfehler:

$$d_{k+1}^{VP} = \frac{h}{6}(\bar{k}_1 + 4\bar{k}_2 + \bar{k}_3) - h\bar{k}_2 + d_{k+1}^K$$

Nach Ersetzen der exakten Werte $\bar{k}_i$ durch die bekannte Näherungen k_i und mit dem Wissen, dass $d_{k+1}^K = O(h^4)$ erhält man schließlich folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} d_{k+1}^{VP} &\approx \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) - hk_2 + O(h^4) \\ &= \frac{h}{6}(k_1 - 2k_2 + k_3) + O(h^4) \end{aligned} \tag{6}$$

Somit kann der lokale Diskretisationsfehler der Verbesserten Polygonzugmethode mit einer einzigen zusätzlichen Auswertung von k_3 abgeschätzt und je nach Größe des Fehlers, die Schrittweite angepasst werden.

4.2 Methode von Heun zweiter Ordnung

Es ist auch möglich ein Runge-Kutta-Verfahren höherer Ordnung zur Abschätzung eines Verfahrens einfach zu konstruieren. Als Beispiel sei hier die Methode von Heun zweiter Ordnung angegeben:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_k, y_k) \\k_2 &= f(x_k + h, y_k + hk_1) \\y_{k+1} &= y_k + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2)\end{aligned}$$

Diese kann in ein Runge-Kutta-Verfahren 3.Ordnung eingebettet werden. Ein Parameter ist schon durch das Verfahren vorgegeben: $a_2 = 1$. Wir wählen zusätzlich $a_3 = \frac{1}{2}$ und erhalten mit (5) die restlichen Parameter:

$$c_1 = \frac{1}{6}, \quad c_2 = \frac{1}{6}, \quad c_3 = \frac{2}{3}, \quad b_{32} = \frac{1}{4}, \quad b_{31} = \frac{1}{4}$$

Zur Abschätzung der Methode von Heun 2.Ordnung erhält man somit ein Runge-Kutta-Verfahren 3.Ordnung der folgenden Gestalt:

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_k, y_k) \\k_2 &= f(x_k + h, y_k + hk_1) \\k_3 &= f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{h}{4}(k_1 + k_2)) \\y_{k+1} &= y_k + \frac{h}{6}(k_1 + k_2 + 4k_3)\end{aligned}$$

Als Fehlerabschätzung erhalten wir in diesem Fall:

$$\begin{aligned}d_{k+1}^H &\approx \frac{h}{6}(k_1 + k_2 + 4k_3) - \frac{h}{2}(k_1 + k_2)O(h^4) \\&= \frac{h}{3}(-k_1 - k_2 + 2k_3) + O(h^4)\end{aligned}$$

Literatur:

H.R. Schwarz: Numerische Mathematik (1997 Stuttgart, Teubner), § 9.1.4