Runge-Kutta-Theorie: Explizite, eingebettete und implizite RK-Verfahren

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Gliederung

- Runge-Kutta-Verfahren
  - Explizite Verfahren
  - Eingebettete Verfahren
  - Implizite Verfahren

- Zusammenfassung

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Explizite Verfahren (1)

Definition 1.1:

Ein RK-Verfahren $\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$ heißt ***explizit***, wenn A eine streng untere Dreiecksmatrix ist.

Ein Zeitschritt $I_h(y) = y + \sum_{j=1}^{s} b_j k_j$ in der Form

$$k_1 := h f(y), \qquad k_i := h f\left(y + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j\right), \quad i = 2, \ldots, s$$

ist dann mit s Auswertungen von f ausführbar.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Explizite Verfahren (2)

Bemerkung 1.2:

Es genügt, wenn die Matrix A durch Permutation auf strenge Dreiecksform gebracht werden kann.

Bemerkung 1.3:

a) Es existieren explizite RK-Verfahren beliebig hoher Ordnung.

b) Ein explizites s-stufiges Verfahren hat höchstens die Ordnung s.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Explizite Verfahren (3)

„*Euler-*“ oder „*Polygonzug-Verfahren*“

s = 1

p = 1

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

$$I_h(y) = y + h\,f(y)$$

„*Runge 2.ter Ordnung*“

s = 2

p = 2

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

$$I_h(y) = y + h\,f\left(y + \frac{h}{2} f(y)\right)$$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Explizite Verfahren (4)

„Heun 2.ter Ordnung"

s = 2

p = 2

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$I_h(y) = y + \frac{h}{2} f(y) + \frac{h}{2} f\big(y + h f(y)\big)$$

„Kutta 3.ter Ordnung"

s = 3

p = 3

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 2 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Explizite Verfahren (5)

„*klassisches RK-Verfahren 4.ter Ordnung*“

s = 4

p = 4

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

Dieses Verfahren bietet einen akzeptablen Kompromiss zwischen Aufwand (Stufenzahl s) und Genauigkeit (Ordnung p).

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (1)

Problem:

Mittels zweier unterschiedlicher Verfahren soll eine Abschätzung des lokalen Verfahrensfehlers berechnet werden, um diese für die Schrittweitensteuerung zu verwenden.

Idee:

Benutze explizite Verfahren I_h bzw. $\hat{I}_h$ der Ordnung p bzw. $\hat{p}=p+1$, die <u>gemeinsame Zwischenstufen haben.</u> Somit ist der nötige Aufwand zur simultanen Ausführung beider Verfahren geringer als der Aufwand, der zur Ausführung jedes einzelnen Verfahrens vonnöten ist.

Folgerung und Definition 2.1:

Die Butcher-Matrix von I_h ist eine Teilmatrix („***Einbettung***“) der Butcher-Matrix von $\hat{I}_h$.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (2)

Annahme:

$$\left\|F_h(y)-\hat{I}_h(y)\right\|=O\left(h^{p+2}\right)\ll\left\|F_h(y)-I_h(y)\right\|=\left\|e(y)h^{p+1}\right\|+O\left(h^{p+2}\right)$$

Damit liefert $E(h,y)=\hat{I}_h(y)-I_h(y)$ eine Fehlerschätzung für das Verfahren niederer Ordnung:

$$\left\|F_h(y)-\hat{I}_h(y)\right\|\ll\left\|F_h(y)-I_h(y)\right\|\approx\left\|E(h,y)\right\|$$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (3)

Betrachte $$h \rightarrow h\left(\frac{\varepsilon}{\left\|E(h,y)\right\|}\right)^{\frac{1}{p+1}}$$

$$\left\|F_h(y) - \hat{I}_h(y)\right\| \ll \left\|F_h(y) - I_h(y)\right\| \approx \varepsilon$$

Zwei mögliche Approximationen von $F_h(y)$ stehen zur Wahl:

a) Benutze $I_h(y)$ als Approximation. Damit ist die Schrittweite optimal groß, das genauere $\hat{I}_h(y)$ wird nur zur Schrittweitensteuerung benutzt.

b) Benutze $\hat{I}_h(y)$ als Approximation. Hier sind die Schrittweiten tendenziell zu klein, denn es gilt $\left\|F_h(y) - \hat{I}_h(y)\right\| \ll \varepsilon$.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (4)

