

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Matematika – 1. stopnja

Vera Kroflič Kabanova  
**Runge-Kutta Fehlbergova metoda**

Delo diplomskega seminarja

Mentor: doc. dr. Marjetka Krajnc

Ljubljana, 2013

## KAZALO

1. Uvod	4
2. Osnovni pojmi	4
3. Runge-Kutta metode	7
4. Adaptivna ocena koraka	12
4.1. Richardsonova ekstrapolacija	12
4.2. Ugnezdene metode	13
5. Runge-Kutta Fehlbergova metoda	15
5.1. Algoritem	16
6. Druge znane ugnezdene metode	17
6.1. Cash-Karpova metoda	17
6.2. Dormand-Princeova metoda	17
7. Primeri	18
Literatura	23

## Runge-Kutta Fehlbergova metoda

### POVZETEK

Diplomska naloga obravnava numerične metode za reševanje navadnih diferencialnih enačb. Vsebuje podrobnejšo razlago Runge-Kutta metod in opis različnih pristopov optimiziranja teh metod s pomočjo adaptivnega prilagajanja velikosti koraka. Predvsem so poudarjene ugnezdene metode. Cilj tehboljšav je zmanjšati časovno zahtevnost in obenem zagotoviti, da bo napaka dovolj majhna. Natančneje je obravnavana Runge-Kutta Fehlbergova metoda. Predstavljena je tudi primerjava Fehlbergove metode z najbolj razširjeno Runge-Kutta metodo s konstantnim korakom.

## Runge-Kutta Fehlberg method

### ABSTRACT

This work presents numerical methods for solving ordinary differential equations. Detailed explanation of Runge-Kutta methods and description of different optimization approaches of these methods using adaptive step size is provided. Nested adaptive methods are explained in more details. The goal of these methods is to make as few steps as possible and to ensure that the error is small enough. A detailed discussion of Runge-Kutta Fehlberg method is included and a comparison of Fehlberg method to the most common Runge-Kutta method with constant step size is given.

**Math. Subj. Class. (2010):** 65L05, 65L20

**Ključne besede:** numerična analiza, navadne diferencialne enačbe, lokalna napaka, globalna napaka, stabilnost, konvergenca, Runge-Kutta metoda, ugnezdena metoda, Runge-Kutta Fehlbergova metoda

**Keywords:** numerical analysis, ordinary differential equations, local truncation error, global truncation error, stability, convergence, Runge-Kutta method, adaptive method, Runge-Kutta Fehlberg method

## 1. UVOD

Reševanje diferencialnih enačb je eno pomembnejših področij aplikativne matematike, saj se z njimi srečujemo v fiziki, biologiji, meteorologiji, financah in drugih pomembnih vejah znanosti. Ker velike večine diferencialnih enačb ne znamo rešiti analitično, posežemo po numeričnih metodah.

Začetki razvoja numeričnih metod za reševanje diferencialnih enačb segajo v 18. stoletje, ko je v letih 1768-1770 švicarski matematik Leonhard Euler razvil Eulerjevo metodo. Pomemben mejnik sta postavila nemška matematika Carl David Tolmé Runge in Martin Wilhelm Kutta z razvojem Runge-Kutta metod okoli leta 1900. Zanimanje za numerično reševanje diferencialnih enačb je močno naraslo tekom druge svetovne vojne, saj so jih uporabljali za izračun natančnih trajektorij za posamezna orožja [14]. Na razvoj numeričnih metod je kasneje vplivala tudi vesoljska tekma med Sovjetsko zvezo in ZDA.

Razvijale so se *diskretne* in *zvezne* numerične metode za reševanje navadnih diferencialnih enačb. Pri diskretnih metodah interval, na katerem iščemo rešitev, razdelimo s točkami, v katerih računamo numerični približek rešitvi. Razdalji med zaporednima točkama rečemo *korak*. Pri zveznih metodah približek rešitve iščemo kot vektorsko funkcijo s komponentami v nekem danem prostoru npr. prostoru odsekoma polinomskih funkcij. V tem diplomskem seminarju se bomo posvetili zgolj diskretnim metodam.

Da bi pridobili na procesorskem času in natančnosti, so razvili tehniko prilaganja koraka. Ideja te tehnike je, da na vsakem koraku ocenimo, če je trenutna velikost koraka ustrezna in na podlagi te ugotovitve korak zmanjšamo, povečamo ali ga ne spremenimo. Osnovni prijem za oceno ustreznosti velikosti koraka je razvil R.H. Merson v petdesetih letih prejšnjega stoletja. Erwin Fehlberg je nato na podoben način razvil Runge-Kutta Fehlbergovo metodo, ki je bila dolgo časa najbolj popularna metoda z adaptivnim korakom. V zadnjem času se vse več uporabljajo Dormand-Princeove metode [7].

V nadaljevanju bomo ponovili osnovne definicije in izreke, tako iz analize navadnih diferencialnih enačb, kot iz numeričnih metod reševanja navadnih diferencialnih enačb. Spoznali bomo pojme, kot so *stabilnost* in *konvergenca* numerične metode ter *globalna* in *lokalna napaka*. Nato si bomo bolj poglobljeno ogledali Runge-Kutta metode, spoznali bomo njihovo splošno obliko in idejo izpeljave. Lotili se bomo tudi problema adaptivne velikosti koraka. Spoznali bomo dva različna prijema, s pomočjo katerih lahko prilagajamo velikost koraka. Nato bomo spoznali Runge-Kutta Fehlbergovo metodo. Za konec bomo na nekaj ilustrativnih primerih primerjali Runge-Kutta metode s prilagodljivim korakom in tiste brez. Pokazali bomo, zakaj in kdaj je prilagodljivi korak uporaben.

## 2. OSNOVNI POJMI

*Diferencialna enačba* je funkcijska enačba, ki poleg neznane funkcije vsebuje tudi njene odvode. *Red* diferencialne enačbe je stopnja najvišjega odvoda, ki v enačbi nastopa.

Za diferencialno enačbo reda  $r$ ,  $y^{(r)} = f(x, y, y', \dots, y^{(r-1)})$  iščemo določeno rešitev na intervalu  $[a, b]$ . Potrebujemo  $r$  dodatnih pogojev. Glede na te predpisane pogoje probleme delimo na *začetne* in *robne*. Pri začetnih problemih so vsi pogoji podani v eni začetni točki  $y^{(\ell)}(a) = y_{\ell, a}$  za  $\ell = 0, 1, \dots, r-1$ , pri robnih pa v

več točkah, ponavadi v dveh robnih točkah. V tem diplomskem seminarju se bomo osredotočili zgolj na začetne probleme.

Vsak začetni problem višjega reda se da prevesti na sistem diferencialnih enačb prvega reda. Iščemo torej rešitev vektorske enačbe

$$(1) \quad \begin{aligned} \mathbf{y}' &= \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(a) &= \mathbf{y}_a \end{aligned}$$

na intervalu  $[a, b]$ , kjer je  $\mathbf{f}: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ . Pojavi se vprašanje, če rešitev sploh obstaja. Hočemo zagotoviti obstoj in enoličnost rešitve.

**Definicija 2.1.** Funkcija  $\mathbf{f}: [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  je *Lipschitzova v drugi spremenljivki*, če obstaja konstanta  $L$ , da za vsak  $x \in [a, b]$  in  $\mathbf{y}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^d$  velja

$$\| \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(x, \mathbf{z}) \| \leq L \| \mathbf{y} - \mathbf{z} \| .$$

Obstoj in enoličnost rešitve nam zagotovi eksistenčni izrek, dokaz katerega lahko najdemo v [10].

**Izrek 2.2.** Naj bo  $\mathbf{f}: [a, b] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  zvezna v prvem argumentu in Lipschitzova v drugem na območju

$$D = \{(x, \mathbf{y}) | a \leq x \leq b, \| \mathbf{y} - \mathbf{y}_a \|_\infty \leq c\}.$$

Konstanta  $c > 0$  ocenjuje oddaljenost dovoljenih  $\mathbf{y}$  od začetnega pogoja. Potem ima začetni problem

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_a \in \mathbb{R}^d,$$

na intervalu  $\left[ a, \min \left( b, \frac{c}{\| \mathbf{f} \|_{\infty, D}} \right) \right]$  enolično zvezno odvedljivo rešitev  $\mathbf{y}$ .

Od zdaj naprej bomo obravnavali le enačbe, ki zadoščajo eksistenčnemu izreku. Iščemo torej numerično rešitev enačbe (1) na intervalu  $[a, b]$ , tj. zaporedje parov  $\{(x_n, \mathbf{y}_n)\}_n$ , kjer velja  $x_n < x_{n+1}$  in je  $\mathbf{y}_n$  približek za točno rešitev  $\mathbf{y}(x_n)$ . To pomeni, da vrednost  $\mathbf{y}$  ocenimo v točkah  $a \leq x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_N \leq b$ . Definiramo lahko korak  $h_{n+1} = x_{n+1} - x_n$ . Če na intervalu  $[a, b]$  izberemo ekvidistančno delitev, je korak  $h$  konstanten. Do nadaljnjega obravnavamo metode s konstantnim korakom.

