

Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle¹

Von

E. Fehlberg, Huntsville

(Eingegangen am 15. April 1968)

Zusammenfassung — Summary

Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle. Es werden neue, explizite RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter und siebenter Ordnung hergeleitet. Diese Formeln enthalten eine Schrittweiten-Kontrolle, die auf einer vollständigen Erfassung des ersten Gliedes des lokalen Abbruchfehlers basiert. Die Formeln erfordern — pro Integrations-schritt — weniger Auswertungen der Differentialgleichungen als andere RUNGE-KUTTA-Formeln entsprechender Ordnung, wenn bei letzteren ebenfalls eine Schrittweiten-Kontrolle (RICHARDSON's extrapolation to the limit) verwendet wird. Durch geeignete Wahl einiger Parameter kann in unseren Formeln das erste Glied des Abbruchfehlers stark reduziert werden; dadurch wird eine Vergrößerung der Schrittweite — ohne Verlust an Genauigkeit — ermöglicht. Ein numerisches Beispiel wird gebracht. Bei gleicher Genauigkeit ergeben unsere Formeln in diesem Beispiel 40% bis 60% Ersparnis an Rechenzeit, verglichen mit den bekannten RUNGE-KUTTA-Formeln gleicher Ordnung.

Classical Fifth- and Seventh-Order Runge-Kutta Formulas with Stepsize Control. New explicit fifth- and seventh-order RUNGE-KUTTA formulas are derived. They include a stepsize control procedure based on a complete coverage of the leading term of the local truncation error. These formulas require fewer evaluations per step than other RUNGE-KUTTA formulas of corresponding order if the latter ones are also used with stepsize control (RICHARDSON's extrapolation to the limit). By a proper choice of some parameters the leading truncation error term of our formulas can be reduced substantially, thereby allowing an increase in the stepsize without loss of accuracy. A numerical example is presented. Our results being of the same accuracy, we save in this example 40% to 60% computer time compared with the known RUNGE-KUTTA formulas of corresponding order.

Einleitung

1. In dieser Arbeit werden neue explizite RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter und siebenter Ordnung hergeleitet. Die Formeln enthalten eine Schrittweiten-Kontrolle, die auf einer vollständigen Erfassung des ersten Gliedes des lokalen Abbruchfehlers beruht.

Wegen dieser Schrittweiten-Kontrolle erfordern unsere Formeln mehr Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt als die bekannten

¹ Dies ist ein stark gekürzter Auszug eines vom Autor herausgebrachten, internen NASA Technical Report [6], auf den hinsichtlich vieler Einzelheiten und hinsichtlich der Formeln sechster und achter Ordnung verwiesen sei.

klassischen RUNGE-KUTTA-Formeln entsprechender Ordnung ohne Schrittweiten-Kontrolle. Sie erfordern jedoch weniger Auswertungen pro Schritt als die letzteren Formeln, wenn man diese ebenfalls mit einer Schrittweiten-Kontrolle versieht (RICHARDSON's extrapolation to the limit).

2. Durch geeignete Wahl einiger Parameter läßt sich in unseren neuen Formeln das erste Glied des lokalen Abbruchfehlers stark reduzieren. Dadurch erlauben unsere neuen Formeln die Benutzung einer größeren Schrittweite ohne Einbuße an Genauigkeit.

3. Da unsere neuen Formeln höchstens von siebenter Ordnung sind, kann man von ihnen nicht die Wirtschaftlichkeit unserer früheren RUNGE-KUTTA-Transformationsformeln [4], [5] erwarten, da die letzteren RUNGE-KUTTA-Formeln von beliebig hoher Ordnung darstellen. Indessen haben unsere neuen Formeln gewisse Vorteile, da sie keine Vorbereitungen (wie Differentiationen der Differentialgleichungen) durch den Programmierer erfordern. Unsere neuen Formeln einschließlich Schrittweiten-Kontrolle lassen sich leicht und ein für alle Mal als selbständiges Unterprogramm (subroutine) schreiben.

4. Unsere neue Formel achter Ordnung RK 8 (9) — vgl. [6] — bietet in den Beispielen, die wir durchgerechnet haben, keinen großen Vorteil mehr gegenüber unserer Formel siebenter Ordnung RK 7 (8). Es scheint, als hätten wir mit den Formeln siebenter und achter Ordnung etwa das Optimum an Wirtschaftlichkeit erreicht; denn es ist zu bedenken, daß in unseren Formeln die Zahl der erforderlichen Durchgänge durch die Differentialgleichungen mit wachsender Ordnung rasch zunimmt.

Teil I. Runge-Kutta-Formeln fünfter Ordnung

5. Unsere Differentialgleichungen mögen (in Vektorform) lauten:

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

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

$$\left. \begin{aligned} f_0 &= f(x_0, y_0) \\ f_\alpha &= f(x_0 + \alpha_\alpha h, y_0 + h \sum_{\lambda=0}^{\alpha-1} \beta_{\alpha\lambda} f_\lambda) \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots, 7) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

und

$$\left. \begin{aligned} y &= y_0 + h \sum_{\alpha=0}^5 c_\alpha f_\alpha + O(h^6) \\ \hat{y} &= y_0 + h \sum_{\alpha=0}^7 \hat{c}_\alpha f_\alpha + O(h^7) \end{aligned} \right\} \quad (h = \text{Integrations-schrittweite}). \quad (3)$$

Die Gleichungen (3) besagen, daß wir eine Formel fünfter Ordnung und eine sechster Ordnung suchen, die in den ersten sechs Auswertungen

f_0, f_1, \dots, f_5 miteinander übereinstimmen. Mittels der beiden zusätzlichen Auswertungen f_6, f_7 wird dann zu der ersten Formel (3), die von fünfter Ordnung ist, eine zweite Formel (3) als Formel sechster Ordnung konstruiert.

