Runge-Kutta-Verfahren

[vgl. 'Numerische Mathematik' von *Hans Rudolf* **Schwarz** (Teubner)]

Betrachte die skalare Differentialgleichung erster Ordnung

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

Diese läßt sich in die dazu äquivalente Integralgleichung

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x, y(x))\, dx \tag{2}$$

umformen. Der Wert des Integrals soll nun durch eine allgemeine Quadraturformel approximiert werden, welche - abhängig von der Fehlerordnung - auf vier Stützstellen $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ im Intervall $[x_k, x_{k+1}]$ beruht mit zugehörigen Integrationsgewichten c_1, c_2, c_3, c_4. Die Lage der Integrationsstützstellen ξ_i sowie die Gewichte sollen zunächst beliebig sein. Sie werden später so bestimmt, daß das resultierende Verfahren eine entsprechende Fehlerordung besitzt.

Ansatz für die Näherung y_{k+1}:

$$y_{k+1} = y_k + h \sum_{i=1}^{n} c_i f(\xi_i, y(\xi_i)). \tag{3}$$

(Beachte: $y(x_k)$ ist der exakte, y_k der approximierte Wert.)

Lege nun die Stützstellen wie folgt fest $(h = x_{k+1} - x_k)$:

$$\xi_1 = x_k, \quad \xi_2 = x_k + a_2 h, \quad \xi_3 = x_k + a_3 h, \quad \xi_4 = x_k + a_4 h, \quad 0 < a_2, a_3, a_4 \leq 1. \tag{4}$$

Demzufolge ist $y(\xi_1) = y_k$. Für die verbleibenden Werte $y(\xi_i)$ verwende man die Ansätze von Prädiktorwerten:

$$\begin{array}{lrcl}
y(\xi_2): & y_2^* & = & y_k + hb_{21} f(x_k, y_k) \\
y(\xi_3): & y_3^* & = & y_k + hb_{31} f(x_k, y_k) + hb_{32} f(x_k + a_2 h, y_2^*) \\
y(\xi_4): & y_4^* & = & y_k + hb_{41} f(x_k, y_k) + hb_{42} f(x_k + a_2 h, y_2^*) + hb_{43} f(x_k + a_3 h, y_3^*).
\end{array}$$

Setzt man diese Ansätze in (3) ein, so kann man folgenden Algorithmus aufstellen:

$$\boxed{\begin{array}{rcl}
k_1 & = & f(x_k, y_k) \\
k_2 & = & f(x_k + a_2 h, y_k + hb_{21} k_1) \\
k_3 & = & f(x_k + a_3 h, y_k + hb_{31} k_1 + hb_{32} k_2) \\
k_4 & = & f(x_k + a_4 h, y_k + hb_{41} k_1 + hb_{42} k_2 + hb_{43} k_3) \\
y_{k+1} & = & y_k + h \{ c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4 \}
\end{array}}$$

An die 13 freie Parameter kann man noch folgende Bedingung stellen, die dadurch motiviert wird, daß die Prädiktorwerte y_i^* für $y'(x) = 1$ exakt sind:

$$a_k = \sum_{j=1}^{k-1} b_{kj}, \quad k = 2, 3, 4.$$

Der lokale Diskretisationsfehler d_{k+1} an der Stelle x_{k+1} ist definiert als:

$$d_{k+1} = y(x_{k+1}) - y(x_k) - h \sum_{i=1}^{4} c_i \tilde{k}_i, \tag{5}$$

wobei nun $\tilde{k}_i$ die Ausdrücke bedeuten, die aus k_i hervorgehen, indem man y_k durch $y(x_k)$ erstetzt.

Entwickle nun zuerst die $\tilde{k}_i$ nach Taylor bis zur 3.Ordnung. Verwende bei jedem Iterationsschritt ebenso nur Terme bis zur Ordnung 3 in h. Beachte noch zusätzlich die Abkürzungen:

