9. Явные методы второго порядка точности.

1°. Рассмотрим в качестве неявного метода правило трапеций

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = \frac{f_{n+1} + f_n}{h}$$

и реализуем его в форме $PECE$.

В качестве предиктора используем явный метод Эйлера:

$$y^0_{n+1} = y_n + h f_n .$$

Получаем явный одношаговый **метод Хойна** 2-го порядка точности (1900 г.):

$$\boxed{\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = \frac{1}{2}\left(f_n + f(t_{n+1},\, y_n + h f_n)\right)} .$$

Хойн (Heun), Карл Людвиг Вильгельм (1859 – 1929) – немецкий математик.

2°. Возьмём в качестве неявного метода правило средней точки:

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

Напомню, что

Здесь $\dfrac{y_{n+1} - y_n}{h} \approx y\left(t_n + \dfrac{h}{2}\right)$.

Используем ту же идею, что и для правила трапеций: неизвестную величину в правой части находим с помощью явного метода Эйлера – только уже с половинным шагом.

Приближённо заменяя $y\left(t_n + \dfrac{h}{2}\right)$ на $y_n + \dfrac{h}{2} f_n$, получаем явный одношаговый **метод Рунге** 2-го порядка точности (1895 г.):

$$\boxed{\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f\left(t_n + \frac{h}{2},\, y_n + \frac{h}{2} f_n\right)} .$$

Получен этот метод впервые Карлом Рунге, с именем которого мы уже не раз встречались.

Это – не метод типа “предиктор – корректор”: предсказание строилось не для узла t_{n+1}, а для промежуточной точки.

Таким образом, у нас в распоряжении впервые оказались два явных метода, порядок точности которых выше, чем у явного метода Эйлера. Обратите внимание: и в методе Хойна, и в методе Рунге повышения точности удалось достичь за счёт того, что функция f на каждом шаге вычисляется *дважды*: как в точке t_n, так и в некоторой другой точке.

Обсудим, как можно обобщить идею построения данных методов, чтобы получить явные одношаговые методы более высокого порядка точности.

10. Общая формулировка явных методов Рунге – Кутты.

Сначала – о названии.

Рунге в 1895 г. предложил два метода этого класса: с $p = 2$ (известный нам) и с $p = 3$. Общую формулировку дал Кутта в 1901 г.

Кутта (Kutta), Мартин Вильгельм (1867 – 1944) – немецкий математик.

Формулировку, данную Куттой, мы сейчас и рассмотрим.

Пусть $y(t)$ – решение дифференциального уравнения

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

удовлетворяющее условию $y(t_n) = y_n$.

Вновь, как и при построении простейших примеров конечноразностных методов, воспользуемся формулой Ньютона – Лейбница.

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))\, \mathrm{d}t .$$

Попытаемся приближённо вычислить интеграл, стоящий в правой части.

Возьмём на отрезке $[t_n, t_{n+1}]$ s вспомогательных узлов

$$t_n^i = t_n + a_i h ,$$

где $0 = a_0 \leqslant \ldots \leqslant a_{s-1} \leqslant 1$. Заменив интеграл квадратурной суммой с узлами t_n^i, получим:

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + h \sum_{i=0}^{i<s} w_i\, f(t_n^i, y(t_n^i)) .$$

Коэффициенты a_i задают положение вспомогательных узлов, а w_i – веса квадратурной формулы.

Полученное приближённое соотношение мы могли бы использовать для вычисления решения в очередном узле сетки, если бы не следующее обстоятельство:

Значения $y(t_n^i)$ при $i = 1, \ldots, s-1$ по-прежнему неизвестны.

Действительно, только при $i = 0$ значение решения в узле нам известно – по условию.

Значит, пока мы далеко не продвинулись. Но лучик надежды есть: ведь при числе узлов, равном 1, все величины в правой части нашей приближённой формулы оказываются известными.

Поэтому мы двинемся дальше и попытаемся найти неизвестные значения тем же способом, что и раньше, постепенно увеличивая число задействованных узлов.

Запишем равенства

$$y(t_n^i) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n^i} f(t, y(t))\,\mathrm{d}t, \qquad i = 1, \dots, s-1,$$

и каждый из интегралов заменим своей квадратурной суммой с узлами $t_n^0, \dots, t_n^{i-1}$.