Wegen der Bedingung, daß die ersten sechs Auswertungen unserer Formel sechster Ordnung eine Formel fünfter Ordnung ergeben müssen, benötigen wir insgesamt für unser Formelpaar eine Auswertung mehr, nämlich acht, als für eine Formel sechster Ordnung allein nötig wären.

6. Die Bedingungsgleichungen für die Koeffizienten von RUNGE-KUTTA-Formeln bis zur achten Ordnung können einer Arbeit von J. C. BUTCHER ([1], Tab. 1) entnommen werden. Für eine RUNGE-KUTTA-Formel fünfter Ordnung erhalten wir so 17 Bedingungsgleichungen und für eine Formel sechster Ordnung zusätzlich 20 weitere Bedingungsgleichungen.

Diese $17 + 37 = 54$ Gleichungen sind notwendige und hinreichende Bedingungsgleichungen für die Koeffizienten eines Paares von RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter und sechster Ordnung.

7. Durch Einführung zusätzlicher Annahmen läßt sich die Zahl der notwendigen und hinreichenden Bedingungsgleichungen zu einer weit geringeren Zahl hinreichender Bedingungsgleichungen reduzieren, die sich leichter auflösen lassen als die ursprünglichen 54 Gleichungen.

Für das folgende führen wir die Abkürzungen

$$\sum_{\nu=1}^{x-1} \beta_{x\nu} \alpha_{\nu}^{\lambda} = P_{x\lambda} \quad (x = 2, 3, 4, \dots, 7; \lambda = 1, 2, 3) \quad (4)$$

ein und machen die Annahmen

$$\alpha_5 = \alpha_7 = 1, \quad \alpha_6 = 0, \quad \hat{c}_1 = c_1 = 0, \quad (5)$$

$$\hat{c}_2 = c_2, \quad \hat{c}_3 = c_3, \quad \hat{c}_4 = c_4, \quad \hat{c}_5 = 0, \quad \hat{c}_6 = \hat{c}_7 = c_5$$

$$\left. \begin{aligned} (*) \quad P_{\nu 1} &= \frac{1}{2} \alpha_{\nu}^2 \quad (\nu = 2, 3, 4, 5), \\ P_{\nu 1} &= \frac{1}{2} \alpha_{\nu}^2 \quad (\nu = 6, 7). \end{aligned} \right\} \quad (A) \quad (A \nu)$$

$$(*) \quad c_2 \beta_{21} + c_3 \beta_{31} + c_4 \beta_{41} + c_5 \left\{ \begin{array}{l} \beta_{51} \\ \beta_{61} + \beta_{71} \end{array} \right\} = c_1 (1 - \alpha_1) = 0, \quad (B \ 1)$$

$$(*) \quad c_3 \beta_{32} + c_4 \beta_{42} + c_5 \left\{ \begin{array}{l} \beta_{52} \\ \beta_{62} + \beta_{72} \end{array} \right\} = c_2 (1 - \alpha_2), \quad (B \ 2)$$

$$(*) \quad c_4 \beta_{43} + c_5 \left\{ \begin{array}{l} \beta_{53} \\ \beta_{63} + \beta_{73} \end{array} \right\} = c_3 (1 - \alpha_3), \quad (B) \quad (B \ 3)$$

$$(*) \quad c_5 \left\{ \begin{array}{l} \beta_{54} \\ \beta_{64} + \beta_{74} \end{array} \right\} = c_4 (1 - \alpha_4), \quad (B \ 4)$$

$$c_5 (\beta_{65} + \beta_{75}) = c_5 (1 - \alpha_5) = 0, \quad (B \ 5)$$

$$c_5 \beta_{76} = c_5 (1 - \alpha_6) = c_5. \quad (B \ 6)$$

$$\begin{array}{l}
 (*) \quad c_2 \alpha_2 \beta_{21} + c_3 \alpha_3 \beta_{31} + c_4 \alpha_4 \beta_{41} + c_5 \left\{ \begin{array}{l} \beta_{51} \\ \beta_{71} \end{array} \right\} = 0, \\
 c_2 \alpha_2^2 \beta_{21} + c_3 \alpha_3^2 \beta_{31} + c_4 \alpha_4^2 \beta_{41} + c_5 \beta_{71} = 0, \\
 c_3 \alpha_3 \beta_{32} \beta_{21} + c_4 \alpha_4 (\beta_{42} \alpha_2 + \beta_{43} \alpha_3) + \\
 + c_5 (\beta_{72} \beta_{21} + \beta_{73} \beta_{31} + \beta_{74} \beta_{41} + \beta_{75} \beta_{51} + \beta_{76} \beta_{61}) = 0.
 \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} (C 1) \\ (C 2) \\ (C 3) \end{array}$$

Der Stern (*) vor einigen Formeln der Gruppen (A), (B) und (C) soll andeuten, daß diese Annahmen für die RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter und sechster Ordnung gleichzeitig gültig sein sollen. Spalten sich die Formeln, wie in (B) und (C), in je zwei Formeln auf, so gelten die oberen Formeln für die RUNGE-KUTTA-Formel fünfter Ordnung und die unteren für die RUNGE-KUTTA-Formel sechster Ordnung. Die Formeln ohne Stern sind nur für die RUNGE-KUTTA-Formeln sechster Ordnung erforderlich. Die Annahmen (A), (B) und (C) und ihr reduzierender Einfluß auf die Zahl der Bedingungsgleichungen sind in der Literatur wohlbekannt.