$$\begin{aligned}
y'(x) &= f(x, y(x)) \\
y''(x) &= f_x + f_y y' = f_x + f f_y =: F \\
y'''(x) &= (f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f + yy) + (f_x + f f_y) f_y =: G + F f_y \\
y''''(x) &= (f_{xxx} + 3f f_{xxy} + 3f^2 f_{xyy} + f^3 f_{yyy}) \\
&\quad +(f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f + yy) f_y + F f_y^2 + F(3f_{xy} + 3f f_{yy}) \\
&=: H + G f_y + F(f_y^2 + 3f_{xy} + 3f f_{yy}).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{k}_1 &= f(x_k, y(x_k)) \equiv f \\
\tilde{k}_2 &= f(x_k + a_2 h, y(x_k) + h b_{21} f(x_k, y(x_k))) \\
&\approx f + a_2 h f_x + h b_{21} f f_y + \frac{1}{2} (a_2 h)^2 f_{xx} + h^2 a_2 b_{21} f f_{xy} + \frac{1}{2} (h b_{21} f)^2 f_{yy} \\
&\quad + \frac{1}{6} (a_2 h)^3 f_{xxx} + \frac{1}{2} (a_2 h)^2 h b_{21} f f_{xxy} + \frac{1}{6} (a_2 b_{21} f)^3 f_{yyy} + O(h^4) \\
&= f + a_2 h F + \frac{1}{2} (a_2 h)^2 G + \frac{1}{6} (a_2 h)^2 H + O(h^4) \\
\tilde{k}_3 &= f(x_k + a_3 h, y(x_k) + h(b_{31} \tilde{k}_1 + b_{32} \tilde{k}_2))
\end{aligned}$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned}
h(b_{31}\tilde{k}_1 + b_{32}\tilde{k}_2) &= h b_{31} f + h b_{32} \left(f + a_2 h F + \frac{1}{2} (a_2 h)^2 G + \frac{1}{6} (a_2 h)^3 H + O(h^4) \right) \\
&\approx h a_3 f + h^2 a_2 b_{32} F + \frac{1}{2} h^3 a_2^2 b_{32} G + O(h^4)
\end{aligned}$$

damit ist

$$\begin{aligned}
\tilde{k}_3 &\approx f + a_3 h f_x + \left(h a_3 f + h^2 a_2 b_{32} F + \frac{1}{2} h^3 a_2^2 b_{32} G \right) f_y \\
&+ \frac{1}{2} (a_3 h)^2 f_{xx} + a_3 h \left(h a_3 f + h^2 a_2 b_{32} F \right) f_{xy} + \frac{1}{2} \left(h^2 a_3^2 f^2 + 2 h^3 a_2 a_3 b_3 2 f F \right) f_{yy} \\
&+ \frac{1}{6} (a_3 h)^3 f_{xxx} + \frac{1}{2} (a_3 h)^2 (a_3 f) f_{xxy} + \frac{1}{2} (a_3 h) \left(h^2 a_3^2 f^2 + 2 h^3 a_2 a_3 b_{32} f F \right) f_{xyy} \\
&+ \frac{1}{6} (h a_3 f)^3 f_{yyy} \\
&= f + a_3 h F + h^2 a_2 b_{32} F f_y + \frac{1}{2} h^2 a_3^2 G \\
&+ \frac{1}{2} h^3 a_2^2 b_{32} G f_y + h^3 a_2 a_3 b_{32} F (f_{xy} + f_{yy}) + \frac{1}{6} h^3 a_3^3 H
\end{aligned}$$

$$\tilde{k}_4 = f(x_k + a_4 h, y(x_k) + h(b_{41} \tilde{k}_1 + b_{42} \tilde{k}_2 + b_{43} \tilde{k}_3))$$

Nebenrechnung:

$$\begin{aligned}
h(b_{41} \tilde{k}_1 + b_{42} \tilde{k}_2 + b_{43} \tilde{k}_3) &\approx h b_{41} f + h b_{42} \left(f + a_2 h F + \frac{1}{2} a_2^2 h^2 G \right) \\
&+ h b_{43} \left(f + a_3 h F + h^2 a_2 b_{32} F f_y + \frac{1}{2} h^2 a_3^2 G \right) \\
&= h a_4 f + h^2 a_2 b_{42} F + h^2 a_3 b_{43} F \\
&+ \frac{1}{2} h^3 a_2^2 b_{42} G + h^3 a_2 b_{43} b_{32} F f_y + \frac{1}{2} h^3 a_3^2 b_{43} G
\end{aligned}$$

damit ist

$$\begin{aligned}
\tilde{k}_4 &\approx f + a_4 h f_x \\
&+ \left(h a_4 f + h^2 (a_2 b_{42} F + a_3 b_{43} F) + \frac{1}{2} h^3 a_3 b_{43} F + h^3 a_2 b_{32} b_{43} F f_y + \frac{1}{2} h^3 a_3^2 b_{43} G \right) f_y \\
&+ \frac{1}{2} (a_4 h)^2 f_{xx} + (a_4 h) \left(h a_4 f + h^2 (a_2 b_{42} F + a_3 b_{43} F) \right) f_{xy} \\
&+ \frac{1}{2} \left(h^2 a_4^2 f^2 + 2 h^3 a_4 f (a_2 b_{42} F + a_3 b_{43} F) \right) f_{yy} \\
&+ \frac{1}{6} (a_4 h)^3 f_{xxx} + \frac{1}{2} (a_4 h)^2 (h a_4 f) f_{xxy} + \frac{1}{2} (a_4 h) (h a_4 f)^2 f_{xyy} + \frac{1}{6} (h a_4 f)^3 f_{yyy} \\
&= f + a_4 h F + h^2 (a_2 b_{42} + a_3 b_{43}) F f_y + h^3 \left(\frac{1}{2} a_2^2 b_{42} G + a_2 b_{32} b_{43} F f_y + \frac{1}{2} a_3^2 b_{43} G \right) f_y \\
&+ \frac{1}{2} (a_4 h)^2 G + h^3 (a_2 a_4 b_{42} + a_3 a_4 b_{43}) F f_{xy} + h^3 a_4 f F (a_2 b_{42} + a_3 b_{43}) f_{yy} \\
&+ \frac{1}{6} (a_4 h)^3 H
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich mit

