Computing 6, 61—71 (1970)

Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme

Von

E. Fehlberg, Huntsville

(Eingegangen am 8. September 1969)

Zusammenfassung — Summary

Klassische Runge-Kutta-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle und ihre Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme. Es werden neue, explizite RUNGE-KUTTA-Formeln vierter und niedrigerer Ordnung mitgeteilt. Diese Formeln enthalten eine Schrittweiten-Kontrolle, die auf einer vollständigen Erfassung des ersten Gliedes des lokalen Abbruchfehlers basiert. Die Formeln haben wesentlich kleinere Abbruchfehler als entsprechende Formeln anderer Autoren. Diese neuen Formeln eignen sich zur numerischen Integration von in den Raumvariablen diskretisierten Wärmeleitungsproblemen, da die bei solchen Problemen auftretenden Stabilitätsverhältnisse die zulässige Schrittweite von RUNGE-KUTTA-Formeln höherer Ordnung beeinträchtigen würden. Die Formeln werden auf ein Beispiel für ein Wärmeleitungsproblem angewandt.

Classical Fourth- and Lower Order Runge-Kutta Formulas with Stepsize Control and their Application to Heat Transfer Problems. New explicit fourth- and lower order RUNGE-KUTTA formulas are presented. These formulas include a stepsize control procedure based on a complete coverage of the leading term of the local truncation error. The formulas have considerably smaller truncation errors than corresponding formulas of other authors. These new formulas are suitable for the numerical integration of heat transfer problems after discretisation of these problems in the space variables, since stability considerations, occurring in such problems, would eliminate the benefits (large permissible stepsize) of high-order RUNGE-KUTTA formulas. The formulas are applied to an example for a heat transfer problem.

Einleitung

In zwei früheren Arbeiten [2], [3] hat der Autor RUNGE-KUTTA-Formeln höherer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle hergeleitet. Diese Formeln sind für die numerische Integration von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen sehr geeignet, da sie — ohne Genauigkeitsverlust — gestatten, die Integration in sehr viel größerer Schrittweite durchzuführen als dies bei RUNGE-KUTTA-Formeln von niederer Ordnung möglich ist.

Wärmeleitungsprobleme (eindimensionale und auch mehrdimensionale) lassen sich durch Diskretisierung (in der x-Variablen bzw. in den Raumvariablen) in Probleme für Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen in t umwandeln. Für solche Probleme erweisen sich RUNGE-KUTTA-Formeln von niederer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle, wie sie in dieser Arbeit mitgeteilt werden sollen, als vorteilhaft. Denn die bei solchen

Problemen auftretenden Stabilitätsverhältnisse (man vergleiche hierzu etwa E. T. GOODWIN [5], S. 113—115) verhindern die Verwendung einer hinreichend großen Schrittweite, die allein RUNGE-KUTTA-Formeln höherer Ordnung wirtschaftlich macht. Dagegen haben sich die in Teil 2 dieser Arbeit mitgeteilten RUNGE-KUTTA-Formeln von niederer Ordnung — RK 1 (2), RK 2 (3) und RK 3 (4) für solche Probleme als recht brauchbar erwiesen, wie die Ergebnisse des Beispieles in Teil 3 zeigen. Die Herleitung dieser RUNGE-KUTTA-Formeln findet man in einem vom Autor herausgebrachten, internen NASA Technical Report [4]. Dort sind auch weitere Beispiele angegeben.

Es ist wesentlich, daß der Abbruchfehler einer RUNGE-KUTTA-Formel so klein wie möglich ist, da die zulässige Schrittweite natürlich von der Größe des Abbruchfehlers abhängt. Wir haben daher versucht, in dieser Arbeit RUNGE-KUTTA-Formeln mit möglichst kleinem Abbruchfehler anzugeben.