8. Führen wir die Annahmen (5), (A), (B) und (C) in die ursprünglichen Bedingungsgleichungen ein, so finden wir, daß viele der Bedingungsgleichungen miteinander identisch werden. Man wird so schließlich auf zwei Gruppen von Bedingungsgleichungen geführt, die sich nicht weiter reduzieren lassen. Die erste Gruppe ist von den β -Koeffizienten unabhängig und lautet

$$\begin{array}{l}
 (*) \quad \left\{ \begin{array}{l} c_0 \\ \hat{c}_0 \end{array} \right\} + c_2 + c_3 + c_4 + \left\{ \begin{array}{l} c_5 \\ 2 c_5 \end{array} \right\} = 1, \\
 (*) \quad \sum_{\nu=2}^4 c_\nu \alpha_\nu^\mu + c_5 = \frac{1}{\mu + 1}, \\
 \sum_{\nu=2}^4 c_\nu \alpha_\nu^5 + c_5 = \frac{1}{6}.
 \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} (D 0) \\ (D) \quad (\mu = 1, 2, 3, 4), \\ (D 5) \end{array}$$

Die zweite Gruppe von Bedingungsgleichungen, in denen jetzt auch die β -Koeffizienten auftreten, lautet, wenn man noch die Abkürzungen

$$p_{\alpha\lambda} = P_{\alpha\lambda} - \beta_{\alpha 1} \alpha_1^\lambda \quad (\alpha = 2, 3, 4, 5, 6, 7; \lambda = 1, 2, 3) \quad (6)$$

einführt:

$$\begin{array}{l}
 (*) \quad c_3 \alpha_3 p_{32} + c_4 \alpha_4 p_{42} + c_5 \left\{ \begin{array}{l} p_{52} \\ p_{72} \end{array} \right\} = \frac{1}{15}, \\
 c_3 \alpha_3 p_{33} + c_4 \alpha_4 p_{43} + c_5 p_{73} = \frac{1}{24}, \\
 c_3 \alpha_3^2 p_{32} + c_4 \alpha_4^2 p_{42} + c_5 p_{72} = \frac{1}{18}, \\
 c_4 \alpha_4 \beta_{43} p_{32} + c_5 (\beta_{73} p_{32} + \beta_{74} p_{42} + \beta_{75} p_{52} + \beta_{76} p_{62}) = \frac{1}{72}.
 \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} (E) \quad \begin{array}{l} (E 1) \\ (E 2) \\ (E 3) \\ (E 4) \end{array}$$

Die Koeffizienten $\beta_{\kappa 0}$ ($\kappa = 1, 2, 3, \dots, 7$) erhält man schließlich aus den wohlbekannten Gleichungen

$$\left. \begin{aligned} (*) \quad \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} &= \alpha_{\mu} \quad (\mu = 1, 2, 3, 4, 5), \\ \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} &= \alpha_{\mu} \quad (\mu = 6, 7). \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} (F) \\ (F \mu) \end{array}$$

Im folgenden werden wir uns mit der Auflösung der Systeme (A), (B), (C), (D) und (E) beschäftigen.

9. Aus dem Bestehen der Gleichungen (A), (B), (C), (D) und (E) können Beziehungen zwischen den α -Koeffizienten gefolgert werden, nämlich

$$\alpha_4 = \frac{1}{3} \cdot \frac{9 \alpha_2 - 4}{5 \alpha_2 - 2}, \tag{7}$$

$$\alpha_3 = \frac{\alpha_2}{15 \alpha_2^2 - 10 \alpha_2 + 2}. \tag{8}$$

Die Beziehung (8) kann aus der Verträglichkeitsbedingung für das System (D μ), (D 5) unter Benutzung von (7) hergeleitet werden.

Aus (7) und (8) folgt, daß α_1 und α_2 die beiden einzigen frei wählbaren α -Koeffizienten sind.

10. Nach Auffinden der einschränkenden Bedingungen (7), (8) für die α -Koeffizienten ist die Berechnung der übrigen RUNGE-KUTTA-Koeffizienten für unser Formelpaar RK 5 (6) ziemlich trivial. Wir beschränken uns daher darauf, die Rechnung nur in großen Zügen anzugeben:

Aus (D μ) können die Gewichtsfaktoren c_2, c_3, c_4, c_5 ermittelt werden. Aus (E 1), (E 3) und einer aus (B 2), (B 3), (B 4) und (D 2), (D 3) kombinierten dritten Relation können wir p_{32}, p_{42} und $p_{52} = p_{72}$ finden. Die vier Gleichungen (A 2), (A 3), (A 4) und (A 5) gestatten die Ermittlung von $\beta_{21} \alpha_1, \beta_{31} \alpha_1, \beta_{41} \alpha_1$ und $\beta_{51} \alpha_1$. Einführung dieser Ausdrücke in (C 1) liefert p_{41} , da β_{32} bereits von dem Ausdruck für p_{32} her bekannt ist. Aus den Ausdrücken für p_{41} und p_{42} lassen sich dann aber die Koeffizienten β_{42} und β_{43} bestimmen. Aus den Gleichungen (B 2), (B 3), (B 4) ergeben sich dann die Koeffizienten $\beta_{52}, \beta_{53}, \beta_{54}$. Dies sind alle Koeffizienten für unsere RUNGE-KUTTA-Formel fünfter Ordnung RK 5.