Numerične metode za reševanje diferencialnih enačb delimo na *enočlenske* in *veččlenske*. Pri enočlenskih za izračun približka  $\mathbf{y}_n$  uporabimo le vrednost prejšnjega približka  $\mathbf{y}_{n-1}$ . Pri veččlenskih oz.  $k$ -členskih uporabimo  $k$  predhodnih približkov  $\mathbf{y}_{n-1}, \dots, \mathbf{y}_{n-k}$ , kjer je  $k > 1$ . Enočlenske metode so sicer časovno bolj zahtevne, saj vsak korak zahteva več izračunov funkcijskih vrednosti  $\mathbf{f}$ , vendar so bolj prožne, torej lažje sproti spreminjamo korak. Enočlenske metode, s katerimi rešujemo problem (1), imajo v splošnem obliko

$$(2) \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \Psi(x_n, \mathbf{y}_n, h),$$

kjer je  $\Psi(x_n, \mathbf{y}_n, h)$  numerična aproksimacija odvoda rešitve, ki jo imenujemo *prirastek enočlenske metode*.

Numerične metode prav tako delimo na *eksplicitne* in *implicitne*. Pri eksplicitnih metodah lahko naslednji približek takoj izrazimo, medtem ko je pri implicitnih metodah potrebno rešiti sistem nelinearnih enačb. Implicitne metode so tako bolj potratne, ampak se pogosto izkažejo za bolj stabilne.

**Definicija 2.3.** Enočlenska numerična metoda je *stabilna*, če za vsako diferencialno enačbo, ki zadošča zahtevam eksistenčnega izreka, obstajata konstanti  $h_0 > 0$  in

$c > 0$ , da za dve numerični rešitvi  $(\mathbf{y}_n)_{n>0}$  in  $(\tilde{\mathbf{y}}_n)_{n>0}$ , z začetnima vrednostma  $\mathbf{y}_0$  in  $\tilde{\mathbf{y}}_0$ , velja

$$\|\mathbf{y}_n - \tilde{\mathbf{y}}_n\| \leq c \|\mathbf{y}_0 - \tilde{\mathbf{y}}_0\|$$

za vsak  $h$ ,  $0 < h \leq h_0$  in vse  $n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ .

**Primer 2.4.** Izpeljemo najpreprostejšo numerično metodo za reševanje navadnih diferencialnih enačb. Rešujemo začetni problem (1). Potrebno je aproksimirati odvod  $\mathbf{y}'$ . Najlažje ga aproksimiramo z *enostransko diferenco*. Odvod lahko tako aproksimiramo v točki  $x_{n-1}$  s premo diferenco

$$\mathbf{y}'(x_{n-1}) \approx \frac{\mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

Ko to aproksimacijo vstavimo v enačbo  $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$  in upoštevamo, da je korak  $h = x_n - x_{n-1}$ , dobimo eksplicitno Eulerjevo metodo

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n),$$

pri kateri imamo za približek direktno formulo.

Odvod lahko aproksimiramo tudi v točki  $x_n$  z obratno diferenco

$$\mathbf{y}'(x_n) \approx \frac{\mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

Na enak način kot prej izpeljemo implicitno Eulerjevo metodo

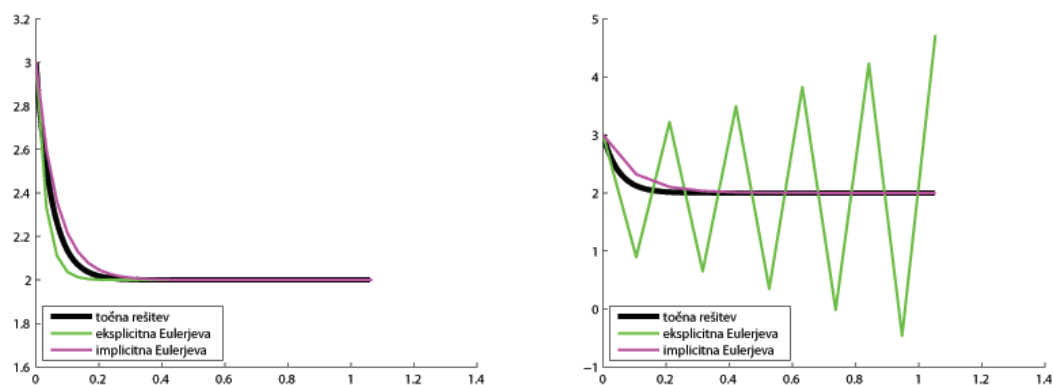
$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(x_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}),$$

pri kateri moramo za izračun naslednjega približka rešiti nelinearno enačbo.

Na konkretnem primeru

$$(3) \quad \begin{aligned} y' &= -20(y - 2), \\ y(0) &= 3 \end{aligned}$$

na intervalu  $[0, 2]$  lahko vidimo, da je implicitna Eulerjeva metoda bolj stabilna od eksplicitne (slika 1).



SLIKA 1. Prikaz rešitev enačbe (3). Levo s korakom  $h = \frac{1}{30}$ , desno s korakom  $h = \frac{2}{19}$ .

Dobro bi bilo imeti merilo, kako je numerična metoda dobra, tj. koliko se numerična rešitev razlikuje od točne.

**Definicija 2.5.** *Globalna napaka* je razlika med pravo vrednostjo rešitve  $\mathbf{y}(x_n)$  in njenim približkom  $\mathbf{y}_n$  v neki točki  $x_n$ :

$$\| \mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}_n \| .$$

Globalno napako težko ocenimo, saj se kopiči z vsakim korakom. Zato uvedemo pomožni pojem.

**Definicija 2.6.** *Lokalna napaka* je razlika med pravo vrednostjo rešitve  $\mathbf{y}(x_n)$  in njenim približkom  $\mathbf{y}_n$  v neki točki  $x_n$  ob predpostavki  $\mathbf{y}_i = \mathbf{y}(x_i)$  za vse  $i < n$ :

$$\tau_n(h) = \| \mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}_n \| .$$

Predpostavka seveda v splošnem ni izpolnjena, vendar pa lahko lokalno napako brez težav ocenimo s pomočjo razvoja v Taylorjevo vrsto.

**Definicija 2.7.** Numerična metoda je *reda*  $r \in \mathbb{N}$ , če velja:

$$\max_{0 \leq n \leq N} \| \mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}_n \| = \mathcal{O}(h^r).$$

Pomembno je tudi, da metoda *konvergira*, tj. da numerični približki konvergirajo k točnim vrednostim. Želimo torej, da velja

$$\max_{0 \leq n \leq N} \| \mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}_n \| \rightarrow 0, \quad \text{ko} \quad \max_{1 \leq n \leq N} h_n \rightarrow 0.$$

Za enočlenske metode so pomembni naslednji izreki o stabilnosti, konvergenci in zvezi med redom lokalne ter globalne napake. Dokaze teh izrekov najdemo v [7]. Pri vseh naslednjih izrekih izhajamo iz oblike enočlenskih metod podane v formuli (2). Seveda še vedno velja tudi zahteva, da začetni problem zadošča eksistenčnemu izreku.

**Izrek 2.8.** Če je  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  Lipschitzova v drugi spremenljivki, potem je metoda stabilna.

**Izrek 2.9.** Če je  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  zvezna v prvi in tretji spremenljivki in Lipschitzova v drugi spremenljivki, potem je metoda konvergentna natanko tedaj, ko je konsistentna, tj.

$$\Psi(x, \mathbf{y}, 0) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}).$$

**Izrek 2.10.** Naj bo  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  zvezna v prvi in tretji spremenljivki in Lipschitzova v drugi spremenljivki z Lipschitzovo konstanto  $L$ . To pomeni, da je metoda konvergentna. Naj za lokalno napako  $\tau_n(h)$  velja, da obstajata taki konstanti  $h_0 > 0$  in  $C > 0$ , da za vse  $h$ ,  $0 < h < h_0$ , in  $n$  velja ocena  $\| \tau_n(h) \| \leq Ch^{r+1}$ . Tedaj za globalno napako velja

$$\| \mathbf{y}(x_n) - \mathbf{y}_n \| \leq Ch^r (e^{(b-a)L} - 1) \frac{1}{L} + e^{(b-a)L} \| \mathbf{y}(x_0) - \mathbf{y}_0 \| .$$

Zadnji izrek pove, da je za reševanje začetnih problemov z enočlenskimi metodami globalna napaka za red slabša od lokalne.

### 3. RUNGE-KUTTA METODE

V skupino Runge-Kutta metod sodijo skoraj vse enočlenske metode. Prednost enočlenskih metod je, kot smo že omenili, možnost prilagajanja velikosti koraka. Prav zato trenutno veljajo za najprimernejše orodje za numerično reševanje začetnih problemov.

Ideja izpeljave teh metod temelji na tem, da aproksimiramo vrednosti odvoda v več točkah na intervalu  $[x_n, x_{n+1}]$ . Na podlagi teh ocen odvoda dobimo ocene spremembe rešitve. Naslednji približek dobimo tako, da prejšnjemu približku prištejemo neko linearno kombinacijo aproksimacij spremembe rešitve. Ustrezno linearno kombinacijo aproksimacij spremembe rešitve dobimo tako, da skušamo s pomočjo razvoja v Taylorjevo vrsto zmanjšati lokalno napako. *Stopnja* Runge-Kutta metode je število aproksimacij spremembe rešitve, ki jih uporabimo.