Заметьте: для каждого значения i число задействованных узлов – своё, и оно последовательно растёт с ростом i.

Получим следующие приближённые равенства:

$$y(t_n^1) \approx y(t_n) + h\, b_{10} f(t_n^0, y(t_n^0)),$$

$$\dots$$

$$y(t_n^{s-1}) \approx y(t_n) + h \sum_{j=0}^{j<s-1} b_{s-1,j} f(t_n^j, y(t_n^j)).$$

Что означают числовые коэффициенты в этих формулах? Если бы перед квадратурными суммами стояли длины элементарных отрезков интегрирования, то это были бы веса квадратурных формул. Но сейчас выбрана иная нормировка: всюду в качестве множителя используется h, т.е. длина шага.

Итак:

Коэффициенты b_{ij} – не веса квадратурных формул, но пропорциональны им.

Обратите внимание: в правых частях этих приближённых формул фигурируют значения решения задачи Коши в тех вспомогательных узлах, для которых приближённые формулы уже получены.

Исходя из данных приближённых соотношений, мы можем, наконец, получить расчётные формулы некоторого конечноразностного метода.

Обозначим через y_n^i даваемые правыми частями этих равенств приближения к $y(t_n^i)$, а через k_i – выражения $f(t_n^i, y_n^i)$. Получим расчётные формулы:

$$y_n^0 = y_n, \qquad k_0 = f(t_n^0, y_n^0),$$

$$\dots$$

$$y_n^{s-1} = y_n + h \sum_{j=0}^{j<s-1} b_{s-1,j}\, k_j\,, \qquad k_{s-1} = f(t_n^{s-1}, y_n^{s-1})\,,$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^{i<s} w_i\, k_i\,.$$

Обычно из этих формул исключают вспомогательные величины y_n^i. Окончательно:

$$k_0 = f(t_n, y_n)\,,$$

$$k_1 = f(t_n + a_1 h,\ y_n + h\, b_{10}\, k_0)\,,$$

$$\dots$$

$$k_{s-1} = f\Big(t_n + a_{s-1} h,\ y_n + h \sum_{j=0}^{j<s-1} b_{s-1,j}\, k_j\Big)\,,$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=0}^{i<s} w_i\, k_i\,.$$

Теперь – определение.

Всякий метод из данного класса называется s-этапным **явным методом Рунге – Кутты** (ЯМРК).

При одном и том же числе этапов s различные методы отличаются конкретным выбором коэффициентов a_i, b_{ij} и w_i.

Коэффициенты a_i, b_{ij}, w_i подбирают так, чтобы обеспечить заданный порядок аппроксимации p, а также удовлетворить каким-либо дополнительным условиям.

Как реально осуществляется такой подбор, мы обсуждать не будем. Фактически решение разлагают в ряд Тейлора и подставляют в расчётные формулы, а затем коэффициенты подбирают так, чтобы в погрешности аппроксимации обнулить слагаемые, содержащие невысокие степени шага h. Выкладки при этом получаются весьма громоздкими.

В настоящее время вошла в обычай специальная система обозначений, позволяющая символически представлять конкретные методы Рунге – Кутты. В этой системе обозначений коэффициенты записывают в виде специальной таблицы.

Таблица Батчера – символическая запись коэффициентов ЯМРК в виде

$$
\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
a_1 & b_{10} & & & & \\
a_2 & b_{20} & b_{21} & & & \\
\vdots & \ldots & & & & \\
a_{s-1} & b_{s-1,0} & b_{s-1,1} & \ldots & b_{s-1,s-2} & \\
\hline
 & w_0 & w_1 & \ldots & w_{s-2} & w_{s-1}
\end{array}
$$

Данная запись предложена Батчером в 1964 г.

Батчер, Джон Чарльз (р. 1933) – новозеландский математик.

А вообще-то Батчер прославился глубоким вкладом в общую теорию методов Рунге – Кутты; в частности, он серьёзно продвинул вперёд технику вывода расчётных формул для методов Рунге – Кутты высокого порядка аппроксимации.

По поводу терминологии: в данном случае слова “порядок аппроксимации” и “порядок точности” вполне взаимозаменяемы. Именно, справедливо следующее утверждение.

Замечание. Если ЯМРК имеет порядок аппроксимации $p \geqslant 1$, то он сходится с порядком точности, равным p (поскольку все одношаговые методы устойчивы на конечном отрезке).