Numerieke methoden voor stelsels gewone differentiaalvergelijkingen

Prof. Dr. Marnix Van Daele

Deel III

Runge–Kutta-methoden

Hoofdstuk 7

Runge–Kutta-methoden

7.1 Definitie

Runge–Kutta-methoden werden reeds kort geïntroduceerd in Hoofdstuk 2.

Definitie 7.1.1 *De algemeenste s-traps Runge–Kutta-methode voor het probleem*

$$y' = f(x, y), \quad y(a) = \eta, \quad f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m \tag{7.1}$$

is van de vorm :

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i \, k_i \,, \\ \quad k_i = f(x_n + c_i \, h, \, y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \, k_j), \quad i = 1, 2, \ldots, s \,. \end{cases} \tag{7.2}$$

□

We zullen verder (tenzij anders vermeld) veronderstellen dat aan de *rijsom-voorwaarde* voldaan is, i.e.

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij}, \quad i = 1, 2, \ldots, s \,. \tag{7.3}$$

Het is gebruikelijk de coëfficiënten die optreden in (7.2) voor te stellen in de volgende gedaante, algemeen bekend als *Butcher-matrix*, *Butcher-array* of *Butcher-tableau* :

$$
\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3s} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_s
\end{array}
$$

We definiëren de s-dimensionale vectoren c en b en de $s \times s$ matrix A door

$$
c = [c_1,\, c_2,\, \ldots,\, c_s]^T, \quad b = [b_1,\, b_2,\, \ldots,\, b_s]^T, \quad A = [a_{ij}]\,. \tag{7.4}
$$

Merk op dat de componenten van c door (7.3) de rijsommen zijn van A. Het is duidelijk dat een s-traps RKM volledig gespecificeerd is door de Butcher-matrix

$$
\begin{array}{c|c}
c & A \\
\hline
 & b^T
\end{array}\,.
$$

Een alternatieve vorm voor (7.2), die in sommige omstandigheden nuttiger is, wordt gegeven door

$$
\left\{
\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i\, f(x_n + c_i\, h,\, Y_i)\,, \\
Y_i &= y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, f(x_n + c_j\, h,\, Y_j), \quad i = 1,\, 2,\, \ldots,\, s\,.
\end{aligned}
\right. \tag{7.5}
$$

De vormen (7.2) en (7.5) zijn equivalent als we de volgende interpretatie maken :

$$
k_i = f(x_n + c_i\, h,\, Y_i), \quad i = 1,\, 2,\, \ldots,\, s\,. \tag{7.6}
$$

Als in (7.2) $a_{ij} = 0$ voor $j \geq i$, $i = 1,\, 2,\, \ldots,\, s$, dan worden alle k_i expliciet gegeven in termen van voordien berekende k_j, $j = 1,\, 2,\, \ldots,\, i-1$ en de methode is dan een *expliciete* of *klassieke* RKM (ERKM). Als dit niet het geval is, hebben we te maken met een *impliciete* RKM (IRKM) en het is dan in het algemeen noodzakelijk bij elke stap van de berekening een impliciet stelsel voor de k_i op te lossen. Merk dan wel op dat de dimensie van dit stelsel $m\,s$ is : elke component ${}^{t}k_i$, $t = 1,\, 2,\, \ldots,\, m$ van k_i, $i = 1,\, 2,\, \ldots,\, s$ wordt, voluit neergeschreven, gegeven door

$$
{}^{t}k_i = {}^{t}f(x_n + c_i\, h,\, {}^{1}y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, {}^{1}k_j,\, {}^{2}y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, {}^{2}k_j,\, \ldots,\, {}^{m}y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, {}^{m}k_j)\,.
$$

