

# Herleitung des Runge-Kutta-Verfahrens

Löse numerisch die gewöhnliche Differentialgleichung

$$y'(x) = f(x, y). \quad (1)$$

Der allgemeine Ansatz sei die Iteration

$$y_{k+1} = y_k + h\Phi_h(x_k, y_k), \quad (2)$$

es muss also eine geeignete Funktion  $\Phi_h$  gefunden werden. Definiere

$$\Delta_h(x, y) := \begin{cases} \frac{y(x+h)-y(x)}{h} & \text{falls } h \neq 0 \\ f(x, y) & \text{falls } h = 0, \end{cases} \quad (3)$$

dann ist der lokale Diskretisierungsfehler durch die Differenz

$$T_h = \Delta_h(x_k, y(x_k)) - \Phi_h(x_k, y(x_k)) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \Phi_h(x, y(x))$$

gegeben.

## Ziel:

Finde eine Formel für  $\Phi_h$ , so dass die Taylorentwicklungen von  $\Delta_h$  und  $\Phi_h$  bis auf Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(h^{p+1})$  miteinander übereinstimmen. Dann ist das Verfahren von der Ordnung  $p$  und bis auf Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(h^{p+1})$  exakt. Dabei soll das Verfahren auch noch effizient sein, d.h. es sollen keine Ableitungen von  $f$  berechnet werden müssen.

## Methode:

Taylorentwicklungen von  $\Delta_h$  und  $\Phi_h$  berechnen, Koeffizientenvergleich.

In diesen Berechnungen werden nur Terme bis zur zweiten Ordnung berücksichtigt. Die Verfahren höherer Ordnung lassen sich aber prinzipiell genauso bestimmen!

Beginne mit  $\Delta_h$ :

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \mathcal{O}(h^3) \quad (4)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \frac{y(x+h) - y(x)}{h} &= y'(x) + \frac{h}{2}y''(x) + \mathcal{O}(h^2) \\ &\stackrel{(1)}{=} f(x, y) + \frac{h}{2}(f(x, y))' + \mathcal{O}(h^2) \\ &= f(x, y) + \frac{h}{2}(f_x(x, y) + f_y(x, y)f(x, y)) + \mathcal{O}(h^2) \quad (5) \end{aligned}$$

Wähle den folgenden allgemeinen Ansatz für  $\Phi_h$ :

$$\begin{aligned}\Phi_h(x, y) &= (b_1 f_1 + \dots + b_s f_s)(x, y) \\ &= \sum_{i=1}^s b_i f_i(x, y)\end{aligned}\tag{6}$$

mit den sogenannten *Stufen*

$$\begin{aligned}f_1(x, y) &= f(x, y) \\ f_2(x, y) &= f(x + c_2 h, y + h a_{21} f_1(x, y)) \\ f_3(x, y) &= f(x + c_3 h, y + h[a_{31} f_1(x, y) + a_{32} f_2(x, y)]) \\ &\vdots \\ f_s(x, y) &= f(x + c_s h, y + h[a_{s1} f_1(x, y) + \dots + a_{s,s-1} f_{s-1}(x, y)])\end{aligned}\tag{7}$$

und

$$\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = c_i \quad i = 1, \dots, s.\tag{8}$$

Bei dieser Wahl von  $\Phi_h$  wird das Verfahren (1), (6)-(8) explizites  $s$ -stufiges Runge-Kutta Verfahren genannt. Die Koeffizienten  $b_1, \dots, b_s, c_1, \dots, c_s, a_{ij}$  werden in Tableaus zusammengefasst:

$c_1$			
$c_2$	$a_{21}$		
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$c_s$	$a_{s1}$	$\dots$	$a_{s,s-1}$
	$b_1$	$\dots$	$b_{s-1} \quad b_s$

**Anmerkung:**

Das Tableau stellt die Koeffizienten für ein explizites Runge-Kutta-Verfahren dar (d.h. die Lösung im neuen Iterationsschritt kann aus der Lösung des letzten Iterationsschritts berechnet werden). Bei einem impliziten Verfahren (d.h. die Lösung im neuen Iterationsschritt muss durch ein Gleichungssystem gelöst werden) wären die  $a_{ij} \neq 0$  für  $j \geq i$ .