11. Wir haben noch die fehlenden Koeffizienten unserer RUNGE-KUTTA-Formel sechster Ordnung anzugeben. Aus den beiden Gleichungen (C 1) folgt: $\beta_{71} = \beta_{51}$, und aus der Gleichung (B 6): $\beta_{76} = 1$. Die Gleichung (B 5) legt die Annahme $\beta_{65} = \beta_{75} = 0$ nahe. Aus (A 7), (E 1) und (E 2) können dann p_{71}, p_{72} und p_{73} ermittelt werden. Aus diesen Ausdrücken findet man dann die Koeffizienten β_{72}, β_{73} und β_{74} . Schließlich liefern die (unteren) Gleichungen (B 2), (B 3) und (B 4) die Koeffizienten β_{62}, β_{63} und β_{64} .

Damit sind alle Koeffizienten unseres Formelpaares RK 5 (6) als Funktionen von α_1 und α_2 bestimmt. Drückt man sie explizit durch diese

beiden Parameter aus, so läßt sich zeigen, daß unsere Koeffizienten in der Tat allen Bedingungsgleichungen genügen.

12. Wir beschäftigen uns jetzt mit dem ersten Glied des lokalen Abbruchfehlers unserer Formel RK 5 in der Absicht, durch geeignete Wahl von α_1 und α_2 eine Formel mit möglichst kleinem lokalen Abbruchfehler zu finden. Nach BUTCHER ([1], Tab. 1) besteht das erste Glied des lokalen Abbruchfehlers aus 20 Summanden von der Form

$$T_\nu \cdot [\dots]_\nu \cdot h^6 \quad (\nu = 1, 2, 3, \dots, 20). \quad (9)$$

Hierbei bedeuten die T_ν numerische, für die betreffende RUNGE-KUTTA-Formel charakteristische Konstanten; die Klammern $[\dots]_\nu$ in (9) enthalten gewisse Kombinationen von partiellen Ableitungen der rechten Seite von (1). Wegen unserer speziellen Annahmen (5) verschwindet die Mehrheit unserer Fehler-Koeffizienten T_ν . Als von Null verschieden ergeben sich nur die Koeffizienten (in BUTCHERS Reihenfolge der Anordnung): $T_1, T_2, T_3, T_4, T_{10}, T_{11}, T_{12}, T_{13}$. Durch eine geeignete Wahl von α_1 , nämlich

$$\alpha_1 = \frac{2}{15} \cdot \frac{5\alpha_2 - 1}{\alpha_2} \quad (10)$$

kann auch T_2 und T_{11} zum Verschwinden gebracht werden. Für die verbleibenden von Null verschiedenen Koeffizienten ergibt sich dann

$$T_{10} = -T_1 = \frac{1}{360} \cdot \frac{(3\alpha_2 - 1)(5\alpha_2 - 1)}{15\alpha_2^2 - 10\alpha_2 + 2}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} T_{13} &= -T_4 = -\frac{1}{3} T_3 = \\ &= \frac{1}{3} T_{12} = -\frac{1}{360} \cdot \frac{(3\alpha_2 - 1)(5\alpha_2^2 - 5\alpha_2 + 1)}{15\alpha_2^2 - 10\alpha_2 + 2}. \end{aligned} \quad (12)$$

13. Von (11) und (12) folgt, daß alle Fehler-Koeffizienten T_ν Null werden, wenn wir $\alpha_2 = 1/3$ fordern. Solch eine Wahl von α_2 führt jedoch zu $\alpha_3 = 1, \alpha_4 = 1$ und macht die Gleichungen (D μ), (D 5) unverträglich. Wir können also nicht alle T_ν gleichzeitig Null machen, was zu erwarten war, da wir sonst eine RUNGE-KUTTA-Formel sechster Ordnung mit nur sechs Auswertungen erhalten hätten.

Es ist auch nicht ratsam, für α_2 einen Wert in der Nähe von $1/3$ zu wählen, um alle T_ν -Koeffizienten klein zu machen, da solch eine Wahl zu großen Werten für einige Gewichtungsfaktoren c_ν führen würde.

Als nächstes könnte man versuchen, nur die Koeffizienten (12) zu Null zu machen durch $5\alpha_2^2 - 5\alpha_2 + 1 = 0$ oder $\alpha_2 = \frac{1}{10}(5 \pm \sqrt{5})$. Solch eine Annahme führt jedoch, wie man zeigen kann, ebenfalls zu Widersprüchen.

Es ist jedoch möglich, für α_2 einen Wert in der Nähe von $\alpha_2 = \frac{1}{10}(5 - \sqrt{5})$ zu wählen (das negative Vorzeichen vor der Wurzel in α_2 führt zu absolut kleineren Fehler-Koeffizienten T_{10} und T_1) und dadurch sämtliche Fehler-Koeffizienten (11) und (12) klein zu halten.

Wir wählen z. B. anstelle von $\alpha_2 = \frac{1}{10} (5 - \sqrt{5}) \approx 0.276$ den numerisch bequemen Wert

$$\alpha_2 = \frac{4}{15} \approx 0.267, \tag{13}$$

der ziemlich dicht bei $\alpha_2 = \frac{1}{10} (5 - \sqrt{5})$ liegt, zu relativ einfachen RUNGE-KUTTA-Koeffizienten führt (sämtliche Gewichtungsfaktoren sind nicht-negativ) und die relativ kleinen Fehler-Koeffizienten

$$T_{10} = -\frac{1}{2160} \approx -0.463 \cdot 10^{-3}, \quad T_{13} = \frac{1}{32400} \approx 0.309 \cdot 10^{-4} \tag{14}$$

ergibt.