Er is echter ook een middenweg : als het voorvalt dat $a_{ij} = 0$ voor $j > i$, $i = 1,\, 2,\, \ldots,\, s$, dan is elke ${}^{t}k_i$ individueel gedefinieerd door

$$
{}^{t}k_i = {}^{t}f(x_n + c_i\, h,\, {}^{1}y_n + h \sum_{j=1}^{i} a_{ij}\, {}^{1}k_j,\, {}^{2}y_n + h \sum_{j=1}^{i} a_{ij}\, {}^{2}k_j,\, \ldots,\, {}^{m}y_n + h \sum_{j=1}^{i} a_{ij}\, {}^{m}k_j)\,,
$$

en i.p.v. bij elke stap een niet-lineair stelsel van dimensie $m\,s$ te moeten oplossen, moeten we slechts s ongekoppelde stelsels, elk van dimensie m oplossen. Zulke methoden worden *semi-impliciet* of *diagonaal-impliciet* (DIRKM) genoemd. Samenvattend hebben we dus

- ERKM : expliciete methode :
  $a_{ij} = 0,\ j \geq i,\ j = 1, 2, \ldots, s$, d.w.z. A heeft een strikt beneden-driehoeksvorm.
- DIRKM : semi-impliciete methode :
  $a_{ij} = 0,\ j > i,\ j = 1, 2, \ldots, s$, d.w.z. A heeft een beneden-driehoeksvorm.
- IRKM : impliciete methode :
  $a_{ij} \neq 0$ voor sommige $j > i$, d.w.z. A is niet beneden-driehoekig.

Gezien men in het geval van niet-expliciete methoden vergelijkingen simultaan moet oplossen, is de vraag relevant of de vergelijkingen (7.2) wel een oplossing bezitten. Butcher leverde een voldoende voorwaarde d.m.v. volgende stelling :

Stelling 7.1.1 *Zij f continu in de omgeving van de beginwaarde en zij L haar Lipschitz-constante. Indien*

$$h < \frac{1}{L \max\limits_{1\leq i\leq s} \sum\limits_{j=1}^{s} |a_{ij}|},$$

dan bestaat er een unieke oplossing voor (7.2) die kan bekomen door iteratie. □

Bewijs. Beschouw het Gauss–Jacobi-iteratieproces

$$k_i^{(N)} = f(x_0 + c_i\, h,\, y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j^{(N-1)})\,. \tag{7.7}$$

Definiëren we $a = \max\limits_{1\leq i\leq s} \sum\limits_{j=1}^{s} |a_{ij}|$, dan bewijzen we vooreerst dat (7.2) slechts 1 oplossing bezit. Zij $(k_1, k_2, \ldots, k_s)^T$ en $(k_1^*, k_2^*, \ldots, k_s^*)^T$ twee verschillende oplossingen :

$$k_i = f(x_0 + c_i\, h,\, y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j)\,, \qquad i = 1, 2, \ldots, s\,,$$

en

$$k_i^* = f(x_0 + c_i\, h,\, y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j^*)\,, \qquad i = 1, 2, \ldots, s\,.$$

Dan is

$$\begin{aligned}
\|k_i - k_i^*\| &= \Big\| f(x_0 + c_i\, h,\, y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j) - f(x_0 + c_i\, h,\, y_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j^*) \Big\| \\
&\leq h\, L \Big\| \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, (k_j - k_j^*) \Big\| \\
&\leq h\, L \sum_{j=1}^{s} |a_{ij}|\, \|k_j - k_j^*\| \\
&\leq h\, L\, a \max_{1\leq j\leq s} \|k_j - k_j^*\|\,,
\end{aligned}$$

zodat, als $h\,L\,a < 1$, voor elke i

$$\|k_i - k_i^*\| < \max_{1\le j\le s} \|k_j - k_j^*\|\,,$$

wat een contradictie is.
Vervolgens bewijzen we dat het schema (7.7) convergeert. Een gelijkaardige berekening leidt tot

$$\left\|k_i^{(N)} - k_i^{(N-1)}\right\| \le h\,L\,a \max_{1\le j\le s}\left\|k_j^{(N-1)} - k_j^{(N-2)}\right\|,$$

zodat ook

$$\max_{1\le i\le s}\left\|k_i^{(N)} - k_i^{(N-1)}\right\| \le h\,L\,a \max_{1\le j\le s}\left\|k_j^{(N-1)} - k_j^{(N-2)}\right\|.$$