Beispiel für das *Fehlberg4(5)-Verfahren*:

$$
\begin{array}{c|cccccc}
0 & 0 & & & & & \\
\frac{2}{9} & \frac{2}{9} & 0 & & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{12} & \frac{1}{4} & 0 & & & \\
\frac{3}{4} & \frac{69}{128} & \frac{-243}{128} & \frac{135}{64} & 0 & & \\
1 & \frac{-17}{12} & \frac{27}{4} & \frac{-27}{5} & \frac{16}{15} & 0 & \\
\frac{5}{6} & \frac{65}{432} & \frac{-5}{16} & \frac{13}{16} & \frac{4}{27} & \frac{5}{144} & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{9} & 0 & \frac{9}{20} & \frac{16}{45} & \frac{1}{12} & 0 \\
 & \frac{47}{450} & 0 & \frac{12}{25} & \frac{32}{225} & \frac{1}{30} & \frac{6}{25} \\
 & \frac{-1}{150} & 0 & \frac{3}{100} & \frac{-16}{75} & \frac{-1}{20} & \frac{6}{25}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{l}
\leftarrow\ k_1 = h f(y) \\
\leftarrow\ k_2 = h f\left(y + \frac{2}{9} k_1\right) \\
\quad\ \vdots \\
\quad\ \vdots \\
\quad\ \vdots \\
\leftarrow\ k_6 = h f\left(y + \frac{65}{432} k_1 + \cdots\right) \\
\leftarrow\ b^T \\
\leftarrow\ \hat{b}^T \\
\leftarrow\ \hat{b}^T - b^T
\end{array}
$$

Somit ist

$$E(h,y) = -\frac{1}{150} k_1 + \frac{3}{100} k_3 - \frac{16}{75} k_4 - \frac{1}{20} k_5 + \frac{6}{25} k_6$$

eine Abschätzung des führenden Fehlerterms des Verfahrens 4.ter Ordnung

$$I_h(y) = y + \frac{1}{9} k_1 + \frac{9}{20} k_3 + \frac{16}{45} k_4 + \frac{1}{12} k_5 .$$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (5)

FSAL-Prinzip (First Same As Last):

Stimmt der Vektor $\left(b_1,\ldots,b_s\right)$ des niederen (s-stufigen) Verfahrens I_h mit der letzten Stufenzeile $a_{s+1,1},\ldots,a_{s+1,s}$ des höheren (s+1-stufigen) Verfahrens $\hat{I}_h$ überein, so gilt folgendes:

$$y_{s+1} = I_h\left(y\right)$$

Beobachtung:

Wenn $\tilde{y} = I_h\left(y\right)$ als Approximation von $F_h\left(y\right)$ angenommen wird, so ist die erste Stufe $\tilde{k}_1 = h\,f\left(\tilde{y}\right)$ des nächsten Schrittes bereits durch die letzte Stufe $k_{s+1} = h\,f\left(y_{s+1}\right)$ des vorherigen Schrittes gegeben.

Folgerung:

Die Fehlerabschätzung wird automatisch geliefert.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Eingebettete Verfahren (6)

Beispiel für das *Fehlberg3(4)-Verfahren mit FSAL*:

$$\begin{array}{c|ccccc}
0 & 0 & & & & \\
\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & & & \\
\frac{4}{9} & \frac{4}{81} & \frac{32}{81} & 0 & & \\
\frac{6}{7} & \frac{57}{98} & \frac{-432}{343} & \frac{1053}{686} & 0 & \\
1 & \frac{1}{6} & 0 & \frac{27}{52} & \frac{49}{156} & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{6} & 0 & \frac{27}{52} & \frac{49}{165} & 0 \\
 & \frac{43}{288} & 0 & \frac{243}{416} & \frac{343}{1872} & \frac{1}{12} \\
 & \frac{-5}{288} & 0 & \frac{27}{416} & \frac{-245}{1872} & \frac{1}{12}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \\ \\
\leftarrow \; b^T \\
\leftarrow \; \hat{b}^T \\
\leftarrow \; \hat{b}^T - b^T
\end{array}$$

Somit ist $$y_5 = y + \frac{1}{6} k_1 + \frac{27}{52} k_3 + \frac{49}{156} k_4 = I_h(y)$$

Also ist $k_5 = h\,f(y_5) = h\,f(I_h(y))$ die erste Stufe des nächsten Zeitschritts (beim Schrittwechsel $h \to \tilde{h}$ ist sie $\tilde{h}\,f(y_5)$).

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (1)

Problem:

Bei nicht expliziten Runge-Kutta Verfahren auf $\mathbb{R}^N$ muss in jedem Zeitschritt $I_h(y)$ ein nichtlineares Gleichungssystem

$$y_i = y + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f(y_j), \qquad i = 1, \ldots, s$$

für die Zwischenstufen numerisch gelöst werden.