In Tab. I haben wir die zu $\alpha_2 = 4/15$ gehörenden Koeffizienten unseres Formelpaares RK 5 (6) zusammengestellt.

Tabelle I. RK 5 (6)

λ α	α_x	$\beta_{x\lambda}$							c_x	\hat{c}_x
		0	1	2	3	4	5	6		
0	0	0							$\frac{31}{384}$	$\frac{7}{1408}$
1	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$							0	
2	$\frac{4}{15}$	$\frac{4}{75}$	$\frac{16}{75}$						$\frac{1125}{2816}$	
3	$\frac{2}{3}$	$\frac{5}{6}$	$-\frac{8}{3}$	$\frac{5}{2}$					$\frac{9}{32}$	
4	$\frac{4}{5}$	$-\frac{8}{5}$	$\frac{144}{25}$	-4	$\frac{16}{25}$				$\frac{125}{768}$	
5	1	$\frac{361}{320}$	$-\frac{18}{5}$	$\frac{407}{128}$	$-\frac{11}{80}$	$\frac{55}{128}$			$\frac{5}{66}$	0
6	0	$-\frac{11}{640}$	0	$\frac{11}{256}$	$-\frac{11}{160}$	$\frac{11}{256}$	0			$\frac{5}{66}$
7	1	$\frac{93}{640}$	$-\frac{18}{5}$	$\frac{803}{256}$	$-\frac{11}{160}$	$\frac{99}{256}$	0	1		$\frac{5}{66}$

$$T E = \frac{5}{66} (f_0 + f_5 - f_6 - f_7) h. \tag{15}$$

Gleichung (15) stellt das für die Schrittweiten-Kontrolle erforderliche erste Glied des lokalen Abbruchfehlers dar.

Teil II. Runge-Kutta-Formeln siebenter Ordnung

14. Da die Herleitung der Koeffizienten für RUNGE-KUTTA-Formeln höherer Ordnung in ähnlicher Weise erfolgt wie die für Formeln fünfter Ordnung in Teil I, können wir uns im folgenden noch kürzer fassen.

Für ein Formelpaar siebenter und achter Ordnung machen wir den Ansatz

$$\left. \begin{aligned} f_0 &= f(x_0, y_0) \\ f_\varkappa &= f(x_0 + \alpha_\varkappa h, y_0 + h \sum_{\lambda=0}^{\varkappa-1} \beta_{\varkappa\lambda} f_\lambda) \quad (\varkappa = 1, 2, 3, \dots, 12) \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

und

$$\left. \begin{aligned} y &= y_0 + h \sum_{\varkappa=0}^{10} c_\varkappa f_\varkappa + 0(h^8), \\ \hat{y} &= y_0 + h \sum_{\varkappa=0}^{12} \hat{c}_\varkappa f_\varkappa + 0(h^9), \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

d. h. wir lassen jetzt insgesamt 13 Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt zu.

15. Analog zu Teil I machen wir jetzt wieder die vereinfachenden Annahmen

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{10} = \alpha_{12} = 1, \quad \alpha_{11} = 0, \quad \hat{c}_1 = c_1 = 0, \quad \hat{c}_2 = c_2 = 0, \quad \hat{c}_3 = c_3 = 0, \\ \hat{c}_4 = c_4 = 0, \\ \hat{c}_5 = c_5, \quad \hat{c}_6 = c_6, \quad \hat{c}_7 = c_7, \quad \hat{c}_8 = c_8, \quad \hat{c}_9 = c_9, \quad \hat{c}_{10} = 0, \\ \hat{c}_{11} = \hat{c}_{12} = c_{10}, \\ \beta_{31} = \beta_{41} = \beta_{51} = \beta_{61} = \beta_{71} = \beta_{81} = \beta_{91} = \beta_{101} = \beta_{111} = \beta_{121} = 0, \\ \beta_{52} = \beta_{62} = \beta_{72} = \beta_{82} = \beta_{92} = \beta_{102} = \beta_{112} = \beta_{122} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

$$(A 1) \quad P_{v1} = \frac{1}{2} \alpha_v^2 \quad (v = 2, 3, 4, \dots, 12) \quad (A 1-v)$$

$$(A 2) \quad P_{v2} = \frac{1}{3} \alpha_v^3 \quad (v = 2, 3, 4, \dots, 12) \quad (A 2-v)$$

$$(A 3) \quad P_{v3} = \frac{1}{4} \alpha_v^4 \quad (v = 5, 6, 7, \dots, 12) \quad (A 3-v)$$

$$\left. \sum_{\mu=v}^9 c_\mu \beta_{\mu v-1} + c_{10} \left\{ \begin{array}{l} \beta_{10 v-1} \\ \beta_{11 v-1} + \beta_{12 v-1} \end{array} \right\} = c_{v-1} (1 - \alpha_{v-1}) \quad (v = 4, 5, \dots, 9) \right\} \quad (B v-1)$$

$$c_{10} \left\{ \begin{array}{l} \beta_{109} \\ \beta_{119} + \beta_{129} \end{array} \right\} = c_9 (1 - \alpha_9), \quad (B) \quad (B 9)$$

$$c_{10} (\beta_{1110} + \beta_{1210}) = c_{10} (1 - \alpha_{10}) = 0, \quad (B 10)$$

$$c_{10} \beta_{1211} = c_{10} (1 - \alpha_{11}) = c_{10}. \quad (B 11)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \beta_{\mu 3} + c_{10} \begin{Bmatrix} \beta_{103} \\ \beta_{123} \end{Bmatrix} = 0, \right\} \quad (C 1)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \beta_{\mu 4} + c_{10} \beta_{124} = 0, \right\} \quad (C 2)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu}^2 \beta_{\mu 3} + c_{10} \beta_{123} = 0, \right\} \quad (C 3)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu}^2 \beta_{\mu 4} + c_{10} \beta_{124} = 0, \right\} \quad (C 4)$$

$$\left. \sum_{\mu=6}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \left(\sum_{\nu=5}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} \beta_{\nu 3} \right) + c_{10} \sum_{\nu=5}^{11} \beta_{12\nu} \beta_{\nu 3} = 0, \right\} \quad (C 5)$$

$$\left. \sum_{\mu=6}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \left(\sum_{\nu=5}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} \beta_{\nu 4} \right) + c_{10} \sum_{\nu=5}^{11} \beta_{12\nu} \beta_{\nu 4} = 0. \right\} \quad (C 6)$$