Dit betekent dat elke component $|\,{}^t\!k_i^{(N)} - {}^t\!k_i^{(N-1)}| \le M\,(h\,L\,a)^N$ waarbij M vast is, hetgeen de convergentie aantoont voor $h\,L\,a < 1$.
Noem nu $k_i = \lim_{N\to\infty} k_i^{(N)}$, dan geldt wegens de continuïteit van f :

$$\begin{aligned}
k_i &= \lim_{N\to\infty} k_i^{(N)} \\
&= \lim_{N\to\infty} f(x_0 + c_i\,h,\, y_0 + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\,k_j^{(N-1)}) \\
&= f(x_0 + c_i\,h,\, y_0 + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} \lim_{N\to\infty} k_j^{(N-1)}) \\
&= f(x_0 + c_i\,h,\, y_0 + h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j)\,,
\end{aligned}$$

hetgeen aantoont dat k_i de unieke oplossing is van (7.2). ∎

Verder toonde Butcher ook aan dat, als $f(x,\,y)$ daarenboven ook p keer continu afleidbaar, dit dan ook geldt voor de functies k_i (als functies van h).

Het idee waarop RKMn steunen is zeer interessant en zelfs briljant. De unieke oplossing van een IVP kan gezien worden als één enkele integratiecurve in $\mathbb{R}^{m+1}$, maar tengevolge van afkappings- en afrondingsfouten zal elke numerieke oplossing afwijken van die integratiecurve en onvermijdelijk beïnvloed worden door naburige integratiecurven; d.w.z. dat bij numerieke integratie het gedrag van de *familie* integratiecurven, en niet dat van één unieke oplossingscurve, van belang is. RKMn trachten informatie bij elkaar te krijgen over die familie van curves. Zulk een interpretatie wordt gemakkelijk ingezien in het geval van de ERKMn, waarvoor we uit (7.2) en (7.3) vinden dat

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_n,\, y_n), \\
k_2 &= f(x_n + c_2\,h,\, y_n + c_2\,h\,k_1), \\
k_3 &= f(x_n + c_3\,h,\, y_n + (c_3 - a_{32})\,h\,k_1 + a_{32}\,h\,k_2) \\
\vdots &\quad\ \vdots
\end{aligned}$$

Als we nu starten van $(x_n,\, y_n)$ en één stap met de Euler-regel nemen van lengte $c_2\, h$ en nadien de afgeleide vector $y' = f$ evalueren in het bereikte punt, dan bekomen we k_2. We hebben nu twee waarden voor de afgeleide, nl. k_1 en k_2; laten we dus een gewogen gemiddelde nemen van k_1 en k_2 als de initiële helling in een andere Euler-stap vanuit $(x_n,\, y_n)$ van lengte $c_3\, h$ en de afgeleide berekenen bij dit bereikte punt; het bekomen resultaat is k_3. Voortwerkend op die wijze, bekomen we een verzameling k_i, $i = 1, 2, \ldots, s$ van waarden van de afgeleide. De finale stap is dan nog een andere Euler-stap

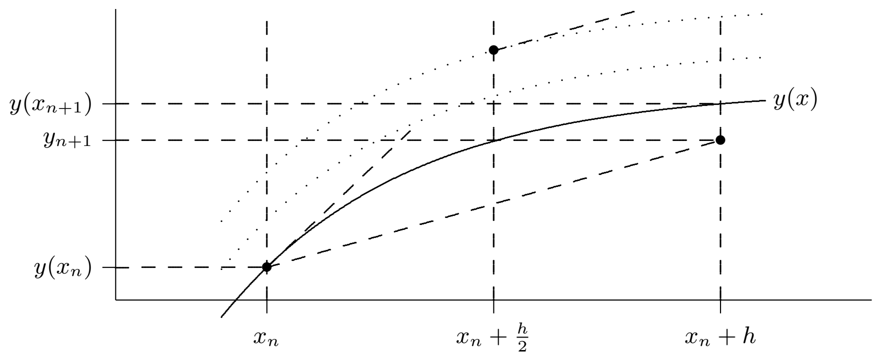
$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i\, k_i$$

van $(x_n,\, y_n)$ naar $(x_{n+1},\, y_{n+1})$, gebruik makend van een gewogen gemiddelde van de waarden $k_1, k_2, \ldots, k_s$. Een ERKM zendt aldus voelers uit in de oplossingsruimte om waarden van de afgeleide $f(x,\, y)$ te verkrijgen, alvorens te beslissen in welke richting een Euler-stap te nemen. De *middelpunt*-methode

$$y_{n+1} = y_n + h\, k_2$$

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n,\, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + \tfrac{1}{2}h,\, y_n + \tfrac{1}{2}\, h\, k_1) \end{aligned}$$

illustreert deze gedachtengang voortreffelijk, zoals te zien is in Figuur 7.1.