Lösung:

Hierzu kann man ein *Newton-Verfahren* anwenden, was jedoch hohen Aufwand verursacht, da zur Ausführung eines Newton-Schrittes die Ableitung benötigt wird.

Alternativ bedient man sich der *Fixpunkt-Iteration*.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (2)

Newton-Verfahren:

$$y^{(k+1)} := y^{(k)} - \left(f'\left(y^{(k)}\right)\right)^{-1} f\left(y^{(k)}\right)$$

Die Startwerte sind vorgegeben oder werden mittels beliebiger expliziter Verfahren konstruiert.

Fixpunkt-Iteration:

$$y_i^{(k+1)} = y + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f\left(y_j^{(k)}\right) \qquad \begin{array}{l} i=1,\ldots,s \\ k=0,1,2,\ldots \end{array}$$

Der Startwert ist $y_1^{(0)} = \ldots = y_s^{(0)} = y$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (3)

Beispiel für das *Trapezverfahren* der Ordnung 2:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \qquad \begin{aligned} y_1 &= y \\ y_2 &= y + \frac{h}{2} f(y) + \frac{h}{2} f(y_2) \\ I_h(y) &= y_2 \end{aligned} \qquad Y = I_h(y) = y + \frac{h}{2} f(y) + \frac{h}{2} f(Y)$$

Um die Ordnung zu erhalten reicht eine *Fixpunktiteration* mit $Y^{(0)} = y$:

$$Y^{(1)} = y + \frac{h}{2} f(y) + \frac{h}{2} f\left(Y^{(0)}\right) = y + h\,f(y)$$

Das resultierende approximative *Trapezverfahren* ist identisch mit *Heun* 2.ter Ordnung.

$$Y^{(1)} = y + h\,f(y) \qquad (\textit{Prädiktor})$$

$$I_h^{(1)}(y) = y + \frac{h}{2} f(y) + \frac{h}{2} f\left(Y^{(1)}\right) \qquad (\textit{Korrektor})$$

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

„Heun 2.ter Ordnung“

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (4)

Satz 3.1: ***(Gauß-Legendre-Verfahren)***

Zu s-Stufen existieren Verfahren der Ordnung 2s.

Seien $c_1,\dots,c_s$ die s Nullstellen des Legrende-Polynoms $P_s^*(c)=\frac{d^s}{dc^s}c^s(1-c)^s$.

Sei das Butcher-Schema durch *Quad* und *Simp* eindeutig festgelegt

$$\mathrm{Quad}^{(s)}:\quad \sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{k-1}=\frac{1}{k} \qquad k=1,\dots,s$$

$$\mathrm{Simp}^{(s)}:\quad \sum_{j=1}^{s} a_{ij} c_j^{k-1}=\frac{c_i^k}{k} \qquad i,k=1,\dots,s$$

Damit hat das s-Stufige *Gauß-Legendre-Verfahren* die Ordnung 2s.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (5)

Beispiele für *Gauß-Legendre-Verfahren*:

Das *1-stufige Verfahren der Ordnung 2*:

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

Der Zeitschritt $y \rightarrow Y = I_h(y)$ mit

$$y_1 = y + \frac{h}{2} f(y_1), \qquad Y = y + h f(y_1) \quad \Rightarrow \quad y_1 = \frac{1}{2}(y+Y)$$

ist als Lösung der Gleichung $Y = y + h f\left(\frac{1}{2}(y+Y)\right)$ definiert.

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Implizite Verfahren (6)

Das *2-stufige Verfahren der Ordnung 4*:

$$
\begin{array}{c|cc}
\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4}-\frac{\sqrt{3}}{6} \\
\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4}+\frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\
\hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

Das *3-stufige Verfahren der Ordnung 6*:

$$
\begin{array}{c|ccc}
\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{2}{9}-\frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36}-\frac{\sqrt{15}}{30} \\
\frac{1}{2} & \frac{5}{36}+\frac{\sqrt{15}}{24} & \frac{2}{9} & \frac{5}{36}-\frac{\sqrt{15}}{24} \\
\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36}+\frac{\sqrt{15}}{30} & \frac{2}{9}+\frac{\sqrt{15}}{15} & \frac{5}{36} \\
\hline
 & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18}
\end{array}
$$

Lukas Klich
luke3d@uni-paderborn.de
Universität Paderborn

Zusammenfassung

- Explizite RK-Verfahren
- Eingebettete RK-Verfahren
- Implizite RK-Verfahren