16. Unter den vereinfachenden Annahmen von 15 reduzieren sich die ursprünglichen Bedingungsgleichungen zu den folgenden beiden Gruppen von Gleichungen

$$\left. \left\{ \begin{matrix} c_0 \\ \hat{c}_0 \end{matrix} \right\} + \sum_{\nu=5}^9 c_{\nu} + \left\{ \begin{matrix} c_{10} \\ 2 c_{10} \end{matrix} \right\} = 1, \right\} \quad (D 0)$$

$$\left. \sum_{\nu=5}^{10} c_{\nu} \alpha_{\nu}^{\mu} = \frac{1}{\mu + 1}, \quad (\mu = 1, 2, 3, \dots, 7), \right\} \quad (D \mu)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} P_{\mu 4} + c_{10} \begin{Bmatrix} P_{104} \\ P_{124} \end{Bmatrix} = \frac{1}{35}, \right\} \quad (E 1)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \left(\sum_{\nu=4}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} P_{\nu 3} \right) + c_{10} \begin{Bmatrix} \sum_{\nu=4}^9 \beta_{10\nu} P_{\nu 3} \\ 11 \\ \sum_{\nu=4}^{11} \beta_{12\nu} P_{\nu 3} \end{Bmatrix} = \frac{1}{140}, \right\} \quad (E 2)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} P_{\mu 5} + c_{10} P_{125} = \frac{1}{48}, \right\} \quad (E 3)$$

$$\left. \sum_{\mu=5}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu}^2 P_{\mu 4} + c_{10} P_{124} = \frac{1}{40}, \right\} \quad (E 4)$$

$$\left. \sum_{\mu=6}^9 c_{\mu} \alpha_{\mu} \left(\sum_{\nu=6}^{\mu-1} \beta_{\mu\nu} P_{\nu 4} \right) + c_{10} \sum_{\nu=5}^{11} \beta_{12\nu} P_{\nu 4} = \frac{1}{240} \right\} \quad (\text{E}) \quad (\text{E } 5)$$

17. Es bestehen wieder Beziehungen zwischen den α -Koeffizienten. Zunächst läßt sich aus der Verträglichkeitsbedingung für die Gleichungen (D 1) bis (D 7) der Koeffizient α_5 durch $\alpha_6, \alpha_7, \alpha_8, \alpha_9$ ausdrücken. Der etwas umfangreiche Ausdruck für α_5 vereinfacht sich zu $\alpha_5 = 1/2$, wenn wir $\alpha_6 + \alpha_7 = 1$ und $\alpha_8 + \alpha_9 = 1$ fordern. Wir setzen daher für das Folgende voraus

$$\alpha_6 + \alpha_7 = 1, \quad \alpha_8 + \alpha_9 = 1, \quad \alpha_5 = \frac{1}{2}. \quad (19)$$

Weitere Beziehungen zwischen den α -Koeffizienten erhält man aus (A 1-2), (A 2-2)

$$\alpha_1 = \frac{2}{3} \alpha_2, \quad (20)$$

aus (A 1-3), (A 2-3)

$$\alpha_2 = \frac{2}{3} \alpha_3 \quad (21)$$

und aus (A 1-5), (A 2-5), (A 3-5) mit $\alpha_5 = 1/2$

$$\alpha_3 = \frac{1}{8} \cdot \frac{8 \alpha_4 - 3}{3 \alpha_4 - 1}. \quad (22)$$

Danach können alle α -Koeffizienten durch $\alpha_4, \alpha_6, \alpha_8$ ausgedrückt werden. Es läßt sich indessen zeigen, daß α_8 bereits durch unsere Bedingungs-gleichungen und unsere Annahmen zu

$$\alpha_8 = \frac{2}{3} \quad (23)$$

festgelegt ist.

Daher haben wir nur zwei freie Koeffizienten, nämlich α_4 und α_6 .

18. Wir übergangen wieder die Berechnung der Gewichtsfaktoren c_{ν} und der β -Koeffizienten für unser Formelpaar RK 7 (8), da diese ziemlich trivial ist, nachdem die Beschränkungen für die α -Koeffizienten einmal gefunden worden sind.

19. Das erste Glied des lokalen Abbruchfehlers für unsere Formel RK 7 besteht jetzt aus 115 Summanden. Wegen der vereinfachenden Annahmen von 15 sind jedoch die Fehler-Koeffizienten T_{ν} von 75 dieser Summanden Null. Die von Null verschiedenen 40 Fehler-Koeffizienten sind weiter sämtlich Vielfache der vier Koeffizienten T_{49}, T_{52}, T_{57} und T_{68} (in BUTCHERS Reihenfolge der Anordnung).