Runge-Kutta metoda stopnje  $s$  je oblike

$$(4) \quad \mathbf{k}_i = h\mathbf{f} \left( x_n + \alpha_i h, \mathbf{y}_n + \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \mathbf{k}_j \right), \quad i = 1, \dots, s,$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \sum_{i=1}^s \gamma_i \mathbf{k}_i,$$

kjer so  $\mathbf{k}_i$  ocene spremembe rešitve,  $\alpha_i$  odmiki od  $x_n$ ,  $\beta_{ij}$  povedo, kako pri izračunu ocene spremembe rešitve uporabimo prejšnje ocene spremembe rešitve,  $\gamma_i$  pa so uteži, s katerimi množimo vrednosti  $\mathbf{k}_i$ . Te metode ponavadi predstavimo s tabelami, ki jih imenujemo *Butcherjeve sheme*:

$$\begin{array}{c|cccc} \alpha_1 & \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1s} \\ \alpha_2 & \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_s & \beta_{s1} & \beta_{s2} & \dots & \beta_{ss} \\ \hline & \gamma_1 & \gamma_2 & \dots & \gamma_s \end{array}$$

Če je Butcherjeva shema strogo spodnje trikotna oz.  $\beta_{ij} = 0$  za  $j \geq i$ , je metoda eksplicitna. Če je Butcherjeva shema spodnje trikotna oz.  $\beta_{ij} = 0$  za  $j > i$  in  $\beta_{ii} \neq 0$  za vsaj en  $i$ , je metoda diagonalno implicitna. Sicer je metoda implicitna.

Najosnovnejša Runge-Kutta metoda je Eulerjeva metoda. Eksplicitna Eulerjeva metoda uporabi oceno odvoda v začetni točki koraka, implicitna pa v končni točki koraka.

**Primer 3.1.** Oglejmo si primer izpeljave dvostopenjskih eksplicitnih Runge-Kutta metod. Te metode imajo naslednjo obliko:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f}(x_n + \alpha h, \mathbf{y}_n + \beta \mathbf{k}_1), \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \gamma_1 \mathbf{k}_1 + \gamma_2 \mathbf{k}_2. \end{aligned}$$

Približek  $\mathbf{y}_{n+1}$  moramo razviti v Taylorjevo vrsto okoli točke  $(x_n, \mathbf{y}_n)$ . Dobimo naslednje zveze

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}, \\ \mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f} + \alpha h^2 \mathbf{f}_x + \beta h \mathbf{f}_y \mathbf{k}_1 + \mathcal{O}(h^3), \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \gamma_1 h\mathbf{f} + \gamma_2 (h\mathbf{f} + \alpha h^2 \mathbf{f}_x + \beta h \mathbf{f}_y \mathbf{k}_1) + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

kjer z  $\mathbf{f}_x$  označimo odvod  $\mathbf{f}$  na spremenljivko  $x$ , z  $\mathbf{f}_y$  pa Jacobijevo matriko parcialnih odvodov  $\mathbf{f}$  na komponente vektorja  $\mathbf{y}$ . Za naslednji približek torej vzamemo:

$$(5) \quad \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + (\gamma_1 + \gamma_2)h\mathbf{f} + \gamma_2 \alpha h^2 \mathbf{f}_x + \gamma_2 \beta h^2 \mathbf{f}_y \mathbf{f} + \mathcal{O}(h^3).$$



Sedaj je še potrebno razviti točno rešitev  $\mathbf{y}(x_n + h)$  v Taylorjevo vrsto okoli točke  $x_n$ :

$$(6) \quad \mathbf{y}(x_n + h) = \mathbf{y}(x_n) + h\mathbf{f} + \frac{1}{2}h^2(\mathbf{f}_x + \mathbf{f}_y\mathbf{f}) + \mathcal{O}(h^3).$$

Primerjamo rezultata (5) in (6). Ker hočemo čim manjšo lokalno napako, vidimo, da mora veljati

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1, \quad \gamma_2\alpha = \frac{1}{2} \quad \text{in} \quad \gamma_2\beta = \frac{1}{2}.$$

Za poljubni  $\gamma_2 \neq 0$  dobimo

$$\gamma_1 = 1 - \gamma_2, \quad \alpha = \frac{1}{2\gamma_2} \quad \text{in} \quad \beta = \frac{1}{2\gamma_2}.$$

Pri različnih izbirah  $\gamma_2$  dobimo različne metode. Na primer za  $\gamma_2 = \frac{1}{2}$  dobimo *Heunovo metodo*, za  $\gamma_2 = 1$  pa *modificirano Eulerjevo metodo*. Tema metodama pripadata naslednji shemi

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1 & 1 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad \text{in} \quad \begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 1 \end{array}.$$

Obe metodi imata lokalno napako  $\mathcal{O}(h^3)$ . Po izreku 2.10 je torej red globalne napake enak 2. Metodi sta torej drugega reda.

Če bi hoteli izpeljati dvostopenjsko implicitno metodo, bi imeli več dela, saj bi iskali več koficientov:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(x_n + \alpha_1 h, \mathbf{y}_n + \beta_{11}\mathbf{k}_1 + \beta_{12}\mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f}(x_n + \alpha_2 h, \mathbf{y}_n + \beta_{21}\mathbf{k}_1 + \beta_{22}\mathbf{k}_2), \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \gamma_1\mathbf{k}_1 + \gamma_2\mathbf{k}_2, \end{aligned}$$

izpeljava pa bi potekala na isti način. Če bi približek  $\mathbf{y}_{n+1}$  in točno rešitev  $\mathbf{y}(x_{n+1})$  razvili v Taylorjevo vrsto okoli točke  $(x_n, \mathbf{y}_n)$  do četrtega reda, bi tako dobili Hammer - Hollingsworthovo implicitno metodo četrtega reda [7]

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

Višjestopenjske Runge-Kutta metode izpeljemo povsem enako kot v zgornjem primeru. Izpeljava temelji na verižnem pravilu odvajanja. Izpeljava sama po sebi ni zahtevna, ampak zelo hitro postane nepregledna. Zato si pri izpeljavah dostikrat pomagamo z B-drevesi. To so podatkovne strukture, ki so natančneje opisane v [11]. S temi drevesi lahko predstavljamo diferencialne. Natančnejšo razlago izpeljave preko B-dreves najdemo v [7].

Ob analizi Butcherjevih shem dvostopenjskih Runge-Kutta metod opazimo, da velja naslednja zveza:

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^2 \beta_{ij}, \quad i = 1, 2.$$

Izkaže se, da zveza

$$(7) \quad \alpha_i = \sum_{j=1}^s \beta_{ij}, \quad i = 1, \dots, s$$

velja za splošno stopnjo  $s$  [7], kar nam olajša nadaljnje izpeljave. To pomeni, da velja

$$x_n + \alpha_i h = x_n + h \sum_{j=1}^s \beta_{ij}.$$

Torej, če vektorju  $\mathbf{y}$  dodamo dodatno komponento  $x$  oz. celemu sistemu dodamo enačbo  $x' = 1$ , lahko problem (1) reduciramo na avtonomni sistem:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}' &= \mathbf{f}(\mathbf{y}), \\ \mathbf{y}(a) &= \mathbf{y}_a. \end{aligned}$$

Podrobno razlago postopka najdemo v [7]. Prav tako pri izpeljavi dvostopenjske Runge-Kutta metode ( $s = 2$ ) opazimo, da je  $\gamma_1 + \gamma_2 = 1$ . Tudi ta zveza

$$(8) \quad \sum_{i=1}^s \gamma_i = 1$$

velja splošno [7] in nam olajša nadaljnje izpeljave.

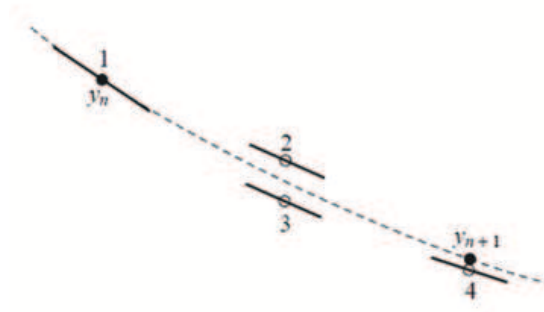
**Primer 3.2.** Najbolj razširjena je štiristopenjska Runge-Kutta metoda

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{2}\mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= h\mathbf{f}(x_n + h, \mathbf{y}_n + \mathbf{k}_3) \\ \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + \frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{2}{6}\mathbf{k}_2 + \frac{2}{6}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4. \end{aligned}$$

Predstavimo jo lahko z naslednjo shemo

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

To metodo pogosto označimo z RK4. Dobimo jo tako, da aproksimiramo odvod enkrat v začetni točki, dvakrat na sredini in enkrat v končni točki intervala  $[x_n, x_{n+1}]$ .



SLIKA 2. RK4: točke ocen odvoda.