1. Runge-Kutta-Formeln vierter Ordnung

Wir gehen aus von dem (in Vektorform geschriebenen) System von Differentialgleichungen:

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

und suchen ein Paar von RUNGE-KUTTA-Formeln vierter und fünfter Ordnung von folgender Beschaffenheit:

$$\begin{aligned} f_0 &= f(x_0, y_0), \\ f_\varkappa &= f\left(x_0 + \alpha_\varkappa h,\quad y_0 + h \sum_{\lambda=0}^{\varkappa-1} \beta_{\varkappa\lambda} f_\lambda\right) \quad (\varkappa = 1, 2, 3, 4, 5) \end{aligned} \tag{2}$$

und

$$\begin{aligned} y &= y_0 + h \sum_{\varkappa=0}^{4} c_\varkappa f_\varkappa + 0(h^5), \\ \hat{y} &= y_0 + h \sum_{\varkappa=0}^{5} \hat{c}_\varkappa f_\varkappa + 0(h^6) \end{aligned} \tag{3}$$

(h = Integrationsschrittweite).

Die Gleichungen (3) besagen, daß unsere beiden RUNGE-KUTTA-Formeln in den ersten fünf Auswertungen $f_0, f_1, \ldots, f_4$ übereinstimmen sollen. Durch Hinzufügen einer sechsten Auswertung soll man weiter eine Formel fünfter Ordnung erhalten. Die Differenz der beiden Formeln (3) liefert dann einen Näherungswert für den Abbruchfehler der ersten Formel (3).

Es ist bemerkenswert, daß es durch eine einzige zusätzliche Auswertung f_5 möglich ist, eine auf fünf Auswertungen $f_0, f_1, \ldots, f_4$ aufgebaute RUNGE-KUTTA-Formel vierter Ordnung zu einer Formel fünfter Ordnung zu ergänzen.

Die Verwendung von fünf Auswertungen für die Formel vierter Ordnung — anstelle der üblichen vier Auswertungen — macht es möglich, den lokalen Abbruchfehler wesentlich zu verkleinern.

Ein Formelpaar vierter und fünfter Ordnung wurde bereits im Jahre 1966 von D. SARAFYAN [7] mitgeteilt; das gleiche Formelpaar wurde im Jahre 1969 von R. ENGLAND [1] veröffentlicht. Jedoch ist die Formel vierter Ordnung dieser Autoren auf nur vier Auswertungen f_0, f_1, f_2, f_3 aufgebaut und sie benutzen zwei zusätzliche Auswertungen für die Formel fünfter Ordnung.

In Tab. 1 und Tab. 2 haben wir das Koeffizienten-Schema für unsere neue Formel und für SARAFYANS Formel, sowie in (4) und (5) die Näherungswerte für die Abbruchfehler dieser Formeln, zusammengestellt.

Tabelle 1. *Unsere Formel RK 4 (5)*

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	1	2	3	4	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0	0					$\frac{25}{216}$	$\frac{16}{135}$
1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					0	0
2	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				$\frac{1\,408}{2\,565}$	$\frac{6\,656}{12\,825}$
3	$\frac{12}{13}$	$\frac{1\,932}{2\,197}$	$-\frac{7\,200}{2\,197}$	$\frac{7\,296}{2\,197}$			$\frac{2\,197}{4\,104}$	$\frac{28\,561}{56\,430}$
4	1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3\,680}{513}$	$-\frac{845}{4\,104}$		$-\frac{1}{5}$	$-\frac{9}{50}$
5	$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3\,544}{2\,565}$	$\frac{1\,859}{4\,104}$	$-\frac{11}{40}$		$\frac{2}{55}$

$$T\,E = \left(-\frac{1}{360} f_0 + \frac{128}{4\,275} f_2 + \frac{2\,197}{75\,240} f_3 - \frac{1}{50} f_4 - \frac{2}{55} f_5\right) h. \tag{4}$$

Tabelle 2. SARAFYANS-*Formel* RK 4 (5)

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	1	2	3	4	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0	0					$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{24}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					0	0
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$				$\frac{2}{3}$	0
3	1	0	-1	2			$\frac{1}{6}$	$\frac{5}{48}$
4	$\frac{2}{3}$	$\frac{7}{27}$	$\frac{10}{27}$	0	$\frac{1}{27}$			$\frac{27}{56}$
5	$\frac{1}{5}$	$\frac{28}{625}$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{546}{625}$	$\frac{54}{625}$	$-\frac{378}{625}$		$\frac{125}{336}$

$$T\,E = \left(\frac{1}{8} f_0 + \frac{2}{3} f_2 + \frac{1}{16} f_3 - \frac{27}{56} f_4 - \frac{125}{336} f_5\right) h. \tag{5}$$

Das erste Glied des Abbruchfehlers der Formeln vierter Ordnung besteht aus neun Terms, deren numerische Koeffizienten $T_1, T_2, \ldots, T_9$ im folgenden wiedergegeben sind. Durch geeignete Wahl des noch freien Parameters α_2 in unseren Formeln können wir erreichen, daß diese Fehler-Koeffizienten für unsere Formel RK 4 (5) klein ausfallen.

