11. Примеры явных методов Рунге – Кутты.

Для всех методов я буду приводить расчётные формулы, а также таблицу Батчера.

Простейшие методы этого класса Вам фактически уже знакомы.

1°. $$k_0 = f(t_n, y_n),$$
$$y_{n+1} = y_n + h k_0.$$

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

Это – явный метод Эйлера.

Метод одноэтапный; как мы знаем, он имеет первый порядок точности.

2°. $$k_0 = f(t_n, y_n),$$
$$k_1 = f(t_n + h, y_n + h k_0),$$
$$y_{n+1} = y_n + h\left(\frac{k_0}{2} + \frac{k_1}{2}\right).$$

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

Это – метод Хойна.

3°. $$k_0 = f(t_n, y_n),$$
$$k_1 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + h\frac{k_0}{2}\right),$$
$$y_{n+1} = y_n + h k_1.$$

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

Это – метод Рунге.

Последние два метода – двухэтапные, и оба имеют один и тот же порядок точности, равный двум. Вообще, имеется *однопараметрическое* семейство двухэтапных явных методов Рунге – Кутты второго порядка точности.

Теперь обратимся к методам более высокого порядка точности. Методы 3-го порядка точности мы пропустим и перейдём сразу к методам 4-го порядка точности. Достичь такой точности удаётся, используя четырёхэтапные методы (при этом расчётные формулы остаются всё ещё достаточно компактными, что и сделало четырёхэтапные методы Рунге – Кутты весьма популярными).

Многообразие этих методов по сравнению с двухэтапными методами ещё более велико. Именно, существует *двухпараметрическое* семейство четырёхэтапных методов Рунге – Кутты и ещё три особых однопараметрических семейства таких методов, которые имеют четвёртый порядок точности. Рассмотрим только два примера.

4°. Рассмотрим следующую таблицу Батчера:

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

Явная запись расчётных формул:

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(t_n, y_n), \\
k_1 &= f(t_n + \frac{h}{2}, \; y_n + h\frac{k_0}{2}), \\
k_2 &= f(t_n + \frac{h}{2}, \; y_n + h\frac{k_1}{2}), \\
k_3 &= f(t_n + h, \; y_n + h k_2), \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3).
\end{aligned}
$$

Это – **классический метод Рунге – Кутты**.

Среди всех методов Рунге – Кутты он приобрёл наибольшую популярность. Фактически при вычислениях с постоянным шагом он используется чаще всего. Обычно даже, когда говорят “метод Рунге – Кутты” в единственном числе, именно его и имеют в виду.

В этом методе на каждом шаге четыре раза вычисляется значение правых частей дифференциального уравнения.

Полезно посмотреть на расчётные формулы этого метода повнимательнее. Что реально делается?

А смысл действий – такой. При вычислении k_1 фактически делается один шаг явного метода Эйлера половинной длины. Далее найденное в промежуточной точке значение заменяется другим – как если бы мы реализовали неявный метод Эйлера по схеме “предиктор – корректор” с однократной коррекцией. Наконец, с использованием значения функции в промежуточной точке делается шаг полной длины – примерно так, как это делалось в методе Рунге.

Итоговое значение y_{n+1} находится как линейная комбинация вычисленных промежуточных значений.

Теперь рассмотрим ещё один четырёхэтапный метод. Запишем следующую таблицу Батчера.

5°.

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

Вот явная запись расчётных формул:

$$
\begin{aligned}
k_0 &= f(t_n, y_n), \\
k_1 &= f\left(t_n + \frac{h}{3},\ y_n + h\,\frac{k_0}{3}\right), \\
k_2 &= f\left(t_n + \frac{2h}{3},\ y_n + h\left(-\frac{k_0}{3} + k_1\right)\right), \\
k_3 &= f(t_n + h,\ y_n + h(k_0 - k_1 + k_2)), \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{8}(k_0 + 3k_1 + 3k_2 + k_3).
\end{aligned}
$$

Этот метод называется **“правило трёх восьмых”**.

Таким образом, мы сейчас располагаем двумя четырёхэтапными методами Рунге – Кутты: классическим методом Рунге – Кутты и правилом “трёх восьмых”. Что можно сказать об этих методах?

Оба метода 4° и 5° имеют 4-й порядок точности; предложены Куттой в 1901 г.

Интересно посмотреть, к чему сводятся эти методы в частном случае, когда правые части дифференциальных уравнений зависят *только* от времени.

Замечание. Рассмотрим для простоты одномерный случай. Для задачи Коши $\dot{y} = f(t, y)$, $y(0) = y_0$ оба метода превращаются в квадратурные формулы.