Vprašajmo se, ali je metoda stabilna in konvergentna. Metodo lahko zapišemo tudi v obliki (2), kjer je

$$\Psi(x, \mathbf{y}, h) = \frac{1}{6h} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4).$$

Predpostavimo, da funkcija  $\mathbf{f}$  zadošča zahtevam eksistenčnega izreka 2.2. Torej je Lipschitzova v  $\mathbf{y}$  s konstanto  $L$ . Tedaj  $\mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_2$ ,  $\mathbf{k}_3$  in  $\mathbf{k}_4$  zadoščajo naslednjim neenačbam:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{k}_1(\mathbf{y}) - \mathbf{k}_1(\mathbf{z})\| &\leq hL \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|, \\ \|\mathbf{k}_2(\mathbf{y}) - \mathbf{k}_2(\mathbf{z})\| &\leq hL \left(1 + \frac{1}{2}hL\right) \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|, \\ \|\mathbf{k}_3(\mathbf{y}) - \mathbf{k}_3(\mathbf{z})\| &\leq hL \left(1 + \frac{1}{2}hL + \frac{1}{4}(hL)^2\right) \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|, \\ \|\mathbf{k}_4(\mathbf{y}) - \mathbf{k}_4(\mathbf{z})\| &\leq hL \left(1 + hL + \frac{1}{2}(hL)^2 + \frac{1}{4}(hL)^4\right) \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|. \end{aligned}$$

Zato za  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  velja:

$$\|\Psi(x, \mathbf{y}, h) - \Psi(x, \mathbf{z}, h)\| \leq L \left(1 + \frac{1}{2}hL + \frac{1}{6}(hL)^2 + \frac{1}{24}(hL)^4\right) \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|.$$

Opazimo, da je  $1 + \frac{1}{2}hL + \frac{1}{6}(hL)^2 + \frac{1}{24}(hL)^4$  začetek razvoja funkcije  $e^{hL}$  v Taylorjevo vrsto:

$$\|\Psi(x, \mathbf{y}, h) - \Psi(x, \mathbf{z}, h)\| \leq Le^{hL} \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|.$$

Ker je korak  $h$  končen, je  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  Lipschitzova v  $\mathbf{y}$  in tako metoda zadošča pogojem izreka 2.8. To dokazuje, da je štiristopenjska Runge-Kutta metoda stabilna. Ali je tudi konvergentna? Ker funkcija  $\mathbf{f}$  zadošča zahtevam eksistenčnega izreka, je zvezna v prvi komponenti, torej je  $\Psi(x, \mathbf{y}, h)$  zvezna v  $x$  in  $h$ . Pokazati moramo le še to, da je metoda konsistentna, kar je res, saj velja

$$\begin{aligned} \Psi(x, \mathbf{y}, 0) &= \frac{1}{6}(\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) + 2\mathbf{f}(x + \frac{1}{2}0, \mathbf{y} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_1) + \\ &+ 2\mathbf{f}(x + \frac{1}{2}0, \mathbf{y} + \frac{1}{2}\mathbf{k}_2) + \mathbf{f}(x + 0, \mathbf{y} + \mathbf{k}_3)) = \\ &= \frac{1}{6} \cdot 6\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}). \end{aligned}$$

Pokazali smo, da štiristopenjska Runge-Kutta metoda zadošča zahtevam izreka 2.9 in je tako konvergentna.

Na podoben način se da pokazati, da so vse metode, ki jih bomo obravnavali v tem delu, stabilne in konvergentne. V splošnem za vsako Runge-Kutta metodo obstaja  $h_0 > 0$ , da je metoda stabilna za vsak  $0 \leq h \leq h_0$  [6].

V praksi raje uporabljamo eksplicitne Runge-Kutta metode reda štiri ali manj z manjšim korakom kot eksplicitne Runge-Kutta metode višjih redov z večjim korakom. Razlog za to je viden v tabeli 1 [2].

Stopnja	2	3	4	$5 \leq n \leq 7$	$8 \leq n \leq 9$	$10 \leq n$
Lokalna napaka	$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^3)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^{n-1})$	$\mathcal{O}(h^{n-2})$	$\mathcal{O}(h^{n-3})$

TABELA 1. Razmerje med stopnjo in redom eksplicitnih Runge-Kutta metod.

Za implicitne metode velja, da lahko izpeljemo  $s$ -stopenjsko Runge-Kutta metodo stopnje  $2s$  [6].

#### 4. ADAPTIVNA OCENA KORAKA

Prednost Runge-Kutta metod je možnost preprostega spreminjanja koraka. Cilj je narediti čim manj korakov in obenem zagotoviti, da bo lokalna napaka

$$\|\mathbf{y}(x_i) - \mathbf{y}_i\| < \varepsilon, \quad i = 0, 1, \dots, N,$$

za neko izbrano toleranco  $\varepsilon$ . Obstaja več načinov, kako oceniti, če je korak  $h$  primerno izbran.

**4.1. Richardsonova ekstrapolacija.** Da lahko uporabimo *Richardsonovo ekstrapolacijo*, moramo predpostaviti obnašanje lokalne napake

$$\tau_n(h) = \mathbf{y}_n - \mathbf{y}(x_n) = \mathbf{c}h^{r+1} + \mathcal{O}(h^{r+2}),$$

kjer je  $\mathbf{c}$  konstanten vektor. Vzamemo približka  $\mathbf{y}_n$  in  $\tilde{\mathbf{y}}_n$  za  $\mathbf{y}(x_n)$ , ki ju dobimo s korakoma  $h$  in  $\frac{h}{2}$ . Dobimo:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_n - \mathbf{y}(x_n) &= \tau_n(h) \approx \mathbf{c}h^{r+1}, \\ \tilde{\mathbf{y}}_n - \mathbf{y}(x_n) &= 2\tau_n\left(\frac{h}{2}\right) \approx 2\mathbf{c}\left(\frac{h}{2}\right)^{r+1} \approx \frac{1}{2^r}\tau_n(h). \end{aligned}$$

Ko od prve enačbe odštejemo drugo, dobimo oceno napake:

$$\tau_n(h) \approx \frac{2^r}{2^r - 1}(\mathbf{y}_n - \tilde{\mathbf{y}}_n).$$

Če ta ocena presega željeno toleranco, uporabimo zvezo  $\tau_n(h) \approx \mathbf{c}h^{r+1}$  za določitev primerne koraka  $h$  in postopek ponovimo z novim korakom. Sicer nadaljujemo z nespremenjenim korakom. Čeprav je postopek preprost, je dokaj časovno zahteven. Potrebno je kar nekaj dodatnega računanja, saj moramo za vsak izračun približka  $\mathbf{y}_n$  delo opraviti dvakrat, pri koraku  $h$  in pri koraku  $\frac{h}{2}$ . Raziščimo boljše možnosti.

**4.2. Ugnezdene metode.** Recimo, da imamo dve metodi, eno reda  $p$  in drugo  $p + 1$ , torej z lokalnima napakama reda  $p + 1$  in  $p + 2$

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h\Psi(x_i, \mathbf{y}_i, h) : \quad \tau_i(h) = \mathcal{O}(h^{p+1}), \\ \tilde{\mathbf{y}}_{i+1} &= \tilde{\mathbf{y}}_i + h\tilde{\Psi}(x_i, \tilde{\mathbf{y}}_i, h) : \quad \tilde{\tau}_i(h) = \mathcal{O}(h^{p+2}).\end{aligned}$$

Iščemo tak  $h$ , da dobimo čim boljše aproksimacijo  $\mathbf{y}_{i+1}$  in  $\tilde{\mathbf{y}}_{i+1}$  točne vrednosti v točki  $x_{i+1}$ . Lokalni napaki sta enaki

$$(9) \quad \tau_i(h) = \mathbf{y}_{i+1} - \mathbf{y}(x_{i+1}),$$

$$(10) \quad \tilde{\tau}_i(h) = \tilde{\mathbf{y}}_{i+1} - \mathbf{y}(x_{i+1}).$$

Iz enačb (9) in (10) dobimo naslednjo zvezo:

$$(11) \quad \tau_i(h) = \mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1} + \tilde{\tau}_i(h).$$

Ker je  $\tau_i(h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$  in  $\tilde{\tau}_i(h) = \mathcal{O}(h^{p+2})$ , lahko v relaciji (11)  $\tilde{\tau}_i(h)$  zanemarimo in pišemo

$$(12) \quad \tau_i(h) \approx \mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1}.$$

Predpostavimo, da je  $\tau_i(h) \approx Kh^{p+1}$ , za neko konstanto  $K$ . Recimo, da sedaj namesto koraka  $h$  uporabimo korak  $qh$ ,  $q > 0$ . Dobimo naslednjo oceno lokalne napake:

$$(13) \quad \tau_i(qh) \approx Kq^{p+1}h^{p+1} \approx q^{p+1}\tau_i(h) \approx q^{p+1}(\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1}).$$

Lokalno napako hočemo omejiti z  $\varepsilon$ :

$$(14) \quad \|q^{p+1}(\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1})\| \leq \varepsilon.$$

Po preureditvi neenačbe (14) dobimo:

$$(15) \quad q \leq \left( \frac{\varepsilon}{\|\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1}\|} \right)^{\frac{1}{p+1}}.$$

Iz tega sledi, da je optimalni korak

$$(16) \quad h_{opt} = h \left( \frac{\varepsilon}{\|\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1}\|} \right)^{\frac{1}{p+1}}.$$

Po takem postopku bi morali na vsakem koraku uporabiti korak  $h$  za izračun  $\mathbf{y}_{i+1}$  in  $\tilde{\mathbf{y}}_{i+1}$  in določitev  $q$ . Nato bi morali korak ponoviti s korakom  $qh$ . To bi zahtevalo dvakratno računanje funkcijskih vrednosti, kar je zagotovo preveč potratno. Zato korak ponovimo z novo velikostjo le v primeru, ko norma lokalne napake tekočega koraka presega  $\varepsilon$ . V nasprotnem primeru uporabimo  $q$  za izračun vrednosti  $h$  za naslednji približek.