Figuur 7.1: Illustratie van het idee achter RKMn aan de hand van de middelpunt-methode.

Sedert de jaren '80 is ook veel onderzoek verricht naar *continue RKMn* met het oog op het bekomen van *dense output*.

Definitie 7.1.2 *De algemeenste s-traps continue Runge–Kutta-methode voor het probleem*

$$y' = f(x,\, y), \quad y(a) = \eta, \quad f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m \tag{7.8}$$

is van de vorm :

$$\begin{cases} u(x_n + \theta\, h) = y_n + h \displaystyle\sum_{i=1}^{s} b_i(\theta)\, k_i\,, \\ \qquad k_i = f(x_n + c_i\, h,\, y_n + h \displaystyle\sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, k_j), \quad i = 1, 2, \ldots, s\,. \end{cases} \tag{7.9}$$

□

De enige wijziging t.o.v. de discrete RKMn is dat b_i vervangen is door een veelterm $b_i(\theta)$, met $b_i(0) = 0$. Stellen we $b_i = b_i(1)$, dan zien we dat een continue RKM steeds een discrete RKM bevat. In het vervolg van deze cursus zullen we steeds veronderstellen dat we met de discrete vorm werken.

7.2 Historisch overzicht

Carl David Tolmé Runge is geboren in Bremen in 1856, studeerde in München en ging naar Berlijn om daar samen te werken met twee van de grootste wiskundigen van die tijd, L. Kronecker en K. Weierstrass. Hij werd beïnvloed door de fysici onder zijn vrienden (o.a. Max Planck), waardoor hij zijn interesse in spectroscopie ontwikkelde. Daarnaast had hij aandacht voor toepassingen van theoretische wiskunde naar technische problemen of problemen uit de fysica toe. Het was in Hannover dat Runge in 1895 in de *Mathematische Annalen* zijn beroemd artikel schreef, dat aan de basis ligt van de huidige Runge-Kutta methodes. In 1904 kreeg Runge zijn benoeming als professor in de toegepaste wiskunde. Hij stierf in Göttingen in 1927.

Wilhelm Martin Kutta werd geboren in 1876 te Upper Silesia (Polen). Hij studeerde wiskunde in Breslau. Hij was werkzaam bij zijn leermeester Runge aan de "Technische Hochschule" in München. Hij publiceerde in 1901 zijn verbeterde versie van Runges artikels op aangeven van Heun (1900), waarin hij ijvert voor het includeren van alle geëvalueerde afgeleiden bij de berekening van een punt van de oplossingskromme van de differentiaalvergelijking. Het was Kutta die de verzameling van vierde-orde RKMn karakteriseerde en die tevens de eerste vijfde-orde methoden ontwikkelde. Kutta stierf in 1944 in Duitsland.

Nyström, die eerder ook al bijgedragen had tot de ontwikkeling van de RKMn voor eerste-orde SGDV, ontwierp in 1925 speciale methoden voor tweede-orde vergelijkingen. Pas in 1956-1957 werden methoden van zesde-orde geïntroduceerd door het werk van Hŭta.

Sinds de intrede van de digitale computers is er een vernieuwde belangstelling voor RKMn. Dit resulteerde in een gevoelige uitbreiding van de theorie en de ontwikkeling van particuliere methoden. Daar waar de eerste studies volledig gewijd waren aan ERKM, werd de aandacht nu ook gewijd aan IRKMn, waarvan thans algemeen aanvaard wordt dat ze een krachtig middel vormen om *stijve* problemen op te lossen.