20. Es genügt daher, diese vier Koeffizienten als Funktionen von α_4 und α_6 zu ermitteln. Wir benutzten eine elektronische Rechenanlage, um diese vier Koeffizienten für ein Netz von (α_4, α_6) -Werten aus den Intervallen $0 < \alpha_4 < 1, 0 < \alpha_6 < 1$ zu berechnen.

Tabelle 2. RK 7 (8)

λ κ	α_κ	$\beta_{\mu\lambda}$											c_κ	\hat{c}_κ		
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10			11	
0	0	0													$\frac{41}{840}$	0
1	$\frac{2}{27}$	$\frac{2}{27}$														0
2	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{36}$	$\frac{1}{12}$													0
3	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$												0
4	$\frac{5}{12}$	$\frac{5}{12}$	$-\frac{25}{16}$	$\frac{25}{16}$	$\frac{1}{16}$											0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{20}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$										$\frac{34}{105}$
6	$\frac{5}{6}$	$-\frac{25}{108}$	0	$\frac{125}{108}$	$-\frac{65}{27}$	$\frac{125}{54}$	$\frac{2}{54}$									$\frac{9}{35}$
7	$\frac{1}{6}$	$\frac{31}{300}$	0	0	$\frac{61}{225}$	$-\frac{2}{900}$	$\frac{13}{900}$									$\frac{9}{35}$
8	$\frac{2}{3}$	2	0	$-\frac{53}{6}$	$\frac{704}{45}$	$-\frac{67}{90}$	$\frac{67}{90}$	3								$\frac{9}{280}$
9	$\frac{1}{3}$	$\frac{91}{108}$	0	$\frac{23}{108}$	$\frac{976}{135}$	$-\frac{311}{54}$	$\frac{19}{60}$	$\frac{17}{6}$	$\frac{1}{12}$							$\frac{9}{280}$
10	1	$\frac{2383}{4100}$	0	0	$\frac{341}{164}$	$-\frac{82}{1025}$	$\frac{301}{4100}$	$\frac{45}{82}$	$\frac{45}{164}$	$\frac{18}{41}$						0
11	0	$\frac{3}{205}$	0	0	0	$-\frac{6}{41}$	$-\frac{3}{205}$	$\frac{3}{41}$	$-\frac{3}{41}$	$\frac{6}{41}$	0					$\frac{41}{840}$
12	1	$-\frac{1777}{4100}$	0	0	$-\frac{341}{164}$	$-\frac{82}{1025}$	$\frac{289}{4100}$	$\frac{51}{82}$	$\frac{33}{164}$	$\frac{12}{41}$	0	1				$\frac{41}{840}$

$$TE = \frac{41}{840} (f_0 + f_{10} - f_{11} - f_{12}) h. \tag{26}$$

Als günstigste Kombination fanden wir

$$\alpha_4 = \frac{5}{12}, \quad \alpha_6 = \frac{5}{6} \quad (24)$$

mit den folgenden Werten für unsere vier Fehler-Koeffizienten

$$\begin{aligned} T_{49} &\approx 0.164 \cdot 10^{-5}, & T_{52} &\approx -0.567 \cdot 10^{-6}, \\ T_{57} &\approx 0.765 \cdot 10^{-6}, & T_{68} &\approx -0.919 \cdot 10^{-7}. \end{aligned} \quad (25)$$

In Tab. 2 haben wir die zu der Kombination (24) gehörenden RUNGE-KUTTA-Koeffizienten unseres Formelpaares RK 7 (8) zusammengestellt einschließlich der Formel (26) für die Schrittweiten-Kontrolle.

Teil III. Ein numerisches Beispiel

21. In diesem Teil unserer Arbeit vergleichen wir an einem numerischen Beispiel unsere neuen RUNGE-KUTTA-Formeln und bekannte klassische RUNGE-KUTTA-Formeln von der gleichen Ordnung miteinander, letztere unter Verwendung von RICHARDSON's *extrapolation to the limit* als Prinzip zur Schrittweitenkontrolle.

Wir haben diesen Vergleich auch auf die Formeln sechster und achter Ordnung ausgedehnt, welche wir an anderer Stelle [6] hergeleitet haben.

22. Wir wählen das folgende Beispiel

$$y' = -2xy \cdot \log z, \quad z' = 2xz \cdot \log y \quad (27)$$

mit der Anfangsbedingung

$$x_0 = 0 : y_0 = e, \quad z_0 = 1, \quad (28)$$

das die Lösung

$$y = e^{\cos(x^2)}, \quad z = e^{\sin(x^2)} \quad (29)$$

besitzt.

Wir integrierten das System (27) von $x = 0$ bis $x = 5$. Alle Rechnungen wurden auf einer IBM-7094 Rechenanlage (16 Dezimalstellen) durchgeführt und allen Rechnungen liegt einheitlich die gleiche Toleranz (10^{-16}) für den örtlichen Abbruchfehler zugrunde.

23. Im Falle der Formeln fünfter Ordnung haben wir zum Vergleich die beiden Formeln von W. KUTTA ([9], S. 446—447) in ihrer berichtigten Form ([3], S. 424) bzw. ([10], S. 5) verwendet. In den letzten Jahren sind zwar weitere RUNGE-KUTTA-Formeln fünfter Ordnung aufgestellt worden, ihre Fehler-Koeffizienten T_i sind jedoch kaum günstiger als die der Formeln von KUTTA.