Именно, классический метод Рунге – Кутты на каждом шаге интегрирования сводится к элементарной формуле Симпсона

$$
y_{n+1} - y_n = h\left(\frac{1}{6} f(t_n) + \frac{4}{6} f(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{6} f(t_{n+1})\right),
$$

а “правило трёх восьмых” – к элементарной формуле Ньютона – Котеса с 4 узлами

$$y_{n+1} - y_n = h\left(\frac{1}{8}f(t_n) + \frac{3}{8}f(t_{n+\frac{1}{3}}) + \frac{3}{8}f(t_{n+\frac{2}{3}}) + \frac{1}{8}f(t_{n+1})\right).$$

Но для этих квадратурных формул мы располагаем аккуратными оценками погрешности. Данный факт можно использовать, чтобы оценить локальную погрешность методов Рунге – Кутты.

Пусть в задаче Коши *частного вида*

$$\dot{y} = f(t), \qquad y(0) = y_0$$

точным решением служит функция $y(t)$, а $\bar{y}_{n+1}$ – значение, получаемое одним из рассматриваемых ЯМРК при замене y_n на $y(t_n)$. Тогда для модуля локальной погрешности имеем:

$$\left|l_{n+1}\right| = \left|y(t_{n+1}) - \bar{y}_{n+1}\right| =$$

$$= \left|\underbrace{y(t_{n+1}) - y(t_n)}_{I(f)} - \underbrace{(\bar{y}_{n+1} - y_n)}_{S(f)}\right| = \left|R(f)\right|.$$

Отсюда, если $f \in C^4$ и $M_4 = \max\limits_{[t_{n+1}, t_n]} \left|f^{(4)}(t)\right|$, то

$$\left|l_{n+1}\right| \leqslant \frac{M_4 h}{2\,880} h^4$$

для классического метода Рунге – Кутты и

$$\left|l_{n+1}\right| \leqslant \frac{M_4 h}{6\,480} h^4$$

для “правила трёх восьмых”.

В обоих случаях $l_{n+1} = O(h^5) = O(h^{p+1})$, т.е. $p = 4$.

Мы уже говорили о том, что для метода с порядком аппроксимации p локальная погрешность есть величина порядка $O(h^{p+1})$. Значит, мы *доказали*, что данные методы имеют четвёртый порядок точности (но наше доказательство ограничилось задачами Коши весьма частного вида).

В целом в практике численного анализа сложилась традиция использовать именно классический метод Рунге – Кутты, хотя сам Кутта считал лучшим именно второй из своих методов.

Теперь кратко коснёмся явных методов Рунге – Кутты более высоких порядков точности. Они могут быть эффективны при расчётах с высокой точностью.

12. Порядковые барьеры Батчера.

Во всех рассмотренных нами примерах явных методов Рунге – Кутты порядок точности метода совпадал с числом этапов. Иными словами,

В примерах 1°–5° $s = p$; s – число этапов, p – порядок точности.

Оказывается, для явных методов Рунге – Кутты более высокого порядка точности это условие уже не может быть удовлетворено. Иными словами, при построении методов высокого порядка точности возникают *препятствия*, которые на самом деле носят алгебраический характер: чтобы метод имел заданный порядок точности, требуется, чтобы его коэффициенты удовлетворяли некоторой системе полиномиальных уравнений.

Батчер доказал следующие утверждения:

1) при $p \geqslant 5$ не существует ЯМРК с $s = p$ (1-й барьер Батчера, 1964 г.);

2) при $p \geqslant 7$ не существует ЯМРК с $s = p + 1$ (2-й барьер Батчера, 1965 г.);

3) при $p \geqslant 8$ не существует ЯМРК с $s = p + 2$ (3-й барьер Батчера, 1985 г.).

Где лежит четвёртый порядковый барьер, пока неизвестно.

Для значений p, не превышающих 8, методы с минимальным числом этапов действительно построены. Полученные результаты мы отобразим с помощью следующей таблицы.

Минимальное число этапов для данного p:

p	1	2	3	4	5	6	7	8
s	1	2	3	4	6	7	9	11

В действительности, сейчас наивысший порядок точности, достигнутый для явных методов Рунге – Кутты, равен 10. Именно, построен метод такого порядка с числом этапов, равным 17. Неизвестно, является ли это число этапов минимальным.

Вообще, при построении явных методов Рунге – Кутты высокого порядка точности математики столкнулись с чрезвычайно серьёзными трудностями. Однако построение таких методов началось довольно рано. Уже сам Кутта в своей основополагающей статье 1901 г. построил 6-этапный метод 5-го порядка точности; правда, как выяснилось впоследствии, коэффициенты в двух последних строках таблицы Батчера он нашёл неверно (его выкладки удалось исправить).