De hernieuwde belangstelling resulteerde in verschillende theoretische benaderingswijzen. De werkwijze die ongetwijfeld het meest impact heeft gehad is die van J. Butcher. Zijn werkwijze wordt beschreven in Hoofdstuk 8. Een alternatieve theorie, gebaseerd op recursieve betrekkingen, werd ontwikkeld door P. Albrecht.

7.3 De afleiding van expliciete Runge–Kutta-methoden voor scalaire problemen

Zoals reeds vermeld werden tot in de jaren '60 enkel ERKMn beschouwd. Daarenboven werden bij de afleiding van die methoden altijd scalaire problemen in acht genomen en er werd stilzwijgend (en zoals we later zullen zien verkeerdelijk) verondersteld dat niets belangrijks zou veranderen indien deze methoden werden toegepast op stelsels. Zoals in de collegenota's van tweede kandidatuur beschreven is, bestond de techniek voor de afleiding van de zgn. *ordevoorwaarden* erin de ontwikkeling van de oplossing, bekomen door één stap m.b.v. de RKM, te laten samenvallen tot op zekere orde met de Taylor-reeksontwikkeling van de exacte oplossing. De termen in die ontwikkeling werden afgeleid door rechtstreekse berekening. Zulke berekeningen zijn zeer zwaar en langdradig wanneer hoge ordes worden nagestreefd. In deze paragraaf leiden we ERKMn bestaande uit ten hoogste drie trappen af om ons er van te overtuigen dat betere en elegantere afleidingsmethoden noodzakelijk zijn.

Uit (7.2) en (7.3) volgt dat een 3-traps ERKM kan geschreven worden als

$$y_{n+1} = y_n + h\,(b_1\,k_1 + b_2\,k_2 + b_3\,k_3)$$

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n,\, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + c_2\,h,\, y_n + c_2\,h\,k_1) \\ k_3 &= f(x_n + c_3\,h,\, y_n + (c_3 - a_{32})\,h\,k_1 + a_{32}\,h\,k_2) \end{aligned} \tag{7.10}$$

We veronderstellen dat $f(x,\,y)$ voldoende afleidbaar is en voeren de volgende notatie in :

$$f := f(x,\,y), \quad f_x := \frac{\partial\, f(x,\,y)}{\partial\, x}, \quad f_{xx} := \frac{\partial^2\, f(x,\,y)}{\partial\, x^2}, \quad f_{xy}(\equiv f_{yx}) := \frac{\partial^2\, f(x,\,y)}{\partial\, x\ \partial\, y}, \quad \ldots$$

alle geëvalueerd in het punt $(x_n,\, y(x_n))$. Als we dan $y(x_{n+1})$ ontwikkelen in Taylor-reeks rond x_n verkrijgen we

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\,y^{(1)}(x_n) + \frac{1}{2}\,h^2\,y^{(2)}(x_n) + \frac{1}{6}\,h^3\,y^{(3)}(x_n) + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

Nu is

$$\begin{aligned} y^{(1)}(x_n) &= f \\ y^{(2)}(x_n) &= f_x + f_y\,y' = f_x + f\,f_y \\ y^{(3)}(x_n) &= f_{xx} + f_{xy}\,f + f\,(f_{yx} + f_{yy}\,f) + f_y\,(f_x + f\,f_y) \\ &= f_{xx} + 2\,f\,f_{xy} + f^2\,f_{yy} + f_y\,(f_x + f\,f_y) \end{aligned} \tag{7.11}$$

Laat ons de notatie nog inkorten door de definities

$$F := f_x + f\,f_y, \quad G := f_{xx} + 2\,f\,f_{xy} + f^2\,f_{yy}\,, \tag{7.12}$$

zodat de ontwikkeling voor de exacte oplossing $y(x_{n+1})$ kan geschreven worden als

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h\,f + \frac{1}{2}\,h^2\,F + \frac{1}{6}\,h^3\,(F\,f_y + G) + \mathcal{O}(h^4)\,. \tag{7.13}$$

Voor de numerieke oplossing $\tilde{y}_{n+1}$ hebben we een gelijkaardige ontwikkeling nodig. Als we de k_i gegeven door (7.10) ontwikkelen, vinden we dat $k_1 = f$ en

$$k_2 = f + c_2\, h\, (f_x + k_1\, f_y) + \frac{1}{2}\, c_2^2\, h^2\, (f_{xx} + 2\, k_1\, f_{xy} + k_1^2\, f_{yy}) + \mathcal{O}(h^3)\,.$$