Für unsere Formel RK 4 (5):

$$\begin{aligned} &T_1 = \frac{1}{780}, \quad T_2 = \frac{1}{12\,480}, \quad T_3 = \frac{1}{4\,160}, \quad T_4 = \frac{1}{12\,480}, \\ &T_5 = -\frac{1}{780}, \quad T_6 = -\frac{1}{12\,480}, \quad T_7 = -\frac{1}{16\,640}, \\ &T_8 = -\frac{1}{8\,320}, \quad T_9 = -\frac{1}{49\,920}. \end{aligned} \tag{6}$$

Für Sarafyans Formel RK 4 (5):

$$\begin{aligned} &T_1 = -\frac{1}{120}, \quad T_2 = \frac{1}{480}, \quad T_3 = -\frac{1}{240}, \quad T_4 = -\frac{1}{720}, \\ &T_5 = \frac{1}{120}, \quad T_6 = -\frac{1}{480}, \quad T_7 = \frac{1}{960}, \quad T_8 = \frac{1}{480}, \\ &T_9 = \frac{1}{2\,880}. \end{aligned} \tag{7}$$

Vergleichen wir (6) mit (7), so sehen wir, daß unsere Koeffizienten T_1 und T_5 nur gleich 2/13 der entsprechenden Koeffizienten von Sarafyan sind. Für die übrigen Koeffizienten ist das Verhältnis sogar noch kleiner (1/26 bzw. 3/52).

Infolge der kleineren Fehlerkoeffizienten unserer Formel RK 4 (5) dürfen wir erwarten, daß wir — bei einer vorgegebenen Genauigkeitsforderung — mit einer größeren Integrationsschrittweite rechnen dürfen als dies bei Sarafyans Formel möglich ist.

Es sei noch erwähnt, daß Sarafyans Koeffizienten (7) bis auf T_7 mit den Koeffizienten der viel benutzten Runge-Kutta-Formel RK 4 von W. Kutta ([6], S. 443) übereinstimmen (für Kuttas Formel ist $T_7 = 1/160$). Sarafyans Formel wird daher kaum eine größere Schrittweite zulassen als die Standard-Formel von Kutta.

2. Runge-Kutta-Formeln dritter und niederer Ordnung

Da eine Runge-Kutta-Formel vierter Ordnung vier Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt erfordert, benötigt man für ein Formelpaar RK 3 (4) ebenfalls mindestens vier Auswertungen.

Es läßt sich jedoch zeigen, daß man nicht alle Bedingungsgleichungen für die Runge-Kutta-Koeffizienten solch eines Formelpaares erfüllen kann, wenn man nur vier Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt zuläßt.

Läßt man dagegen fünf Auswertungen pro Schritt zu, so kann man es so einrichten, daß man die fünfte Auswertung als erste Auswertung für den nächsten Integrationsschritt übernehmen kann. Abgesehen vom ersten Integrationsschritt benötigt man dann also für ein Formelpaar RK 3 (4) nur vier Auswertungen pro Schritt.

Durch eine geeignete Wahl des noch freien Parameters α_2 können wir dann wieder erreichen, daß die hier auftretenden Fehler-Koeffizienten T_1, T_2, T_3, T_4 für unsere Formel RK 3 (4) klein ausfallen.

In Tab. 3 haben wir die Koeffizienten unserer neuen Formel RK 3 (4) zusammengestellt und in (8) den Näherungswert für den Abbruchfehler unserer Formel dritter Ordnung angegeben.