Die Koeffizienten  $b_1, \dots, b_s, c_1, \dots, c_s, a_{ij}$  werden nun so bestimmt, dass  $\Delta_h - \Phi_h$  möglichst klein (von der Ordnung  $p$ ) ist. Hier wird der Fall  $p = 2$  hergeleitet und vorausgesetzt, dass die Differentialgleichung (1) autonom ist, d.h.

es gelte  $f(x, y) = f(y)$ . Damit vereinfacht sich die Taylorentwicklung (5) von  $\Delta_h$  zu

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = f(y(x)) + \frac{h}{2} f_y(y(x)) f(y(x)) + \mathcal{O}(h^2), \quad (9)$$

da  $f_x(y) = 0$  ist. Um die Taylorentwicklung von  $\Phi_h$  zu berechnen, muss zunächst die Taylorentwicklung der Stufen  $f_i$  berechnet werden, welche sich im Fall der autonomen DGL vereinfachen:

$$\begin{aligned} f_i &= f\left(y + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f\right) \\ &\stackrel{(8)}{=} f + h c_i f' f + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \quad (10)$$

Berechne nun die Taylorentwicklung von  $\Phi_h$  für  $s = 2$ , mit (6) und (10) gilt

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h \sum_{i=1}^2 b_i (f + h c_i f' f + \mathcal{O}(h^2)) \\ &= y_k + h \sum_{i=1}^2 b_i f + \frac{h^2}{2} \left( 2 \sum_{i=1}^2 b_i c_i f' f \right) + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned} \quad (11)$$

Vergleiche (11) mit (5), bilde die Differenz

$$\begin{aligned} \Delta_h - \Phi_h &= \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \frac{y_{k+1} - y_k}{h} \\ &= f + \frac{h}{2} f' f - \left[ \sum_{i=1}^2 b_i f + \frac{h}{2} \left( 2 \sum_{i=1}^2 b_i c_i f' f \right) \right] + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \left( 1 - \sum_{i=1}^2 b_i \right) f + \frac{h}{2} \left( 1 - 2 \sum_{i=1}^2 b_i c_i \right) f' f + \mathcal{O}(h^2) \\ &\stackrel{!}{=} \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \quad (12)$$

Damit ergeben sich die Bedingungen

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 b_i &= 1 \\ \sum_{i=1}^2 b_i c_i &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Analog lassen sich auch Runge-Kutta Verfahren höherer Ordnungen konstruieren. Es gilt der folgende Satz

**Satz 1** Ein Runge-Kutta Verfahren besitzt für jede rechte Seite  $f \in C^p(\Omega, \mathbb{R}^d)$ , jeden Phasenraum  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d \in \mathbb{N}$  genau dann die Konsistenzordnung  $p = 1$ , wenn die Koeffizienten des Verfahrens der Bedingungsgleichung

$$\sum_i b_i = 1 \quad (13)$$

genügen, genau dann die Konsistenzordnung  $p = 2$ , wenn sie zusätzlich der Bedingungsgleichung

$$\sum_i b_i c_i = \frac{1}{2} \quad (14)$$

genügen; genau dann die Konsistenzordnung  $p = 3$ , wenn sie zusätzlich zu den zwei bisherigen Bedingungsgleichungen den Bedingungsgleichungen

$$\sum_i b_i c_i^2 = \frac{1}{3} \quad (15)$$

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6} \quad (16)$$

genügen; genau dann die Konsistenzordnung  $p = 4$ , wenn sie zusätzlich den vier Bedingungsgleichungen

$$\sum_i b_i c_i^3 = \frac{1}{4} \quad (17)$$

$$\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8} \quad (18)$$

$$\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12} \quad (19)$$

$$\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24} \quad (20)$$

genügen. Dabei erstrecken sich die Summationen jeweils von 1 bis  $s$ .

## Einige Anmerkungen zu den Butcher-Bäumen

Es sei die autonome DGL

$$y' = f(y) \tag{21}$$

mit  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  genügend oft diffbar gegeben. Dann gilt unter Ausnutzung der DGL (21)

$$\begin{aligned} y' &= f(y) = f \\ y'' &= f'(y)y' = f'f \\ y''' &= f''(y)f(y)f(y) + f'(y)'f(y)'y' = f''ff + f'f'f \end{aligned}$$