Koraka nočemo prevečkrat ponavljati, zato faktor  $q$  izbiramo konzervativno, tj. ga pomnožimo z varnostnim faktorjem  $0 < \text{fac} \leq 1$ . Poleg tega je potrebno paziti, da velikosti koraka  $h$  ne spremenimo preveč, zato predpišemo minimalno in maksimalno velikost koraka,  $h_{min}$  in  $h_{max}$ . Tako je novi korak enak

$$(17) \quad h_{nov} = \min \left( h_{max}, \max \left( h_{min}, h \cdot \text{fac} \left( \frac{\varepsilon}{\|\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1}\|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right) \right).$$

Pri tej izpeljavi smo v (14) omejili lokalno napako. To smo naredili absolutno. Lahko bi jo omejili tudi relativno:

$$(18) \quad \|q^{p+1}(\mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1})\| \leq h \cdot \varepsilon.$$

Če tako postopamo, je ocena novega koraka sledeča:

$$(19) \quad h_{nov} = \min \left( h_{max}, \max \left( h_{min}, h \cdot \text{fac} \left( \frac{h \cdot \varepsilon}{\| \mathbf{y}_{i+1} - \tilde{\mathbf{y}}_{i+1} \|} \right)^{\frac{1}{p+1}} \right) \right).$$

Za naslednji približek vzamemo  $\mathbf{y}_{i+1}$ , čeprav je  $\tilde{\mathbf{y}}_{i+1}$  bolj natančen. To je zato, ker smo v (12) lahko s pomočjo  $\tilde{\mathbf{y}}_{i+1}$  ocenili  $\tau_i(h)$ , ne moremo pa oceniti  $\tilde{\tau}_i(h)$ . Torej je metoda reda  $p$ .

Zdaj vemo, kako določiti optimalno velikost koraka. Potrebujemo le še dve metodi reda  $p$  in  $p + 1$ . Želimo taki metodi, da je treba računati čim manj funkcijskih vrednosti. Zanimivi so taki pari metod, pri katerih aproksimacije spremembe rešitve  $\mathbf{k}_i$  izračunamo po skupnih formulah, v formuli za izračun naslednjega približka pa potem vključimo različni linearni kombinaciji  $\mathbf{k}_i$ . Tak par metod lahko zapišemo v eni Butcherjevi shemi z dodatno vrstico, ki vsebuje koeficiente  $\tilde{\gamma}_i$ . Takim metodam rečemo *ugnezdene metode*.

Ta pristop je prvi razvil in uporabil R.H. Merson. Njegova ideja je bila razviti petstopenjsko metodo petega reda tako, da bi obstajala ustrezna linearna kombinacija prvih štirih stopenj, ki bi tvorila štiristopenjsko metodo četrtega reda. Lokalno napako bi potem ocenili z aproksimacijo (12). Torej bi bila lokalna napaka  $\mathcal{O}(h^5)$ . Izkazalo se je, da takih metod ni mogoče najti. Obstajata namreč le metodi, kjer lahko lokalno napako aproksimiramo le za diferencialne enačbe, ki so linearne v  $x$  in  $\mathbf{y}$  [3].

Merson je obravnaval petstopenjsko metodo četrtega reda

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & & & \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{8} & 0 & \frac{3}{8} & & \\ 1 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{3}{2} & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{4}{6} & \frac{1}{6} \end{array}$$

z lokalno napako  $\mathcal{O}(h^5)$ . S pomočjo razvoja v Taylorjevo vrsto je pokazal obliko lokalne napake

$$\tau_n(h) = -\frac{1}{720} h^5 \mathbf{y}^{(5)}(x_{n-1}) + \mathcal{O}(h^6).$$

Merson je nato pokazal, da za drugačno linearno kombinacijo  $\mathbf{k}_i$

$$\tilde{\mathbf{y}}_n = \tilde{\mathbf{y}}_{n-1} + \frac{h}{2} (\mathbf{k}_1 - 3\mathbf{k}_3 + 4\mathbf{k}_4)$$

za linearne diferencialne enačbe s konstantnimi koeficienti velja naslednja ocena

$$\tilde{\tau}_n(h) = -\frac{1}{120} h^5 \mathbf{y}^{(5)}(x_{n-1}) + \mathcal{O}(h^6).$$

Opazil je, da velja zveza

$$\tilde{\tau}_n(h) = 6\tau_n(h) + \mathcal{O}(h^6).$$

Torej je ekstrapolirana lokalna napaka za red višja kot osnovna

$$\frac{6\mathbf{y}_n - \tilde{\mathbf{y}}_n}{5} - \mathbf{y}(x_n) = \mathcal{O}(h^6),$$

kar je nato uporabil za oceno koraka. Za splošne navadne diferencialne enačbe ocena seveda ne velja, ekstrapolirana lokalna napaka je le  $\mathcal{O}(h^4)$ .

Čeprav je Mersonova metoda omejena na reševanje linearnih diferencialnih enačb s konstantnimi koeficienti, je bila svoj čas zelo priljubljena, vse dokler niso razvili bolj splošno uporabnih metod kot so Fehlbergova, Cash-Karpova in Dormand-Princeova metoda.

Omeniti je potrebno, da metode z adaptivno velikostjo koraka niso primerne za reševanje vseh začetnih problemov. Uporabljamo jih tipično za probleme, kjer od rešitve pričakujemo, da ima odseke s počasnimi spremembami in odseke s sunkovitimi spremembami. Problemi, kjer rešitev vseskozi oscilira ali se počasi spreminja, niso primerni oz. pri takih problemih z adaptivno izbiro koraka nič ne pridobimo.

## 5. RUNGE-KUTTA FEHLBERGOVA METODA

Runge-Kutta Fehlbergova metoda je ugnezdena metoda reda 4, ki jo je leta 1970 razvil nemški matematik Erwin Fehlberg.

Izpeljava poteka tako, da na standarden način z razvojem v Taylorjevo vrsto izpeljemo eksplicitno šeststopenjsko Runge-Kutta metodo. Poslužimo se formul (7) in (8) za poenostavitev izpeljav. Dobimo sistem enačb za koeficiente  $\tilde{\beta}_{ij}$  in  $\tilde{\gamma}_i$  za  $i = 1, 2, \dots, 6$  in  $j < i$ . Prav tako z razvojem v Taylorjevo vrsto izpeljemo eksplicitno petstopenjsko Runge-Kutta metodo. Dobimo sistem enačb za koeficiente  $\beta_{ij}$  in  $\gamma_i$  za  $i = 1, 2, \dots, 5$  in  $j < i$ . Sistema združimo in dodamo enačbe  $\beta_{ij} = \tilde{\beta}_{ij}$  za  $i = 1, 2, \dots, 5$  in  $j < i$ . Nato je potrebno rešiti dobljeni sistem. Isti pristop k izpeljavi sta v [5] ubrala J.R.Dormand in P.J.Prince.

Runge-Kutta Fehlbergova metoda sestoji iz Runge-Kutta metode

$$\tilde{\mathbf{y}}_{i+1} = \tilde{\mathbf{y}}_i + \frac{16}{135}\mathbf{k}_1 + \frac{6656}{12825}\mathbf{k}_3 + \frac{28561}{56430}\mathbf{k}_4 - \frac{9}{50}\mathbf{k}_5 + \frac{2}{55}\mathbf{k}_6$$

reda 5 in metode

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \frac{25}{216}\mathbf{k}_1 + \frac{1408}{2565}\mathbf{k}_3 + \frac{2197}{4104}\mathbf{k}_4 - \frac{1}{5}\mathbf{k}_5$$

reda 4, kjer dobimo aproksimacije spremembe rešitve po formulah

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{4}h, \mathbf{y}_n + \frac{1}{4}\mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{3}{8}h, \mathbf{y}_n + \frac{3}{32}\mathbf{k}_1 + \frac{9}{32}\mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{12}{13}h, \mathbf{y}_n + \frac{1932}{2197}\mathbf{k}_1 - \frac{7200}{2197}\mathbf{k}_2 + \frac{7296}{2197}\mathbf{k}_3\right), \\ \mathbf{k}_5 &= h\mathbf{f}\left(x_n + h, \mathbf{y}_n + \frac{439}{216}\mathbf{k}_1 - 8\mathbf{k}_2 + \frac{3680}{513}\mathbf{k}_3 - \frac{845}{4104}\mathbf{k}_4\right), \\ \mathbf{k}_6 &= h\mathbf{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_n - \frac{8}{27}\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 - \frac{3544}{2565}\mathbf{k}_3 + \frac{1859}{4104}\mathbf{k}_4 - \frac{11}{40}\mathbf{k}_5\right). \end{aligned}$$

Prednost te metode je v tem, da moramo na vsakem koraku izračunati le šest funkcijskih vrednosti. Če bi imeli poljubni metodi četrtega in petega reda, bi morali

izračunati vsaj štiri funkcijske vrednosti za metodo četrtega reda in šest funkcijskih vrednosti za metodo petega reda (glej tabelo 1), torej vsaj deset funkcijskih vrednosti. Tako prihranimo na procesorskem času brez izgube na natančnosti.