Tabelle 3. RK 3 (4)

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$				$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
		0	1	2	3		
0	0	0				$\frac{79}{490}$	$\frac{229}{1\,470}$
1	$\frac{2}{7}$	$\frac{2}{7}$				0	0
2	$\frac{7}{15}$	$\frac{77}{900}$	$\frac{343}{900}$			$\frac{2\,175}{3\,626}$	$\frac{1\,125}{1\,813}$
3	$\frac{35}{38}$	$\frac{805}{1\,444}$	$-\frac{77\,175}{54\,872}$	$\frac{97\,125}{54\,872}$		$\frac{2\,166}{9\,065}$	$\frac{13\,718}{81\,585}$
4	1	$\frac{79}{490}$	0	$\frac{2\,175}{3\,626}$	$\frac{2\,166}{9\,065}$		$\frac{1}{18}$

$$TE = \left(\frac{4}{735} f_0 - \frac{75}{3\,626} f_2 + \frac{5\,776}{81\,585} f_3 - \frac{1}{18} f_4\right) h. \tag{8}$$

Die vier Fehler-Koeffizienten unserer Formel dritter Ordnung lauten:

$$T_1 = \frac{1}{228}, \quad T_2 = 0, \quad T_3 = -\frac{1}{855}, \quad T_4 = -\frac{1}{2\,565}. \tag{9}$$

Zum Vergleich geben wir noch die Fehler-Koeffizienten der bekannten RUNGE-KUTTA-Formel dritter Ordnung von W. KUTTA ([6], S. 440) an:

$$T_1 = -\frac{1}{24}, \quad T_2 = 0, \quad T_3 = \frac{1}{24}, \quad T_4 = 0. \tag{10}$$

Der größte Koeffizient (T_1) von (9) ist nur gleich 2/19 des größten Koeffizienten (T_3) von (10). Wir können daher wieder erwarten, daß unsere Formel RK 3 (4) weniger Integrationsschritte erfordert und schneller sein wird als KUTTAs Formel dritter Ordnung, zumal letztere, wenn man sie mit der üblichen Schrittweiten-Kontrolle (Wiederholung der Berechnung zweier Schritte als ein Schritt mit doppelter Schrittweite) programmiert, fünf Auswertungen pro Schritt erfordert.

Da in Tab. 3 $\alpha_4 = 1$ ist und die Koeffizienten β_{40}, β_{41}, β_{42}, β_{43} mit den Gewichtsfaktoren c_0, c_1, c_2, c_3 übereinstimmen, kann in der Tat die Auswertung f_4 als Auswertung f_0 für den nächsten Schritt übernommen werden, wodurch sich — abgesehen vom ersten Integrationsschritt — die Zahl der Auswertungen pro Schritt für unsere Formel RK 3 (4) auf vier reduziert.

Eine Runge-Kutta-Formel RK 2 (3) mit drei Auswertungen läßt sich leicht durch Ergänzung des sogenannten verbesserten Euler-Cauchy-Verfahrens zu einer Formel dritter Ordnung gewinnen. In Tab. 4 haben wir die Koeffizienten einer so erhältlichen Formel RK 2 (3) angegeben und in (11) den Näherungswert für ihren Abbruchfehler.

Tabelle 4. RK 2 (3) — *auf dem verbesserten* Euler-Cauchy-*Verfahren basierend*

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 1	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0	0		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$
1	1	1		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{6}$
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$		$\frac{2}{3}$

$$T\,E = \left(\frac{1}{3} f_0 + \frac{1}{3} f_1 - \frac{2}{3} f_2\right) h. \tag{11}$$

Die Fehler-Koeffizienten des verbesserten Euler-Cauchyschen Verfahren ergeben sich zu:

$$T_1 = -\frac{1}{6}, \quad T_2 = \frac{1}{12}. \tag{12}$$

Eine Runge-Kutta-Formel RK 2 (3) mit sehr viel kleineren Fehler-Koeffizienten können wir erhalten, wenn wir vier Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt zulassen. Wir können, ähnlich wie bei unserer Formel RK 3 (4), jetzt fordern, daß die vierte Auswertung wieder als erste Auswertung für den nächsten Schritt benutzbar sein soll, sodaß wir also — vom ersten Integrationsschritt abgesehen — wieder nur drei Auswertungen pro Schritt benötigen. In Tab. 5 haben wir solch eine Formel RK 2 (3) angegeben und in (13) den Näherungswert für ihren Abbruchfehler.