Door k_1 te vervangen door f en de notatie (7.12) te gebruiken, bekomen we

$$k_2 = f + c_2\, h\, F + \frac{1}{2}\, c_2^2\, h^2\, G + \mathcal{O}(h^3)\,. \tag{7.14}$$

We kunnen k_3 analoog behandelen, maar hier komt het zware afleidingswerk aan de orde :

$$\begin{aligned} k_3 \;=\; & f + h\, \{c_3\, f_x + [(c_3 - a_{32})\, k_1 + a_{32}\, k_2]\, f_y\} \\ & + \frac{1}{2}\, h^2\, \{c_3^2\, f_{xx} + 2\, c_3\, [(c_3 - a_{32})\, k_1 + a_{32}\, k_2]\, f_{xy} \\ & \qquad + [(c_3 - a_{32})\, k_1 + a_{32}\, k_2]^2\, f_{yy}\} + \mathcal{O}(h^3)\,. \end{aligned}$$

Als we nu hier ook k_1 vervangen door f en k_2 vervangen door (7.14), waarbij slechts termen tot $\mathcal{O}(h^2)$ weerhouden worden, verkrijgen we

$$k_3 = f + c_3\, h\, F + h^2\, (c_2\, a_{32}\, F\, f_y + \frac{1}{2}\, c_3^2\, G) + \mathcal{O}(h^3)\,. \tag{7.15}$$

Na introductie van (7.14) en (7.15) in (7.10) vinden we

$$\begin{aligned} \tilde{y}_{n+1} \;=\; & y(x_n) + h\, (b_1 + b_2 + b_3)\, f + h^2\, (b_2\, c_2 + b_3\, c_3)\, F \\ & + \frac{1}{2}\, h^3\, [2\, b_3\, c_2\, a_{32}\, F\, f_y + (b_2\, c_2^2 + b_3\, c_3^2)\, G] + \mathcal{O}(h^4)\,. \end{aligned} \tag{7.16}$$

Nu moeten we proberen de ontwikkelingen (7.13) en (7.16) aan elkaar gelijk te stellen. We pogen dit te bereiken m.b.v. één, twee en drie trappen. Voor meer dan drie trappen zouden we de term k_4 in (7.10) moeten hebben, die aanleiding zou geven aan bijkomende termen.

- 1-traps : de methode (7.10) wordt 1-traps wanneer we $b_2 = b_3 = 0$ kiezen. Dan wordt (7.16) gereduceerd tot

  $$\tilde{y}_{n+1} = y(x_n) + h\, b_1\, f\,.$$

  Uit (7.13) en (7.16) volgt dat we enkel $b_1 = 1$ kunnen stellen, zodat $T_{n+1} = \mathcal{O}(h^2)$. Er bestaat dus slechts één enkele 1-traps ERKM van orde 1, nl. de *Euler-regel*.

- 2-traps : de methode wordt 2-traps voor $b_3 = 0$; (7.16) wordt dan

  $$\tilde{y}_{n+1} = y(x_n) + h\, (b_1 + b_2)\, f + h^2\, b_2\, c_2\, F + \frac{1}{2}\, h^3\, b_2\, c_2^2\, G + \mathcal{O}(h^4)\,.$$

  Door vergelijking met (7.13) zien we dat tweede orde kan bereikt worden door

  $$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2\, c_2 = \frac{1}{2} \tag{7.17}$$

te kiezen. Dit is een stelsel van twee vergelijkingen in drie onbekenden. De algemene oplossing is van de vorm

$$c_2 = \lambda \neq 0, \quad b_1 = 1 - \frac{1}{2\,\lambda}, \quad b_2 = \frac{1}{2\,\lambda}\,.$$

Er bestaat een enkelvoudige oneindige verzameling van 2-traps ERKMn. Het is evident uit (7.13) dat geen enkel element van deze verzameling een hogere orde dan 2 kan bereiken. Twee particuliere oplossingen leveren welbekende methoden op :