Butcherjeva shema metode je

0	0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0					
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$	0				
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$	0			
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$	0		
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	0	
	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$		$\Leftarrow \mathcal{O}(h^5)$
	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$	$\Leftarrow \mathcal{O}(h^6)$

### 5.1. Algoritem.

**VHOD:** krajišči  $a$  in  $b$ , začetni pogoj  $\mathbf{y}_a$ , toleranca  $\varepsilon$ ,  $h_{max}$ ,  $h_{min}$

**IZHOD:** seznam  $\{\{x_i, \mathbf{y}_i\}\}_i$

$x = a$

$\mathbf{y} = \mathbf{y}_a$

$h = h_{max}$

KONEC=1

seznam =  $\{\{x, \mathbf{y}\}\}$

**while** KONEC=1 **do**

$\mathbf{k}_1 = hf(x, \mathbf{y})$

$\mathbf{k}_2 = hf(x + \frac{1}{4}h, \mathbf{y} + \frac{1}{4}\mathbf{k}_1)$

$\mathbf{k}_3 = hf(x + \frac{3}{8}h, \mathbf{y} + \frac{3}{32}\mathbf{k}_1 + \frac{9}{32}\mathbf{k}_2)$

$\mathbf{k}_4 = hf(x + \frac{12}{13}h, \mathbf{y} + \frac{1932}{2197}\mathbf{k}_1 - \frac{7200}{2197}\mathbf{k}_2 + \frac{7296}{2197}\mathbf{k}_3)$

$\mathbf{k}_5 = hf(x + h, \mathbf{y} + \frac{439}{216}\mathbf{k}_1 - 8\mathbf{k}_2 + \frac{3680}{513}\mathbf{k}_3 - \frac{845}{4104}\mathbf{k}_4)$

$\mathbf{k}_6 = hf(x + \frac{1}{2}h, \mathbf{y} - \frac{8}{27}\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 - \frac{3544}{2565}\mathbf{k}_3 + \frac{1859}{4104}\mathbf{k}_4 - \frac{11}{40}\mathbf{k}_5)$

$\mathbf{R} = \left| \frac{1}{360}\mathbf{k}_1 - \frac{128}{4275}\mathbf{k}_3 - \frac{2197}{75240}\mathbf{k}_4 + \frac{1}{50}\mathbf{k}_5 + \frac{2}{55}\mathbf{k}_6 \right|$

(\* $\mathbf{R} = |\tilde{\mathbf{y}}_{i+1} - \mathbf{y}_{i+1}|$ \*)

**if**  $\mathbf{R} \leq \varepsilon$  **then**

(\*Aproksimacijo sprejmemo\*)

$\mathbf{y} = \mathbf{y} + \frac{25}{216}\mathbf{k}_1 + \frac{1408}{2565}\mathbf{k}_3 + \frac{2197}{4104}\mathbf{k}_4 - \frac{1}{5}\mathbf{k}_5$

$x = x + h$

seznam = {seznam,  $\{x, \mathbf{y}\}$ }

**end if**



```

 $h = \min\{h_{max}, \max\{h_{min}, h \cdot \text{fac} \left( \frac{\varepsilon}{\mathbf{R}} \right)^{\frac{1}{5}}\}\}$ 
if  $x \geq b$  then
  KONEC=0
else if  $x + h > b$  then
   $h = b - x$ 
else if  $h < h_{min}$  then
  KONEC=0
  Print ("Presežen minimum")
end if
end while

```

## 6. DRUGE ZNANE UGNEZDENE METODE

Poleg Runge-Kutta Fehlbergove metode sta v širši uporabi tudi Cash-Karpova in Dormand-Princeova metodi.

**6.1. Cash-Karpova metoda.** Cash-Karpova metoda tako kot Fehlbergova ugnezdena metoda četrtega reda uporabi šest aproksimacij spremembe rešitve za izračun rešitve četrtega in petega reda [12].

Butcherjeva shema metode je

0	0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	0					
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$	0				
$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{10}$	$-\frac{9}{10}$	$\frac{6}{5}$	0			
1	$-\frac{11}{54}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{70}{27}$	$\frac{35}{27}$	0		
$\frac{7}{8}$	$\frac{1631}{55296}$	$\frac{175}{512}$	$-\frac{575}{13824}$	$\frac{44275}{110592}$	$-\frac{253}{4096}$	0	
	$\frac{282}{27648}$	0	$\frac{18575}{48384}$	$\frac{13525}{55296}$	$\frac{277}{14336}$	$\frac{1}{4}$	$\Leftarrow \mathcal{O}(h^5)$
	$\frac{37}{378}$	0	$\frac{250}{621}$	$\frac{125}{594}$	0	$-\frac{512}{1771}$	$\Leftarrow \mathcal{O}(h^6)$

**6.2. Dormand-Princeova metoda.** Ta metoda uporabi rahlo drugačen pristop. Sestavljena je iz sedmih aproksimacij spremembe rešitve, amapk jih na vsakem koraku uporabi le šest. Na vsakem koraku zadnje vrednotenje opravi v isti točki kot prvo vrednotenje naslednjega koraka. Metoda je sestavljena iz dveh metod petega in četrtega reda. Poglavitna razlika Dormand-Princeove metode od ostalih ugnezdenih metod je v tem, da so pri tej metodi koeficienti izbrani za minimizacijo lokalne napake metode petega reda. Pri Fehlbergovi in Cash-Karpovi metodi se minimizira lokalna napaka metode četrtega reda. Zato je Dormand-Princeova metoda bolj primerna za iskanje bolj natančnih rešitev. Trenutno se Dormand-Princeova metoda uporablja kot vgrajena MATLAB-ova metoda ode45 [13].

Butcherjeva shema metode je

0	0							
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	0						
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$	0					
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$	0				
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$	0			
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	0		
1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0	
	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0	$\Leftarrow \mathcal{O}(h^6)$
	$\frac{5179}{57600}$	0	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{393}{640}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{18}{2100}$	$\frac{1}{40}$	$\Leftarrow \mathcal{O}(h^5)$

## 7. PRIMERI

**Primer 7.1.** Rešimo sistem diferencialnih enačb, ki opisuje nelinearno nihanje,

$$(20) \quad \begin{aligned} \dot{x} &= y, \\ \dot{y} &= \sin x, \end{aligned}$$

na intervalu  $t \in [0, 100]$ , pri čemer odvod po času označimo s piko. Tega sistema se najprej lotimo pri začetnem pogoju

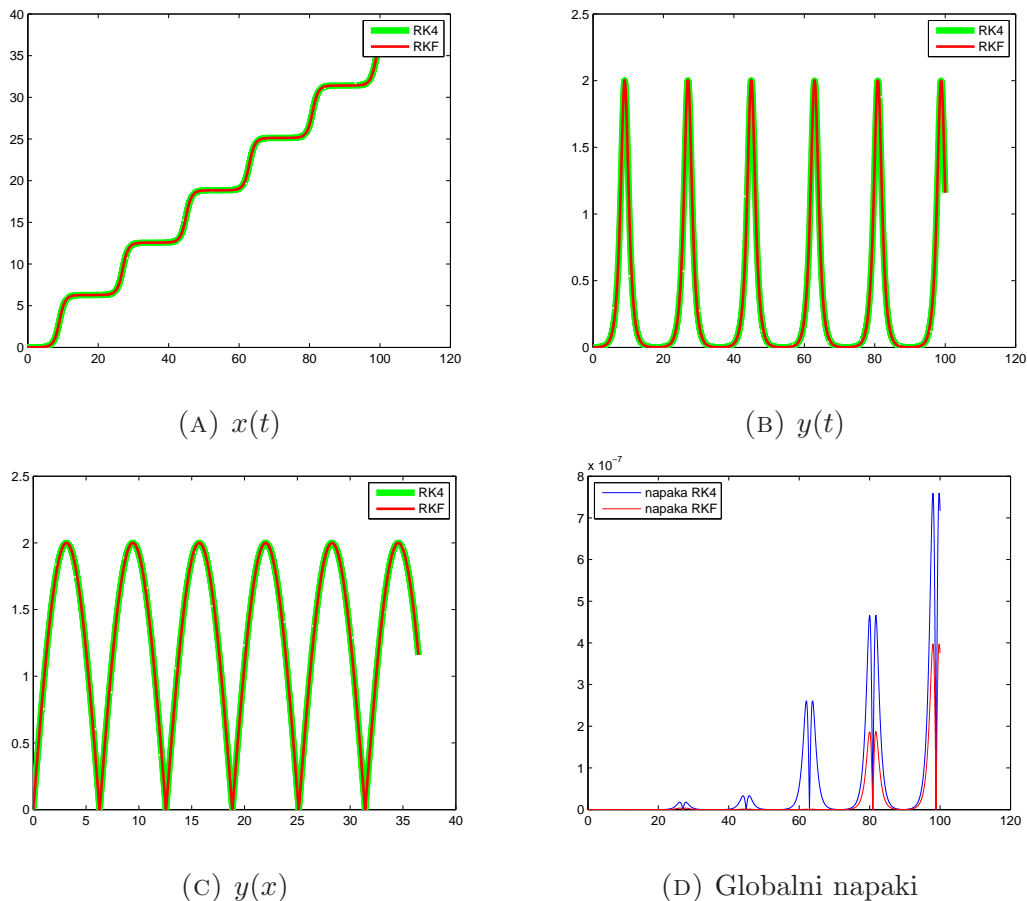
$$(21) \quad \begin{aligned} x &= 0, \\ y &= 0.001. \end{aligned}$$