Tabelle 5. RK 2 (3)

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 1	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 2	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0	0			$\frac{214}{891}$	$\frac{533}{2\,106}$
1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$			$\frac{1}{33}$	0
2	$\frac{27}{40}$	$-\frac{189}{800}$	$\frac{729}{800}$		$\frac{650}{891}$	$\frac{800}{1\,053}$
3	1	$\frac{214}{891}$	$\frac{1}{33}$	$\frac{650}{891}$		$-\frac{1}{78}$

$$T\,E = \left(-\frac{23}{1\,782} f_0 + \frac{1}{33} f_1 - \frac{350}{11\,583} f_2 + \frac{1}{78} f_3\right) h. \tag{13}$$

Die beiden Fehler-Koeffizienten für die Formel zweiter Ordnung von Tab. 5 ergeben sich zu:

$$T_1 = -\frac{1}{2\,112}, \quad T_2 = +\frac{1}{2\,112}. \tag{14}$$

Vergleich von (14) mit (12) zeigt, daß die Fehler-Koeffizienten (14) nur gleich 1/352 bzw. gleich 1/176 der Fehler-Koeffizienten (12) sind.

Der Vollständigkeit halber sei noch erwähnt, daß das verbesserte EULER-CAUCHY-Verfahren als eine Formel RK 1 (2) mit der EULER-CAUCHY-Formel als RK 1 aufgefaßt werden kann. Tab. 6 zeigt die Koeffizienten dieses Verfahrens und (15) den Näherungswert für den Abbruchfehler der EULER-CAUCHY-Formel.

Tabelle 6. RK 1 (2) — *verbessertes* EULER-CAUCHY-*Verfahren*

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0		1	$\frac{1}{2}$
1	1	1		$\frac{1}{2}$

$$TE = \frac{1}{2}(f_0 - f_1)\,h. \tag{15}$$

Aus Tab. 6 ist ersichtlich, daß diese Formel RK 1 (2) — vom ersten Integrationsschritt abgesehen — nur eine einzige Auswertung pro Schritt benötigt, da die zweite Auswertung wieder als erste Auswertung für den nächsten Schritt übernommen werden kann.

Die EULER-CAUCHY-Formel hat den Fehler-Koeffizienten:

$$T_1 = -\frac{1}{2}. \tag{16}$$

Natürlich kann man, wenn man zwei Auswertungen pro Schritt zuläßt, RUNGE-KUTTA-Formeln RK 1 (2) mit einem wesentlich kleineren Fehler-Koeffizienten T finden. Wir geben in Tab. 7 ein Beispiel dafür und in (17) den Näherungswert für den Abbruchfehler dieser Formel.

Tabelle 7. RK 1 (2)

$\varkappa \backslash \lambda$	$\alpha_\varkappa$	$\beta_{\varkappa\lambda}$ 0	1	$c_\varkappa$	$\hat{c}_\varkappa$
0	0			$\frac{1}{256}$	$\frac{1}{512}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		$\frac{255}{256}$	$\frac{255}{256}$
2	1	$\frac{1}{256}$	$\frac{255}{256}$		$\frac{1}{512}$

$$TE = \frac{1}{512}(f_0 - f_2)\,h. \tag{17}$$

Die Formel RK 1 der Tab. 7 hat den Fehler-Koeffizienten:

$$T_1 = -\frac{1}{512}. \tag{18}$$

Obwohl die Formel RK 1 (2) der Tab. 7 zwei Auswertungen pro Schritt (drei Auswertungen für den ersten Integrationsschritt) erfordert, ist sie der nur eine Auswertung pro Schritt (zwei Auswertungen für den ersten Schritt) benötigenden Formel der Tab. 6 im allgemeinen überlegen. Denn wegen des sehr viel kleineren Abbruchfehlers läßt sie im allgemeinen eine erheblich größere Schrittweite zu als das verbesserte EULER-CAUCHY-Verfahren der Tab. 6.

3. Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme

Zur Einführung betrachten wir das einfache eindimensionale Wärmeeitungsproblem:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

$$\text{Anfangsbedingung: } t = 0 : u(x, 0) = u_0(x). \tag{19}$$

$$\text{Randbedingungen: } \begin{cases} x = 0 : u(0, t) = b_0(t), \\ x = 1 : u(1, t) = b_1(t). \end{cases}$$

Gesucht ist also eine Funktion u — im allgemeinen die Temperatur — von x und t, die außer der Wärmeleitungsgleichung noch gewissen Anfangs- und Randbedingungen genügt.

Das bekannteste und älteste Verfahren zur numerischen Lösung der Wärmeleitungsgleichung besteht darin, die in ihr auftretenden Differentialquotienten durch Differenzenquotienten zu ersetzen. Für die erste Gl. (19) erhält man dann:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2\,u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \tag{20}$$

mit $k = \Delta t$ und $h = \Delta x$.

Gl. (20) kann dann nach $u_{i,j+1}$ aufgelöst werden, und man erhält so u für den nächsten Zeitpunkt $j + 1$ aus den u-Werten für den Zeitpunkt j.

Die Maschenweiten h und k müssen bei diesem Verfahren bekanntlich der Stabilitätsbedingung:

$$r = \frac{k}{h^2} \leqq \frac{1}{2} \tag{21}$$

genügen.

Da man h klein wählen, d. h. das Intervall $0 \leqq x \leqq 1$ fein unterteilen muß, um einigermaßen genaue Werte u zu erhalten, führt die Bedingung (21) zu einem sehr kleinen Wert k für den Zeitschritt. Dies macht diese Differenzen-Methode unter Umständen zu langsam für die Benutzung auf einer elektronischen Rechenanlage.

Um genauere Werte u bei geringerem Zeitaufwand zu erhalten, modifiziere man das Differenzenverfahren in zweifacher Hinsicht. Man ersetze

$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ durch eine bessere Differenzen-Approximation, indem man jetzt auch Differenzen höherer Ordnung verwendet, und man verzichte auf eine Diskretisierung in der t-Richtung, behalte also in dieser Richtung den Differentialquotienten bei.

Anstelle von (20) erhält man dann aus der ersten Gl. (19) das folgende System von gewöhnlichen Differentialgleichungen:

$$\frac{d u_i(\tau)}{d\tau} = \delta^2 u_i(\tau) - \frac{1}{12}\delta^4 u_i(\tau) + \frac{1}{90}\delta^6 u_i(\tau) - + \ldots \tag{22}$$

mit $\tau = \frac{t}{h^2}$ und $\delta^2 u_i(\tau) = u_{i+1}(\tau) - 2\,u_i(\tau) + u_{i-1}(\tau)$, usw.

Die Überführung des Wärmeleitungsproblems (19) in das System gewöhnlicher Differentialgleichungen (22) ist kein neuer Gedanke. Man vergleiche dazu etwa das Buch von E. T. GOODWIN ([5], S. 113). Dort wird auch die Integration von (22) durch das Standard RUNGE-KUTTA-Verfahren vierter Ordnung diskutiert. Es wird dort gezeigt, daß die Stabilitätsgrenze des RUNGE-KUTTA-Verfahrens vierter Ordnung nicht sehr viel höher liegt als die des Differenzenverfahrens (20), nämlich $r \leqq 0{,}7$ anstelle von $r \leqq 0{,}5$. Da das RUNGE-KUTTA-Verfahren einen wesentlich größeren rechnerischen Aufwand darstellt als das Differenzenverfahren (20), mag es daher den Anschein haben, als wären RUNGE-KUTTA-Verfahren nicht sonderlich geeignet für Wärmeleitungsprobleme.

Indessen ist zu beachten, daß die Stabilitätsbedingung wohl die Stabilität garantiert, aber natürlich keinerlei Aussagen über die Größe des lokalen Abbruchfehlers macht. In vielen praktischen Problemen — namentlich solchen, in denen die erste Gleichung (19) durch eine kompliziertere Gleichung zu ersetzen ist — wird man die Integration mit einer erheblich kleineren Schrittweite $k = \Delta t$ durchführen müssen als sich aus der Stabilitätsbedingung ergeben würde, sofern man einigermaßen genaue Werte erhalten will.