(i) de *middelpunt*-methode, waarvoor $\lambda = \frac{1}{2}$ of $b_1 = 0$, $b_2 = 1$, $c_2 = \frac{1}{2}$. De corresponderende Butcher-matrix is :

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

(ii) de *gemodificeerde Euler*-methode, waarvoor $\lambda = 1$ of $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$, $c_2 = 1$, met Butcher-matrix

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

- 3-traps : we kunnen orde 3 bereiken als we kunnen voldoen aan de betrekkingen

$$\begin{aligned} b_1 + b_2 + b_3 &= 1 \\ b_2\,c_2 + b_3\,c_3 &= \frac{1}{2} \\ b_2\,c_2^2 + b_3\,c_3^2 &= \frac{1}{3} \\ b_3\,c_2\,a_{32} &= \frac{1}{6}\,. \end{aligned}$$

Er zijn nu vier vergelijkingen in zes onbekenden. Wanneer we dit stelsel wensen op te lossen zien we dat de oplossingen kunnen gegroepeerd worden in drie grote klassen :

– Geval 1 :

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \lambda & \lambda & & \\ \mu & \dfrac{\mu\,[3\,\lambda\,(\lambda-1)+\mu]}{\lambda\,(3\,\lambda-2)} & \dfrac{\mu\,(\lambda-\mu)}{\lambda\,(3\,\lambda-2)} & \\ \hline & \dfrac{6\,\lambda\,\mu - 3\,(\lambda+\mu)+2}{6\,\lambda\,\mu} & \dfrac{2-3\,\mu}{6\,\lambda\,(\lambda-\mu)} & \dfrac{3\,\lambda-2}{6\,\mu\,(\lambda-\mu)} \end{array}$$

waarbij $\lambda \neq 0$, $\frac{2}{3}$, μ en $\mu \neq 0$.

– Geval 2 :

$$\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & & \\
0 & -\frac{1}{4\,\nu} & \frac{1}{4\,\nu} & \\
\hline
 & \frac{1}{4}-\nu & \frac{3}{4} & \nu
\end{array}$$

met $\nu \neq 0$.

– Geval 3 :

$$\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & & \\
\frac{2}{3} & \frac{2}{3}-\frac{1}{4\,\omega} & \frac{1}{4\,\omega} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}-\omega & \omega
\end{array}$$

met $\omega \neq 0$.

Er ontstaan dus oplossingen die behoren tot een twee-parameter familie en anderzijds ook oplossingen van twee één-parameter families. Geen enkele van deze oplossingen leidt tot een methode met orde groter dan drie. Twee particuliere oplossingen leiden tot welbekende methoden met volgende Butcher-matrices :

(i) De derde-orde methode van *Heun*, behorend tot de oplossing uit Geval 1 met $\lambda = \frac{1}{3}$ en $\mu = \frac{2}{3}$:

$$\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & & \\
\frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{3} & \\
\hline
 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{3}{4}
\end{array}$$

(ii) De derde-orde methode van *Kutta*, behorend tot de oplossing uit het Geval 1 met $\lambda = \frac{1}{2}$ en $\mu = 1$:

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

In deze paragraaf hebben we een aantal interessante punten belicht. Er bestaat één enkele 1-traps ERKM van orde 1, een één-parameter familie van 2-traps ERKMn van orde 2, een twee-parameter familie en twee één-parameter families van 3-traps ERKMn van orde 3. Uit de afgeleide formules zien we dat de totale afgeleiden van de oplossing y niet onmiddellijk een fundamentele rol spelen; zekere functies van de functie f, zoals F en G gedefinieerd in (7.12), blijken een grotere rol te vervullen. Voor LMM is de dimensie van het stelsel onbelangrijk, d.w.z. de ontwikkeling van een methode voor een scalair probleem verschilt weinig van de ontwikkeling voor een m-dimensionaal stelsel. Hier echter is de besproken ontwikkelingstechniek niet rechtstreeks uitbreidbaar naar een m-dimensionaal stelsel. Hoe zouden we bijvoorbeeld (7.11) moeten interpreteren als y, $f \in \mathbb{R}^m$? Die laatste opmerking zal verder uitgediept worden in volgend hoofdstuk.