$x_i$	RK4	RKF, $\varepsilon = 10^{-15}$
1	$3.95 \cdot 10^{13}$	$8.24 \cdot 10^{11}$
2	$9.56 \cdot 10^{11}$	$1.96 \cdot 10^{11}$
3	$4.81 \cdot 10^9$	$9.93 \cdot 10^{10}$
4	$1.35 \cdot 10^9$	$4.89 \cdot 10^{11}$
5	$1.19 \cdot 10^9$	$4.35 \cdot 10^{11}$
6	$7.98 \cdot 10^8$	$2.95 \cdot 10^{10}$
7	$1.23 \cdot 10^9$	$2.02 \cdot 10^{11}$
8	$8.05 \cdot 10^7$	$3.22 \cdot 10^7$
9	$6.75 \cdot 10^{10}$	$3.39 \cdot 10^{10}$

TABELA 2. Primerjava globalnih napak.

Primerjajmo reševanje tega začetnega problema s štiristopenjsko Runge-Kutta metodo s korakom  $h = 0.001$  in Runge-Kutta Fehlbergovo metodo s toleranco

$\varepsilon = 10^{-15}$ . S tako toleranco dosežemo enak red lokalne napake. Na sliki 3 si lahko ogledamo parametrično podano rešitev problema. Vidimo, da ima rešitev odseke, kjer se spreminja počasi, in odseke, kjer se hitro in strmo spremeni. Zato sklepamo, da bo Fehlbergova metoda primerna za reševanje tega problema. Ugotovimo, da Runge-Kutta Fehlbergova metoda deluje približno trikrat hitreje kot štiristopenjska Runge-Kutta metoda. Adaptivna metoda opravi le 19380 korakov, medtem ko štiristopenjska Runge-Kutta metoda opravi 100000 korakov.



SLIKA 3. Rešitev sistema (20) pri pogojih (21) in napaka.

Oglejmo si še globalne napake za posamezni metodi (tabela 2). Globalne napake ocenimo tako, da rešitev naše metode primerjamo z rešitvijo, ki jo nudi vgrajena MATLAB-ova metoda `ode45` z natančnostjo  $10^{-15}$ . Vidimo, da sta napaki primerljivi, kar je razvidno tudi iz grafa na sliki 3D. Fehlbergova metoda izgleda celo malenkost bolj natančna.

Zaključimo lahko, da je Runge-Kutta Fehlbergova metoda primerna za reševanje tega problema, saj pridobimo na času brez povečanja napake.

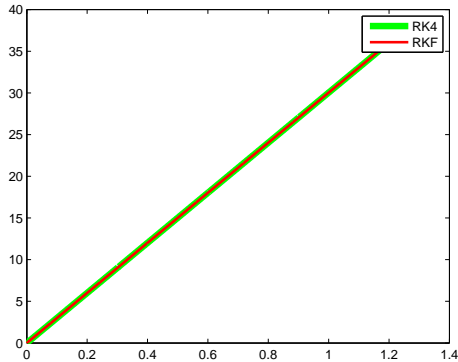
**Primer 7.2.** Vrnemo se na sistem iz prejšnjega primera

$$(22) \quad \begin{aligned} \dot{x} &= y, \\ \dot{y} &= \sin x, \end{aligned}$$

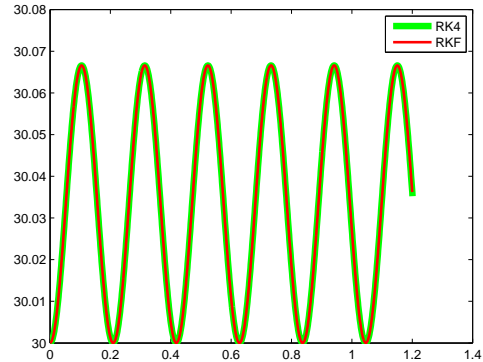
tokrat pri začetnem pogoju

$$(23) \quad \begin{aligned} x &= 0, \\ y &= 30. \end{aligned}$$

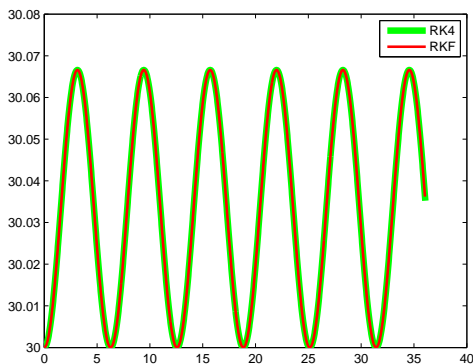
Ta začetni problem sedaj rešujemo na intervalu  $t \in [0, 1.2]$ .



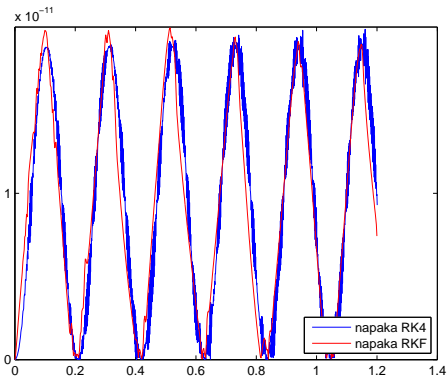
(A)  $x(t)$



(B)  $y(t)$



(C)  $y(x)$



(D) Globalni napaki

SLIKA 4. Rešitev sistema (22) pri pogojih (23) in napaka.

Štiristopenjska Runge-Kutta metoda s korakom  $h = 0.0001$  se izvede približno štirikrat hitreje kot Runge-Kutta Fehlbergova metoda s toleranco  $\varepsilon = 10^{-15}$ , ki odgovarja ustreznemu redu lokalne napake. Globalne napake ocenimo tako, da rešitev naše metode primerjamo z rešitvijo, ki jo nudi vgrajena MATLAB-ova metoda `ode45` z natančnostjo  $10^{-15}$ . V tabeli 3 lahko vidimo, da je globalna napaka Fehlbergove metode večinoma za eno decimalno mesto boljša od štiristopenjske Runge-Kutta metode, zato ni smiselno primerjati časa teh metod. Račun ponovimo. Tokrat Runge-Kutta Fehlbergovo metodo izvedemo s toleranco  $\varepsilon = 10^{-12}$ . Izračun se tokrat izvede v primerljivem času kot štiristopenjska Runge-Kutta metoda. V tabeli 3 primerjamo globalne napake. Ugotovimo, da sta globalni napaki Runge-Kutta Fehlbergove metode s toleranco  $\varepsilon = 10^{-12}$  in štiristopenjske Runge-Kutta metode primerljivi, kar vidimo tudi na sliki 4D.

Štiristopenjska Runge-Kutta metoda opravi 1200 korakov, Fehlbergova pa le 565. Čeprav Fehlbergova metoda opravi manj korakov, se izračun izvede v približno enakem času. Očitno se na času izvajanja Fehlbergove metode poznajo dodatni izračuni funkcij.

Sklepamo lahko, da v tem primeru z adaptivno prilagoditvijo velikosti koraka ničesar ne pridobimo. To dejstvo si lahko razložimo s pomočjo grafa parametrično podane rešitve na sliki 4. Vidimo, da rešitev v drugi komponenti oscilira vzdolž celega intervala. Rešitev se torej vseskozi hitro spreminja, nimamo območij počasnih sprememb.

$x_i$	RK4	RKF, $\varepsilon = 10^{-15}$	RKF, $\varepsilon = 10^{-12}$
0.12	$1.75 \cdot 10^{11}$	$1.50 \cdot 10^{13}$	$1.63 \cdot 10^{11}$
0.24	$5.49 \cdot 10^{12}$	$7.79 \cdot 10^{13}$	$7.26 \cdot 10^{12}$
0.36	$1.02 \cdot 10^{11}$	$1.09 \cdot 10^{12}$	$7.96 \cdot 10^{12}$
0.48	$1.16 \cdot 10^{11}$	$1.35 \cdot 10^{13}$	$1.51 \cdot 10^{11}$
0.60	$6.35 \cdot 10^{12}$	$1.10 \cdot 10^{12}$	$6.01 \cdot 10^{12}$
0.72	$1.95 \cdot 10^{11}$	$9.20 \cdot 10^{13}$	$1.97 \cdot 10^{11}$
0.84	$7.86 \cdot 10^{12}$	$2.32 \cdot 10^{13}$	$8.87 \cdot 10^{12}$
0.96	$1.89 \cdot 10^{11}$	$1.41 \cdot 10^{12}$	$1.82 \cdot 10^{11}$
1.08	$1.11 \cdot 10^{11}$	$1.57 \cdot 10^{12}$	$1.41 \cdot 10^{11}$

TABELA 3. Primerjava globalnih napak.