Für die Steuerung der Schrittweite ist daher die Kenntnis des lokalen Abbruchfehlers erforderlich. Um möglichst genaue Werte von u_i in (22) zu erhalten, wird man den lokalen Abbruchfehler so klein halten wollen, daß er für den Computer vernachlässigbar wird. Unsere RUNGE-KUTTA-Formeln mit Schrittweiten-Kontrolle, die wir in den Abschnitten 1 und 2 der Arbeit mitgeteilt haben, geben uns die Möglichkeit zu solch einem Vorgehen.

RUNGE-KUTTA-Formeln höherer Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle, die wir in zwei früheren Arbeiten [2], [3] mitgeteilt haben, eignen sich für die Anwendung auf Wärmeleitungsprobleme nicht, da die bei ihnen zu erwartende und sie wirtschaftlich machende Schrittweiten-Vergrößerung hier wegen der Stabilitätsschranken nicht eintritt. Dies gilt im allgemeinen bereits schon für unsere in Abschnitt 1 mitgeteilte Formel RK 4 (5). Hingegen haben sich unsere Formeln RK 1 (2), R K 2 (3) und RK 3 (4) von Abschnitt 2 als vorteilhaft erwiesen, verglichen mit dem Differenzen-Verfahren (20), wie wir jetzt an einem Beispiel zeigen wollen.

Wir betrachten das folgende eindimensionale Wärmeleitungsproblem, dessen exakte Lösung bekannt ist, sodaß wir die Fehler unserer Formeln kontrollieren können:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{2 + x^2} \cdot e^{-u} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

$$\begin{aligned}
&\text{Anfangsbedingung:} && t = 0 : u = 2\,[1 - \log(2 - x^2)] \\
&\text{Randbedingungen:} && \begin{cases} x = 0 : \dfrac{\partial u}{\partial x} = 0, \\ x = 1 : u = 2 + \log(1 + t). \end{cases} \\
&\text{Exakte Lösung:} && u = 2 + \log(1 + t) - 2\log(2 - x^2).
\end{aligned} \tag{23}$$

Bei Verwendung höherer zentraler Differenzen in der x-Richtung läßt sich die erste Gl. (23) in das folgende System gewöhnlicher Differentialgleichungen umschreiben:

$$\left.\begin{aligned}
\frac{du_i(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{2 + x_i^2} \cdot e^{-u_i(\tau)} \Big\{ \delta^2 u_i(\tau) - \frac{1}{12}\delta^4 u_i(\tau) + \\
+ \frac{1}{90}\delta^6 u_i(\tau) - + \cdots \Big\}
\end{aligned}\right\} \tag{24}$$

Die Verwendung der vierten, sechsten usw. Differenzen in (24) erfordern einige Extrapolationen am Rande $x = 1$. Wenn wir die vierten (sechsten) Differenzen mitführen, haben wir angenommen, daß die sechsten (achten) Differenzen in der Nachbarschaft von $x = 1$ konstant sind. Für $x = 0$ ist keine Extrapolation erforderlich, da das Problem in bezug auf $x = 0$ symmetrisch ist. Für unsere Berechnung haben wir das Intervall $0 \leqq x \leqq 1$ in 16 gleiche Teile geteilt ($h = 1/16$). Die numerische Integration von (24) wurde auf einer acht-stelligen digitalen Rechenanlage (IBM 7094) mit einer Toleranz von 10^{-8} für den Abbruchfehler an der Stelle $x = 0$ durchgeführt.

Um das gewöhnliche Differenzen-Verfahren (20) ebenfalls mit Schrittweiten-Kontrolle verwenden zu können, haben wir es zum verbesserten EULER-CAUCHY-Verfahren (Tab. 6) ergänzt, denn bezüglich der Integration nach t ist das Differenzenverfahren offensichtlich mit dem EULER-CAUCHY-Verfahren identisch.

In Tab. 8 haben wir für $t = 100$ die Rechenergebnisse unserer neuen RUNGE-KUTTA-Formeln RK 1 (2), RK 2 (3) und RK 3 (4) mit den Ergebnissen des Differenzen-Verfahrens (EULER-CAUCHY) verglichen. Bei der Bezeichnung der Methode in Tab. 8 findet man auch die Ordnung der höchsten noch berücksichtigten zentralen Differenz in der x-Richtung δ^2, δ^4 oder δ^6 angegeben. Die letzte Spalte in Tab. 8 zeigt den Gesamtfehler (Maximum des Gesamtfehlers für den x-Querschnitt) der einzelnen Verfahren für $t = 100$.