Im Falle der Formeln sechster Ordnung haben wir von A. HUTAS Formeln [7], [8] die zweite Formel ([8], S. 23) wegen ihrer einfacheren Koeffizienten herangezogen. Während HUTAS Formeln acht Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt erfordern, haben später J. C. BUTCHER [2] und andere Autoren RUNGE-KUTTA-Formeln sechster Ordnung aufgestellt, die nur sieben solche Auswertungen benötigen. Wir

Tabelle 3. Vergleich der verschiedenen Methoden für das Beispiel (27), (28), (29)

Methode	Ordnung der Methode	Zahl der Auswertungen pro Schritt	Ergebnisse für $x = 5$ (Toleranz: 10^{-10})				Gesamtfehler in y und z	
			Zahl der Schritte	Gesamtzahl der Auswertungen der Differentialgleichungen	Rechenzeit (min) auf der IBM 7094	Δy	Δz	
KUTTA-1.....	5	11	6 335	69 685	7,10	- 0,3071 · 10 ⁻¹²	- 0,2772 · 10 ⁻¹²	
KUTTA-2.....	5	11	6 290	69 190	6,95	- 0,2383 · 10 ⁻¹²	- 0,2802 · 10 ⁻¹²	
RK 5 (6).....	5	8	4 779	38 232	3,84	+ 0,1072 · 10 ⁻¹²	- 0,2190 · 10 ⁻¹²	
HUTA	6	15	3 596	53 940	5,65	- 0,4863 · 10 ⁻¹³	- 0,1731 · 10 ⁻¹²	
BUTCHER	6	13	2 958	38 454	3,87	- 0,5951 · 10 ⁻¹³	- 0,1495 · 10 ⁻¹²	
RK 6 (7).....	6	10	2 245	22 450	2,25	- 0,4641 · 10 ⁻¹³	- 0,1079 · 10 ⁻¹²	
SHANKS (7-9)....	7	17	1 423	24 191	2,49	- 0,1332 · 10 ⁻¹³	- 0,7377 · 10 ⁻¹³	
RK 7 (8).....	7	13	818	10 634	1,12	- 0,2509 · 10 ⁻¹³	- 0,5135 · 10 ⁻¹³	
SHANKS (8-12)...	8	23	694	15 962	1,65	- 0,1710 · 10 ⁻¹³	- 0,4646 · 10 ⁻¹³	
RK 8 (9).....	8	17	510	8 670	0,91	- 0,1776 · 10 ⁻¹⁴	- 0,3553 · 10 ⁻¹³	

haben hier zum Vergleich eine Formel von J. C. BUTCHER ([2], S. 193) herangezogen, die uns wegen ihrer kleinen Fehler-Koeffizienten besonders interessant erschien.

Im Falle der Formeln siebenter und achter Ordnung haben wir die Formeln von E. B. SHANKS ([11], S. 34) zum Vergleich herangezogen; keine anderen RUNGE-KUTTA-Formeln von dieser Ordnung sind uns bekannt.

24. Tab. 3 zeigt unsere Ergebnisse. Da unsere Fehler-Koeffizienten (absolut) kleiner sind als die entsprechenden Koeffizienten der Vergleichsformeln, kommen wir mit erheblich weniger Integrationschritten aus als die Vergleichsformeln. Wegen der Einfachheit unseres Verfahrens der Schrittweiten-Kontrolle benötigen wir auch weniger Auswertungen der Differentialgleichungen pro Schritt als die Vergleichsverfahren. Diese beiden Faktoren zusammen bewirken in unserem Beispiel bei gleicher Genauigkeit eine Zeitersparnis unserer neuen RUNGE-KUTTA-Formeln von etwa 40 bis 60% verglichen mit den bekannten klassischen RUNGE-KUTTA-Formeln der gleichen Ordnung.

Literatur

- [1] BUTCHER, J. C.: Coefficients for the Study of RUNGE-KUTTA Integration Processes. *J. Austral. Math. Soc.* **3**, 185—201 (1963).
- [2] BUTCHER, J. C.: On RUNGE-KUTTA Processes of High Order. *J. Austral. Math. Soc.* **4**, 179—194 (1964).
- [3] FEHLBERG, E.: Eine Methode zur Fehlerverkleinerung beim RUNGE-KUTTA-Verfahren. *Z. angew. Math. Mech.* **38**, 421—426 (1958).
- [4] FEHLBERG, E.: New High-Order RUNGE-KUTTA Formulas with Stepsize Control for Systems of First- and Second-Order Differential Equations. *Z. angew. Math. Mech.* **44**, Sonderheft, T 17—T 29 (1964).
- [5] FEHLBERG, E.: New High-Order RUNGE-KUTTA Formulas with an Arbitrarily Small Truncation Error. *Z. angew. Math. Mech.* **46**, 1—16 (1966).
- [6] FEHLBERG, E.: Classical Fifth-, Sixth-, Seventh-, and Eighth-Order RUNGE-KUTTA Formulas with Stepsize Control. NASA Technical Report 287, 1968.
- [7] HUTA, A.: Une amélioration de la méthode de RUNGE-KUTTA-NYSTRÖM pour la résolution numérique des équations différentielles du premier ordre. *Acta Fac. Nat. Univ. Comenian. Math.* **1**, 201—224 (1956).
- [8] HUTA, A.: Contribution à la formule de sixième ordre dans la méthode de RUNGE-KUTTA-NYSTRÖM. *Acta Fac. Nat. Univ. Comenian. Math.* **2**, 21—24 (1957).
- [9] KUTTA, W.: Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen. *Z. Math. Phys.* **46**, 435—453 (1901).
- [10] NYSTRÖM, E. J.: Über die numerische Integration von Differentialgleichungen. *Acta Soc. Sci. Fenn.* **50**, Nr. 13 (1925).
- [11] SHANKS, E. B.: Solutions of Differential Equations by Evaluations of Functions. *Math. Comp.* **20**, 21—38 (1966).

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