$$y(x_{k+1}) = y(x_k+h) = y(x_k) + y'(x_k)h + \frac{1}{2}y''(x_k)h^2 + \frac{1}{6}y'''(x_k)h^3 + \frac{1}{24}y''''(x_k)h^4 + O(h^5)$$

$$\begin{aligned}
d_{k+1} &= y(x_{k+1}) - y(x_k) - h\left(c_1\tilde{k}_1 + c_2\tilde{k}_2 + c_3\tilde{k}_3 + c_4\tilde{k}_4\right) \\
&= hf\left(1 - c_1 - c_2 - c_3 - c_4\right) \\
&\quad + h^2F\left(\frac{1}{2} - c_2a_2 - c_3a_3 - c_4a_4\right) \\
&\quad + h^3Ff_y\left(\frac{1}{6} - c_3a_2b_{32} - c_4a_2b_{42} - c_4a_3b_{43}\right) \\
&\quad + h^3G\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{2}c_2a_2^2 - \frac{1}{2}c_3a_3^2 - \frac{1}{2}c_4a_4^2\right) \\
&\quad + h^4H\left(\frac{1}{24} - \frac{1}{6}c_2a_2^3 - \frac{1}{6}c_3a_3^3 - \frac{1}{6}c_4a_4^3\right) \\
&\quad + h^4Gf_y\left(\frac{1}{24} - \frac{1}{2}c_3a_2^2b_{32} - \frac{1}{2}c_4a_2^2b_{42} - \frac{1}{2}c_4a_3^2b_{43}\right) \\
&\quad + h^4Ff_y^2\left(\frac{1}{24} - c_4a_2b_32b_43\right) \\
&\quad + h^4Ff_{xy}\left(\frac{1}{8} - c_3a_2a_3b_{32} - c_4a_2a_4b_{42} - c_4a_3a_4b_{43}\right) \\
&\quad + h^4Ff_{yy}\left(\frac{1}{8} - c_3a_2a_3b_{32} - c_4a_2a_4b_{42} - c_4a_3a_4b_{43}\right).
\end{aligned}$$

Die Forderung nach einer möglichst kleinen Fehlerordnung (hier Ordnung 4) verlangt, daß jeder Klammerausdruck verschwindet. Man erhält so ein Gleichungssystem mit 8 Gleichungen und 10 Unbekannten. Dieses System läßt sich z.B. nach a_2 und a_3 auflösen. Sofern diese beiden ungleich sind, gilt:

$$\begin{aligned}
a_4 &= 1 \\
b_{21} &= a_2 \\
b_{32} &= \frac{1}{2}\frac{a_3(a_2-a_3)}{a_2(2a_2-1)} \\
b_{31} &= a_3 - b_{32} \\
b_{42} &= \frac{1}{2}\frac{(a_2-2-4a_3^2+5a_3)(a_2-1)}{a_2(a_2-a_3)(3+6a_2a_3-4a_2-4a_3)} \\
b_{43} &= \frac{(2a_2-1)(a_2-1)(1-a_3)}{a_3(6a_2a_3+3-4a_3-4a_2)(a_3-a_2)} \\
b_{41} &= a_4 - b_{42} - b_{43}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_1 &= \frac{1}{12}\frac{6a_2a_3 - 2a_3 - 2a_2 + 1}{a_2a_3} \\
c_2 &= \frac{1}{12}\frac{1 - 2a_2}{a_2(a_2-1)(a_3-a_2)} \\
c_3 &= \frac{1}{12}\frac{2a_2 - 1}{a_3(a_3-1)(a_3-a_2)} \\
c_4 &= \frac{1}{12}\frac{6a_2a_3 + 3 - 4a_3 - 4a_2}{(a_2-1)(a_3-1)}.
\end{aligned}$$

Gilt hingegen $a_2 = a_3$ so erhält man:

$$\begin{aligned}
a_4 &= 1 \\
b_{21} &= a_2 \\
b_{32} &= \frac{1}{8a_2} \\
b_{31} &= a_2 - b_{32} \\
b_{42} &= -\frac{1}{2a_2} \\
b_{43} &= 2 \\
b_{41} &= -1 - b_{42} \\
c_1 &= \frac{1}{6}, \quad c_2 = 0, \quad c_3 = \frac{2}{3}, \quad c_4 = \frac{1}{6}.
\end{aligned}$$