Aus Tab. 8 ist der Genauigkeitsgewinn, den man durch Hinzunahme der vierten und sechsten zentralen Differenzen δ^4 und δ^6 in (24) erzielen kann, unmittelbar ersichtlich. Tab. 8 zeigt weiter, daß die Ergebnisse unserer neuen RUNGE-KUTTA-Formeln von gleicher oder sogar größerer Genauigkeit sind als die der Differenzen-Methode (EULER-CAUCHY) und nur einen Bruchteil der Rechenzeit der letzteren Methode erfordern.

Tabelle 8. *Vergleich der verschiedenen* RUNGE-KUTTA-*Methoden für Problem (23). (Alle Ergebnisse für $t = 100$, Toleranz: 10^{-8}; $h = 1/16$)*

Methode		Ordnung der Methode	Zahl der Schritte	Rechenzeit (min) auf der IBM 7094	Gesamtfehler (maximum) in u
EULER-CAUCHY	δ^2	1	30 721	1.75	$0.1408 \cdot 10^{-2}$
RK 1 (2)	δ^2	1	1 924	0.22	$0.1452 \cdot 10^{-2}$
RK 2 (3)	δ^2	2	822	0.23	$0.1425 \cdot 10^{-2}$
RK 3 (4)	δ^2	3	1 036	0.33	$0.1424 \cdot 10^{-2}$
EULER-CAUCHY	δ^4	1	30 715	2.07	$-0.3767 \cdot 10^{-4}$
RK 1 (2)	δ^4	1	1 998	0.28	$-0.1991 \cdot 10^{-4}$
RK 2 (3)	δ^4	2	1 070	0.36	$-0.1961 \cdot 10^{-4}$
RK 3 (4)	δ^4	3	1 305	0.50	$-0.2086 \cdot 10^{-4}$
EULER-CAUCHY	δ^6	1	30 712	2.33	$-0.2068 \cdot 10^{-5}$
RK 1 (2)	δ^6	1	2 072	0.39	$-0.1848 \cdot 10^{-5}$
RK 2 (3)	δ^6	2	1 227	0.45	$-0.3636 \cdot 10^{-5}$
RK 3 (4)	δ^6	3	1 520	0.61	$-0.4947 \cdot 10^{-5}$

Verzichtet man bei der Differenzen-Methode auf eine Schrittweiten-Kontrolle und benutzt die Schrittweite Δt, die nach der Stabilitätsbedingung noch zulässig ist, so kommt man schneller zum Ziele, indessen sind die Ergebnisse sehr viel ungenauer und man kann in unserem Beispiel keinesfalls vier oder fünf Dezimalstellen garantieren.

Literatur

[1] ENGLAND, R.: Error Estimates for RUNGE-KUTTA Type Solutions to Systems of Ordinary Differential Equations. The Computer Journal **12**, 166—170 (1969).

[2] FEHLBERG, E.: Classical Fifth-, Sixth-, Seventh-, and Eighth-Order RUNGE-KUTTA Formulas with Stepsize Control. NASA Technical Report 287 (1968).

[3] FEHLBERG, E.: Klassische RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle. Comp. **4**, 93—106 (1969).

[4] FEHLBERG, E.: Low-Order Classical RUNGE-KUTTA Formulas with Stepsize Control and their Application to some Heat Transfer Problems. NASA Technical Report 315 (1969).

[5] GOODWIN, E. T. (Editor): Modern Computing Methods. Second Edition. New York: Philosophical Library. 1961.

[6] KUTTA, W.: Beitrag zur näherungsweisen Integration totaler Differentialgleichungen. Z. Math. Phys. **46**, 435—453 (1901).

[7] SARAFYAN, D.: Error Estimation for RUNGE-KUTTA Methods through Pseudo-Iterative Formulas. Technical Report No. 14, Lousiana State University in New Orleans, May 1966.

Dr. Erwin Fehlberg
National Aeronautics and Space Administration (NASA)
Marshall Space Flight Center
Computation Laboratory
Huntsville, Alabama 35812
U.S.A.