**Primer 7.3.** Sedaj si oglejmo še fizikalni primer s področja superprevodnosti.

Imamo sistem dveh parcialnih diferencialnih enačb, ki opisuje dinamiko superprevodne žice s konstantnim tokom

$$u \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\phi\psi \right) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \psi - \psi|\psi|^2,$$

$$j = -\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2i} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right),$$

kjer je  $\psi(x, t)$  brezdimenzijski kompleksni parameter reda superprevodnosti,  $\phi(t)$  elektrostatični potencial,  $u$  parameter odvisen od snovi in  $j$  električni tok. Iščemo napetost, torej razliko potencialov, v odvisnosti od časa. Zanima nas rešitev pri robnih pogojih

$$-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2},$$

$$\frac{\partial \phi \left( -\frac{L}{2} \right)}{\partial x} = \frac{\partial \phi \left( \frac{L}{2} \right)}{\partial x} = 0,$$

$$\rho \left( -\frac{L}{2} \right) = \rho \left( \frac{L}{2} \right) = 1.$$

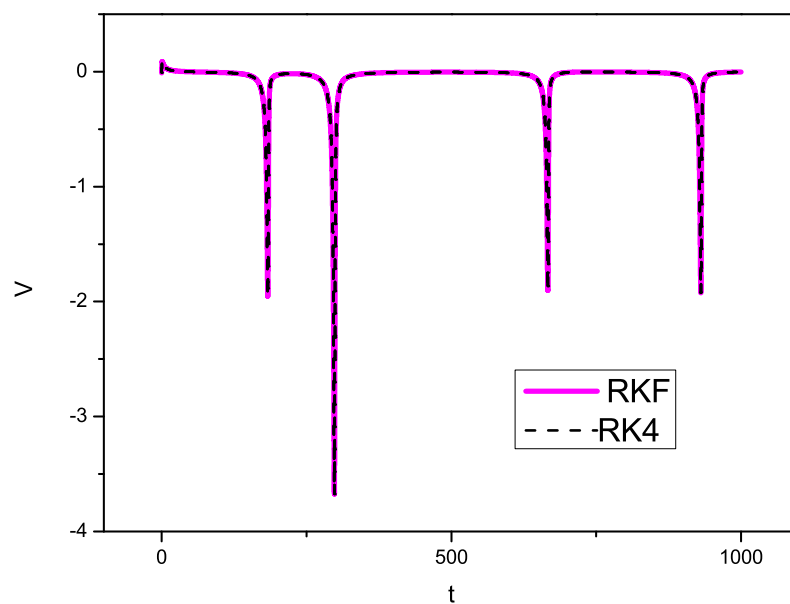
Izbira začetnih pogojev za ta primer ni pomembna, saj čez nekaj časa rešitev skonvergira k periodičnemu ciklu, ki ni odvisen od začetnih pogojev.

Ta sistem lahko s pomočjo metode končnih elementov prevedemo na sistem 512 navadnih diferencialnih enačb, ki ga lahko rešujemo z zgoraj opisanimi metodami. Podrobno razlago najdemo v [1].

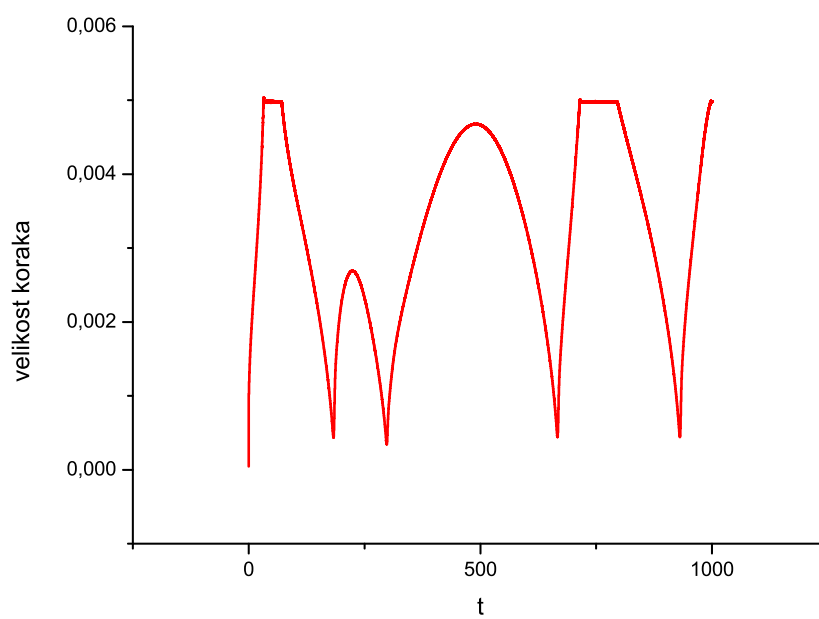
Sistem rešimo s štiristopenjsko Runge-Kutta metodo s korakom 0.001 in z Runge-Kutta Fehlbergovo metodo z  $\varepsilon = 10^{-15}$ . Rešitev na intervalu  $t \in [0, 1000]$  je za konstantni tok  $j = 0.38517$  prikazana na sliki 5.

Runge-Kutta Fehlbergova metoda je bila v tem primeru okoli dvakrat hitrejša. To razložimo z dejstvom, da smo opravili samo 404082 korakov, medtem ko smo pri štiristopenjski Runge-Kutta metodi opravili 1000000 korakov. Na sliki 6 vidimo

spreminjanje velikosti koraka s časom za Fehlbergovo metodo. Ob pogledu na sliki 5 in 6 je očitno, da korak naraste tam, kjer se rešitev počasi spreminja, in se zmanjša ob hitrih spremembah rešitve.



SLIKA 5. Napetost v odvisnosti od časa.



SLIKA 6. Velikost koraka v odvisnosti od časa.

## LITERATURA

- [1] V. Baranov, *Dynamics of the resistive state in the nonequilibrium superconductors and relaxation of the hot electrons in metals*, doktorska disertacija, Jožef Stefan international postgraduate school, Ljubljana, 2013.
- [2] R. L. Burden in J. D. Faires, *Numerical analysis*, 6th ed., Brooks/Cole, Pacific Grove, 1997.
- [3] J. C. Butcher, *A history of Runge-Kutta methods*, Appl. Numer. Math. **20** (1996) 247–260.
- [4] J. C. Butcher, *Numerical methods for ordinary differential equations*, 2nd ed., J. Wiley & Sons, Chichester, 2008.
- [5] J. R. Dormand in P. J. Prince, *A family of embedded Runge-Kutta formulae*, J. Comput. Appl. Math. **6** (1980) 19–26.
- [6] C. W. Gear, *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- [7] J. Kozak, *Numerična analiza*, Matematika – fizika **44**, DMFA - založništvo, Ljubljana, 2008.
- [8] B. Plestenjak, *Numerične metode*, verzija 4. 3. 2010, [ogled 16. 7. 2013], dostopno na [http://www-lp.fmf.uni-lj.si/plestenjak/vaje/nafgg/Predavanja/Knjiga\\_NM.pdf](http://www-lp.fmf.uni-lj.si/plestenjak/vaje/nafgg/Predavanja/Knjiga_NM.pdf).
- [9] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling in B. P. Flannery, *Numerical recipes in C : the art of scientific computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [10] E. Zakrajšek, *Analiza III*, Matematični rokopisi **21**, DMFA – založništvo, Ljubljana, 1998.
- [11] *B-tree*, [ogled 1. 9. 2013], dostopno na <http://en.wikipedia.org/wiki/B-tree>.
- [12] *Cash-Karp method*, [ogled 13. 8. 2013], dostopno na <http://en.wikipedia.org/wiki/Cash-Karp>.
- [13] *Dormand-Prince method*, [ogled 13. 8. 2013], dostopno na [http://en.wikipedia.org/wiki/Dormand-Prince\\_method](http://en.wikipedia.org/wiki/Dormand-Prince_method).
- [14] *History of numerical solution of differential equations using computers*, [ogled 16. 7. 2013], dostopno na [http://en.wikipedia.org/wiki/History\\_of\\_numerical\\_solution\\_of\\_differential\\_equations\\_using\\_computers](http://en.wikipedia.org/wiki/History_of_numerical_solution_of_differential_equations_using_computers).
- [15] *Runge-Kutta methods*, [ogled 16. 7. 2013], dostopno na [http://en.wikipedia.org/wiki/Runge-Kutta\\_methods](http://en.wikipedia.org/wiki/Runge-Kutta_methods).