Die Butcher-Bäume lassen sich auch für nicht-autonome DGL und  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  über Jacobi Matrizen definieren, in dem Fall der DGL (21) mit  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  gilt dann

$$\begin{aligned} y' &= f(y) = f \\ y'' &= f'(y)y' = f'f \\ y''' &= f''(y)(y', y') + f'(y)y'' = f''(f, f) + f'f'f, \end{aligned}$$

wobei die Argumente von  $y$  wiederum unterdrückt wurden. Anmerkung zur Notation:

$$f^{(k)}(y)[h_1, \dots, h_k] := \frac{\partial^k f}{\partial y_1 \dots \partial y_k}(y)$$

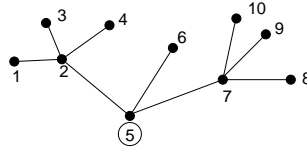
Diese Verkettungen der Ableitungen lassen sich durch *Graphen* ausdrücken.

**Definition 2** Ein numerierter gewurzelter Baum (NGB) ist ein Tripel  $(\lambda\rho\tau) = (V, E, r)$  aus:

- (i) einer Knotenmenge  $V$  (vertices),
- (ii) einer Menge gerichteter Zweige/Äste/Kanten  $E$  (edges),
- (iii) eines ausgewiesenen Wurzelknotens  $r$  (root).

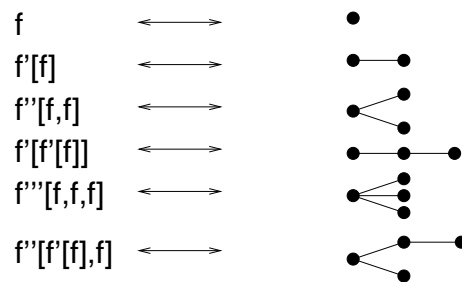
Dabei muss für jeden Knoten  $v \in V$  genau eine Kantenfolge  $\tau_1, \dots, \tau_k \in E$  existieren, so dass ein Weg über  $k$  Zweige/Kanten von  $r$  nach  $v$  existiert. Mit  $|\tau|$  wird die Ordnung des Baumes bezeichnet, dies ist die Anzahl der Knoten.

**Beispiel 1:**



Für diesen Baum ist der Knoten mit der Nummer 5 der ausgewiesene Wurzelknoten. Ist der Wurzelknoten nicht angegeben, so ist es der einzige Knoten, der nicht Endpunkt eines Zweigs ist. Von ihm aus beginnen die Zweige, so dass ihre Richtung nicht extra gekennzeichnet werden muss.

**Beispiel 2:**

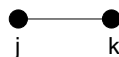


Jedes  $f$  ohne Ableitungen entspricht einem Blatt (Endpunkt), und die Ordnung der Ableitung entspricht der Anzahl der nachfolgenden Äste an dem zugehörigen Knoten. Dieser Baum ist nicht numeriert. Man spricht dann von einem gewurzelten Baum  $\rho\tau$ . Wir nutzen die Bäume nur als Notationen für das Runge-Kutta Verfahren. Die folgenden Gewichte  $\Phi$  lassen sich begründen und herleiten (für Interessierte: siehe z.B. Butcher, *The Numerical Analysis Of Ordinary Differential Equations. Runge-Kutta And General Linear Methods*), an dieser Stelle soll jedoch darauf verzichtet werden und nur die Notation eingeführt werden:

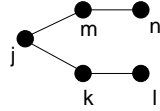
a)  $\Phi(\tau) = \sum_j b_j :$



b)  $\Phi(\tau) = \sum_j \sum_k b_j a_{j,k} = \sum_j b_j c_j :$



$$c) \Phi(\tau) = \sum_j \sum_m \sum_k \sum_n \sum_l b_j a_{j,m} a_{m,n} a_{j,k} a_{k,l} :$$



**Definition 3** Ein  $s$ -stufiges Runge-Kutta Verfahren für die autonome Gleichung  $y' = f(y)$  hat genau dann die Ordnung  $p$ , wenn

$$\Phi(\tau) = \sum_{j=1}^s b_j \Phi_j(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)} \quad (22)$$

für alle Butcher-Bäume  $\tau$  der Ordnung  $\leq p$  gilt.

Für  $m$  Bäume  $\tau_1, \dots, \tau_m$  kann gezeigt werden, dass

$$\gamma(\tau) = |\tau| \gamma(\tau_1) \cdots \gamma(\tau_m) \quad (23)$$

gilt, wobei  $\gamma(\bullet) = 1$ .